

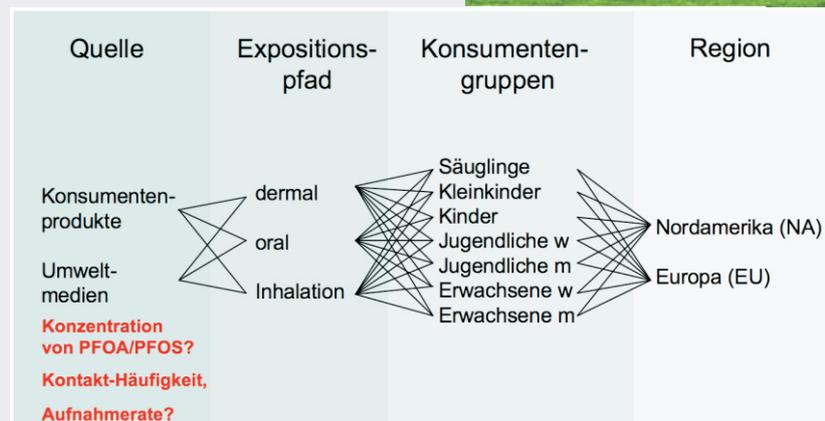


Mitteilungen der Fachgruppe

# Umweltchemie und Ökotoxikologie

Gesellschaft Deutscher Chemiker

- Identifikation von persistenten Stoffen mit Ferntransportpotenzial
- Konsumentenexposition gegenüber PFOS und PFOA
- Methodik der szenariengestützten Risikobewertung und Toxizitätsmodellierung
- Vorstellung des Fachgruppen-Arbeitskreises "Chemiekalienbewertung"
- Ankündigung der Fachgruppentagung 2008
- Personalien



## Impressum

Mitteilungen der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie

Herausgegeben von der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie der Gesellschaft Deutscher Chemiker  
[www.gdch.de/umweltchemie](http://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](mailto:fischerk@uni-trier.de)

### Abkürzung:

Mitt Umweltchem Ökotox

### Design/ Technische Umsetzung:

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

Methodik der szenariengestützten Risikobewertung aus Scheringer et. al.: „Konsumentenexposition...“

## Originalbeiträge

- 32 **M. Scheringer et al.:** Konsumentenexposition gegenüber PFOS und PFOA  
37 **M. Matthies, J. Klasmeier:** Multimediale Modellierung zur Identifikation von persistenten Stoffen mit Ferntransportpotenzial  
45 **B. Simon-Hettich:** Toxizitätsmodellierung mit kommerziellen (Q)SAR-Systemen: praktische Aspekte für die regulatorische Anwendung

## Aus der Fachgruppe

- 49 Vorstellung des Fachgruppen-Arbeitskreises „Chemikalienbewertung“  
50 Praktikumsbörse  
50 Ankündigung der Fachgruppen-Tagung 2008

## Kurz vorgestellt

- 52 Analytisches Laboratorium Luhnstedt  
54 Institut für sozial-ökologische Forschung (ISOE), Frankfurt am Main

## Informationen

### Kurznachrichten

- 55 Kinder-Umwelt-Survey 2003/06: Stoffgehalte im Hausstaub  
56 Nationaler Durchführungsplan zum Stockholmer POP-Abkommen  
**Tagungsbericht**  
56 Persistente Perfluorverbindungen – eine Gefahr für Mensch und Umwelt?  
59 **Tagungsankündigungen**  
60 Green Chemistry for Environment and Health 9th International Conference on Carbonaceous Particles in the Atmosphere and 11 Symposium on Chemistry and Fate of Modern Pesticides  
66 **Sonstiges**  
GDCh-Fortbildungskurse 2008  
Gebiet Chemie und Umwelt

## Personalia

- 62 75. Geburtstag von Prof. Otto Hutzinger  
62 Persönliche Glückwünsche von Gerhard Lammel  
63 Prof. Walter Klöpffer 70 Jahre  
63 Geburtstagsliste 3. Quartal 2008  
65 Neue Fachgruppenmitglieder



## Konsumentenexposition gegenüber PFOS und PFOA

Martin Scheringer<sup>1</sup> ([scheringer@chem.ethz.ch](mailto:scheringer@chem.ethz.ch)), David Trudel,<sup>1</sup> Lea Horowitz,<sup>1</sup> Matthias Wormuth,<sup>1</sup> Ian T. Cousins,<sup>2</sup> Konrad Hungerbühler<sup>1</sup> ([hungerb@chem.ethz.ch](mailto:hungerb@chem.ethz.ch))

1: Departement für Chemie und angewandte Biowissenschaften, ETH Zürich, CH-8093 Zürich, Schweiz

2: Departement für Angewandte Umweltwissenschaften (ITM), Universität Stockholm, SE-10691 Stockholm, Schweden

### Zusammenfassung

Perfluorierte Tenside werden in einer Vielzahl von Konsumentenprodukten eingesetzt, z.B. in Imprägnierungsmitteln für Textilien, Teppiche und Nahrungsmittelverpackungen sowie in Beschichtungen für Kochgeschirr. Insbesondere Perfluorooctansäure (PFOA) und Perfluorooctansulfonsäure (PFOS) sind in zahlreichen Umweltmedien, Nahrungsmitteln und in Proben aus menschlichem Gewebe gefunden worden. Aufgrund der grossen Vielzahl eingesetzter Perfluorverbindungen (diverse Monomere und Polymere, welche immer auch Monomerverunreinigungen enthalten) und der Vielzahl der Anwendungen dieser Verbindungen ist es schwierig, die wichtigsten Quellen für die Konsumentenexposition gegenüber Perfluorverbindungen zu identifizieren und zu minimieren. Wir betrachten hier PFOA und PFOS als die beiden Substanzen, die am häufigsten und in den höchsten Konzentrationen experimentell nachgewiesen wurden. Wir wenden die Methode der szenariogestützten Risikobewertung (Scenario-Based Risk Assessment, SceBRA) an, um die Beiträge einer Vielzahl von Expositionsquellen zu quantifizieren und die relevantesten dieser Quellen zu identifizieren; die Analyse wird für Europa und Nordamerika im Vergleich und für sieben Konsumentengruppen (Kleinkinder bis Erwachsene) durchgeführt. Die untersuchten Aufnahmepfade enthalten u.a. 18 verschiedene Nahrungsmittel, Verschlucken von Hausstaub, In-den-Mund-Nehmen von behandelter Kleidung (Kleinkinder), Inhalation bei der Anwendung von Imprägniersprays, Hand-Mund-Kontakt und In-den-Mund-Nehmen bei behandelten Teppichen, Inhalation bei Teppichimprägnierung sowie Übergang aus imprägniertem Papier/Karton in Nahrung. Für alle Pfade wurden Bandbreiten bestimmt, welche die Unsicherheit der eingehenden Parameter reflektieren. Die Exposition gegenüber PFOS stammt hauptsächlich aus Nahrung, welche mit PFOS aus der Umwelt kontaminiert ist; die Exposition ist für Kleinkinder [im Mittel 36 ng/(kg<sub>KG</sub>·d)] höher als für Erwachsene [12 ng/(kg<sub>KG</sub>·d)]. Exposition gegenüber PFOA stammt ebenfalls hauptsächlich aus der Nahrung, aber bei Kleinkindern zu erheblichem Anteil auch aus dem Verschlucken von Hausstaub und dem Kontakt mit imprägnierten Teppichen. Bei Erwachsenen ist neben dem Kontakt mit Teppichen auch ein Beitrag aus der Verwendung von Imprägniersprays und aus Fertignahrung in imprägnierter Verpackung möglich.

### Einleitung und Methodik

Perfluorooctansäure (engl. *perfluorooctanoic acid*, PFOA) und Perfluorooctansulfonsäure (PFOS) gehören zur Gruppe der perfluorierten Tenside (PFT). PFT besitzen eine polare, z.T. auch reaktive Kopfgruppe und eine perfluorierte Alkankette. Die perfluorierte Alkankette verleiht den Substanzen wasser- und zugleich fettabweisenden Charakter.

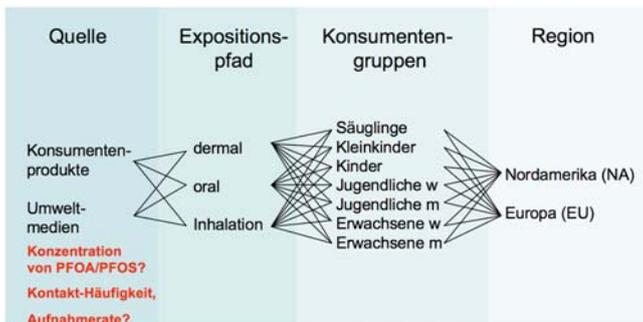
PFOS, PFOA und eine Vielzahl weiterer PFT sind seit mehreren Jahrzehnten im Gebrauch [1]. Aufgrund ihrer extrem hohen Persistenz sind PFOS und PFOA mittlerweile ubiquitär in der Umwelt [2–4]. Zudem sind sie auch in der unmittelbaren Umgebung des Menschen vorhanden, d.h. in Nahrung, Gebrauchsgegenständen und, an Staub gebunden, in Innenräumen, sowie im menschlichen Körper selbst [4–6].

PFOA ist vor allem in der Produktion von Perfluorpolyethylen (Teflon) verwendet worden, ist aber auch als Verunreinigung in wasser- und fettabweisenden Beschichtungsmaterialien enthalten. Während bei Teflon die Polymerkette selbst fluoriert ist, bestehen viele wasser- und fettabweisende Beschichtungsmaterialien aus einer nicht fluorierten Polymerkette (z.B. Polyester, Polyether, Polyurethane), an der die perfluorierten Alkanketten der Monomere Seitenketten bilden. Diese Beschichtungsmaterialien werden umfassend zur Imprägnierung von Papier, Textilien, Leder, Teppichen etc. eingesetzt. PFOS und andere Perfluorsulfonverbindungen sind u.a. in der Herstellung fluorierter Beschichtungsmaterialien in großem Umfang eingesetzt worden. Im Jahr 2001 hat der Hauptproduzent von PFOS seine Produktion umgestellt und auf die Verwendung von PFOS in Beschichtungsmaterialien verzichtet. Auch bei PFOA unternehmen die Produzenten zur Zeit erhebliche Anstrengungen, um die Emissionen und Rückstände in Produkten zu vermindern.

PFOS und PFOA bilden zudem die stabilen Endpunkte der chemischen oder biologischen Umwandlung reaktiverer Perfluorverbindungen wie Fluortelomeralkoholen und Perfluoroktansulfonamiden. Die toxischen Effekte von PFOS und PFOA betreffen vor allem die Leber [7].

Da Konsumenten in vielfältiger Weise mit PFOS und PFOA in Kontakt kommen und die Substanzen lange im menschlichen Körper verbleiben (und sich bei weiterer Aufnahme entsprechend akkumulieren können), ist es wichtig, die Hauptquellen der Exposition zu kennen und diese nach Möglichkeit zu eliminieren. In einer vor kurzem veröffent-

lichten Untersuchung [8] haben wir analysiert, welche Quellen wie stark zur Exposition der Bevölkerung gegenüber PFOS und PFOA beitragen. Zu diesem Zweck haben wir die Methodik der szenariengestützten Risikobewertung (*Scenario-Based Risk Assessment*, SceBRA) verwendet, s. Abbildung 1 [9]. Das Ziel dieser Methodik besteht darin, jeden plausiblen "typischen" Fall, in dem Kontakt zu einer Substanz bestehen kann, mittels eines Szenarios abzubilden. "Szenario" wird hier also nicht nur im Sinne einer einzelnen denkbaren Situation verstanden, sondern in dem Sinne, dass alle relevanten Situationen abgedeckt und die entsprechenden Expositionen quantifiziert werden sollen. Andererseits sind die betrachteten Szenarien noch immer generisch, d.h. sie bilden typische Situationen ab, die für eine größere Bevölkerungsgruppe im Durchschnitt denkbar sind; echte Einzelfälle werden hingegen nicht modelliert.



**Abb. 1:** Methodik der szenariengestützten Risikobewertung (SceBRA) [8, 9].

Die SceBRA-Methode erfordert drei Typen von Daten: Konzentrationsparameter, Kontaktparameter und Aufnahmeparameter. Konzentrationsparameter beschreiben die Gehalte, mit denen die betrachtete Substanz in relevanten Gegenständen, in Nahrung, Atemluft und Hausstaub sowie im Trinkwasser vorkommt. Kontaktparameter beschreiben, wie häufig und auf welche Weise welcher Teil der Bevölkerung mit welcher Art von Gegenstand oder Umweltmedium in Kontakt kommt, welche expositionsrelevanten Aktivitäten ausgeübt werden und welche Nahrungsmittel die betrachtete Personengruppe zu sich nimmt. Die Aufnahmeparameter schließlich beschreiben, welche Mengen der untersuchten Substanz in den Körper gelangen können, d.h. die körpereigenen Membranen (z.B. Lungenmembran) durchdringen können. Für die Untersuchung von PFOS und PFOA haben wir sieben Bevölkerungsgruppen unterschieden: Säuglinge, Kleinkinder, Kinder, weibliche und männliche Jugendliche, Frauen und Männer; zudem haben wir bei den Kontaktparametern zwischen Nordamerika und Europa differenziert.

Konzentrationsparameter wurden überwiegend aus Messungen von PFOS und PFOA in Nahrungsmitteln (Fisch, Fleisch und Milchprodukte, Gemüse, Fertignahrung, Trinkwasser, Muttermilch), in Hausstaub, in Teppichen und Imprägniermitteln für Teppiche sowie (dies nur für PFOA) in Imprägniermitteln für Nahrungsmittel-Behälter wie Pizza-

schachteln und in Imprägniersprays für Leder und Textilien entnommen [10–14].

Kontaktparameter wurden entnommen aus Statistiken zur Ernährung in Europa und Nordamerika, aus Daten zur Aufnahme von Hausstaub und Erde, Daten zum Kontakt mit imprägnierten Teppichen und der Häufigkeit, mit der die Hände zum Mund geführt werden, Daten zum Konsum von verpackter Fertignahrung und *Fast Food*, und Daten zur Häufigkeit, mit der Imprägniersprays verwendet werden [15–19].

Aufnahmeparameter wurden aus toxikologischen Untersuchungen abgeleitet [7, 20]. Für alle Parameter wurde ein tiefer, ein mittlerer und ein hoher Wert bestimmt, um die bestehenden Unsicherheiten und Bandbreiten abzubilden (tiefes, mittleres und hohes Expositionsszenario). In den meisten Fällen waren zu wenig Datenpunkte vorhanden, um die Parameter in Form von Verteilungen zu beschreiben.

Die betrachteten Expositionspfade führen vor allem zu oraler und inhalativer Exposition (bei dermalen Exposition wie z.B. Hautkontakt mit Teppichen oder Kleidung hat sich gezeigt, dass ihr Beitrag so gering ist, dass er gegenüber den Beiträgen aus oraler und inhalativer Exposition vernachlässigt werden kann). Berücksichtigt als Quellen für orale Exposition wurden Trinkwasser und 18 Kategorien von Nahrungsmitteln, verschluckter Hausstaub, Mundkontakt mit Gegenständen (Säuglinge, Kleinkinder), Übertritt aus Verpackungen und Geschirr in die Nahrung. Die inhalativen Pfade umfassen die Innenraumluft (lungengängige Partikel, da PFOS und PFOA fast nicht in der Gasphase vorliegen) und Aerosole aus Imprägnierspray. Für jeden Pfad wurde die Dosis (in ng pro kg Körpergewicht und Tag,  $\text{ng}/(\text{kg}_{\text{KG}}\cdot\text{d})$ ) berechnet, die ins Körperinnere übertritt (*uptake dose* [21]), d.h. die Mengen an PFOS und PFOA, die in den Verdauungstrakt und in die Lunge gelangen, wurden mit den entsprechenden Aufnahmeparametern kombiniert. Für die gastrointestinale Aufnahme liegt der aufgenommene Anteil bei ca. 80%, bei inhalativer Aufnahme bei 100%.

## Resultate

Die aufgenommenen Dosen von PFOS und PFOA sind für Säuglinge und Kleinkinder am höchsten (Szenario "hohe Konzentration": 220  $\text{ng}/(\text{kg}_{\text{KG}}\cdot\text{d})$  für PFOS und 120  $\text{ng}/(\text{kg}_{\text{KG}}\cdot\text{d})$  für PFOA) und für erwachsene Frauen am tiefsten (Szenario "tiefe Exposition": 3.2  $\text{ng}/(\text{kg}_{\text{KG}}\cdot\text{d})$  für PFOS und 0.4  $\text{ng}/(\text{kg}_{\text{KG}}\cdot\text{d})$  für PFOA). Aufgrund der Unsicherheit und Variabilität der Konzentrations- und Kontaktparameter liegen das tiefe und das hohe Expositionsszenario bei PFOS bei allen Konsumentengruppen um etwas mehr als einen Faktor 10 auseinander, bei PFOA um fast einen Faktor 100. Die Resultate für Nordamerika und Europa sind hingegen für alle sieben Konsumentengruppen und alle drei Expositionshöhen sehr ähnlich.

Szenario	Säuglinge	Klein- kinder	Kinder	Jugendliche, w	Jugendliche, m	Frauen	Männer
<b>PFOS</b>							
Tief	5.7	7.8	7.4	4.4	4.9	3.2	3.5
Mittel	36	28	24	13	15	12	12
Hoch	220	170	150	49	55	55	50
<b>PFOA</b>							
Tief	1.4	1.8	1.8	1.0	1.2	0.7	0.8
Mittel	6.0	7.6	6.7	3.6	4.1	2.8	3.0
hoch	114	94	72	53	53	44	39

**Tabelle 1:** Aufgenommene Dosen von PFOS und PFOA für sieben Konsumentengruppen in Europa [8].  
Werte in ng pro kg Körpergewicht und Tag.

In den Szenarien für tiefe und mittlere Exposition stammt PFOS zu über 95% aus Nahrung und Trinkwasser. PFOS ist mittlerweile kaum noch in neuen Konsumentenprodukten enthalten, und die in die Umwelt entlassenen Mengen zirkulieren nun für längere Zeit in den verschiedenen Umweltmedien und gelangen so in eine Vielzahl von Nahrungsmitteln. Parameter mit besonders starkem Einfluss auf die Resultate der SceBRA-Berechnungen für PFOS sind dementsprechend auch die PFOS-Konzentrationen in Milch, Fisch, Fleisch und Kartoffeln; zudem auch die gastrointestinale Aufnahme.

Im Szenario mit hoher Exposition stammen bei Kindern ca. 50% der aufgenommenen PFOS-Dosen aus Kontakt mit imprägnierten Teppichen und aus verschlucktem Staub. Dies rührt daher, dass in den Szenarien für hohe Exposition häufigerer Kontakt mit imprägnierten Produkten und höherer Marktanteil imprägnierter Produkte angenommen wird.

Bei PFOA stammen in den Szenarien für tiefe und mittlere Exposition über 90% der aufgenommenen Dosen aus Nahrung und Trinkwasser. Bei den Szenarien für hohe Exposition sind es jedoch nur noch ca. 25%, während der Anteil aus Staub, Teppichen, Nahrungsmittel-Verpackungen und Imprägniersprays in diesen Szenarien deutlich überwiegt. Dies ist wiederum auf die höheren PFOA-Gehalte und Benutzungshäufigkeiten zurückzuführen, die in den Hochexpositions-Szenarien angenommen werden. Parameter mit besonders starkem Einfluss auf die SceBRA-Resultate sind bei PFOA die Konzentrationen in Kartoffeln, Gemüse, Obst, Muttermilch und Fleisch sowie die gastrointestinale Aufnahme. Bei den älteren Konsumentengruppen fällt der Einfluss der Muttermilch weg, und die Konzentrationen von PFOA in Trinkwasser und Fertignahrung werden wichtig.

Um die mit der SceBRA-Methode berechneten Werte zu evaluieren, haben wir ein einfaches pharmakokinetisches Modell [22] verwendet. Dieses Modell berechnet für Erwachsene die aufgenommene Dosis von PFOS und PFOA auf der Grundlage gemessener Blutserumkonzentrationen

[23–25], der Halbwertszeiten im menschlichen Körper und des Verteilungsvolumens. Mittlere Werte der Blutserumkonzentrationen liegen bei 20 bis 30 ng/ml für PFOS und bei 5 bis 8 ng/ml für PFOA; die mittlere Halbwertszeit im menschlichen Körper liegt bei gut acht Jahren für PFOS und gut vier Jahren für PFOA; für das mittlere Verteilungsvolumen wurden 3,6 l/kg<sub>KG</sub> angenommen. Die Bandbreiten für die Halbwertszeit und das Verteilungsvolumen sind allerdings groß (ein Faktor 10 für die Halbwertszeit und ein Faktor 5 für das Verteilungsvolumen). Auf dieser Grundlage ergeben sich aus den Blutserumwerten für Europa mittlere aufgenommene Dosen von 15 ng/(kg<sub>KG</sub>·d) für PFOS und 8 ng/(kg<sub>KG</sub>·d) für PFOA; die Bandbreiten der auf diese Weise berechneten aufgenommenen Dosen betragen einen Faktor 150 bis 300. Dabei liegen die mittleren Werte jedoch nahe bei den Werten in Tabelle 1 (ca. 12 ng/(kg<sub>KG</sub>·d) für PFOS und ca. 3 ng/(kg<sub>KG</sub>·d) für PFOA), und wir schließen daraus, dass die SceBRA-Methode aufgenommene Dosen liefert, welche grundsätzlich mit den gemessenen Blutserumwerten konsistent sind.

Eine weitere Evaluierungsmöglichkeit liefern die von Fromme et al. gemessenen oralen Aufnahmen von PFOS und PFOA in Süddeutschland [26]. Fromme et al. haben Gehalte von PFOS und PFOA in der Nahrung von 31 Testpersonen gemessen und daraus die oral aufgenommene Dosis bestimmt. Für PFOA erhalten sie 2.9 ng/(kg<sub>KG</sub>·d), was exakt mit unserem Wert für den Fall mittlerer Exposition übereinstimmt (s. Tabelle 1). Für PFOS hingegen finden Fromme et al. nur eine aufgenommene Dosis von 1.4 ng/(kg<sub>KG</sub>·d), was um fast einen Faktor 10 tiefer liegt als unser Wert von 12 ng/(kg<sub>KG</sub>·d).

## Diskussion

In den Szenarien zur Berechnung der tiefen und mittleren Exposition stammen die aufgenommenen Dosen von PFOS und PFOA zu über 90% aus Nahrung und Trinkwasser. In diesen Szenarien sind die PFOS-Dosen bis zu einem Faktor 5 höher als die PFOA-Dosen, was auf die erheblichen Mengen an PFOS zurückgeht, die bis 2001 aus Produktionsprozessen

und aus Konsumentenprodukten freigesetzt wurden. Diese Mengen zirkulieren noch immer in der Umwelt und finden sich in diversen Nahrungsmitteln. Bei den Szenarien für hohe Exposition hingegen sind die Dosen von PFOS und PFOA ähnlich hoch, was auf den höheren Mengen von PFOA beruht, die in diesen Szenarien aus diversen Konsumentenprodukten aufgenommen werden. Insgesamt zeigen unsere Resultate den dominanten Anteil der Nahrung als Quelle von PFOS und PFOA, aber auch die Möglichkeit, dass einzelne Produkte wie imprägnierte Teppiche, Fertignahrung in imprägnierter Verpackung und Imprägniersprays zumindest bei einzelnen Konsumentengruppen ebenfalls einen relevanten Teil der Exposition ausmachen. Auffallend ist zudem die hohe Exposition kleiner Kinder, die sowohl von der Muttermilch wie auch von Kontakt mit imprägnierten Teppichen und dem Verschlucken von Hausstaub herrührt.

Unsere Analyse beruht auf der Annahme, dass Exposition, Aufnahme und Ausscheidung unter zeitlich konstanten Bedingungen stattfinden. Durch den Verzicht auf PFOS durch die Firma 3M im Jahr 2001 und Maßnahmen zur Verminderung der Emissionen von PFOA geht zur Zeit jedoch vor allem die direkte Exposition gegenüber PFOS und PFOA in Konsumentenprodukten zurück. Für eine genauere Expositionsanalyse und eine Prognose wäre es daher erforderlich, die Gehalte von PFOS und PFOA in diversen Nahrungsmitteln und Konsumentenprodukten in kontinuierlichen Zeitreihen zu messen.

Die Abnahme der direkten Exposition würde bedeuten, dass neuere Messungen von Blutserumkonzentrationen den Rückgang der aufgenommenen Dosen anzeigen müssten (sofern diese Messungen mindestens eine Eliminations-Halbwertszeit nach dem Ende der Verwendung von PFOS durchgeführt wurden). Die SceBRA-Berechnungen hingegen beruhen weitgehend auf Konzentrationsparametern, die noch aus der Zeit der hohen PFOS- und PFOA-Emissionen stammen. In unserer Analyse sind die aus den Blutserumkonzentrationen bestimmten Dosen bei PFOS den Dosen aus der SceBRA-Berechnung sehr ähnlich, d.h. sie zeigen noch keinen Rückgang gegenüber den 1990er Jahren an. Fromme et al. [26] haben jedoch aus ihren Messungen in Nahrungsmitteln deutlich tiefere Aufnahmen von PFOS berechnet, als wir sie mit den SceBRA-Resultaten erhalten. Möglicherweise beruhen diese Diskrepanzen auch auf räumlichen Unterschieden in der PFOS-Kontamination der Nahrungsmittel. Auf jeden Fall ist eine weitergehende, umfassendere und längerfristige Untersuchung des Vorhandenseins von PFOS und PFOA in Nahrungsmitteln und menschlichem Blut wünschenswert. Weiterhin wäre es wichtig, das Ausmaß der Verunreinigung von Beschichtungs- und Imprägniermitteln durch PFOA genauer zu erfassen und den Übertritt von PFOA und anderen PFT aus diesen Produkten in die Nahrung genauer zu quantifizieren.

Ein weiterer Aspekt sind die Expositionspfade, die in der vorliegenden Analyse keinen erheblichen Beitrag zur aufgenommenen Dosis leisten, z.B. Hautkontakt mit imprägnierten Möbeln oder imprägnierter Kleidung. Solange die

Konzentrationswerte für PFOS und PFOA und die Aufnahme-raten mit den derzeit hohen Unsicherheiten behaftet sind, lässt sich nicht ausschließen, dass diese Pfade einen höheren Beitrag leisten, als es sich in unserer Analyse ergeben hat.

Schließlich lässt sich festhalten, dass die Methode SceBRA das Potential für eine systematische Analyse der Expositionsquellen von Substanzen mit breitem Anwendungsspektrum hat. Dies wurde kürzlich auch durch die Untersuchung der Exposition gegenüber Phthalaten demonstriert [27, 28]. Dieses Potential macht die Methode auch interessant für die Expositionsabschätzungen unter REACH.

## Literatur

- [1] Prevedouros, K., Cousins, I. T., Buck, R. C., Korzeniowski, S. H. Sources, fate and transport of perfluorocarboxylates, *Environ. Sci. Technol.* 40 (2006), 32–44.
- [2] Shoeib, M., Harner, T., Ikonou, M., Kannan, K. Indoor and outdoor air concentrations and phase partitioning of perfluoroalkyl sulfonamides and polybrominated diphenyl ethers, *Environ. Sci. Technol.* 38 (2004), 1313–1320.
- [3] Martin, J. W., Smithwick, M. M., Braune, B. M., Hoekstra, P. F., Muir, D. C. G., Mabury, S. A. Identification of long-chain perfluorinated acids in biota from the Canadian Arctic, *Environ. Sci. Technol.* 38 (2004), 373–380.
- [4] Skutlarek, D., Exner, M., Farber, H. Perfluorinated surfactants in surface and drinking waters, *Environ. Sci. Pollut. Res.* 13 (2006), 299–307.
- [5] Kubabwo, C., Stewart, B., Zhu, J., Marro, L. Occurrence of perfluorosulfonates and other perfluorochemicals in dust from selected homes in the city of Ottawa, Canada, *J. Environ. Monit.* 7 (2005), 1074–1078.
- [6] Olsen, G. W., Church, T. R., Miller, J. P., Burris, J. M., Hansen, K. J., Lundberg, J. K., Armitage, J. B., Herron, R. M., Medhizadehkashi, Z., Nobiletti, J. B., O'Neill, E. M., Mandel, J. H., Zobel, L. R. Perfluorooctanesulfonate and other fluorochemicals in the serum of American Red Cross adult blood donors, *Environ. Health Perspect.* 111 (2003), 1892–1901.
- [7] Kennedy, G. L., Butenhoff, J. L., Olsen, G. W., O'Connor, J. C., Seacat, A. M., Perkins, R. G., Biegel, L. B., Murphy, S. R., Farrar, D. G. The toxicology of perfluorooctanoate, *Critical Reviews in Toxicology* 34 (2004), 351–384.
- [8] Trudel, D., Horowitz, L., Wormuth, M., Scheringer, M., Cousins, I. T., Hungerbühler, K. Estimating Consumer Exposure to PFOS and PFOA, *Risk Anal.* 28 (2008), 251–269.
- [9] Scheringer, M., Vögl, T., von Grote, J., Capaul, B., Schubert, R., Hungerbühler, K. Scenario-based risk assessment of multi-use chemicals: Application to solvents, *Risk Anal.* 21 (2001), 481–497.
- [10] So, M. K., Yamashita, N., Taniyasu, S., Jiang, Q., Giesy, J. P., Chen, K., Lam, P. K. Health risks in infants associated with exposure to perfluorinated compounds in human breast milk from Zhoushan, China, *Environ. Sci. Technol.* 40 (2006), 2924–2929.
- [11] Food Standard Agency. Fluorinated Chemicals: UK Dietary Intakes. Food Standards Agency, 2006.
- [12] Tittlemier, S. A., Pepper, K., Seymour, C., Moisey, J., Bronson, R., Cao, X. L., Dabeka, R. W. Dietary exposure of Canadians to perfluorinated carboxylates and perfluorooctane sulfonate via consumption of meat, fish,

- fast foods, and food items prepared in their packaging, *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 55 (2007), 3203–3210.
- [13] Gruber, L., Schlummer, M., Ungewiss, J., Wolz, G., Moeller, A., Weise, N., Fromme, H. Analysis of sub-ppb levels of perfluorooctanoic acid (PFOA) and perfluorooctanesulfonate (PFOS) in food and fish, *Organohalogen Compounds* 69 (2007), 142–145.
- [14] Sinclair, E., Mayack, D. T., Roblee, K., Yamashita, N., Kannan, K. Occurrence of perfluoroalkyl surfactants in water, fish, and birds from New York State, *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* 50 (2006), 398–410.
- [15] U.S. EPA. *Exposure Factors Handbook*. Washington: U.S. Environmental Protection Agency, 1997.
- [16] Eurostat. *How Europeans Spend Their Time—Everyday Life of Women and Men*. Luxemburg: Office for Official Publications for the European Communities, 2004.
- [17] COPCC. *World Trade Center indoor environment assessment: Selecting contaminants of potential concern and setting health-based benchmarks*. Contaminants of Potential Concern Committee, World Trade Center Indoor Air Task Force Working Group, 2003.
- [18] Amorim Cruz, J.A. Dietary habits and nutritional status in adolescents over Europe—Southern Europe, *European Journal of Clinical Nutrition* 54, Suppl 1 (2000), S29–S35.
- [19] Kant, A. K., Graubard, B. I. Eating out in America, 1987–2000: Trends and nutritional correlates, *Preventive Medicine*, 38 (2004), 243–249.
- [20] Hundley, S. G., Sarrif, A. M., Kennedy, G. L. Absorption, distribution, and excretion of ammonium perfluorooctanoate (APFO) after oral administration to various species, *Drug and Chemical Toxicology* 29 (2006), 137–145.
- [21] Zartarian, V., Bahadori, T., McKone, T.E. Adoption of an official ISEA glossary, *J. Expos. Anal. Environ. Epidemiol.* 15 (2005), 1–5.
- [22] Washburn, S. T., Bingman, T. S., Braithwaite, S. K., Buck, R. C., Buxton, L. W., Clewell, H. J., Haroun, L. A., Kester, J. E., Rickard, R. W., Shipp, A. M. Exposure assessment and risk characterization for perfluorooctanoate in selected consumer articles, *Environ. Sci. Technol.* 39 (2005), 3904–3910.
- [23] Midasch, O., Schettgen, T., Angerer, J. Pilot study on the perfluorooctanesulfonate and perfluorooctanoate exposure of the German general population, *Int. J. Hygiene Environ. Health* 209 (2006), 489–496.
- [24] Fromme, H., Midasch, O., Twardella, D., Angerer, J., Boehmer, S., Liebl, B. Occurrence of perfluorinated substances in an adult German population in southern Bavaria, *International Archives of Occupational and Environmental Health* 80 (2007), 313–319.
- [25] Kärrman, A., Ericson, I., van Bavel, B., Darnerud, P.O., Aune, M., Glynn, A., Lignell, S., Lindstrom, G. Exposure of perfluorinated chemicals through lactation: Levels of matched human milk and serum and a temporal trend, 1996–2004, in Sweden, *Environ. Health Perspect.* 115 (2007), 226–230.
- [26] Fromme, H., Schlummer, M., Möller, A., Gruber, L., Wolz, G., Ungewiss, J., Böhmer, S., Dekant, W., Mayer, R., Liebl, B., Twardella, D. Exposure of an adult population to perfluorinated substances using duplicate diet portions and biomonitoring data, *Environ. Sci. Technol.* 41 (2007), 7928–7933.
- [27] Wormuth, M., Scheringer, M., Vollenweider, M., Hungerbühler, K. What are the Sources of Exposure to Eight Frequently Used Phthalic Acid Esters in Europeans? *Risk Anal.* 26 (2006), 803–824.
- [28] Wormuth, M., Demou, E., Scheringer, M., Hungerbühler, K. Assessments of Direct Human Exposure – the Approach of EU Risk Assessments Compared to Scenario-Based Risk Assessment (SceBRA), *Risk Anal.* 27 (2007), 979–990.

## 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

---

## Präambel zu den Originalbeiträgen von M. Matthies & J. Klasmeier sowie B. Simon-Hettich

Die beiden Artikel von Matthies & Klasmeier sowie Simon-Hettich beruhen auf Beiträgen, die 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“ wurde bereits in der Ausgabe 01/2008, S. 3-11, ein Beitrag aus dieser Reihe (M. Scheringer, K. Hungerbühler: Datenprobleme und Datenbedarf in der Umweltrisikobewertung von Chemikalien) publiziert. Der vierte und letzte Beitrag (E. Jacob: QSAR-Ansätze für die toxikologische Bewertung von Industriechemikalien) wird im folgenden Heft erscheinen.

---



## Multimediale Modellierung zur Identifizierung von persistenten Stoffen mit Ferntransportpotenzial

Michael. Matthies ([matthies@uos.de](mailto:matthies@uos.de)),

Jörg. Klasmeier ([jklasmei@usf.uni-osnabrueck.de](mailto:jklasmei@usf.uni-osnabrueck.de)), Osnabrück

### Zusammenfassung

Persistente Stoffe werden in der Umwelt nicht oder nur in geringem Maße abgebaut und können sich daher in Organismen anreichern. In den vergangenen Jahren wurden in entlegenen Gebieten der Erde, insbesondere in den Polarregionen, Pflanzenschutzmittel-Wirkstoffe und Industriechemikalien in überraschend hohen Konzentrationen gefunden, die dort nie oder nur in geringen Mengen eingesetzt worden sind. Sie werden als POPs (Persistent Organic Pollutants) oder PBT-Stoffe (persistent, bioakkumulierend, toxisch) bezeichnet. In internationalen Übereinkünften wie der UNEP Stockholm-Konvention wurden Kriterien für Halbwertszeiten (HWZ) des Abbaus in Wasser, Sediment und Boden festgelegt, mit denen solche Stoffe frühzeitig identifiziert und für eine weitergehende Bewertung ausgewählt werden sollen. Auch der Entwurf für die neue Europäische Chemikalienverordnung (REACH) betont den Vorsorgegedanken durch ein Zulassungsverfahren für PBT-Stoffe und sehr langlebige und bioakkumulierende Chemikalien. In diesem Beitrag wird ein Verfahren vorgestellt, mit dem Maßzahlen für die Gesamtpersistenz in der Umwelt und das Ferntransportpotenzial von organischen Chemikalien mit Hilfe des multimedialen Modells ELPOS (Environmental Long-Range Transport and Persistence of Organic Substances) berechnet werden können. Multimediale Verteilungsmodelle bilden die Umwelt (oder einen Teilausschnitt) als ein vernetztes System von Umweltkompartimenten bestimmter geometrischer, physikalischer, chemischer und biologischer Eigenschaften ab, die mit den chemischen (Fremd-)Stoffen in Wechselwirkung treten und sie über die Kompartimentgrenzen austauschen. Sie sind besonders geeignet, das zeitliche und räumliche Verhalten von Umweltchemikalien über lange Zeiträume abzubilden. Im modellgestützten Verfahren werden Referenzchemikalien wie die PCBs, deren Umweltpersistenz und Ferntransportpotenzial gut bekannt sind, zur Klassifikation von Stoffen mit PBT- oder POP-Eigenschaften herangezogen. Die Kombination von Abbau- und Verteilungsverhalten in multimedialen Modellen kann gegenüber der ausschließlichen Verwendung von HWZ-Kriterien zu einer unterschiedlichen Einstufung von Stoffen führen. Mit multimedialen Modellen kann darüber hinaus Einblick in die steuernden Umweltprozesse gewonnen werden, ohne dass ein zusätzlicher Datenbedarf entsteht. Es wird daher vorgeschlagen, das modellgestützte Verfahren als integralen Teil für die Identifikation von Stoffen mit PBT bzw. POP-Eigenschaften einzusetzen.

### 1. Einführung

Persistente Stoffe werden in der Umwelt nicht oder nur in geringem Maße abgebaut und können sich daher in Organismen anreichern. In den vergangenen Jahren wurden in entlegenen Gebieten der Erde, insbesondere in den Polarregionen, Pflanzenschutzmittel-Wirkstoffe und Industriechemikalien in überraschend hohen Konzentrationen gefunden, die dort nie oder nur in geringen Mengen eingesetzt worden sind. Sie werden als POPs (Persistent Organic Pollutants) oder PBT-Stoffe (persistent, bioakkumulierend, toxisch) bezeichnet. Da die traditionelle Risikobewertung auf solche Stoffe nicht angewendet werden kann, wird in den TGD (Technical Guidance Documents) ein besonderes Verfahren mit Kriterien für Persistenz, Bioakkumulation und Toxizität (PBT assessment) vorgeschlagen */1/*. In internationalen Übereinkünften wie der UNEP Stockholm-Konvention */2/*, dem Aarhus Protokoll der UNECE (United Nations Economic Commission for Europe) */3/* und dem OSPAR-Abkommen (Oslo/Paris Convention for the Protection of the Marine Environment of the North-East Atlantic) zum Schutz der Nordsee */4/* wurden ebenfalls Kriterien festgelegt, mit denen solche Stoffe frühzeitig identifiziert und für eine weitergehende Bewertung ausgewählt werden sollen. Auch der Vorschlag für die neue Europäische Chemikalienverordnung (REACH) betont den Vorsorgegedanken durch eine Bewertung aller Stoffe auf ihre PBT-Eigenschaften */5/*. Tabelle 1 zeigt die von verschiedenen Institutionen und Konventionen vorgeschlagenen Halbwertszeiten (HWZ) für Abbau in Wasser, Sediment und Boden als Kriterien für Persistenz und die HWZ in Luft als Kriterium für das Ferntransportpotenzial. Bei einer Überschreitung mindestens einer Halbwertszeit für Wasser, Sediment oder Boden wird ein Stoff als persistent klassifiziert („oder“ Verknüpfung). Die Halbwertszeit in Luft wird dagegen als Kriterium für das Ferntransportpotenzial mit „und“ verknüpft. Die Kriterien wurden zwar unter Berücksichtigung des beobachteten Umweltverhaltens festgelegt, ignorieren jedoch wesentliche Aspekte wie Eintrittsmedium, Bindung an Partikel oder Umweltverteilung. Eine gute Übersicht über die verschiedenen PBT-Kriterien findet man in */6/*. Die Bewertung von PBT-Stoffen aus Sicht der Behörden wird in */7/* und die Einschätzung der Industrie in */8/* dargelegt.

In diesem Beitrag wird ein Verfahren vorgestellt, mit dem die Gesamtpersistenz ( $P_{ov}$ ) und der Ferntransport (LRTP) von organischen Chemikalien mit Hilfe von multimedialen Modellen berechnet werden kann. Anhand von Beispielsubstanzen werden die Unterschiede in der Klassifikation herausgearbeitet und die zusätzlichen Informationen über die räumliche Verteilung und Ausbreitung sowie das zeitliche

Umweltverhalten aufgezeigt. Auch für das Bioakkumulationspotenzial wurde ein Multimediamodell verwendet, um die Aufnahme über landwirtschaftliche und marine Nahrungsketten und die daraus resultierende Exposition des Menschen zu berechnen und Stoffe mit einem hohen Bioakkumulationspotenzial zu identifizieren /9/. Darauf wird in diesem Beitrag ebenso wie auf die Toxizität als ein weiteres Kriterium nicht eingegangen.

Halbwertszeiten (d) in Umweltmedien						
	Meerwasser	Süßwasser	Meeresediment	Süßwasser-sediment	Boden	Luft*
REACH /5/	60	40	180	120	120	---
TGD /1/	60	40	180	60	---	
UNEP /2/	60	60	180	180	120	2
OSPAR /4/	50	50	---	---	---	---
UNECE /3/	60	60	180	180	180	2

Tab. 1: Kriterien für Persistenz und Ferntransportpotenzial

## 2. Multimediales Umweltverteilungsmodell ELPOS

Multimediale Verteilungsmodelle bilden die Umwelt (oder einen Teilausschnitt) als ein vernetztes System von Umweltkompartimenten bestimmter geometrischer, physikalischer, chemischer und biologischer Eigenschaften ab, die mit den chemischen (Fremd-)Stoffen in Wechselwirkung treten und sie über die Kompartimentgrenzen austauschen. Sie sind besonders geeignet, das zeitliche und räumliche Verhalten von Umweltchemikalien über lange Zeiträume abzubilden /10/. Für die Expositionsmodellierung wird in den Technical Guidance Documents (TGD) /1/ und dem Bewertungsprogramm EUSES (European Union System for the Evaluation of Substances) /11/ das multimediale Modell SimpleBox eingesetzt, um die regionalen Hintergrundkonzentrationen ( $PEC_{\text{regional}}$ ) zu berechnen. Es ist ein aus drei Böden, einem Wasserkompartiment mit Sediment und der atmosphärischen Grenzschicht gekoppeltes stationäres Umweltsystem-Modell, das interne advective und diffusive Austauschvorgänge wie Deposition, Ausgasung und Sedimentation berücksichtigt, die wegen der Widerstände an den Phasengrenzen zu einer zeitlichen Verzögerung und zu einer Abweichung des stationären Zustandes (Level III) vom thermodynamischen Gleichgewicht führen. Dieses regionale Umweltverteilungs-Modell wurde als Grundlage für das Modell ELPOS (Environmental Long-range Transport and Persistence of Organic Substances) gewählt und durch einige Erweiterungen um zusätzliche Optionen ergänzt /12/. Abbildung 1 zeigt die Struktur des Modells ELPOS und die berücksichtigten Prozesse. Eine genauere Beschreibung von EUSES findet man in /11/ und von ELPOS in /12/.

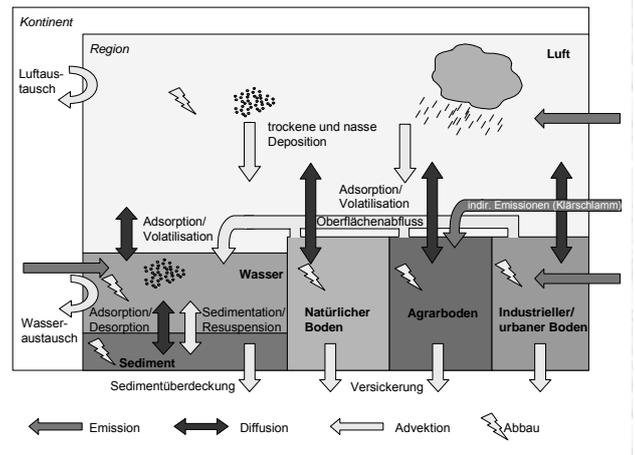


Abb. 1: Multimediales Modell ELPOS (Environmental Long-range Transport and Persistence of Organic Substances)

## 3. Gesamtpersistenz und Ferntransport

### 3.1 Persistenz

Viele der bereits vom Markt genommenen oder verbotenen Xenobiotika („Fremdstoffe“) wie Dieldrin, Mirex, Toxaphene, PCBs sind trotzdem noch immer in der Umwelt zu finden. Diese Stoffe, zu denen auch die PCDD/F („Dioxine“) und das in Asien und Afrika noch eingesetzte Insektizid DDT gehören, werden als „persistent“ bezeichnet, da sie nur schwer abbaubar sind. Als Maß für die Gesamtpersistenz eines Stoffes kann seine mittlere Lebensdauer („overall life time“) in einem geschlossenen Umweltsystem dienen, d.h. Verluste treten nur durch die Abbauprozesse in Luft, Wasser, Sediment und Boden auf. Wenn zusätzlich nicht-reaktive Verlustprozesse wie Auswaschung („leaching“) und Verlagerung ins Sediment („burial“) berücksichtigt werden, spricht man von der mittleren Aufenthaltsdauer  $\tau_{ov}$  („overall residence time“). Webster al. /13/ berechneten die mittlere Lebensdauer für den stationären Zustand (Level III) als Maß für die Gesamtpersistenz  $P_{ov}$ :

$$P_{ov} = \frac{m_{tot}}{\sum_i m_i \cdot k_i} = \frac{m_{tot}}{I} \quad (1)$$

wobei  $m_{tot}$  = Gesamtmasse im System und  $m_i$  und  $k_i$  = Masse und Abbaugeschwindigkeitskonstante im Kompartiment  $i$ .

Wegen der Stationarität lässt sich  $P_{ov}$  auch als Quotient aus Gesamtmasse und Gesamtinput berechnen. Daraus ergibt sich durch Multiplikation mit  $\ln 2 = 0,693$  die Gesamthalbwertszeit. Wie Webster et al. /13/ auch gezeigt haben, hängt die Persistenz ganz wesentlich vom Eintrittskompartiment ab („mode-of-entry“). Ein Stoff wird dann am schnellsten abgebaut, wenn er sich überwiegend im Kompartiment mit der höchsten Abbaurrate befindet. Wegen der Transferwiderstände zwischen den Kompartimenten kann die Aufnahme behindert und damit der Abbau wenig effektiv sein. Die mit ELPOS /12/ und vielen anderen Modellen /14, 15/ berechnete

Gesamtpersistenz wird also je nach Eintrittskompartiment unterschiedlich sein. Stroebe et al. /16/ schlagen daher vor, für die Identifikation und Klassifikation von Stoffen die Gesamtpersistenz für dasjenige Eintrittskompartiment auszuwählen, für das sich der höchste Wert ergibt („Maximum-Approach“). Sie begründen dies mit dem „temporal remote state“, d.h. dem globalen Zustand, der sich nach längerer Zeit einstellt.

### 3.2 Ferntransport

Persistente Stoffe können aufgrund ihrer langen Aufenthaltszeit in der Umwelt über weite Strecken verfrachtet werden, insbesondere dann, wenn sie einen merklichen Anteil in den mobilen Phasen Luft und Wasser haben und dort nicht oder nur wenig abgebaut werden. Man sagt, sie sind ubiquitär verteilt. In den vergangenen Jahren wurden in entlegenen Gebieten der Erde, insbesondere in den Polarregionen, Pflanzenschutzmittel-Wirkstoffe und Industriechemikalien in überraschend hohen Konzentrationen gefunden, die dort nie oder nur in geringen Mengen eingesetzt worden sind /17, 18/. Sie werden im internationalen Sprachgebrauch als „Persistent Organic Pollutants“ (POPs) bezeichnet und können sich in Nahrungsketten anreichern. Um das Potenzial einer Substanz für den Ferntransport aus dem Emissions- oder Anwendungsgebiet heraus zu ermitteln und zu bewerten, wurde von Bennett et al. /19/ das Konzept der "Charakteristischen Transportdistanz" (Charakteristischen Travel Distance, CTD) eingeführt ( $x$  = Ortskoordinate):

$$C(x) = C_0 \cdot e^{-x/L} \quad (2)$$

Sie ist definiert als diejenige Entfernung  $L$  von der Emissionsquelle, in der die anfängliche Konzentration  $C_0$  auf  $1/e$  ( $\approx 37\%$ ) abgefallen ist:

$$C(L) = C_0 \cdot e^{-1} \approx 0,37 \cdot C_0 \quad (3)$$

Wie Beyer et al. /20/ zeigen konnten, lässt sich die charakteristische Entfernung für den Transport in einem mobilen Medium, hier in Luft  $L_{air}$ , berechnen als

$$L_{air} = \frac{m_{air}}{m_{tot}} \cdot \tau_{ov} \cdot u_{air} \quad (4)$$

Damit hängt die charakteristische Transportdistanz  $L_{air}$  sowohl vom Verhältnis der Substanzmassen in der Luft (hier das mobile Medium) als auch von der mittleren Aufenthaltsdauer des Stoffes in der multimedialen Umwelt ab. Das Potenzial für den Ferntransport ist also umso größer, je mehr von einer Substanz in der mobilen Phase und je größer die Persistenz der Substanz ist. Für die Strömung mit dem Wasser gilt die analoge Beziehung mit der Fließgeschwindigkeit im Wasser und  $\tau_{ov}$  für die Emission in Wasser. Die charakteristische Transportdistanz kann anschaulich als diejenige Entfernung interpretiert werden, bei der die durch Verlustprozesse bedingten Massenflüsse gleich denjenigen durch advektiven Transport im mobilen Medium sind /21/. Eine gemeinsame Betrachtung der mittleren Lebenszeit als Maß für die Persistenz und von  $L_{air}$  als Maß für den Ferntransport in der

Luft wurde von Beyer et al. /20/ vorgenommen. Für die beiden Kriterien „Persistenz“ und „Ferntransport in der Luft“ werden als Maß die „overall life time  $P_{ov}$ “ und die „characteristic travel distance  $L_{air}$ “ vorgeschlagen, da sie konsistent die Zeit bzw. Distanz angeben, nach der die Anfangskonzentration auf  $1/e$  abgefallen ist. Ähnlich wie bei der Gesamtpersistenz wird für die Klassifikation die CTD für dasjenige Eintrittskompartiment ausgewählt, für das sich der höchste Wert ergibt (Maximum-Approach) /22/.

In der Tabelle 2 sind einige Unterschiede zwischen der Klassifikation mit Halbwertszeiten in einzelnen Umweltmedien und mit ELPOS dargestellt. Man sieht, dass die Verarbeitung der Stoffdaten in einem Multimedienmodell bei gleichem Datenbedarf deutlich mehr Informationen liefert, die bei der Klassifikation hilfreich sein können.

	Halbwertszeiten	ELPOS
Persistenz	Halbwertszeiten (HWZ) für Einzelmedien	Gesamtpersistenz
Ferntransportpotential	HWZ in Luft (nur UNEP und UNECE)	LRTP in Luft und Wasser
Veknüpung der HWZ	„oder“-Verknüpfung der HWZ für Persistenz, „und“-Verknüpfung mit LRTP	„und“-Verknüpfung
Eintrittsmedium	unabhängig	abhängig
Emissionsvolumen	unabhängig	unabhängig
Umweltverteilung	nicht berücksichtigt	berücksichtigt
Umwelteinflüsse	nicht berücksichtigt	berücksichtigt
Wichtung der HWZ	ungewichtet	gewichtet
Datenbedarf	HWZ in Wasser, Sediment, Boden, (Luft)	HWZ in Wasser, Sediment, Boden, (Luft), Verteilungskoeff.

**Tab. 2:** Vergleich der Klassifikation mit HWZ und ELPOS

Was noch fehlt, ist die Ableitung und Festsetzung von Grenzlínen (Cut-off values) für  $P_{ov}$  und LRTP. Diese Grenzlínen („boundaries“) können z.B. mit Hilfe von Referenzchemikalien wie den PCBs, deren Umweltpersistenz und Ferntransport gut bekannt sind, ermittelt werden /15/. Das Verfahren wurde erfolgreich auf acht verschiedene Multimedienmodelle angewandt, die unterschiedlich parametrisiert sind. Sie reichen von regionalen bis zu globalen Maßstäben und gestatten die Berechnung von Persistenz, Reichweite und Kontaminationspotenzial in empfindlichen Ökosystemen wie der Arktis. Ergebnisse für typische Chemikalien illustrieren, dass die simultane Verwendung von Verteilung und Abbau in multimedialen Modellen zu anderen Klassifikationen als das Aus-

wahlverfahren mittels Halbwertszeiten führen kann /15/. Im Folgenden wird das zweidimensionale Verfahren zur Definition von Grenzlinien für  $P_{ov}$  und LRTP für das Modell ELPOS vorgestellt.

## 4. Klassifikation

Grundlage für die Identifikation und Klassifikation von Stoffen als persistent und weitreichend ist eine zweidimensionale graphische Darstellung von  $P_{ov}$  und LRTP ( $P_{ov}$ /LRTP-Plot), die erstmals von Scheringer (1996) /23/ publiziert wurde. Abbildung 2 zeigt den mit ELPOS generierten  $P_{ov}$ /CTD-Plot für eine Auswahl von Stoffen unterschiedlicher Eigenschaften und Eintrittsmedien. Dargestellt sind jeweils die maximalen Werte für  $P_{ov}$  und CTD /15/. Diejenigen Stoffe, die sich überwiegend in der Luft befinden und wenig abgebaut werden wie Hexachlorbenzol (HCB), werden am weitesten transportiert. Am wenigsten mobil sind diejenigen Stoffe, die entweder rasch abgebaut werden wie *p*-Cresol oder stark im Boden gebunden werden wie OCDD. Stoffe mit sehr unterschiedlicher Persistenz können also die gleiche charakteristische Entfernung haben. Man erkennt aus Abbildung 2, dass es eine Obergrenze für  $L_{air}$  bei gegebener Persistenz  $P_{ov}$  gibt, die durch die diagonale Linie („volatility line“) dargestellt ist.

Für diese gilt  $L_{air} = \tau_{ov} \cdot u_{air}$ , d.h.  $m_{air} \approx m_{tot}$ . Dieses Maximum wird also von Substanzen erreicht, bei denen sich nahezu die gesamte Stoffmenge in der Luft befindet. Analog ergibt sich eine Abschätzung für die obere Grenze des Transports in der Wasserphase, die aber wegen der geringeren Geschwindigkeit deutlich unter derjenigen für Luft liegt. Einige bekannte POPs und Nicht-POPs werden nun als Referenzchemikalien verwendet, um die Grenzlinien zu ziehen. Es sind dies PCB-180 für die CTD und  $\gamma$ -HCH für  $P_{ov}$  /15/. Für andere Modelle können sich andere Grenzlinien ergeben, was durch die Besonderheiten der Modelle zu erklären ist. Für ELPOS ergeben sich Grenzlinien bei  $\max P_{ov} \approx 200$  Tage und  $\max CTD \approx 4\,000$  km.

Interessant ist nun, wie sich ein Stoff, der genau die grenzwertigen Halbwertszeiten in Wasser, Sediment, Boden und Luft nach der Stockholm-Konvention /2/ hat, bezüglich  $P_{ov}$  und CTD im Modell verhält. Da dort die Verteilungskoeffizienten nicht explizit festgelegt sind, wird das Bioakkumulationskriterium  $\log K_{ow} = 5,0$  herangezogen und der  $K_{AW}$  über 8 Größenordnungen ( $2 > \log K_{AW} > -6$ ) variiert. Mit dieser „virtuellen UNEP-Chemikalie“ ergeben sich die in Abbildung 3 dargestellten Werte. Die CTD liegt für alle Varianten unter 1000 km, was an der restriktiven HWZ von 2 Tagen in Luft liegt, während die  $P_{ov}$ -Werte (meist für Boden) fast exakt auf der Grenzlinie liegen und bei den stärker volatilen Varianten auf die Grenzlinie der CTD in Luft („volatility line“) einschwenken. Man erkennt daran, wie sich bei Variation des wichtigen Umweltverteilungsparameters  $K_{AW}$  die Lage im

$P_{ov}$ /CTD-Plot ändert. Der linke Zweig der UNEP-Variantenkurve wird durch die CTD in Luft begrenzt, während der rechte Zweig durch die  $P_{ov}$  im Boden bestimmt wird. Nur im Übergang spielt das Wasser eine Rolle.

## 4.1 Vergleich der Verfahren

Wie unterscheiden sich nun die in Tabelle 1 dargestellten verschiedenen Klassifikations- und Identifikationsverfahren und was ergeben sie im Vergleich mit ELPOS? Ergeben sie immer dasselbe Bild oder gibt es große Abweichungen bei der Anzahl und Identität der als langlebig und weitreichend identifizierten Stoffe? Für diesen Vergleich werden die in Beyer und Matthies /12/ untersuchten 65 Pflanzenschutzmittel-Wirkstoffe (PSM) herangezogen, für die sowohl die Verteilungskoeffizienten als auch die medienspezifischen Halbwertszeiten im Wasser und Boden aus Simulationstests vorliegen. Letztere wurden durch statistische Mittelung aus verschiedenen durchgeführten Simulationstests gemäß entsprechender Richtlinien ermittelt /12/.

Da keine Halbwertszeiten für das Sediment vorlagen, wurden diese mit einem Extrapolationsfaktor von 3 aus der Halbwertszeit im Wasser ermittelt. Dies entspricht dem Faktor, wie er in den meisten Protokollen für die PBT-Bewertung angewandt wird (siehe Tabelle 1). Die Abbildung 4 zeigt, dass der überwiegende Teil der PSM unter der Grenzlinie für  $\max P_{ov}$  liegt. Weiterhin erkennt man an der Häufung der Punkte auf der Linie parallel zur Volatilitätslinie, dass die überwiegende Anzahl im Wasser und nicht in der Luft transportiert werden. Nur ein Wirkstoff überschreitet die Grenzlinie für das Ferntransportpotenzial und damit beide Kriterien. Die Tabelle 3 zeigt das Ergebnis der verschiedenen Klassifikationsverfahren.

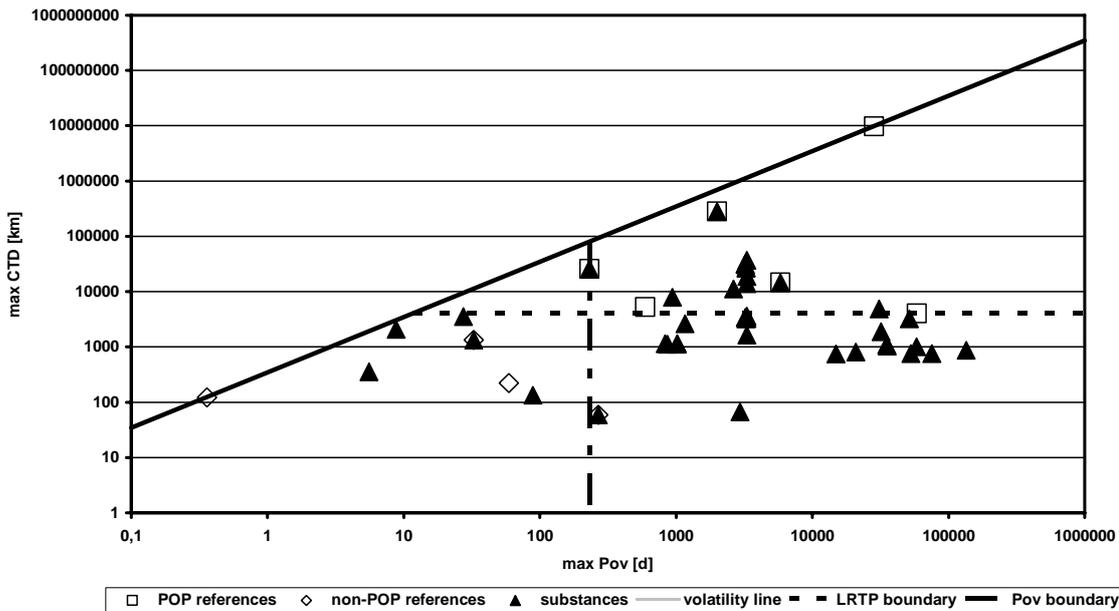


Abb. 2: ELPOS-Klassifikation ( $P_{ov}$ /LRTP-Plot) für einige ausgewählte persistente und nicht-persistente Stoffe (Daten aus /12, 15/)

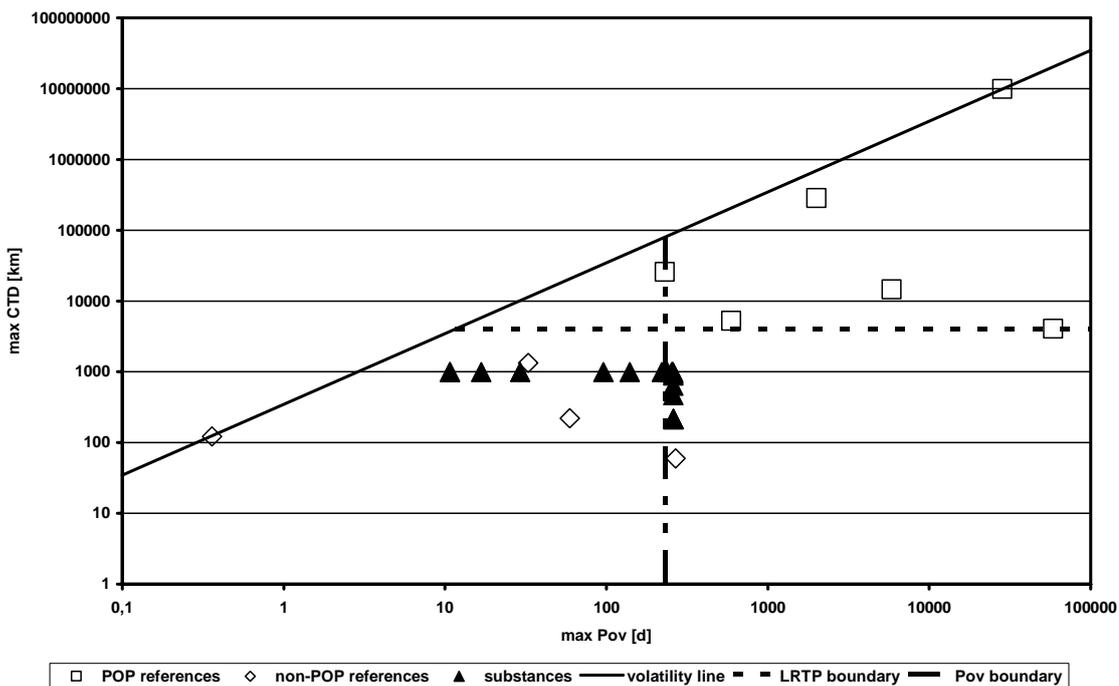


Abb. 3: ELPOS-Klassifikation ( $P_{ov}$ /LRTP-Plot) für eine virtuelle Chemikalie mit HWZ gemäß Stockholmkonvention,  $\log K_{OW} = 5$  und  $2 > \log K_{AW} > -6$ .

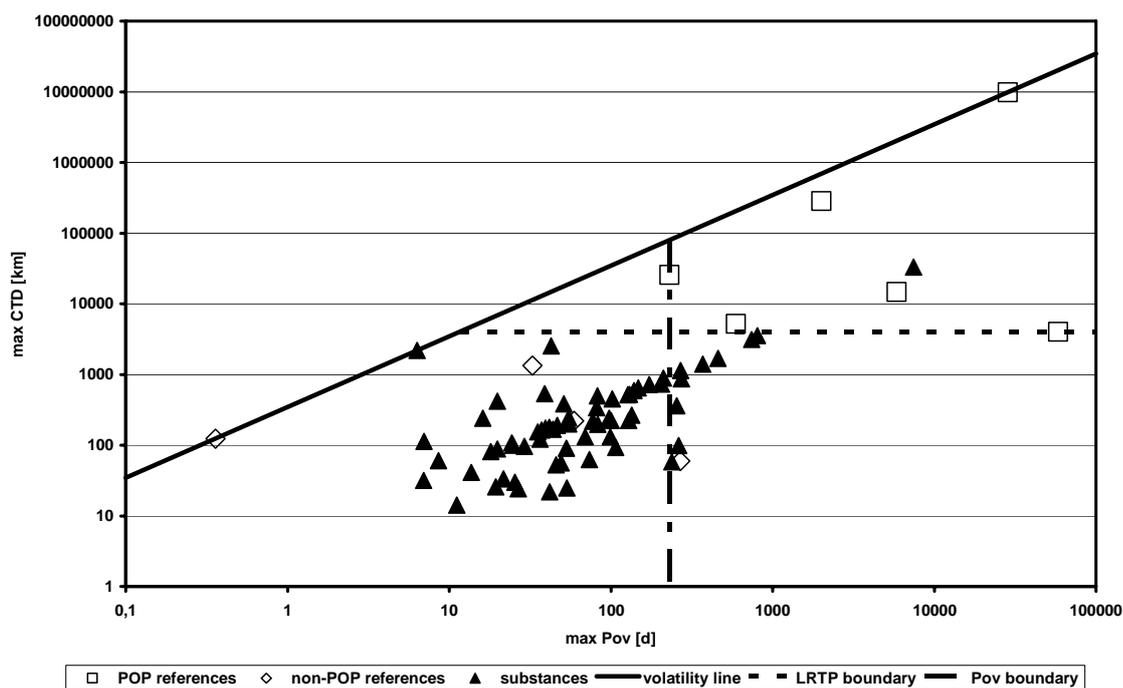


Abb. 4: ELPOS-Klassifikation ( $P_{ov}$ /LRTP-Plot) von 65 Pflanzenschutzmittel-Wirkstoffen (Daten aus /12/).

	P Marin	P Limnisch	P Boden	Persistenz	LRTP	Persistenz und LRTP
TGD	14 (22%)	17 (26%)	----	17 (26%)	----	----
REACH	14 (22%)	17 (26%)	3 (5%)	20 (31%)	----	----
UNEP	14 (22%)	14 (22%)	3 (5%)	17 (26%)	9 (14%)	3 (5%)
OSPAR	15 (23%)	15 (23%)	----	15 (23%)	----	---
UNECE	14 (22%)	14 (22%)	3 (5%)	17 (26%)	9 (14%)	3 (5%)

				$P_{ov}$	LRTP	$P_{ov}$ und LRTP
ELPOS	----	----	----	10 (15%)	1 (2%)	1 (2%)

Tab. 3: Vergleich der Klassifikation von 65 Pflanzenschutzmittel-Wirkstoffen mit verschiedenen Verfahren. Angegeben sind die absolute und relative Anzahl der Stoffe, die über den jeweiligen Grenzwerten liegt

Man erkennt, dass die allein auf Halbwertszeiten im Wasser und Sediment (OSPAR und TGD) beruhenden Verfahren 15 bzw. 17, entsprechend 23 bzw. 26% der Stoffe als persistent identifizieren. Die Zunahme der Halbwertszeit im Boden führt aufgrund der „oder“-Verknüpfung zu einem Anteil von 26% (= 17) nach UNEP und UNECE bzw. 31 % (= 20 Stoffe) nach REACH. ELPOS dagegen, das den Abbau in allen Medien Boden, Wasser, Sediment und Luft gewichtet betrachtet, qualifiziert nur 10 Substanzen (= 15%) als persistent. Ein Ferntransportpotenzial haben 9 Wirkstoffe wegen der Halbwertszeit in Luft von mehr als 2 Tagen. Wenn beide Kriterien Persistenz und Ferntransportpotenzial angewandt werden, wie es nach UNEP und UNECE der Fall ist, reduziert sich wegen der „und“-Verknüpfung die Zahl auf 3 Wirkstoffe, d.h. 5 %. In ELPOS wird darüber hinaus die Umweltverteilung und das Eintrittsmedium berücksichtigt, so dass nur ein Wirkstoff (= 2 %) als langlebig und weitreichend identifiziert wird. Der Vergleich zeigt also sehr deutlich eine konservative Abschätzung, wenn nur die Halbwertszeiten in Wasser und Sediment und nicht das Ferntransportpotenzial, die Umweltverteilung und das Eintrittsmedium einbezogen werden.

## 5. Schlussfolgerungen

Mit multimedialen Modellen, wie hier mit ELPOS gezeigt, können die zeitliche Dimension und die räumliche Ausdehnung der Kontamination von Ökosystemen mit organischen Chemikalien bestimmt werden. Sie sind daher für die Klassifikation und Identifikation von Stoffen mit PBT- und POP-Eigenschaften geeignet. Die Kombination von Abbau- und Verteilungsverhalten in Multimedia-Modellen kann gegenüber der ausschliesslichen Verwendung von HWZ-Kriterien zu einer unterschiedlichen Einstufung von Stoffen führen. Mit multimedialen Modellen kann darüber hinaus Einblick in die steuernden Umweltprozesse gewonnen werden, ohne dass ein zusätzlicher Datenbedarf entsteht. Es wird daher vorgeschlagen, das modellgestützte Verfahren als integralen Teil für die Identifikation von Stoffen mit PBT/POP-Eigenschaften einzusetzen.

## Literatur

- /1/ European Commission (2003) Technical Guidance Document on Risk Assessment. European Chemicals Bureau Ispra (<http://ecb.jrc.it/tgdoc/>).
- /2/ <http://www.pops.int>
- /3/ [http://www.unece.org/env/lrtap/pops\\_h1.htm](http://www.unece.org/env/lrtap/pops_h1.htm)
- /4/ OSPAR Convention for the Protection of the Marine Environment of the North-East Atlantic (2005): Cut-Off Values for the Selection Criteria of the OSPAR Dynamic Selection and Prioritisation Mechanism for Hazardous Substances (Reference Number 2005-9).
- /5/ Council of the European Union, Common position adopted by the Council on 27 June 2006 (REACH) (7524/8/06). Luxembourg, 2006.
- /6/ [http://www.ecy.wa.gov/programs/eap/pbt/rule/contributions/table\\_of\\_various\\_PBT\\_criteria.pdf](http://www.ecy.wa.gov/programs/eap/pbt/rule/contributions/table_of_various_PBT_criteria.pdf)
- /7/ Schulte, C. Persistente, bioakkumulierende und toxische Stoffe in der EU – Anspruch und Wirklichkeit. *Mitt Umweltchem Ökotox* 2006, **12**(3), 65-68.
- /8/ Tolls, J., Holt, M., Malcomber, I., Salvito, D., Thomas, P. Risk Assessment von PBT-Stoffen. *Mitt Umweltchem Ökotox* 2006, **12**(3), 69-70.
- /9/ Czub, G., McLachlan, M. Bioaccumulation Potential of Persistent Organic Chemicals in Humans. *Environ. Sci. Technol.* 2004, **38**, 2406-2412.
- /10/ OECD. Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environmental Persistence and Long-Range Transport. Series on Testing and Assessment No. 45, OECD Environment, Health and Safety Publications. Paris, 2004. (<http://www.oecd.org/env/riskassessment>)
- /11/ European Union System for the Evaluation of Substances (EUSES) (<http://ecb.jrc.it/>)
- /12/ Beyer, A., Matthies, M. Criteria for Atmospheric Long-range Transport Potential and Persistence of Pesticides and Industrial Chemicals. UBA Berichte Nr. 7/02, E. Schmidt Verlag, Berlin, 2002, 244 S., ISBN 3-503-06685-3.
- /13/ Webster, E., Mackay, D., Wania, F. Evaluating Environmental Persistence. *Environ. Toxicol. Chem.* 1998, **17**, 2148-2158.
- /14/ Fenner, K., Scheringer, M., MacLeod, M., Matthies, M., McKone, T. E., Stroebe, M., Beyer, A., Bonnell, M., Le Gall, A.-C., Klasmeier, J., Mackay, D., van de Meent, D. W., Pennington, D., Scharenberg, B., Suzuki, N., Wania, F. Comparing Estimates of Persistence and Long-Range Transport Potential among Multimedia Models. *Environ. Sci. Technol.* 2005, **39**, 1932-1942.
- /15/ Klasmeier, J., Matthies, M., MacLeod, M., Fenner, K., Scheringer, M., Stroebe, M., Le Gall, A.-C., McKone, T. E., van de Meent, D. W., Wania, F. Application of Multimedia Models for Screening Assessment of Long-Range Transport Potential and Overall Persistence. *Environ. Sci. Technol.* 2006, **40**, 53-60.
- /16/ Stroebe, M., Scheringer, M., Hungerbühler, K. Measures of Overall Persistence and the Temporal Remote State. *Environ. Sci. Technol.* **2004**, **38**, 5665-5674.
- /17/ AMAP - Arctic Monitoring and Assessment Programme. AMAP Assessment 2002: Persistent Organic Pollutants in the Arctic. AMAP, Oslo, Norway, 2003 (<http://www.amap.no>).
- /18/ MacDonald, R. W., Barrie, L. A., Bidleman, T. F. et al. Contaminants in the Canadian Arctic: 5 years of progress in understanding sources, occurrence and pathways. *Sci. Total Environ.* 2000, **254**, 93-234
- /19/ Bennett, D.H., McKone, T.E., Matthies, M., Kastenber, W.E.: General Formulation of Characteristic Travel Distance for Semi-volatile Organic Chemicals in a Multi-media Environment. *Environ. Sci. Technol.* 1998, **32**, 4023-4030.

- /20/ Beyer, A., Mackay, D., Matthies, M., Wania, F., Webster, E.: Assessing Long-range Transport Potential of Persistent Organic Pollutants. *Environ. Sci. Technol.* **34**, 699-703, 2000.
- /21/ van de Meent, D., McKone, T.E., Parkerton, T., Matthies, M., Scheringer, M., Wania, F., Purdy, R., Bennett, D.H.: Persistence and Transport Potential of Chemicals in a Multimedia Environment. In: Evaluation of Persistence and Long-Range Transport of Organic Chemicals in the Environment. Ed. Klecka, G. et al., SETAC-Press, Pensacola, 2000, pp.169-204.
- /22/ Stroebe, M., Scheringer, M., Held, H., Hungerbühler, K. Intercomparison of Multimedia Fate Models, Modes of Transport, Measures of Persistence and Long-Range Transport Potential and the Remote State. *Sci. Tot. Environ.* 2004, **321**, 1-20.
- /23/ Scheringer, M. Characterization of the environmental distribution behavior of organic chemicals by means of persistence and spatial range. *Environ. Sci. Technol.* 1997, **31**, 2891-2897.

**Korrespondenzadresse:**

Prof. Dr. Michael Matthies  
Universität Osnabrück  
Institut für Umweltsystemforschung  
Barbarastr. 12  
49076 Osnabrück

## Toxizitätsmodellierung mit kommerziellen (Q)SAR-Systemen: praktische Aspekte für die regulatorische Anwendung

Brigitte Simon-Hettich ([brigitte.simon-hettich@merck.de](mailto:brigitte.simon-hettich@merck.de)), Darmstadt

In der neuen europäischen Chemikaliengesetzgebung REACH sind für Chemikalien mit geringen Produktionsvolumina vorwiegend tierversuchsfreie Alternativen zur Erfassung toxischer Wirkungen vorgesehen. In Anhang IX werden (Q)SAR-Modelle zur Vorhersage bestimmter toxischer Eigenschaften genannt (EU, 2004). Solche Vorhersagen bedürften nur dann keiner Bestätigung durch eine experimentelle Prüfung, wenn die Vorhersagen von validierten (Q)SAR-Systemen stammen, die Ergebnisse geeignet für Einstufung und Kennzeichnungszwecke sind und eine adäquate sowie verlässliche Dokumentation der Ergebnisse vorgelegt wird. Daraus ergibt sich die Frage, in wie weit die derzeit verfügbaren (Q)SAR-Systeme zur Vorhersage von toxischen Wirkungen unter diesen Voraussetzungen zur Beurteilung von Chemikalien unter REACH Verwendung finden können. Eine breite Akzeptanz von (Q)SARs würde in einer Reduktion von Tierversuchen sowie in Einsparungen von Zeit und Kosten resultieren (Tong et al, 2005).

Zur Erhöhung der Akzeptanz von (Q)SAR-Systemen im regulatorischen Bereich hat die OECD international harmonisierte Prinzipien für die Validierung von (Q)SARs entwickelt (OECD, 2004). Demnach sollte ein (Q)SAR-Modell sich auf einen definierten Endpunkt beziehen, einen eindeutigen Algorithmus und eine definierte Anwendungsdomäne beinhalten, sowie geeignete Maßgaben für statistische Verlässlichkeit, Robustheit und Vorhersagegenauigkeit und, wenn möglich, auch eine mechanistische Interpretation umfassen.

Derzeit sind einige kommerzielle (Q)SAR-Systeme zur Vorhersage toxikologischer Eigenschaften verfügbar. Es stellt sich daher die Frage, in wie weit diese Systeme im regulatorischen Umfeld verwendet werden können.

### Verfügbare Modelle zur Toxizitätsmodellierung

Prädiktive computergestützte (Q)SAR-Systeme zur Vorhersage der Toxizität basieren auf der Analyse der Beziehung zwischen der chemischen (Sub-)Struktur einer Substanz oder Substanzgruppe und der toxikologischen Wirkung der Stoffe, die diese (Sub-)Struktur enthalten. Seit den 1980er Jahren werden (Q)SAR-Systeme für toxische Endpunkte entwickelt. Je nach dem, wie die Struktur-Wirkungsbeziehung entwickelt wird, werden zwei verschiedene Arten von Systemen unterschieden: sogenannte **Expertensysteme** und **statistisch-korrelative Systeme**.

Bei der Entwicklung von Expertensystemen erstellen Experten generalisierte Beziehungen zwischen einer (Sub-)Struktur und deren biologischer Wirkung und übertragen diese in eine computerlesbare Form. Die dazugehörigen

Informationen zur Toxizität werden in einer Datenbank gespeichert, die mit den Strukturinformationen verbunden ist. Die Vorhersage neuer chemischer Substanzen erfolgt über die qualitative Identifizierung jener Substrukturen, die mit einer Toxizität verbunden sind (Alerts oder Biophores). Expertensysteme sind daher klassische SAR-Systeme und generieren ja/nein-Antworten.

Statistisch-korrelative Systeme hingegen generieren quantitative Vorhersagen (QSAR). Dazu erfolgt die Analyse der chemischen Struktur anhand von Deskriptoren, d.h. numerischen Repräsentationen der chemischen Struktur. Deskriptoren können von atomaren oder molekularen Eigenschaften der Substanzen abgeleitet werden, wie

- physikalisch-chemische Eigenschaften (z.B. Verteilungskoeffizient Oktanol/Wasser),
- topologische Eigenschaften (z.B. Elektronegativitäten) oder
- Oberflächeneigenschaften (z.B. Polarität).

Diese Deskriptoren werden mit der Toxizität der Substanz korreliert und in einen mathematischen Algorithmus umgewandelt. Dieser Algorithmus wird zur Berechnung der quantitativen Effekte neuer Moleküle verwendet.

Außerdem können die (Q)SAR-Systeme hinsichtlich der Anzahl der vorhergesagten Endpunkte in ‚spezielle‘ und ‚universelle‘ Systeme unterteilt werden. ‚Spezielle Systeme‘ sind solche, die nur einen toxikologischen Endpunkt vorhersagen, z.B. die Expertensysteme OncoLogic der US Umweltbehörde EPA (Kanzerogenität) und Desicion Support System (DSS) des Bundesinstitutes für Risikobewertung (Haut- und Schleimhautreizung). ‚Universelle Systeme‘ dagegen umfassen eine Vielzahl von toxikologischen Endpunkten von akut bis chronisch, von lokal bis systemisch. Die bekanntesten Systeme sind die Expertensysteme DEREK und HazardExpert und die (Q)SAR-Systeme TOPKAT und MultiCASE. Weitere Informationen zu den Systemen (Endpunkte, Systemvoraussetzungen, Kosten) sind im ECETOC Technical Report on (Q)SARs enthalten (ECETOC, 2003).

### Verwendung von (Q)SAR-Systemen bei der regulatorischen Stoffbewertung

Die derzeitige regulatorische Verwendung von (Q)SARs unterscheidet sich beträchtlich zwischen verschiedenen Ländern und sogar zwischen verschiedenen Behörden innerhalb eines Landes. Das resultiert zum Teil aus den unterschiedlichen regulatorischen Rahmenbedingungen, die verschiedene Anforderungen bedingen (Walker et al, 2002; Cronin et al, 2003). Eine weite Verbreitung hat die Verwendung von Analogiebetrachtungen (‚read across‘) bei der Bewertung von Chemikalien gefunden. So wird z. B. in

den USA und China bei der Anmeldung neuer Chemikalien Analogiebetrachtungen zu strukturell ähnlichen Substanzen im jeweiligen nationalen Chemikalienrecht verankert und können zu einem eingeschränkten (öko-)toxikologischen Prüfprogramm und somit zur Reduktion von Tierversuchen führen. In der EU und Südkorea werden Analogiebetrachtungen nur in Einzelfällen bei der Notifizierung von Neustoffen akzeptiert (Walker et al, 2002).

In der EU sind außerdem Gruppenbetrachtungen von homologen Substanzen bei der Einstufung und Kennzeichnung von Stoffen gemäß Gefahrstoffverordnung in der Vergangenheit in Einzelfällen erfolgreich angewandt worden, z.B. bei anorganischen Schwermetallsalzen. Im Gegensatz dazu wird im Technical Guidance Document on Risk Assessment der EU (ECB, 2003) für toxikologische Endpunkte der Einsatz von Struktur-Wirkungsbeziehungen bei der Risikobewertung im wesentlichen auf „expert judgement“ beschränkt, welches dann als „zusätzlicher Hinweis“ gewertet wird.

Deutlich weiter gehen die amerikanische Food and Drug Administration (US FDA) und die dänische Umweltbehörde EPA bei dem Einsatz von (Q)SAR-Systemen. Das Center for Drug Evaluation and Research (CDER) und die Informatics and Computational Safety Analysis Staff (ICSAS) der US FDA ermitteln mit diesen Systemen Vorhersagen zu toxischen und adversen klinischen Effekten bei der Beurteilung von Inhaltsstoffen und Verunreinigungen von Arznei- und Nahrungsmittelzusatzstoffen (Matthews et al, 2004a, Matthews et al, 2004b). Darüber hinaus hat die FDA anhand von vertraulichen und öffentlichen Daten eigene (Q)SAR-Modelle für die kommerziellen Systeme MultiCASE und MDL entwickelt. Bisher stehen bereits Modelle für folgende Endpunkte zur Verfügung,

- Gentoxizität (Ames-, Mouse-Lymphoma-, und in vitro-Chromosomenaberrationstest)
- Kanzerogenität (Ratte und Maus)
- Reproduktionstoxizität (Entwicklungstoxizität)
- Maximal tolerierte Dosis
- Hepatotoxizität.

Diese Modelle werden von der Behörde bei der Bewertung von neuen Stoffen verwendet und sind bei den jeweiligen Anbietern erhältlich. Ziel der FDA ist die Entwicklung einer kompletten Batterie von Vorhersageprogrammen für alle wesentlichen toxikologischen Studien, die von der FDA im Rahmen von Zulassungsverfahren für Arzneimittel oder Nahrungsmittelzusatzstoffen empfohlen werden (Contrera et al, 2004; Matthews et al, 2006).

Zur Abschätzung der Sicherheit von Substanzen, die mit Lebensmitteln in Kontakt kommen erhebt das SAR-Team des Office of Food Additive Safety (OFAS) der US FDA im Rahmen der Food Contact Notification (FCN) Daten zur Kanzerogenität mit kommerziellen und selbstentwickelten Systemen und Datenbanken, wie z.B. OncoLogic, MultiCASE, TOXSYS, Leadscope (Bailey et al., 2005).

Die dänische Umweltbehörde hat mit den (Q)SAR-Systemen MultiCASE und TOPKAT Vorhersagen für ca. 20.000 Chemikalien aus dem EINECS-Verzeichnis ermittelt, daraus Einstufungs- und Kennzeichnungsvorschläge nach dem europäischen Gefahrstoffrecht abgeleitet und im Internet veröffentlicht (Tyle et al, 2002).

In Deutschland hat das Bundesinstitut für Risikobewertung (BfR) ein Decision Support System zur Vorhersage von lokalen Effekten auf Haut- und Schleimhaut (reizende/ätzende Wirkung) entwickelt. Die Vorhersagen von diesem System sollen für die Einstufung und Kennzeichnung der Substanzen nach den Kriterien der Gefahrstoffverordnung geeignet sein (Gerner & Schlede, 2002). Das europäische Chemikalienbüro hat dieses System analysiert, bewertet und Vorschläge zur Weiterentwicklung abgeleitet (Rorije & Hulzeboos, 2005; Tsakovska et al, 2005).

### **Vorhersagegenauigkeit der (Q)SAR-Systeme**

Voraussetzung für einen breiteren Einsatz von (Q)SAR-Systeme für regulatorische Zwecke ist, dass die Vorhersagen valide und verlässlich sind. Die Vorhersagesysteme basieren auf Daten aus experimentellen Prüfungen. Somit ist die Modellentwicklung abhängig von der Verfügbarkeit einer ausreichend großen Datenbank mit qualitativ hochwertigen Daten, denn die Vorhersagesysteme können nur so gut sein, wie die zur Entwicklung verwendeten Daten. Weiterhin sollten die Datenbanken eine möglichst große Vielzahl an verschiedenen chemischen Strukturen und Funktionalitäten abdecken, um ‚universell‘ einsetzbare Systeme zu erhalten. (Sub-)Strukturen oder Moleküleigenschaften, die nicht ausreichend im sogenannten Training Set der Modelle vorhanden sind, können nicht verlässlich vorhergesagt werden.

(Q)SAR-Modelle können für jeden beliebigen toxikologischen Endpunkt entwickelt werden. Für toxische Wirkungen, die auf einen bekannten Mechanismus zurückgeführt werden können, sind die (Q)SAR-Modelle oft erfolversprechend. Je spezifischer und genauer die Mechanismen beschrieben werden können, die dem modellierten Effekt zugrunde liegen, desto genauer ist das resultierende (Q)SAR-Modell. Wenn der Effekt jedoch von einer Vielzahl unterschiedlicher Mechanismen ausgelöst werden kann, so kann die statistische Korrelation ohne Berücksichtigung der Mechanismen zu fehlerhaften Beziehungen und zu nicht verlässlichen (Q)SAR-Modellen führen (Simon-Hettich et al, 2006).

Zur Zeit liefern die wichtigsten kommerziellen Vorhersagesysteme (z.B. DEREK, MultiCASE, TOPKAT) recht gute Vorhersagen für den Endpunkt Mutagenität mit einer Vorhersagegenauigkeit von >70% (White et al, 2003; Hayashi et al, 2005; Hayashi et al, 2006). Auch für lokale Effekte (Haut- und Schleimhautreizung), die stark von physikalisch-chemischen Eigenschaften der Substanzen beeinflusst werden, ist eine erfolgreiche Modellierung möglich (Gerner & Schlede, 2002). Besonders schwierig ist die Modell-

entwicklung für komplexe Endpunkte wie akute Toxizität, chronische Toxizität, Organtoxizität, Kanzerogenität oder Reproduktionstoxizität, da die in diesen Studien erfassten Effekte von einer Vielzahl von Variablen und Mechanismen abhängen: Aufnahme, Verteilung, Metabolismus und Ausscheidung (ADME) der Substanz in vivo, spezies-spezifische Effekte, Reproduzierbarkeit und Variabilität der experimentellen Ergebnisse sowie nicht standardisierte Beurteilungskriterien für die beobachteten Effekte erschweren die Modellentwicklung (Gottmann et al., 2001). Für spezifische systemische Effekte wie die Peroxisomenproliferation in der Leber, deren Entstehungsmechanismus gut untersucht und verstanden ist, können jedoch erfolgreich (Q)SAR-Modelle entwickelt werden (Simon-Hettich et al, 2006). Darüber hat sich auch die Entwicklung von (Q)SARs für bestimmte Substanzklassen mit ähnlichen Eigenschaften (kongenere Substanzen) als vielversprechend erwiesen (Richard & Benigni, 2001).

Je nach beabsichtigter Verwendung der Vorhersagen kann die benötigte Vorhersagegenauigkeit unterschiedlich sein. Für das Screening einer Vielzahl von Substanzen z.B. zur Auswahl von Leitsubstanzen in der Arzneimittelforschung oder zur Priorisierung von Substanzen für eine toxikologische Evaluierung ist ein geringerer Grad an Vorhersagegenauigkeit akzeptabel. Sollten die Vorhersagen aber für Einstufungen und Kennzeichnungen im Sinne des Chemikaliengesetzes oder für eine umfassende Risikobeschreibung verwendet werden und somit mit weiteren regulatorischen Maßnahmen verbunden sein, ist ein hohes Maß an Vorhersagegenauigkeit erforderlich.

## Zusammenfassung

Computergestützte Vorhersagesysteme stellen bereits heute eine sinnvolle Ergänzung des toxikologischen Repertoires für die Bewertung von Substanzen dar. Vor allem beim Screening und bei der Priorisierung von Substanzen können diese Systeme eine wichtige Hilfestellung leisten. Da die kommerziell verfügbaren Systeme derzeit noch nicht den OECD-Validitätskriterien entsprechen, ist eine weitergehende Verwendung im regulatorischen Bereich bisher noch eingeschränkt. Unerlässlich für die Bewertung der Vorhersageergebnisse ist eine ausreichende Expertise im Umgang mit diesen Systemen. Aufgrund der relativ hohen Kosten sind die kommerziellen Vorhersagesysteme jedoch nicht allen Interessengruppen (Wissenschaft, Behörden, Industrie) zugänglich (ECETOC, 2003).

Im Rahmen des neuen europäischen Chemikalienrechts REACH werden neben in vivo- und in vitro-Testsystemen (Q)SAR-Systeme (in silico) ein fester Bestandteil der toxikologischen Prüfstrategie werden. Eine Verwendung dieser Systeme in einer ‚integrated testing strategy‘ zur Identifizierung von möglichen toxischen Eigenschaften ist wissenschaftlich möglich und aus Kostengründen auch erforderlich. Mit Hilfe der in silico-Ergebnisse können

substanzspezifische toxikologische Prüfprogramme entwickelt werden, die zu enormen Einsparungen bei der Prüfung von Stoffen im Rahmen von REACH führen. Trotz allem müssen aber auch die Grenzen der Verwendung von (Q)SAR-Systemen bei der Vorhersage von systemisch toxischen Effekten oder bei vollkommen neuen chemischen Strukturen, die nicht im Training Set des Systems vorhanden sind, beachtet werden.

## Literatur

- [1] Bailey AB, Chanderbhan R, Collazo-Braier N, Cheeseman MA, Twaroski ML (2005) The use of structure-activity relationship analysis in the food contact notification program. *Reg Toxicol Pharmacol* 42: 225-235
- [2] Contrera JF, Matthews EJ, Kruhlak NL, Benz RD (2004) Estimating the safe starting dose in phase I clinical trials and no observed effect level based on QSAR modeling of the human maximum recommended daily dose. *Reg Toxicol Pharmacol* 40: 185-206
- [3] Cronin MTD, Jaworska JS, Walker JD, Comber MHI, Watts CD, Worth AP (2003) Use of QSARs in international decision-making frameworks to predict health effects of chemical substances. *Environ Health Perspect* 111(10): 1391-1401
- [4] ECB (2003) Technical guidance Document on Risk Assessment, 2nd ed. European Chemicals Bureau, Ispra (<http://ecb.jrc.it/tgdoc>)
- [5] ECETOC (2003) (Q)SARs: Evaluation of the commercially available software for human health endpoints with respect to chemical management applications. Technical Report No. 89. European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals. Brussels
- [6] EU (2004) <http://europa.eu.int/comm/enterprise/reach>
- [7] Gerner I, Schlede E (2002) Introduction of in vitro data into local irritation/corrosion testing strategies by means of SAR considerations: assessment of chemicals. *Toxicol Lett* 127: 169-175
- [8] Gottmann E, Kramer S, Pfahringer B, Helma C (2001) Data quality in predictive toxicology: reproducibility of rodent carcinogenicity experiments. *Environ Health Perspect* 109: 509-514
- [9] Hayashi M, Kamata E, Hirose A, Takahashi M, Morita T, Ema M (2005) In silico assessment of chemical mutagenesis in comparison with results of Salmonella microsome assay on 909 chemicals. *Mutat Res* 588: 129-135
- [10] Hayashi M, Kamata E, Hirose A, Takahashi M, Morita T, Ema M (2006) Erratum to "In silico assessment of chemical mutagenesis in comparison with results of Salmonella microsome assay on 909 chemicals" [*Mutat Res* 588: 129-135]. *Mutat Res* 603: 196
- [11] Matthews EJ, Kruhlak NL, benz RD, Contrera JF (2004a) Assessment of the health effects in humans: I. QSAR estimation of the maximum recommended

therapeutic dose (MRTD) and no effect level (NOEL) of organic chemicals based on clinical trial data. *Curr Drug Discov Technol* 1(1): 61-76

- [12] Matthews EJ, Kruhlak NL, Weaver JL, Benz RD, Contrera JF (2004b) Assessment of the health effects in humans: II. Construction of an adverse effects database for QSAR modeling. *Curr Drug Discov Technol* 1(4): 243-254
- [13] Matthews EJ, Kruhlak NL, Cimino MC, Benz RD, Contrera JF (2006) An analysis of genetic toxicity, reproductive and developmental toxicity, and carcinogenicity data: II. Identification of genotoxicants, reprotoxicants, and carcinogens using in silico methods. *Reg Toxicol Pharmacol* 44: 97-100
- [14] OECD (2004) The report for the expert group on (quantitative) structure-activity relationships [(Q)SARs] on the principles for the validation of (Q)SARs. OECD Series on Testing and Assessment No. 49. Organisation for the Economic Co-operation and Development. Paris. ENV/JM/MONO(2004)24
- [15] Richard AM, Benigni A (2001) AI and SAR approaches for predicting chemical carcinogenicity: survey and status report. *SAR QSAR Environ Res* 13: 1-19
- [16] Rorije E, Hulzeboos E (2005) Evaluation of (Q)SARs for the Prediction of Skin Irritation/Corrosion Potential. National Institute of Public Health and Environment (RIVM), Bilthoven, NL.
- [17] Simon-Hettich B, Rothfuss A, Steger-Hartmann T (2006) Use of computer-assisted prediction of toxic effects of chemical substances. *Toxicology* 224: 156-162
- [18] Tong W, Hong H, Xie Q, Shi L, Fang H, Perkins R (2005) Assessing QSAR limitations – a regulatory perspective. *Current Computer-Aided Drug Design* 1(2): 195-205
- [19] Tsakovska I, Netzeva T, Worth A (2005) Evaluation of (Q)SARs for Eye Irritation/Corrosion Potential. European Chemicals Bureau, Ispa, I (EUR 21897 EN)
- [20] Tyle H, Larsen HS, Wedebye EB, Sijm D, Krog TP, Niemela J (2002) Identification of potential PBTs and vPvBs by use of QSARs. Danish EPA SHC/TS 2-3/029
- [21] Walker JD, Carlsen L, Hulzebos E, Simon-Hettich B (2002) Global government application of analogues, SARs and QSARs to predict aquatic toxicity, chemical or physical properties, environmental fate parameters and health effects of organic chemicals. *SAR QSAR Environ Res* 13(6): 607-616
- [22] White AC, Mueller RA, Gallavan RH, Aaron S, Wilson AG (2003) A multiple in silico program approach for the prediction of mutagenicity from chemical structure. *Mutat Res* 539: 77-89

## Korrespondenzadresse:

Dr. Brigitte Simon-Hettich  
Institut für Toxikologie, Merck KGaA  
Frankfurter Straße 250  
64293 Darmstadt

## Der Arbeitskreis Chemikalienbewertung der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie stellt sich vor

Martin Scheringer ([scheringer@chem.ethz.ch](mailto:scheringer@chem.ethz.ch)), Zürich; Rüdiger Battersby ([rvb@ebrc.de](mailto:rvb@ebrc.de)), Hannover; Bernd Scharenberg ([bernd.scharenberg@uba.de](mailto:bernd.scharenberg@uba.de)), Dessau

Die Risikobewertung von Chemikalien befindet sich in einem Spannungsfeld zwischen zwei unterschiedlichen Polen: einerseits offenen Grundsatzfragen, welche auch weiterhin wissenschaftliche Forschung benötigen (und dadurch die Forschung auch stimulieren), und andererseits die praktische Aufgabe des Vollzugs durch Behörden und Industrie. Im Juni 2007 ist die neue europäische Chemikaliengesetzgebung REACH (EU 2007) in Kraft getreten. REACH hat den Bedarf an neuen Methoden und Daten zur Stoffbewertung erheblich gesteigert, und es ist noch offen, mit Hilfe welcher Ansätze sich die Effizienz und Aussagekraft der Stoffbewertung in dem Maße steigern lassen wird, wie das von REACH gefordert wird. Es ist ein erklärtes Ziel von REACH, den Umfang von Tierversuchen zu begrenzen und Methoden wie quantitative Struktur-Aktivitäts-Beziehungen (QSAR), in-vitro-Testmethoden, etc. stark auszubauen.

Der Arbeitskreis Chemikalienbewertung hat das Ziel, Themen aus dem ganzen Spektrum von der Grundlagenforschung zu Expositions- und Effektanalyse bis zu den Fragen der praktischen Umsetzung von REACH zu behandeln. Auf der Grundlage von Präsentationen zu ausgewählten Themen diskutiert er neu entwickelte Methoden, Konzepte und Expertensysteme, Fallbeispiele einzelner Stoffgruppen wie perfluorierte Tenside oder Nanosilber sowie Erfahrungsberichte aus der Praxis der Stoffbewertung in Behörden und Industrie, sowohl auf nationaler wie internationaler Ebene (OECD, EU).

Der Arbeitskreis trifft sich zweimal im Jahr und behandelt auf jeder Sitzung drei bis vier Themen durch Vorträge und Diskussionen. Im Verlauf der letzten vier Jahre gab es zwei Hauptthemen, die nach Möglichkeit auf jeder Sitzung behandelt wurden, nämlich REACH und QSAR-Methoden.

Zum Thema REACH wurden u.a. die Entwicklung des Verordnungstextes selbst, die Methoden zur Emissionsabschätzung unter REACH, die Identifizierung persistenter, bioakkumulierender und toxischer Substanzen (PBT-Stoffe), die *REACH Implementation Projects (RIPs)* und das SPORT-Projekt (*Strategic Partnership on REACH Testing*) bearbeitet. Auch nach dem Inkrafttreten der REACH-Verordnung am 1.6.2007 hat das Thema REACH seine Aktualität für den Arbeitskreis nicht verloren, weil in der jetzigen Phase sehr viele konkrete Erfahrungen mit REACH gesammelt werden und der Bedarf an Methoden und Daten für alle Aspekte der Stoffbewertung unter REACH in den nächsten Jahren unverändert hoch bleiben wird.

Zum Thema QSAR wurden sowohl Grundlagen wie konkrete Anwendungen bearbeitet, so die QSAR-Methoden für die Reaktion organischer Substanzen mit OH-Radikalen in Luft, für diverse Toxizitäts-Endpunkte und für aeroben biologischen Abbau, und schließlich die Bündelung diverser QSAR-Ansätze in der "QSAR-Toolbox" der OECD. Im Hinblick auf aeroben biologischen Abbau wurden außerdem die Expertensysteme CATABOL (Universität Bourgas, Bulgarien) und die Biocatalysis-Biodegradation Database der Universität Michigan (USA) vorgestellt (Jaworska et al. 2002, Hou et al. 2004).

Neben REACH und QSAR-Methoden als den beiden Hauptthemen des Arbeitskreises wurden stoffbezogene Fallbeispiele betrachtet, z.B. Biozide, Nanosilber, perfluorierte Tenside und die Risikobewertung für Metalle. Weitere Einzelthemen waren die globale Harmonisierung der Einstufung und Kennzeichnung gefährlicher Güter und Stoffe (GHS), die Untersuchung von U-förmigen Dosis-Wirkungs-Beziehungen (Hormesis), Ferntransport von Persistenten Organischen Chemikalien und die Unterscheidung verschiedener Wirkmechanismen anhand einer differenzierenden ökotoxikologischen Testbatterie. Der Arbeitskreis unterhält außerdem eine ad-hoc-Arbeitsgruppe „Expositionsmodellierung“, die nach Bedarf ein bis zweimal jährlich zusammentritt, um neueste Entwicklungen auf dem Gebiet der Expositionsabschätzung zu diskutieren.

Die Mitglieder des Arbeitskreises Chemikalienbewertung stammen aus Wissenschaft (vorwiegend Hochschulen und Fraunhofer-Institute), Behörden, Industrie und wissenschaftlichen Dienstleistungsunternehmen. Der Arbeitskreis hat sich darauf festgelegt, primär Sachfragen zu bearbeiten, weil die Auseinandersetzung über verschiedene politische Positionen zur Ausgestaltung von REACH auf der Ebene eines Arbeitskreises fruchtlos ist. Zur Zeit sind ca. 25 Mitglieder im Arbeitskreis aktiv, und die Diskussionen sind lebhaft und ergiebig. In Zukunft möchte der Arbeitskreis zu ausgewählten Themen Positionspapiere verfassen, u.a. zur Lage der Forschung und Lehre in den Gebieten Umweltchemie und Ökotoxikologie in Deutschland. Weiterhin ist geplant, dass sich der Arbeitskreis Chemikalienbewertung verstärkt mit anderen Arbeitskreisen der Fachgruppe austauscht und man nach Möglichkeit auch Sitzungen gemeinsam abhalten wird. Schließlich besteht eine Zielsetzung für die nächsten Jahre darin, den Arbeitskreis innerhalb und auch außerhalb der GDCh verstärkt als Anlaufstelle für Fragen zur Stoffbewertung zu etablieren. Mitgliedschaft im Arbeitskreis ist für alle Mitglieder der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie jederzeit möglich (Kontakt: M. Scheringer, [scheringer@chem.ethz.ch](mailto:scheringer@chem.ethz.ch)).

## Literatur

- EU (2007)  
ec.europa.eu/environment/chemicals/reach/reach\_intro.htm
- Hou, B.K., Ellis, L.B.M., Wackett, L.P. (2004) Encoding microbial metabolic logic: predicting biodegradation. J. Ind. Microbiol. Biotechnol. **31**, 261–272
- Jaworska, J., Dimitrov, S., Nikolova, N., Mekenyan, O. (2002) Probabilistic assessment of biodegradability based on metabolic pathways: Catabol system. SAR QSAR Environ. Res. **13**, 307–323.

## 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

---

## Ein neues Serviceangebot der Fachgruppe für Studierende: Praktikumsbörse auf der Fachgruppen-Homepage

Seit kurzem befindet sich auf der FG-Homepage eine Praktikumsbörse im Aufbau, die über das Angebot an Praktika in wissenschaftlichen Institutionen, Behörden und Firmen Auskunft geben soll. Die Initiative hierzu ging von Prof. Lorenz, Universität Halle, zugleich Vorsitzender des FG-AK's „Forschung und Lehre“ aus. Das Angebot richtet sich vorwiegend an Studierende aus den Bereichen (Umwelt-)Chemie, (Öko-)Toxikologie und Umweltwissenschaften. Der Zugriff auf die Börse ist unter <http://www.oekochemie.tu-bs.de/ak-umweltchemie/service.php?navi=Praktika> möglich. Über weitere Links können Interessenten die Ausschreibungen der Praktikplätze direkt aufrufen. Zudem werden die notwendigen Informationen für die on-line-Bewerbung gegeben und Ansprechpartner genannt.

Institutionen werden gebeten, ihre Angebote an Prof. Lorenz ([wilhelm.lorenz@chemie.uni-halle.de](mailto:wilhelm.lorenz@chemie.uni-halle.de)) weiterzuleiten.

---

## 3. Gemeinsame Tagung von SETAC GLB und GDCh: „Neue Problemstoffe in der Umwelt Erfassung, Wirkungen und Lösungsmöglichkeiten“



Vom 23. - 26. September 2008 findet in Frankfurt am Main die dritte gemeinsame Jahrestagung der SETAC GLB (Society of Environmental Toxicology and Chemistry) und der GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie statt.

Gemeinsame Jahrestagungen von SETAC-GLB und der GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie fanden bereits 2002 in Braunschweig und 2004 in Aachen statt.

Im Fokus der diesjährigen Tagung in Frankfurt stehen Neue Problemstoffe. Gemeint sind beispielsweise Pharmaka, Körperpflegemittel, Nanopartikel, halogenierte Flammschutzmittel, per- und polyfluorierte Chemikalien, Schwermetalle, Pestizide, endokrine Disruptoren, Treibstoffadditive, sekundäres organisches Aerosol, aber auch Stoffe, die bereits seit Dekaden in der Umwelt auftreten und erst jetzt als problematisch wahrgenommen werden.

Im Rahmen der Tagung soll die Erfassung dieser Stoffe in aquatischen, terrestrischen und atmosphärischen Systemen sowie deren Wirkung auf unterschiedliche biologische Organisationsebenen im Vordergrund stehen. Weiterhin sollen unter anderem technische Lösungsmöglichkeiten zur Reduktion dieser Stoffe in verschiedenen Umweltsystemen und Strategien zur Entwicklung eines Problembewusstseins im Umgang mit ihnen diskutiert werden.

### Wissenschaftliches Komitee

Christine Achten, Universität Wien/ Österreich  
Klaus-Peter Ebke, Mesocosm GmbH, Homberg/ Ohm  
Elke Fries, Universität Osnabrück  
Tobias Frische, UBA, Dessau  
Bettina Hitzfeld, BAFU, Bern/ Schweiz  
Henner Hollert, RWTH, Aachen  
Udo Hommen, IME, Schmallingenberg  
Adriano Joss, EAWAG, Dübendorf( Schweiz)  
Florian Keil, ISOE, Frankfurt/Main  
Gerhard Lammel, MPI für Chemie, Mainz  
Mathias Liess, UFZ Leipzig, Halle  
Werner Manz, BFG, Koblenz  
Matthias Oetken, Universität Frankfurt/Main  
Wilhelm Püttmann, Universität Frankfurt/Main  
Bettina Rechenberg, UBA, Dessau  
Andreas Schäffer, RWTH Aachen  
Peter Seel, HLUG, Wiesbaden  
Lennart Weltje, BASF AG, Limburgerhof

## Organisation

Die Tagung wird von zwei Instituten der Johann W. Goethe-Universität Frankfurt/Main gestaltet.

**Dr. Matthias Oetken, Dominic Kaiser und Prof. Dr. Jörg Oehlmann**

Institut für Ökologie, Evolution und Diversität,  
Abteilung Aquatische Ökotoxikologie  
J.W. Goethe Universität  
Siesmayerstr. 70, D-60323 Frankfurt am Main  
Tel: +49 69 79824850,  
E-Mail: [oetken@bio.uni-frankfurt.de](mailto:oetken@bio.uni-frankfurt.de)

**Prof. Dr. Wilhelm Püttmann und Julia Regnery**

Institut für Atmosphäre und Umwelt, Abteilung Umweltanalytik  
Altenhöfer Allee 1, D-60438 Frankfurt am Main  
Tel: +49 69 798 40225,  
E-Mail: [Puettmann@iau.uni-frankfurt.de](mailto:Puettmann@iau.uni-frankfurt.de)

## Vorläufiges Tagungsprogramm

### Dienstag, 23. September

- 12:00 Registrierung
- 14:00 Tagungseröffnung –  
Vortrag: U. Lahl, BMU, anschließend Plenarvortrag  
zum Themenfeld Erfassung  
(W. Giger, EAWAG, Dübendorf, CH)
- 16:00 Kaffeepause/Postersession
- 17:00 Parallelsessions
- 19:00 Get together (Casino)

### Mittwoch, 24. September

- 09:00 Vortrag SETAC-GLB Nachwuchspreisträger 2008
- 09:30 Parallelsessions
- 10:30 Kaffeepause
- 11:00 Plenarvortrag zum Themenfeld Wirkungen  
(T. Braunbeck, Univ. Heidelberg)
- 12:00 Parallelsessions
- 13:00 Mittagspause
- 14:30 Parallelsessions
- 16:30 Kaffeepause/Postersession
- 17:30 Mitgliederversammlung (SETAC, GDCh)

### Donnerstag, 25. September

- 09:00 Parallelsessions
- 10:00 Kaffeepause
- 10:30 Parallelsessions
- 11:30 Plenarvortrag zum Themenfeld Lösungsmöglichkeiten  
(H.R. Siegrist EAWAG, Dübendorf, CH)
- 12:30 Mittagspause
- 13:30 Exkursionen
- 19:30 Dinner Party im SCHIRN Restaurant

### Freitag, 26. September

- 09:00 Parallelsessions
- 11:00 Kaffeepause/ Postersession
- 12:00 Abschlussveranstaltung (Preise, Diskussion, Fazit)
- 13:00 Ende der Veranstaltung

## Themengebiete

1. Identifikation und Quantifizierung
2. Verteilung zwischen verschiedenen Umweltkompartimenten
3. Expositionsmessung und –modellierung
4. Abiotischer und biotischer Metabolismus
5. Retrospektives Monitoring
6. Biologisches Effektmonitoring
7. Ökotoxizität von Mischungen
8. Kombinierte Wirkungen verschiedener Stressoren
9. Trait basierte ökologische Risikobewertung
10. Effektmodellierung
11. Tools zur Wirkungserfassung - Biomarker und spez. Endpunkte
12. Verzögerte Wirkung und indirekte Effekte
13. Umweltchemikalien und Biodiversität
14. Technische Lösungsmöglichkeiten
15. Nachhaltige Chemie und Pharmazie
16. Sozial-ökologische Ansätze für integrative Lösungen
17. Risikobewertung und regulatorische Aspekte

Sessions werden gemäß eingegangener Beiträge benannt. Die endgültige Festlegung der Themenschwerpunkte und die Einteilung der Vortragsblöcke erfolgt erst nach Abschluss der Anmeldephase. Beiträge von Diplomanden und Doktoranden sind ausdrücklich erwünscht. Abstracts für Vorträge und Poster können bis **30. Juni 2008** eingereicht werden.

## Tagungsort

In bevorzugter Lage Frankfurts liegt der Campus Westend der Johann Wolfgang Goethe-Universität, der als Deutschlands schönster Campus gilt. Dessen Mittelpunkt ist das im Jahre 1930 vom Architekten Hans Poelzig gebaute ehemalige IG-Farbenhaus, das von einem 14 Hektar großen Park umgeben ist und unter Denkmalschutz steht.

Johann-Wolfgang-Goethe Universität Frankfurt am Main  
Campus Westend  
Casino-Gebäude  
Grüneburgplatz 1  
60323 Frankfurt am Main (D)

## Tagungskosten

	SETAC/ GDCH-Mitglieder		Nicht-Mitglieder	
	Regulär	Studierende	Regulär	Studierende
bis 31.05.08	100 €	50 €	150 €	70 €
ab 01.06.08	130 €	60 €	180 €	80 €
Dinner-Party	30 €	20 €		

Studierenden Ausweis erforderlich

Bitte beachten Sie, dass die Teilnehmerzahl auf **300** begrenzt ist.

Das Analytische Laboratorium in Luhnstedt (AL-Luhnstedt) ist ein privates Institut für die Erhebung und Bewertung von Umweltdaten mit langjähriger Erfahrung in umweltchemischen, toxikologischen und umweltmedizinischen Fragestellungen. Chemische Analytik von organischen und anorganischen Stoffen in verschiedenen Umweltmedien komplementiert die angewandte Forschung zur Umweltchemie und Ökotoxikologie.

### Umweltanalytik

AL-Luhnstedt ist eines der wenigen unabhängigen privaten Laboratorien in Schleswig-Holstein. Seit 2006 ist der Arbeitsbereich Umweltanalytik durch die Deutsche Akkreditierungsstelle Chemie (DACH) nach DIN ISO EN 17025:2005 akkreditiert. In Schleswig-Holstein ist das AL-Luhnstedt nach der Landesverordnung über die Zulassung von Wasseruntersuchungsstellen (ZWVO) zugelassen und führt die Bezeichnung "Staatlich zugelassene Untersuchungsstelle". AL-Luhnstedt bietet ein komplett ausgestattetes Laboratorium für verschiedenste chemische Analytik und physikalische Untersuchungen. Probenahmen und vor-Ort-Untersuchungen sind ebenfalls akkreditiert. Das Leistungsspektrum umfasst Untersuchungen von:

- Wasser
- Abwasser
- Boden
- Abfallstoffe
- Recyclingmaterial

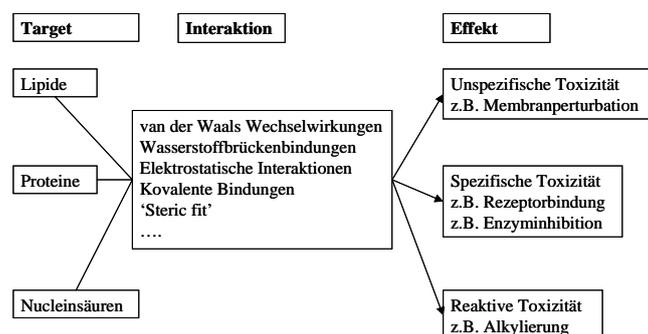
### Chemikalienbewertung

Im Rahmen von Auftragsforschung und Projektarbeit für Industrie und Behörden, z.B. UBA (Umweltbundesamt), ECB (European Chemicals Bureau), EU (Europäische Union), OECD (Organisation für wirtschaftliche Zusammenarbeit und Entwicklung), verfolgt das AL-Luhnstedt interdisziplinäre und innovative Wege in der Gefährdungsabschätzung und Risikobewertung von Chemikalien. Für die profunde Bearbeitung werden Kompetenzen in analytischer und medizinischer Chemie, (Öko)Toxikologie und Pharmakologie kombiniert. Schwerpunkte aktueller Arbeiten sind:

- Aquatische Toxizität in limnischen und marinen Ökosystemen
- Bioakkumulation und Anreicherung von Chemikalien entlang von Nahrungsketten
- Persistenz von Stoffen in der Umwelt
- PBT-Bewertung
- Endokrine Wirkungen

### Quantitative Struktur-Wirkungsbeziehungen (QSARs)

QSARs verknüpfen chemische und biologische Informationen über Chemikalien und sind eine der Techniken der *in-silico* Toxikologie um Gefährdungspotentiale von Stoffen zu identifizieren und zu charakterisieren. Basierend auf der Grundannahme dass alle Eigenschaften einer Substanz durch ihre (stereo)elektronische Struktur bestimmt sind und dass ähnliche Strukturen (funktionelle Ähnlichkeit) ähnliche Eigenschaften haben, können QSAR deskriptiv zur Analyse grundlegender Interaktionen zwischen Stoffen und Biosystemen eingesetzt werden (Abb. 1). Prädiktive QSARs dienen zur Abschätzung von Eigenschaften von Stoffen, zu denen keine experimentellen Daten zur Verfügung stehen. Sie stellen ein Hilfsmittel dar, auch bei ungünstiger Datenlage eine ungefähre Gefährdungsabschätzung vornehmen zu können.

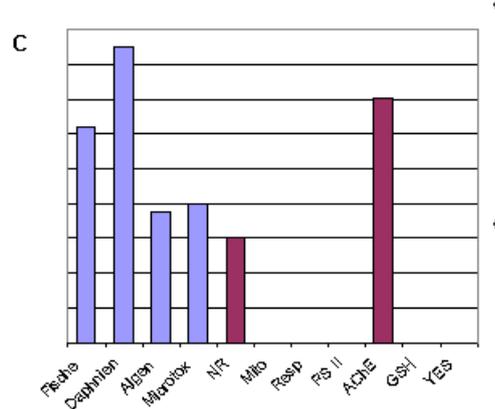
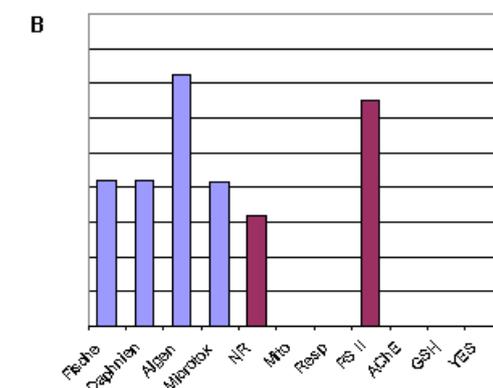
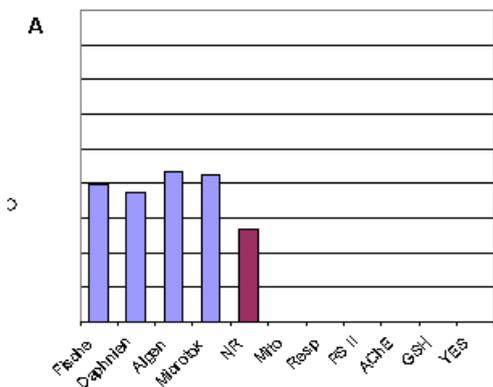


**Abb. 1.:** Beispiele für Interaktionen zwischen Stoffen und biologischen Targets, die toxische Effekte auslösen können.

### in-vitro und in-silico Verfahren zum Ersatz von Tierversuchen

Alternative Verfahren zu biologischen Standardtests unter REACH sind eine ökonomische und ökologische Notwendigkeit, auch weil die vorhandenen Laborkapazitäten nicht ausreichen, um alle erforderlichen Daten zu erheben. Mögliche Wege sind u.a. Interspezieskorrelationen (z.B. *in-vitro* Assay → Säugertest) oder Abschätzung mittels QSARs. Die Erwartung auf diese Weise alle Daten genau und sicher ermitteln zu können, ist allerdings naiv, da die Anwendungsbereiche der jeweiligen Modelle nicht das gesamte Spektrum möglicher Wirkungen erfassen. Die Entscheidung, welches Modell für die jeweilige Fragestellung geeignet ist, erfordert die Identifizierung der prinzipiellen (geschwindigkeitsbestimmenden) Prozesse (Abb. 1) und die mechanistische Klassifizierung von Umweltchemikalien (mode(s) of action, MOA), z.B. durch (öko)toxikologische Profile (Abb. 2). Anhand dieser Profile lassen sich

maßgebliche MOAs und damit die jeweils empfindlichsten Spezies identifizieren sowie Kriterien für die Auswahl geeigneter QSARs erhalten. Beispielsubstanz A (unspezifisch toxisch) ist in den spezifischen *in-vitro* Assays erwartungsgemäß inaktiv und zeigt in sämtlichen aquatischen Tests moderate Wirkungen, die mit log  $K_{OW}$ -abhängigen baseline-QSARs abgeschätzt werden können. Beispielsubstanz B (Photosynthesehemmer) weist hohe Aktivität im PSII-Assay auf, entsprechend sind Algen besonders sensitiv gegenüber dieser Substanz, während die Wirkungen auf Fische, Daphnien, Bakterien und Zellkulturen moderat sind. Beispielsubstanz C (Cholinesteraseinhibitor) ist im AchE-Assay sowie gegenüber Fischen und Daphnien besonders toxisch, im Algen-Test hingegen viel weniger aktiv. Für QSAR Anwendungen bedeuten diese Befunde, dass die Toxizitäten der Beispielsubstanzen B und C nur gegenüber einigen Arten mit log  $K_{OW}$ -abhängige baseline-QSARs vernünftig abgeschätzt werden können (B: Fische, Daphnien und Bakterien; C: Algen und Bakterien), während für die jeweils sensitivsten Spezies spezielle Modelle gewählt werden müssen, die die spezifischen Wirkungen abdecken. In diesen Fällen (B: Algen; C: Fische und Daphnien) würden log  $K_{OW}$ -abhängige baseline-QSARs die Toxizitäten um Größenordnungen unterschätzen. Wesentlich komplexere Profile ergeben sich bei Stoffen mit multiplen spezifischen Wirkungen, die sich häufig einer einfachen graphischen Auswertung entziehen. Hier kommen Verfahren der multivariaten Statistik zum Einsatz.



**Abb. 2.:** Beispiele für (öko)toxikologische Profile:

A: unspezifisch wirksame Substanz,

B: Photosynthesehemmer,

C: Cholinesteraseinhibitor.

Auf der Y-Achse sind die relativen Wirkstärken in aquatischen Tests (Fische, Daphnien, Algen, Mikrotox) und *in-vitro* Assays (NR: Neutralrottest (Zytotoxizität), Mito: ↑ O<sub>2</sub>-Verbrauch in Mitochondrien (Entkopplung), Resp: ↓ O<sub>2</sub>-Verbrauch in Mitochondrien (Atmungskettenhemmung), PS II: Hemmung des Photosystem II in Algen, AchE: Inhibition der Acetylcholinesterase, GSH: Alkylierung von SH-Gruppen im GSH-Assay, YES: Östrogene Wirkung im Hefe-Assay). Je höher der jeweilige Balken, desto stärker ist die Wirkung; kein Balken bedeutete keine Wirkung.

Das übergeordnete Ziel der Arbeiten des AL-Luhnstedt ist es, die Interaktionen zwischen Stoffen und Ökosystem-Komponenten auf molekularem Level zu verstehen und damit zu einer Vorhersage möglicher Gefährdungen und der Abschätzung von Risiken beizutragen.

Weitere Informationen zur Umweltanalytik und Auftragsforschung, Projekten und Publikationen:

<http://www.al-luhnstedt.de>.

## Institut für sozial-ökologische Forschung (ISOE), Frankfurt am Main

Florian Keil ([keil@isoe.de](mailto:keil@isoe.de)), Frankfurt a. M.

Das Institut für sozial-ökologische Forschung (ISOE) ist eine national und international tätige Einrichtung der integrierten Umwelt und Nachhaltigkeitsforschung. Es wurde 1989 als erstes Forschungsinstitut in Deutschland mit einem sozial-ökologischen Profil gegründet und verfolgt einen theoriegeleiteten und umsetzungsorientierten Forschungsansatz. Ziel der Forschung ist die Erarbeitung von integrativen Problemlösungen, die sowohl einen Beitrag zur Erhöhung der gesellschaftlichen Handlungsfähigkeit als auch zum wissenschaftlichen Fortschritt auf den bearbeiteten Forschungsgebieten leisten können. Als Forschungsinstitut ist das ISOE Teil des Wissenschaftssystems, als Beratungseinrichtung zielt es auf den Gebrauch seiner Forschungsergebnisse durch unterschiedliche gesellschaftliche Akteure und politische Entscheidungsträger.

Im Institut arbeiten derzeit 26 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, davon 18 im wissenschaftlichen Bereich. Sie werden durch weitere externe Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter unterstützt. Ihre Kompetenzen umspannen zahlreiche Disziplinen und Fachgebiete, von der Soziologie bis zur Biologie und Chemie, von der Ernährungswissenschaft bis zur Ökonomie und Physik. Projektteams, in denen in der Regel verschiedene Disziplinen vertreten sind, führen die Forschungsarbeit in verschiedenen Forschungsschwerpunkten durch: Wasser und nachhaltige Umweltplanung, transdisziplinäre Konzepte und Methoden, Alltagsökologie und Konsum, Mobilität und Lebensstilanalysen, Bevölkerungsentwicklung und Versorgung sowie Gender & Environment.

Das Institut verfolgt einen transdisziplinären Forschungsansatz, für dessen Gelingen die Zusammenarbeit von sozialwissenschaftlicher und naturwissenschaftlich-technischer Nachhaltigkeitsforschung sowie die Einbeziehung von gesellschaftlichen Akteuren wesentlich sind. Zum integrativen Methodenspektrum des Instituts gehören formale Modellierungen und Computersimulationen, Folgenabschätzungen, multikriterielle Bewertungsverfahren sowie Diskurs- und Szenarioanalysen. Die Kompetenzen in der quantitativen und qualitativen empirischen Sozialforschung (Repräsentativbefragungen, Leitfadeninterviews, Fokusgruppen, Kreativworkshops) und in der Marktforschung im Bereich "Sustainable Consumption and Products" werden auch gezielt als Dienstleistung angeboten.

Netzwerke haben seit Institutsgründung einen besonderen Stellenwert eingenommen. Denn transdisziplinäre sozial-ökologische Forschung benötigt ein breites Spektrum an disziplinärem Wissen. Kooperationspartner sind vorwiegend außeruniversitäre Institute der Umwelt- und Nachhaltigkeitsforschung und Universitäten. Eine besonders enge, regionale Zusammenarbeit mit Schwerpunkten auf der Umweltanalytik, der aquatischen Ökotoxikologie und der Wasserforschung besteht mit der J.W. Goethe-Universität Frankfurt am Main und der Technischen Universität Darmstadt. In aktuellen Verbundprojekten werden beispielsweise erweiterte Konzepte und Verfahren zur Umweltrisikobewertung, zum Risikomanagement und zur Risikokommunikation im Themenfeld Mikroverunreinigungen entwickelt, die neben ökologischen auch ökonomische und soziale Aspekte berücksichtigen.

Das ISOE ist eine gemeinnützige Forschungseinrichtung und wird im Wesentlichen von den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern getragen. Ein wissenschaftlicher Beirat unterstützt und berät das Institut. Als gemeinnütziges, außeruniversitäres Forschungsinstitut finanziert sich das ISOE weitgehend durch eingeworbene Forschungsaufträge oder wettbewerblich vergebene Mittel der öffentlichen Forschungsförderung (Landes- und Bundesministerien, EU). Darüber hinaus erhält das Institut eine institutionelle Unterstützung durch das Land Hessen und die Stadt Frankfurt. Weitere Informationen zum Institut, seiner Forschungsarbeit und aktuellen Projekten können unter <http://www.isoe.de> abgerufen werden.

### Kontakt

Dr. Florian Keil  
Institut fuer sozial-oekologische Forschung ISOE GmbH  
Hamburger Allee 45  
D - 60486 Frankfurt am Main  
Tel. +49 - 69 - 7076919 39  
Fax +49 - 69 - 7076919 11

## Kurznachrichten

### Kinder-Umwelt-Survey (KUS) 2003/06: Hausstaub – Stoffgehalte im Hausstaub aus Haushalten mit Kindern in Deutschland

In Heft 02/08 der Schriftenreihe „WaBoLu-Hefte“ des Umweltbundesamtes ist der UBA-Forschungsbericht 20262219 „Kinder-Umwelt-Survey 2003/06 - KUS- „Hausstaub: Stoffgehalte im Hausstaub aus Haushalten mit Kindern in Deutschland“ erschienen. Dieser Bericht basiert auf einem gemeinsamen Vorhaben des UBA's und des Robert-Koch-Instituts (RKI) Berlin.

Zum Entstehungshintergrund der Studie heißt es im Vorwort: Im Zeitraum von Mai 2003 bis Mai 2006 wurde der 4. Umwelt-Survey durchgeführt. Dieser Kinder-Umwelt-Survey (KUS) war der erste Umwelt-Survey in dem ausschließlich Kinder untersucht wurden. Im KUS wurden repräsentative Daten zur Belastung der 3- bis 14-jährigen Kinder in Deutschland mit chemischen und biologischen Stoffen sowie durch Lärm erhoben. Das Erhebungsinstrumentarium umfasste Blut- und Urinproben der Kinder sowie Hausstaub-, Trinkwasser- und Innenraumluftproben aus den zugehörigen Haushalten. Parallel dazu wurde zur Ergänzung der Messdaten eine Fragebogenerhebung zu expositionsrelevanten Verhaltensweisen und Bedingungen in den Haushalten und in der Wohnumgebung durchgeführt. Der vorliegende Bericht „Hausstaub“ enthält die Ergebnisse der ermittelten Biozid- und PCB-Stoffgehalte in Hausstaubproben aus Haushalten mit Kindern in Deutschland. Untersucht wurden Chlorpyrifos, DDT, HCB, Lindan, Methoxychlor, Propoxur, PCSD/PCAD, PCP und die PCB Kongenere 28, 52, 101, 118, 138, 153 und 180.

Die wesentlichen Ergebnisse des Surveys sind kurzgefasst:

Bei einer zufällig ausgewählten Unterstichprobe des KiGGS wurden bei 1.790 Kindern im Alter von 3 bis 14 Jahren aus 150 Orten Deutschlands Umweltbelastungsdaten erhoben. Wie in den vergangenen Umwelt-Surveys aus den Jahren 1985/86, 1991/92 und 1998 wurden auch im KUS Hausstaubproben aus Staubsaugerbeutelungen so genommen, wie sie zum Zeitpunkt der Befragung der Eltern im Haushalt vorlagen. Zur Untersuchung wurde eine zufällige Unterstichprobe von 600 Hausstaubproben ausgewählt. In der durch Sieben hergestellten 63 µm-Fraktion des Staubes wurden die Biozide Chlorpyrifos, DDT, HCB (Hexachlorbenzol), Lindan, Methoxychlor, PCP (Pentachlorphenol), PCSD (Polychloro-2(chlormethylsulfonamid)-diphenylether), Propoxur und PCB (polychlorierte Biphenyle) analysiert.

Trotz des Verbotes sind PCP, DDT und Lindan noch immer in Hausstaubproben präsent. PCP ist bei 83 % der Staubproben quantifizierbar. Der geometrische Mittelwert beträgt 0,097 mg/kg. Es werden signifikante Zusammenhänge zwischen dem PCP-Gehalt im Staub und dem Wohnort (alte/neue

Länder) und dem Baujahr des Wohnhauses nachgewiesen. Der geometrische Mittelwert ist in den alten Ländern um den Faktor 2 höher als in den neuen Ländern (0,105 mg/kg gegenüber 0,057 mg/kg). Eine mögliche Erklärung hierfür ist die früher häufigere Anwendung von PCP in den alten Ländern.

DDT wurde bei 39 % der Hausstaubproben quantifiziert. Der Anteil ist in den neuen Ländern deutlich höher als in den alten Bundesländern. DDT wurde in den neuen Ländern deutlich länger eingesetzt als in den alten Ländern. Ist der Sozialstatus des Kindes höher und handelt es sich um Staub aus einem Wohnhaus, das vor 1949 gebaut wurde, so ist der Anteil der Proben mit quantifizierbaren Gehalten höher als in der jeweiligen Vergleichsgruppe.

Lindan war in 27 % der Hausstaubproben nachweisbar. Der Anteil der Proben mit bestimmbarem Lindangehalt ist in den neuen Ländern höher als in den alten Ländern. Der höchste Anteil an Proben mit bestimmbarem Lindangehalt liegt bei Stäuben aus Wohnhäusern mit einem Baujahr vor 1949 vor. Die Stoffgehalte der PCB im Hausstaub lagen meist unterhalb der Bestimmungsgrenze. Die niedrig chlorierten Kongenere PCB 28 und PCB 52 konnten in nur 1 % bzw. 2 % der Proben quantifiziert werden. Die Kongenere PCB 101, 118, 138, 153 und 180 wurden in 5 % bis 30 % der Proben nachgewiesen, wobei PCB 153 am häufigsten vorkam. Die Anteile an bestimmbareren PCB-Gehalten sind in den alten Ländern, bei höherem Sozialstatus und bei Wohnhäusern, die vor 1980 gebaut wurden, höher als in der jeweiligen Vergleichsgruppe. Chlorpyrifos und Methoxychlor waren in 32 % bzw. 24 % der Hausstaubproben quantitativ nachweisbar. In 15 % der Hausstaubproben war PCSD/PCAD bestimmbar. HCB und Propoxur wurden in lediglich 2 % und in 6 % der Proben quantitativ nachgewiesen.

Der jeweils aktuelle Stand der Publikationen zum Kinder-Umwelt-Survey kann unter [www.umweltbundesamt.de/survey/](http://www.umweltbundesamt.de/survey/) abgefragt werden. Die Berichte sind dort als kostenlose Downloads erhältlich.

## Nationaler Durchführungsplan unter dem Stockholmer Abkommen zu persistenten organischen Schadstoffen (POPs)

Aktueller Forschungsbericht 205 67 444 (UBA-FB 001094) erschienen

Der vorgelegte Bericht umfasst die Erstellung eines nationalen Emissionsinventars für das Bezugsjahr 2004 für unbeabsichtigt gebildete Persistente Organische Schadstoffe (uPOPs) als Beitrag zur Erfüllung der Berichtspflichten, die sich aus dem Stockholmer Abkommen und dem UNECE POPs-Protokoll ergeben. Das Inventar bezieht sich auf die Luftpfad-Emissionen unbeabsichtigt gebildeter PCDD/PCDF, PAH, B(a)P, PCB und HCB und erlaubt die Identifizierung der Hauptquellgruppen sowie der wesentlichen Schwachstellen und Datenlücken der uPOPs-Emissionsdatenerfassung. Die Berichtswerte des Inventars basieren auf Berechnungen mittels Monte-Carlo-Simulation (MC-Simulation) auf Basis von Emissionsfaktoren und Aktivitätsraten. In einer umfangreichen Literaturstudie wurden Emissionsfaktoren für o.g. Schadstoffe ermittelt sowie aus den Emissionserklärungen des Jahres 2004 (EE 2004) abgeleitet. Aus diesem Datenbestand wurden für Deutschland spezifische Faktoren gebildet. Die in den EE 2004 berichteten Emissionen dienten des Weiteren als Anhaltspunkte für die Schadstofffrachten verschiedener Quellgruppen des industriellen Sektors. Die Emissionsfaktoren und Aktivitätsraten sowie die berechneten Emissionen werden für die einzelnen POPs-Quellkategorien differenziert nach verschiedenen Unterkategorien angegeben. Aus dem vorliegenden Inventar kann eine zukünftige Maßnahmenplanung zur Verbesserung der POPs-Emissionsdatenerfassung abgeleitet und damit die Datenqualität zukünftiger Inventare verbessert werden. Weiterhin werden bestehende und geplante Maßnahmen zur Emissionsminderung für die Hauptemittenten vorgestellt und Vorschläge für eine weitergehende Maßnahmenplanung gemacht. Die Hauptemittenten für PCDD/PCDF stellen die Sektoren metallurgische Industrie, offene Verbrennung und häusliche Verbrennungsquellen dar. Die Emissionen von B(a)P und PAH stammen vorwiegend aus den häuslichen Verbrennungsquellen.

Die Datenlücken und Schwachstellen des Inventars bestehen hauptsächlich im Hinblick auf die HCB- und PCB-Emissionen. Für diese Schadstoffe konnten nur wenige EF aus der Literatur abgeleitet werden und die EE 2004 enthalten nur vereinzelte Angaben. Einen weiteren Schwachpunkt des Inventars stellt die Emissionserfassung des Sektors offene Verbrennung dar. Sowohl die Darstellung der EF als auch der Aktivitätsraten sind in diesem Sektor mit hohen Unsicherheiten behaftet. Aufbauend auf dem erstellten Emissionsinventar als Referenzszenario wurden für alle Sektoren Emissionsprognosen für die Jahre 2010, 2015 und 2020 erstellt. Zusätzlich wird auf die vermutete Entwicklung der energetischen Holznutzung im Bereich der Haushalte und

übrigen Kleinverbraucher sowie die Umsetzung der TA Luft 2002 in Bezug auf die Sinteranlagen eingegangen. Zu diesem Zweck wurden ein Wachstums-Szenario (Szenario 1) und ein Maßnahmen-Szenario (Szenario 2) für die Holzfeuerung in Kleinf Feuerungsanlagen sowie ein Maßnahmen-Szenario für die Sinteranlagen der metallurgischen Industrie (Szenario 3) berechnet.

Diese Publikation ist als Download unter <http://www.umweltdaten.de/publikationen/fpdf-l/3354.pdf> verfügbar.



## Tagungsbericht

### Persistente Perfluorverbindungen – eine Gefahr für Mensch und Umwelt?

Seit knapp 10 Jahren häufen sich die Meldungen über Rückstände von perfluorierten Chemikalien in Umweltproben. Durch den Ferntransport dieser Substanzen sind u.a. Perfluorooctansulfonsäure (PFOS) und Perfluorooctansäure (PFOA) global nachweisbar. Organische Perfluorverbindungen, oft auch als „perfluorierte Tenside“ (PFT) bezeichnet, sind in der Umwelt sehr persistent, akkumulieren in biologischen Matrices und zeigen z.T. toxische Eigenschaften, sodass von dauerhaften Belastungen von Mensch und Umwelt auszugehen ist. Daher sind die Quellen, die zur Aufnahme dieser Stoffe in den menschlichen Körper führen, Gegenstand intensiver Forschung. Die PFT-Belastungen im Einzugsgebiet von Möhne und Ruhr in Nordrhein-Westfalen und die PFOA-Belastungen von Fischen aus der Alz in Oberbayern rückten im Jahr 2006 organische Perfluorverbindungen in Deutschland in den Mittelpunkt des öffentlichen Interesses.

Vor diesem Hintergrund veranstalteten das Bayerische Landesamt für Umwelt und das Bayerische Landesamt für Gesundheit und Lebensmittelsicherheit am 27. und 28.11. 2007 in München eine bundesweite Fachtagung zum oben genannten Thema mit 120 Teilnehmern. Die Veranstaltung sollte einen umfassenden Überblick zum aktuellen Kenntnisstand zu den verschiedenen umwelt- und gesundheits-

bezogenen Aspekten von organischen Perfluorverbindungen geben. Im Juni wird der ausführliche Tagungsband im Oldenbourg Industrieverlag in der Reihe „Münchener Beiträge zur Abwasser-, Fischerei- und Flussbiologie“ als Band 59 erscheinen. Im Folgenden wird auf einige ausgewählte Vorträge näher eingegangen.

Prof. Dr. Gerd-Volker Röschenthaler, Universität Bremen, gab zum Auftakt eine Einführung über die Vielfalt der organischen Fluorchemie. Er wies auf die Neuentwicklung eines vollständig mineralisierbaren Fluortensids durch die Europafachhochschule Fresenius und die Firma Merck KGaA hin wozu ein Poster präsentiert wurde. Diese Substanz enthält eine Trifluormethoxy-Gruppe und steht mittlerweile für technische Anwendungen zur Verfügung.

Dr. Günther Kämpf, Dyneon GmbH & Co KG, Gendorf/Oberbayern, erklärte die Notwendigkeit und Funktionsweise des Ammoniumsalzes der Perfluorooctansäure (APFO) als Emulgator bei der Herstellung von Fluorpolymeren. Die Firma Dyneon ist der größte Verwender von APFO in Deutschland. Die eigene APFO-Produktion wurde in Gendorf 2003 eingestellt, u.a. auch deshalb, weil ein großer Teil der eingesetzten Menge an APFO zurückgewonnen wird. Die Firma Dyneon hat durch die Entwicklung dieser Rückhalte- & Recycling-Technologie im Laufe der Zeit die APFO-Emissionen ins Abwasser auf kleiner als 1,5 % der eingesetzten Menge reduziert, in die Abluft gelangen noch ca. 0,7 %. Ferner konnte der APFO-Gehalt in Fluorpolymeren (Dispersionen) von 1500 ppm auf <20 ppm, d.h. um 99,9 % gesenkt werden. Diese patentierte Containment-Technologie wird anderen Fluorpolymerherstellern als Lizenz angeboten.

In Endprodukten ist durch die thermische Zersetzung APFO bzw. PFOA allenfalls noch in Spuren enthalten. Dr. Kämpf wies darauf hin, dass das Programm zur Reduktion der APFO-Emissionen auch durch entsprechend konsequente Forderungen der zuständigen Umweltbehörden ausgelöst wurde – „Der Drache steigt nur bei Gegenwind“. Dyneon wird darüber hinaus noch in 2008 einen Ersatzstoff für APFO einführen. Die neue Substanz ist ebenfalls fluoriert, um die erforderlichen Emulgator-Eigenschaften zu erreichen. Der Ersatzstoff zeigt aber in Tierversuchen ein deutlich günstigeres Eliminationsverhalten im Vergleich zu PFOA.

Dr. Sabine Bergmann vom Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen stellte ausführlich das umfangreiche PFT-Monitoring im Einzugsgebiet von Möhne und Ruhr vor. PFT-haltiges Material wurde mindestens zwei Jahre lang illegal als „Biodünger“ auf mehr als 1300 landwirtschaftliche Flächen in NRW ausgebracht, davon die meisten bzw. die Mehrheit der besonders stark belasteten Flächen im Einzugsgebiet von Möhne und Ruhr.

Zum Zeitpunkt der Erstuntersuchung im Jahr 2006 enthielten allein sieben besonders stark belastete Flächen in der Summe eine Gesamtmenge von ca. 400 kg PFOS und PFOA. Das Monitoring der betroffenen Oberflächengewässer ergab v.a. stark erhöhte PFOA-Gehalte, in dem am stärksten belasteten Nebengewässer der Möhne (Steinbecke) bis ca. 100 µg/L. Durch die Sanierung der Hauptbelastungsfläche ist

die Belastung in diesem Gewässer - und in der Folge auch in der Möhne und in der Ruhr - ab Februar 2007 deutlich zurückgegangen. Mittlerweile zeigt sich eine rückläufige Tendenz der PFOA-Gehalte auch bei Gewässern, die im Einflussbereich anderer belasteter Flächen liegen. Vor dem Hintergrund, dass die Ruhr 22 % des Rohwassers für die Trinkwasserversorgung in NRW liefert, bestand eine hohe Dringlichkeit, unverzüglich wirksame Maßnahmen zu ergreifen und deren Erfolg intensiv zu überwachen. Zwei Monate nach Bekanntwerden im Mai 2006 konnte der gesundheitlich lebenslang duldbare Leitwert von 0,3 µg/L im Trinkwasser bereits in allen Wasserwerken an der Ruhr und an der Möhne deutlich und dauerhaft unterschritten werden. Sorge bereitet, aufgrund der Ergebnisse von Säulenelutionsversuchen und der Tatsache, dass im Boden mehr PFOS als PFOA gespeichert ist, das Auswaschungsverhalten des schlechter wasserlöslichen PFOS. Es wird vermutet, dass der PFOS-Eintrag über längere Zeit anhalten wird.

Dr. Manfred Sengl vom Bayer. Landesamt für Umwelt präsentierte u.a. Messergebnisse zu Fließgewässern und Klärschlämmen in Bayern. Die mit Abstand höchsten PFOA-Gehalte in Flüssen wurden mit 7,5 µg/L in der Alz unterhalb von Gendorf festgestellt; die erhöhten Konzentrationen waren auch im Inn und der Donau an der österreichischen Grenze mit 110 ng/L bzw. 52 ng/L noch messbar. In den übrigen bislang untersuchten 15 Fließgewässern in Bayern lagen die PFOA-Gehalte bei <1-19 ng/L, die PFOS-Konzentrationen bei <1-42 ng/L. Weitere zwei Trinkwassertalsperren waren völlig unbelastet. Von 67 untersuchten Klärschlämmen wurde bei 14 Proben (20 %) eine Überschreitung des Vorsorgegerichtwertes von 100 µg/kg Trockensubstanz (PFT-Summe) für eine bodenbezogene Verwertung gefunden. Die höchsten Gehalte wurden dabei für PFOS mit bis zu 6720 µg/kg TS gemessen. Die Klärschlämme stammten allerdings überwiegend von Kläranlagen in deren Einzugsbereich sich Betriebe befinden die potenziell mit perfluorierten Chemikalien umgehen. In Bayern kommt dieser Vorsorgegerichtwert seit Anfang 2008 – wie bereits in einigen anderen Bundesländern – zur Anwendung.

Dr. Michael Gerst, Bayer. Landesamt für Umwelt, präsentierte die bisher in Fischen aus bayerischen Fließgewässern nachgewiesenen Konzentrationen von PFOS und PFOA. Daneben wurden die Ergebnisse eines 28-Tage Expositionsversuches mit Regenbogenforellen zur Fischtoxizität von PFOS vorgestellt. Eingesetzt wurden Konzentrationen von 0,5; 1; 5; 10; 25 und 50 µg/l. Untersucht wurden neben dem Akkumulationsverhalten hämatologische und klinisch-chemische Blutparameter sowie Organveränderungen. PFOS zeigte konzentrationsabhängig eine starke Anreicherung im Blut und inneren Organen, wobei auffälligerweise die Gehalte in der Leber in der Regel höher als im Blut waren. Die Gewebeverteilung unterscheidet sich insofern von den bei Wildfängen beobachteten Verhältnissen, bei denen die höchsten Konzentrationen im Blut nachweisbar waren. Veränderungen einzelner klinisch-chemischer Parameter (z.B. Blutglukose, Blutharnstoff) waren ab einer

Konzentration von 0,5 µg/l nachweisbar. Hämatologische Veränderungen beschränkten sich auf eine geringgradige Verschiebung innerhalb des weißen Blutbildes zugunsten der stabkernigen Leukozyten ab 1 µg/l sowie eine Abnahme des Hämoglobingehaltes nach Exposition in 50 µg/L.

Histopathologische Veränderungen waren an der Leber, den Kiemen und den Nieren der Regenbogenforellen nachzuweisen. Erste Effekte in Kiemen und Leber waren z.T. schon bei der niedrigsten PFOS-Konzentration von 0,5 µg/L zu beobachten. Dies impliziert für die Ableitung eines PNEC-Wertes (predicted no effect concentration) eine PFOS-Konzentration von nur 0,05 µg/L, die wesentlich niedriger liegt als der bislang aus Daten zur akuten Ökotoxizität abgeleitete PNEC-Wert von 2 µg/L.

Priv.-Doz. Dr. Hermann Fromme vom Bayer. Landesamt für Gesundheit und Lebensmittelsicherheit stellte die Ergebnisse einer Duplikatstudie vor, mit der die PFOS- und PFOA-Zufuhr der allgemeinen Bevölkerung ermittelt wurde und mit der internen Belastung der Studienteilnehmer in Beziehung gesetzt wurde. Bei 15 Frauen und 16 Männern aus Südbayern (Alter: 16 - 45 Jahre) wurden an sieben aufeinander folgenden Tagen Tagesduplikate aller verzehrsfähig zubereiteten Nahrungsmittel (einschließlich Getränke) gesammelt, homogenisiert und auf perfluorierte Substanzen analysiert. Aus den Analysenergebnissen wurden als Medianwerte für die Aufnahme über Nahrungsmittel 1,4 ng/kg Körpergewicht für PFOS und 2,9 ng/kg KG für PFOA berechnet. Das 90. Perzentil lag bei 3,8 bzw. 8,4 ng/kg KG. PFHxS und PFHxA waren nur in wenigen Duplikatproben quantifizierbar, PFOSA war nicht nachweisbar. Zusätzlich wurden die Substanzen in Blutproben der Probanden analysiert. Die Mediane lagen bei 16,1 µg/l (PFOS) bzw. 5,9 µg/l (PFOA). Unter Verwendung eines einfachen toxikokinetischen Modells ließ sich die im Human-Biomonitoring ermittelte interne Belastung durch die nahrungsbedingte Zufuhr weitgehend erklären [1].

Dr. Ulrike Pabel vom Bundesinstitut für Risikobewertung trug den aktuellen Wissensstand zur Toxikologie und zur gesundheitsbezogenen Risikoabschätzung der Leitsubstanzen PFOS und PFOA vor. Diese Substanzen werden im Säugerorganismus nach derzeitigem Kenntnisstand nicht metabolisiert. Nach der Aufnahme in den Körper binden sie vorwiegend an Serumproteine und tendieren daher dazu, in Blut und Leber zu akkumulieren, jedoch wenig oder nicht im Fettgewebe. PFOS und PFOA sind plazentagängig und gehen auch in die Muttermilch über. Am Beispiel des APFO zeigte Frau Pabel die sehr großen Unterschiede der Gewebeverteilung und Elimination zwischen verschiedenen Spezies die z.T. auch geschlechtsabhängig sind. Die Ursachen dafür sind bislang ungeklärt und erschweren die Risikobewertung. Für den Menschen wurden in Untersuchungen an Chemiarbeitern Halbwertszeiten für PFOA und PFOS von mehreren Jahren ermittelt. Als empfindlichste Zielorgane für die toxische Wirkung im Tierversuch werden für PFOA die Leber und für PFOS Leber und Schilddrüse angesehen. Weitere wichtige toxische Eigenschaften sind

Kanzerogenität und Reproduktionstoxizität. Zu den Wirkungsmechanismen gibt es eine Reihe von offenen Fragen. Als Startpunkt für die Ableitung von Werten für die tolerierbare tägliche Aufnahme (TDI) werden in verschiedenen Risikobewertungen für PFOA Werte für den no observed (adverse) effect level (NO(A)EL) von 0,025 bis 1,6 mg/kg Körpergewicht (KG)/Tag und für PFOS von 0,025 bis 0,03 mg/kg KG/Tag diskutiert. Basierend auf diesen NOAEL wurden TDI-Werte für PFOA von 0,013 bis 3 µg/kg KG/Tag und für PFOS im Bereich von 0,1 bis 0,3 µg/kg KG/Tag vorgeschlagen.

Dr. Christoph Schulte vom Umweltbundesamt zeigte am Beispiel PFOS und PFOA, dass die Risiken dieser Perfluorverbindungen unter der neuen EU-Chemikalienverordnung REACH nicht ausreichend erfasst worden wären, da sie aufgrund ihrer zu geringen Einsatzmengen durch das Raster der genauer zu untersuchenden Chemikalien fallen (u.a. fehlende Datenforderung zu Toxikokinetik und Reproduktionstoxizität). PFOS erfüllt aufgrund seiner nachgewiesenen hohen Anreicherung im Körper alle Kriterien für eine Einstufung als PBT-Stoff (persistent, bioakkumulierend, toxisch) und wäre damit unter REACH zulassungspflichtig. PFOA erfüllt nicht alle Kriterien für eine Zulassungspflicht. Um solche Lücken zu schließen, benötigt REACH als zusätzliches Element eine systematische Umweltbeobachtung und muss das Schutzgut Trinkwasser stärker berücksichtigen sowie eine Erfolgskontrolle von emissionsmindernden Maßnahmen.

Für PFOS wurde auf Basis der vorliegenden öko- und humantoxikologischen Daten ein EU-weites Anwendungsverbot mit wenigen befristeten Ausnahmen ausgesprochen. Das EU-weite Verbot von PFOS wird im Juni 2008 in Deutschland umgesetzt, die vorgesehenen Ausnahmen z.B. im Bereich der Hartverchromung lassen aber weitere Belastungen befürchten. Hier ist der Einsatz der jeweils besten verfügbaren Technik in der Abwasserbehandlung anzustreben. Bei anderen wichtigen Perfluorverbindungen (z.B. den „Fluortelomeralkoholen“) ist die Datenlage für eine abschließende Bewertung noch nicht ausreichend. Es ist zu hoffen, dass diese Wissenslücken rasch geschlossen werden, um auch für diese Substanzen geeignete Maßnahmen ergreifen zu können.

## Literatur

[1] Fromme H., Schlummer M., Möller A. et al. (2007). Environ. Sci. Technol. 41(22), 7928-33.

## Kontakt

Priv.-Doz. Dr. Wolfgang Körner,  
Bayerisches Landesamt für Umwelt, 86177 Augsburg  
E-Mail: [wolfgang.koerner@lfu.bayern.de](mailto:wolfgang.koerner@lfu.bayern.de)

## Tagungsankündigung

### Green Chemistry for Environment and Health

October 13-16, 2008, Munich, Germany

organized by

## HelmholtzZentrum münchen

Deutsches Forschungszentrum für Gesundheit und Umwelt  
in collaboration with:



SECOTOX - Society of Ecotoxicology and Environmental Safety, DBU - Deutsche Bundesstiftung Umwelt, GDCh - Gesellschaft Deutscher Chemiker, TUM - Technische Universität München

Concepts of sustainability have become important in all fields of Sciences during the last decade. According to challenging problems such as increase of population of the world, global climate changes and decrease of resources new perspectives must be identified and realized. One attempt will be to use the new concepts of Green Chemistry. The event will cover all these new aspects and will also address the questions of ethics and policy by distinguished speakers.

### Dear Colleagues,

you are cordially invited to our first international symposium in Green Chemistry for Environment and Health in Munich, Germany.

### Background

Concepts of sustainability have become important in all fields of Sciences during the last decade. According to challenging problems such as increase of population of the world, global climate changes and decrease of resources new perspectives must be identified and realized. One attempt will be to use the new concepts of Green Chemistry. The event will cover all these new aspects and will also address the questions of ethics and policy by distinguished speakers.

### Topics

- Environmentally Benign Processes and Products
- Renewable Resources
- Advances in Catalysis
- Chemicals, Health and Ecotoxicology
- Scores and Measures
- Ethic Concepts

### Aims

1. To provide an opportunity to environmental chemists, toxicologists, biologists, and medical scientists to share their knowledge in all aspects of Green Chemistry with a focus on Environment and Health.
2. To strengthen understanding of environmental and health problems leading to ways of solving them.
3. To strengthen and/or to initiate the collaboration between scientists on a global basis.

### Venue and Date

The conference will be held at the Helmholtz Zentrum München – German Research Center for Environmental Health, a member of the Helmholtz association of German national research centers under the auspices of Prof. Dr. Günther Wess, CEO, Helmholtz Zentrum München.

<b>Fee</b>	after September 15th, 2008	
Standard	150 €	200 €
SECOTOX and GDCh Member s	120 €	160 €
Students	60 €	100 €

### Programme

The international symposium will extend over three and a half days and include plenary lectures, short oral presentations, posters and an excursion.

### Call for papers

We are looking forward to receiving your abstracts for oral and poster presentation. Notification of acceptance of presentation will be before August 1st, 2008. Please follow the the instructions for the preparation and the submission of the papers on our website:

<http://www.helmholtz-muenchen.de/greenchemistry>

Selected papers will be published either in Chemosphere or Fresenius Environmental Bulletin after peer review.

### Important Deadlines

Deadline for abstracts submission:	<b>August 1st, 2008</b>
Notification of acceptance of abstract:	<b>August 30th, 2008</b>
Payment of reduced fee:	<b>September, 31st, 2008</b>

Please notify, that there are only limited numbers of participants.

### Scientific Secretariat

Dr. K.-W. Schramm, Dr. D. Lenoir  
Helmholtz Zentrum München – Institute of Ecological Chemistry  
Ingolstädter Landstraße 1, 85764 Neuherberg, Germany  
Tel: +49(0)89-3187 3147 or +49(0)89-3187 2960;  
Fax: +49(0)89-3187 3371  
E-Mail: [greenchemistry@helmholtz-muenchen.de](mailto:greenchemistry@helmholtz-muenchen.de)

### Registration and further information please see:

[www.helmholtz-muenchen.de/greenchemistry](http://www.helmholtz-muenchen.de/greenchemistry) .

## 9th International Conference on Carbonaceous Particles in the Atmosphere



August, 12-14, 2008, Berkeley California



The ninth conference in this series will take place 30 years after its inception at Lawrence Berkeley National Laboratory. This venue continues to focus on understanding the role of carbonaceous particles in the

environment. Topics covered include • global and regional climate effects • health effects • sampling and analysis methods • source characterization and emissions • transport and transformation • hydration and CCN properties • optical properties • and other relevant issues. Keeping with tradition, the conference will feature only one platform presentation at a time.

As we progress in planning, more information will be added to the Conference' website (<http://iccpa.lbl.gov/iccpa.html>). Please do not hesitate to ask questions if you do not find what you are looking. For general inquiries, contact Cindy Tast ([CLTast@lbl.gov](mailto:CLTast@lbl.gov)). Technical questions about the conference can be directed to Tom Kirchstetter ([TWKirchstetter@lbl.gov](mailto:TWKirchstetter@lbl.gov))

### Committees

#### Honorary Chairs

T. Novakov, Berkeley  
H. Malissa, Bruck

#### Conference Chairs

T. Kirchstetter, Berkeley  
H. Puxbaum, Vienna

#### Program Chairs

T. Bond, Urbana-Champaign

A. Strawa, Moffit Field

#### Local Organizing Committee

T. Kirchstetter, Berkeley  
C. Tast, Berkeley  
J. Stark, Berkeley

#### Scientific Committee

M.O. Andreae, Mainz  
N. Brown, Berkeley  
J. Chow, Reno  
H. Cachier, Gif Sur Yvette  
R. Griffin, Durham  
D. Grosjean, Ventura  
A. Gelencser, Veszprem  
R. Hitzenberger, Vienna  
W. Maenhaut, Ghent  
O. Mayol-Bracero, Puerto Rico  
S. Menon, Berkeley  
R. Niessner, Munich  
J. Penner, Ann Arbor  
C. Pio, Aveiro

### Contact Information

For general inquiries, contact Cindy Tast, [CLTast@lbl.gov](mailto:CLTast@lbl.gov) .  
For technical details, contact Tom Kirchstetter, [TWKirchstetter@lbl.gov](mailto:TWKirchstetter@lbl.gov) .

## 5th Europ. Conference on Pesticides and Related Organic Micropollutants in the Environment



## 11 Symposium on Chemistry and Fate of Modern Pesticides

22.-25. October, Marseille (France)

### Aim and Scope

On behalf of the Organising Committee, we are pleased to invite the scientific community to attend the 5th European Conference on Pesticides and Related Organic Micropollutants in the Environment and the 11th Symposium on Chemistry and Fate of Modern Pesticides, which will be held in Marseille (France), from October, 22nd-25th 2008. The aims of this congress are to:

- Provide a communication forum for the exchange of knowledge and technology among
- scientists interested in Pesticides, Micropollutants, Environment and Food.
- To foster collaboration among scientists, engineers, industries, education
- To enhance the image of Environmental sciences

These events are supported by the "European-Mediterranean Association for Environmental Education Assessment and Protection" and the "International Association of Environmental Analytical Chemistry".

The congress will be organised in six sessions, with plenary lectures given by outstanding scientists. The programme will include keynotes, invited lectures, oral and posters communications selected on the basis of abstract selection. After the conference, a special issue in Journal of Environmental Analytical Chemistry will be provided for publication which will be peer-reviewed following the conventional rules of the journal.

### Main Topics

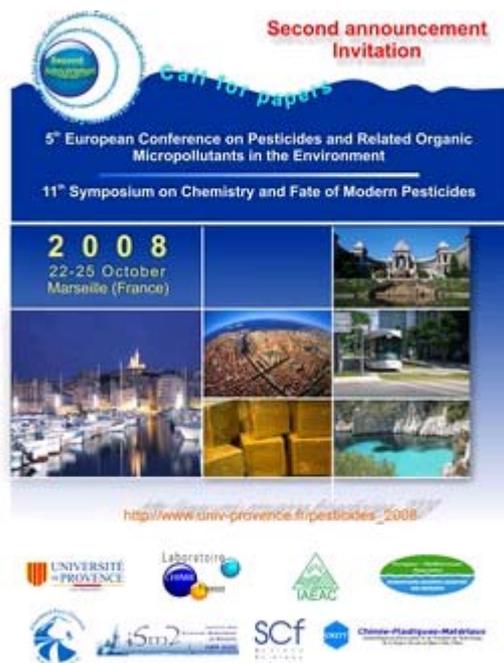
- Analytical techniques and application
- Pesticides behaviour in the environment
- Levels of pesticide residues in water, soil and air
- Quality of agricultural products
- Transportation, Fate Models and Regulations
- Ecotoxicity and environmental risk assessment
- Environmental Protection and remediation techniques
- Advanced oxidation processes
- Environmental Effects and Toxicity
- Micropollutants in aquaculture
- Environmental Education

### Participation

To participate, you only have to fill the on-line registration form at the web site of the congress:

[http://www.univ-provence.fr/pesticides\\_2008](http://www.univ-provence.fr/pesticides_2008)

or to fill the printed participation form and to send it by fax or mail.



## Call for Abstract

### Deadline for Submission 31th August 2008

Authors are invited to submit an extended abstract (no more than 4 pages. Minimum 1 full page) by following the instruction to authors. Please save your document file as: AuthorName\_Abstract.doc (e.g. Duchemin\_Abstract.doc) The extended abstract should be sent by fax, mail or preferentially by e-mail attachment (MS-Word.doc or RTF file) to the following email address: [pesticides\\_2008@univ-provence.fr](mailto:pesticides_2008@univ-provence.fr)

### Preparation and Submission of Abstracts

The abstract must not exceed four pages with the figures, tables and the references. The text should be submitted in Microsoft Word Version 6.0 (or later). Please download the template, this file contains the entire required format and will help you to fill the abstract. The document should be prepared in English. Participants are invited to contribute papers. The articles will be published in a special issue of an international (The choice still under negotiation)

### Scientific Programme

The programme is organised in six sessions, with plenary lectures given by excellent scientists. The symposia included in these sessions will comprise keynote and topic lectures, together with oral and poster communications selected on the basis of abstract submission.

Thursday 23	Friday 24	Saturday 25
Occurrence and fate of pesticides in the Environment	Fate of pesticides in the Environment	Environment effects, toxicity and risk
Analytical techniques applied to environmental and food analysis	Indirect Photolysis	Protection and restoration techniques

### Registration Fee

	Before July 31th,	After July 31th,
Participants	400 Euros	450 Euros
ENEAP Members	320 Euros	370 Euros
IAEAC Members	320 Euros	370 Euros
SFC Members	360 Euros	410 Euros
Students	250 Euros	300 Euros
One-day ticket	200 Euros	250 Euros
Accompanying visitor	180 Euros	230 Euros

Full, members and students registration fee includes admission to the sessions, conference proceedings, the congress kit, the reception cocktail, lunches, coffee breaks and the Gala dinner. Accompanying visitors registration fee includes reception cocktail, lunches and the Gala dinner

### Payment

Payment will be made by bank deposit to: Trésor public, International Bank Account Number (IBAN) N° FR76 1007 1130 0000 0010 0540 140. Bank Identifier Code (BIC) BDFEFRPPXXX. M. Agent comptable Université de Provence. 3, place victor Hugo 13003 Marseille. Payment by Credit card will be soon available.

### Accommodation

The conference will take place in the hotel Mercure Euro Centre where accommodation is available. There will be special prices for the participants (90 € for the double room per day/100 € for twin per day – add 13€ for breakfast).

### Important Dates

Early Registration and payment	July 31th, 2008
Abstracts submission deadline	August 31th, 2008
Notification of acceptance	September 15th, 2008
Conference date	October 22th-25th 2008

### Contacts

Secretariat  
Stéphane Barbati, Serge Chiron  
Université de Provence  
Laboratoire de Chimie Provence  
3, Place Victor Hugo – case 29  
F-13331 Marseille cedex 3  
Tel. +33 4 91 10 65 66  
Fax. +33 4 91 10 63 77  
E-Mail: [pesticides\\_2008@univ-provence.fr](mailto:pesticides_2008@univ-provence.fr)

## Glückwünsche der Fachgruppe an Prof. Dr. Otto Hutzinger anlässlich seines 75. Geburtstags



Prof. Dr. Otto Hutzinger, Initiator der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie (die Fachgruppe wurde im November 1990 gegründet) und ihr erster Vorsitzender (November 1990 bis Ende 1994) feierte am 14. März dieses Jahres seinen 75. Geburtstag. Prof. Hutzinger hat sich nicht nur um unsere Fachgruppe bleibende Verdienste erworben; er hat

vielmehr maßgeblich die wissenschaftlichen Grundkonzeptionen der in unserer Fachgruppe vertretenen Fachrichtungen mitgestaltet und ihrer Entwicklung als eigenständige Fachdisziplinen auf nationaler und internationaler Ebene Bahn gebrochen.

Neben seiner Forschungs- und Lehrtätigkeit u. a. am kanadischen „National Research Council“, an der Universität Amsterdam und an der Universität Bayreuth, hat er durch die Herausgabe des zum internationalen Standardwerks avancierten „Handbook of Environmental Chemistry“ und von mehreren Fachzeitschriften, u. a. der „UWSF- Umweltwissenschaften Schadstoff-Forschung“ entscheidend zur internationalen Kommunikation und Rezeption umweltchemischer Forschungsergebnisse beigetragen.

Viele Fachgruppenmitglieder haben ihre Geburtstagsglückwünsche persönlich an den Jubilar übermittelt. Stellvertretend hierfür ist nachfolgend der Geburtstagsgruß des Fachgruppenvorsitzenden, Prof. Gerhard Lammel, wiedergegeben, der in Heft 02/2008 von „Environmental Science and Pollution Research“ erschienen ist.

Die Fachgruppe dankt ihrem Gründungsvater für die Weitsicht und Energie, mit der er die Sache der Umweltchemie und Ökotoxikologie vorangetrieben hat und hofft auf eine lang anhaltende, gegenseitige Verbundenheit.

Klaus Fischer ([fischerk@uni-trier.de](mailto:fischerk@uni-trier.de))

### Lesen Sie auch den Beitrag

20 Jahre UWSF – Wie alles begann und weiterging  
- Prof. Dr. Otto Hutzinger, dem Gründer und ersten Herausgeber der UWSF gewidmet, zu seinem Jubiläum am 14. März 2008 und zum 20jährigen Bestehen der UWSF -  
von Almut B. Heinrich  
in der UWSF – Z Umweltchem 20 (2) 83 – 85 (2008)  
URL: <http://www.scientificjournals.com/sj/uwsf/Pdf/ald/10772>

## Persönliche Glückwünsche zum 75. Geburtstag von Prof. Dr. Otto Hutzinger

I met Otto Hutzinger in 1984 as a student searching for a challenging PhD study in the environmental sciences. Among the professors to whom this student had sent out written applications he stood out as the one returning the most friendly answer. Professor Hutzinger invited me to Bayreuth, took a considerable portion of his time, showed me around in the laboratories and came back to me offering a study in aquatic chemistry linked to an interesting scientific question.

In those years his name stood quite lonely for the obviously appropriate approach: Put the substance into the centre and follow its interactions within and across environmental media. He was at least in Europe the founder of substance-based environmental sciences. More convincing and more successful than others Next time we met was in 1990, when the working group he had founded was turned into the new Environmental Chemistry and Ecotoxicology Section of the German Chemical Society (GDCh). Otto Hutzinger became the first chair. The position paper (as of 1989) marking this foundation made the key statement that the new disciplines environmental chemistry and ecotoxicology had developed to autonomy to a degree, such that the scientists needed to create an autonomous forum for discussion.

Otto Hutzinger pursued the vision of unified environmental sciences to emerge from the medium-based sub-communities. – By networking and initiating cooperations, e.g. by even organising a World Conference on Remote Sensing in Bayreuth (in 1984). Essential and highly visible instruments for the establishment of a substance-based environmental chemistry initiated by him are the Handbook of Environmental Chemistry (edited since 1980) and the interdisciplinary journals UWSF (founded in 1988) and ESPR (1993). No wonder, that within only a few years UWSF was established as the main German-speaking forum for the substance-based environmental sciences. Obviously, the environmental sciences benefited tremendously and with long-term impact from Otto Hutzinger's initiatives and networking. Much progressed ever since but environmental chemistry is still hard to find on some mental maps nowadays. Therefore, his vision still provides the mission for today and probably also for the years to come.

Why this student did not accept the offer to follow a PhD study under Professor Hutzinger's guidance ? As it was not supposed to happen at Bayreuth university itself, but in some new laboratory space at that time under renovation in Kulmbach, a small city which is basically known for endless streaming good beer, the offer looked in a way still very single-media ...

Gerhard Lammel (Env. Sci. Pollut. Res. 15(2) [2008], 105)

## **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“.