



Multimediale Modellierung zur Identifizierung von persistenten Stoffen mit Ferntransportpotenzial

Michael. Matthies (matthies@uos.de),

Jörg. Klasmeier (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	Meeres-sediment	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_{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/.

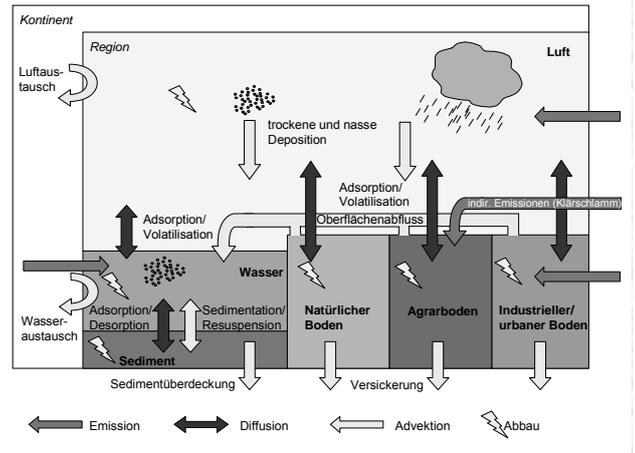


Abb. 1: Multimediales Modell ELPOS (Environmental Long-range Transport and Persistence of Organic Substances)

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 τ_{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 τ_{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 γ -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.

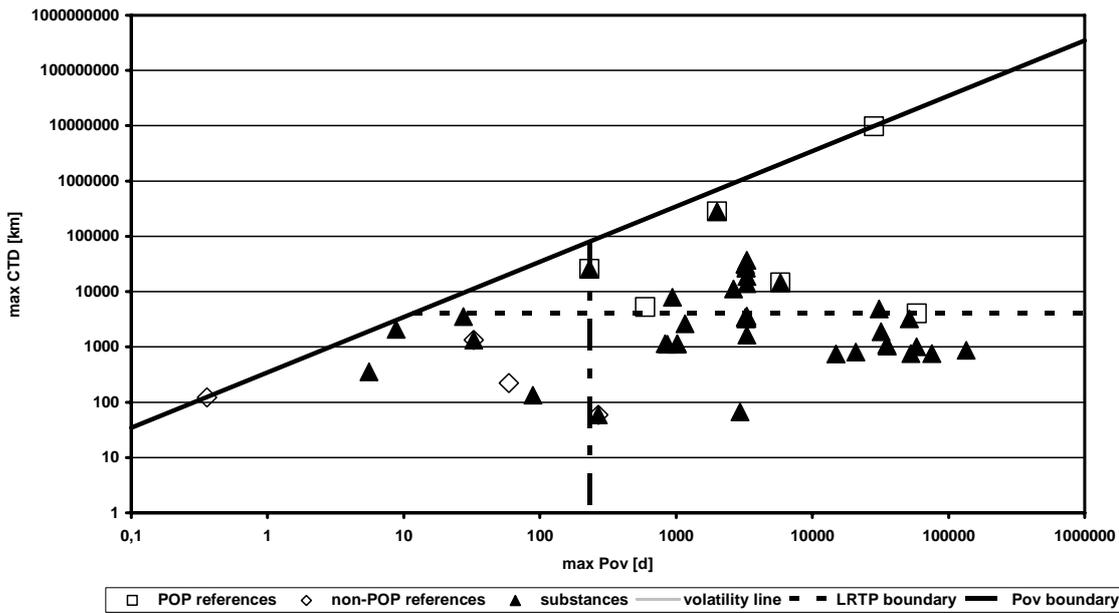


Abb. 2: ELPOS-Klassifikation (P_{ov} /LRTP-Plot) für einige ausgewählte persistente und nicht-persistente Stoffe (Daten aus /12, 15/)

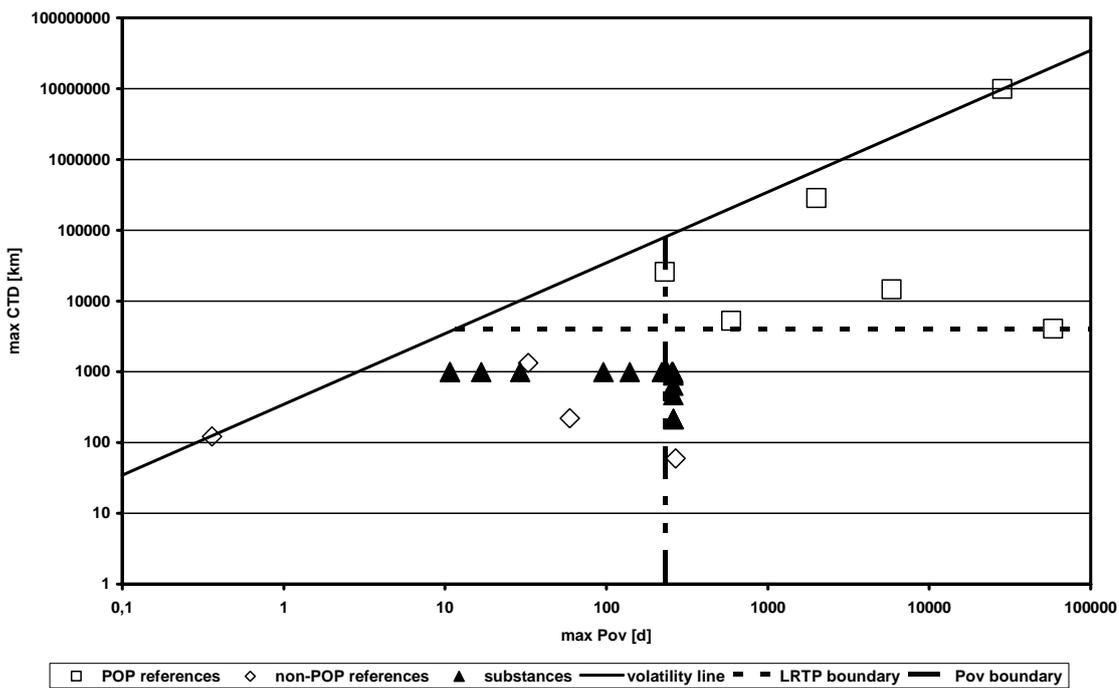


Abb. 3: ELPOS-Klassifikation (P_{ov} /LRTP-Plot) für eine virtuelle Chemikalie mit HWZ gemäß Stockholmkonvention, $\log K_{OW} = 5$ und $2 > \log K_{AW} > -6$.

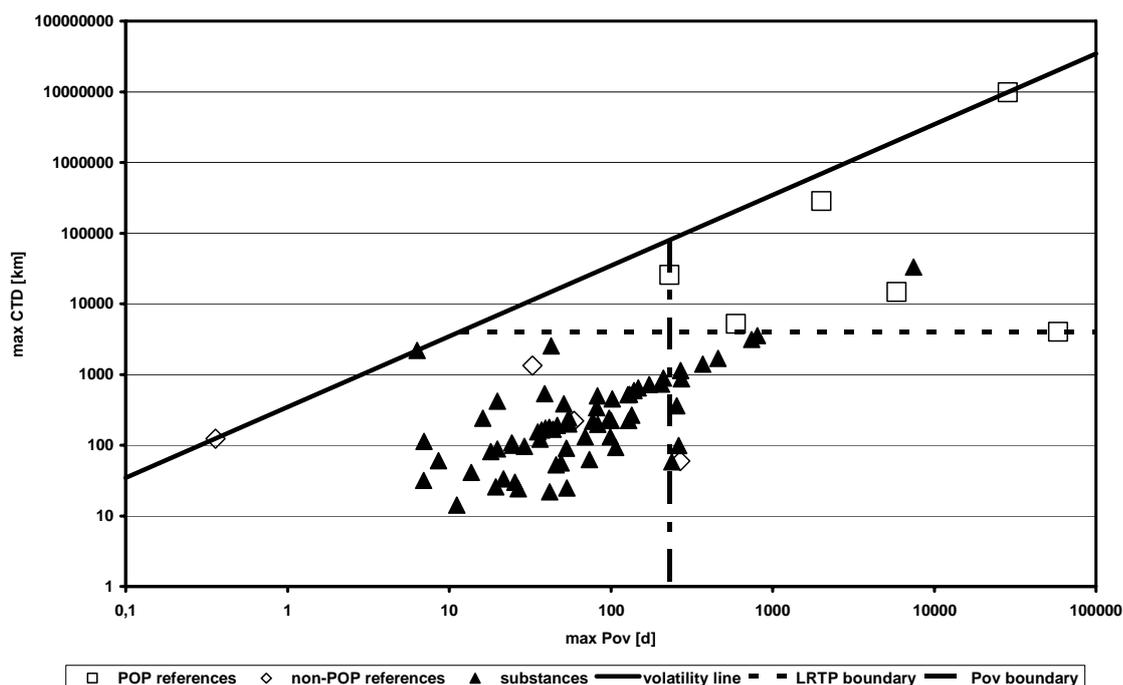


Abb. 4: ELPOS-Klassifikation (P_{ov} /LRTP-Plot) von 65 Pflanzenschutzmittel-Wirkstoffen (Daten aus /12/).

	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
- /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
- /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., Kastenberger, 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