

Mitteilungen der Fachgruppe

# Umweltchemie und Ökotoxikologie

Gesellschaft Deutscher Chemiker

 Das innerstädtische Stickstoffdioxid-Problem

- QSAR-Ansätze und toxikologische Bewertung
- Programm der 3. gemeinsamen Jahrestagung mit der SETAC-GLB
- Landschaftsökologie an der Hochschule Vechta
- Tagungsankündigungen
- Einladung zur Mitgliederversammlung
- Personalia





# Grußwort zur 3. Gemeinsamen Tagung von GDCh Fachgruppe Umweltchemie Ökotoxikologie und SETAC-GLB

G. Lammel (gerhard.lammel@zmaw.de), Mainz und Brno





Die Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie der Gesellschaft Deutscher Chemiker lädt Sie sehr herzlich zu ihrer Jahrestagung ein, die zum dritten Mal als gemeinsame Jahrestagung mit der German Language Branch der Society of Environmental Toxicology and Chemistry - Europe durchgeführt wird.

Das Thema der Tagung, "Neue Problemstoffe in der Umwelt – Erfassung, Wirkungen, Lösungen", stellt die Stoffe in die Mitte und macht deutlich, dass Umweltchemie und Ökotoxikologie nur interdisziplinär bearbeitet werden können und Transdisziplinarität in sich tragen: Stoffliche Umweltprozesse und -veränderungen werden im Kontext gesellschaftlicher Zielvorstellungen akzeptiert oder aber als Umweltproblem wahrgenommen und generieren Handlungsbedarfe, Prävention oder Kuration.

Ziel der Tagung ist es, den auf den Fachgebieten Umweltchemie und Ökotoxikologie tätigen, also Chemikern, Biologen, Geowissenschaftlern, und auch Sozialwissenschaftlern, Juristen, Ingenieuren und Vertretern weiterer Fächer, das größtmögliche deutschsprachige Forum zur Diskussion ihrer Ergebnisse, zu übergreifendem fachlichen Gedankenaustausch und zur persönlichen Begegnung zu bieten. Entsprechend greift das Programm viele wichtige Themen auf und hält attraktive Exkursionen und Abendveranstaltungen bereit.

Mit dieser Jahrestagung kehrt die Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie der Gesellschaft Deutscher Chemiker nach Frankfurt am Main, den Ort ihrer Gründung im Jahr 1990 zurück. Der Leitgedanke war die Schaffung eines Diskussionsforums für Wissenschaftler in damals sehr jungen Fachgebieten, die sich aber "mittlerweile zur Eigenständigkeit entwickelten", wie es im vorausgegangenen Positionspapier, 1989, hieß. Diese Einschätzung teilten die 238 Gründungsmitglieder und insgesamt mehr als 1000 Kolleginnen und Kollegen, ausgedrückt durch ihren Beitritt zur Fachgruppe binnen nur eines Jahres. Wichtigster Impulsgeber für die Gründung und erster Vorsitzender der Fachgruppe war Otto Hutzinger, ein Pionier des Konzeptes, den Stoff in die Mitte der Betrachtung zu stellen.

Wir freuen uns auf eine spannende und interessante Tagung 2008 in Frankfurt!

Prof. Dr. Gerhard Lammel, Vorsitzender der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie der Gesellschaft Deutscher Chemiker



Casino der Universität Frankfurt

# Inhalt

# **Impressum**

Mitteilungen der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie

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

#### Redaktion:

Prof. Dr. Dr. Klaus Fischer Analytische und Ökologische Chemie FB VI – Geografie/ Geowissenschaften – Universität Trier Campus II, Behringstr. 21, D-54296 Trier

Tel. und Fax: 0651/201-3617 Sekretariat: 0651/201-2243 E-Mail: fischerk@uni-trier.de

#### Abkürzung:

Mitt Umweltchem Ökotox

#### Design/ Technische Umsetzung:

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

ISSN: 1618-3258

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

# Titelbild:

Luftmessstation an der Friedrich-Engels-Allee in Wuppertal, Quelle: P. Wiesen

# **Editorial**

67 Grußwort zur 3. Gemeinsamen Tagung von GDCh Fachgruppe Umweltchemie Ökotoxikologie und SETAC-GLB

# Originalbeiträge

- 69 Das innerstädtische "Stickstoffdioxid (NO<sub>2</sub>)-Problem": Welchen Einfluss haben direkte Verkehrsemmissionen?
- 73 Präambel zum BUA-Beitrag von E. Jacob
- 74 QSAR-Ansätze für die toxikologische Bewertung von Industriechemikalien

# Aus der Fachgruppe

- 78 Programm der 3. gemeinsamen Jahrestagung SETAC-GLB und GDCh
- 85 Einladung zur Mitgliederversammlung der Fachgruppe
- 85 AK Chemiekalienbewertung: Neuwahl des Arbeitskreisvorstandes

# Kurz vorgestellt

86 Lehrstuhl für Landschaftsökologie der Hochschule Vechta

## Informationen

#### Kurznachrichten

- 88 UBA-Forschungsbericht 20667470 erschienen
- 88 BfR und UBA-Empfehlung zu Organozinnverbindungen
- 89 BfR-Empfehlung zum Einsatz neuer Duftstoffe
- 90 Hormonaktive Stoffe: Risiko für Mensch und Umwelt?
- 91 Wissenschaftliches Gutachten zu PAH's in der Nahrung

#### Tagungsankündigungen

- 92 9th. European Meeting on Environmental Chemistry, Dezember 2008
- 92 Micropol & Ecohazard 2009
- 93 12. EuCheMS-Konferenz Juni 2009

#### **Sonstiges**

96 GDCh unterstützt BMBF-gefördertes Forschungsprojekt - Umfrage unter Promovierenden und Promovierten

# Personalia

- 95 Geburtstagsliste 4. Quartal 2008
- 96 Neue Fachgruppenmitglieder

# Das innerstädtische "Stickstoffdioxid (NO2)-Problem":

# Welchen Einfluss haben direkte Verkehrsemmissionen?

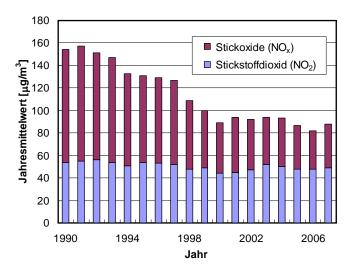
Ralf Kurtenbach¹ (<u>kurtenba@uni-wuppertal.de</u>), Karl-Heinz Becker¹ (<u>khbecker@uni-wuppertal.de</u>), Peter Bruckmann² (<u>bruckmann@lanuv.nrw.de</u>), Jörg Kleffmann¹ (<u>kleffman@uni-wuppertal.de</u>), Anita Niedojadlo¹ (<u>niedan@uni-wuppertal.de</u>) und Peter Wiesen¹ (<u>wiesen@uni-wuppertal.de</u>)

**Schlüsselwörter:** Stickstoffmonoxid (NO), Stickstoffdioxid(NO<sub>2</sub>), Luftqualität, Jahresgrenzwerte, Emission, primäre und sekundäre Schadstoffe

# 1. Einleitung

Stickoxidemissionen  $(NO_x=NO+NO_2)$ Deutschland zum größten Teil noch immer durch den Straßenverkehr hervorgerufen. So liegt bundesweit derzeit der Anteil des Straßenverkehrs an der Gesamt-NO<sub>x</sub>-Emission bei rund 60% [1] . Seit Mitte der 80-er Jahre beobachtet man einen Rückgang der NOx-Emissionen aus dem Straßenverkehr. So betrug nach Emissionsberechnungen des Umweltbundesamtes der Rückgang der NO<sub>x</sub>-Gesamtemission zwischen 1990 und 2005 rund 60% [1]. Aufgrund des starken Rückgangs der NOx-Emission ist eigentlich zu erwarten, dass sich entsprechend auch ein Rückgang bei den NO<sub>x</sub>-Immissionen ergibt. Die Abbildung 1 zeigt als Beispiel die NO<sub>x</sub>- und NO<sub>2</sub>-Immissionsentwicklung an Hauptverkehrsstraßen in Nordrhein-Westfalen (NRW) für den Zeitraum von 1990 bis 2007 [2].

Man erkennt einen deutlichen Rückgang der Jahresmittelwerte der NO<sub>x</sub>-Immission von 154 μg/m<sup>3</sup> auf 88 μg/m<sup>3</sup>. Dieser Rückgang ist in Übereinstimmung mit der berechneten NO<sub>x</sub>-Emissionsentwicklung. Hingegen stagnieren die NO<sub>2</sub>-Immissionswerte in NRW im gleichen Zeitraum bei ca. 50 μg/m<sup>3</sup>. Diesen Trend der NO<sub>2</sub>-Immission beobachtet man auch bundesweit [3]. Die resultierende NO2-Belastung ist bereits heute aufgrund der Toxizität des NO2 und seiner Schlüsselrolle bei der Bildung des troposphärischen Ozons ein Problem für viele Städte [4]. Im Jahr 2007 lagen bundesweit bereits an mehr als der Hälfte der Hauptverkehrsstraßen die Jahresmittelwerte für NO2 deutlich über dem europaweit ab 2010 geltenden Jahresgrenzwert von 40 μg/m<sup>3</sup> .bzw. ~20 ppbV [3]. Seit Anfang 2006 führt die Physikalische Chemie im Fachbereich C der Bergischen Universität Wuppertal (BUW) in Zusammenarbeit mit dem Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz (LANUV) Nordrhein-Westfalen erweiterte Immissionsmessungen an verkehrsnahen Messstationen in Wuppertal und Hagen durch, um die Ursache für die stagnierenden bzw. erhöhten NO2-Immissionswerte zu klären.



**Abb. 1:**  $NO_{x^{-}}$  und  $NO_{2}$ -Immissionsentwicklung an Hauptverkehrsstraßen in Nordrhein-Westfalen (NRW) für den Zeitraum von 1990 bis 2007.

# 2. Experimentelles

Messungen des verkehrsnahen NO, NO $_2$  und Ozon (O $_3$ ) im Stadtgebiet von Wuppertal an der Friedrich-Engels-Allee und in Hagen am Graf-von-Galen-Ring wurden im Zeitraum 2004 bis 2007 zur Bestimmung der direkten- und indirekten NO $_2$ -Emission des Verkehrs durchgeführt. Die Abbildung 2 zeigt die Messstationen in Wuppertal und Hagen. An den Messstationen wurden die Stickstoffoxide NO und NO $_2$  on-line mit Hilfe von NO $_2$ -Chemilumineszenz-Analysatoren (Environmental s.a. AC 31M mit Molybdän-Konverter) und O $_3$  on-line mit Hilfe von O $_3$ -Monitoren (Environnemental s.a. 41M mit UV-Absorption) gemessen.

Zu dem vorgeschriebenen NO2-Meßverfahren nach der entsprechenden VDI-Richtlinie [5] ist anzumerken, dass hier positive Interferenzen gegenüber anderen reaktiven Stickstoffverbindungen (NOy) wie z. B. salpetriger Säure (HONO), Salpetersäure (HNO3) oder organischen Nitraten (RONO2) bekannt sind [6]. Abhängig von den Messbedingungen und für hohe Schadstoffbelastungen, wie z.B. während der morgendlichen "Rush Hour", kann es hierdurch zu einer ca. 10%igen Überschätzung der NO2-Konzentrationen kommen. Während so genannter "Sommer-Smog-Bedingungen" kann es jedoch aufgrund der photochemisch gebildeten, interferierenden Substanzen zu einer drastischen

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Bergische Universität Wuppertal (BUW), FB C / Physikalische Chemie, Wuppertal

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz (LANUV) Nordrhein-Westfalen, Wallneyer Straße 6, D-45023 Essen

# Originalbeiträge

Überschätzung der NO<sub>2</sub>-Konzentrationen von bis zu 200% kommen. Es sind zwar selektive, empfindliche NO<sub>2</sub>-Meßverfahren bekannt, diese werden allerdings aufgrund ihrer Komplexität und Kosten z.Zt. nicht in Messnetzen verwendet. Die Entwicklung einfacher und selektiver NO<sub>2</sub>-Meßverfahren wäre für die Untersuchung der NO<sub>2</sub>-Grenzwertproblematik daher wünschenswert.





**Abb. 2:** Messstationen an Hauptverkehrsstraßen in Wuppertal (Friedrich-Engels-Allee) und Hagen (Graf-von-Galen-Ring)

#### 3. Ergebnisse und Diskussion

Bei Verbrennungsprozessen wie z. B. in Motoren von Kraftfahrzeugen werden  $NO_2$  und NO primär gebildet und direkt emittiert. Das direkt emittierte NO(direkt) wird in der Atmosphäre teilweise durch  $O_3$  oder Peroxy ( $RO_2$ )-Radikale zu sekundärem NO2(indirekt) umgewandelt.

1) 
$$NO + O_3; (RO_2) \rightarrow NO_2 + O_2; (RO)$$

In Gegenwart von Sonnenlicht wird  $NO_2$  teilweise wieder zu NO photolysiert:

2) 
$$NO_2 \xrightarrow{Sonnenlicht(O_2)} NO + O_3$$

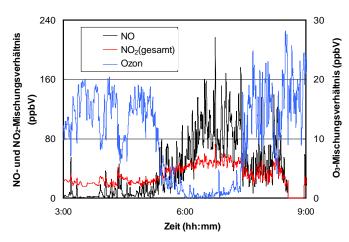
Der eingangs beschriebene gegenläufige Trend der  $NO_x$ - und  $NO_2$ -Immission kann somit verschiedene Ursachen haben. So kann sich sowohl der Anteil des primär emittierten  $NO_2$ (direkt) und damit das  $NO_2/NO_x$ -Emissionsverhältnis des Straßen-

verkehrs als auch der Anteil der sekundären NO<sub>2</sub>-Bildung erhöht haben. Zur Bestimmung des NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>-Emissionserhältnisses trägt man OX als Funktion von NO<sub>x</sub> auf. Nach linearer Regression erhält man aus der Steigung der Ausgleichsgerade das NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>-Emissionsverhältnis und aus dem Achsenabschnitt die O<sub>3</sub>-Hintergrundkonzentration [7]. Das primär emittierte NO<sub>2</sub>(direkt) erhält man durch Multiplikation des NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>-Emissionsverhältnisses mit der gemessenen NO<sub>x</sub>-Konzentration. Die Differenz zwischen dem gemessenen NO<sub>2</sub>(gesamt) und dem erhaltenen primär emittierten NO<sub>2</sub>(direkt) liefert dann das sekundär gebildete NO<sub>2</sub>(indirekt).

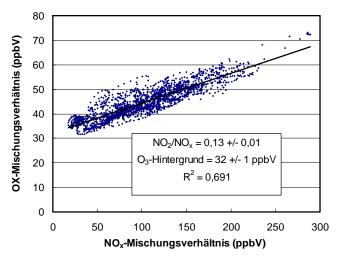
Bei verkehrsnahen Messungen von NO, NO<sub>2</sub> und O<sub>3</sub> in den Morgenstunden während der so genannten "Rush Hour" ist in der Regel die O<sub>3</sub>-Hintergrundkonzentration nahezu konstant, die RO<sub>2</sub>-Chemie in der Atmosphäre vernachlässigbar und die NO<sub>x</sub>-Variation am größten. Messdaten aus diesem Zeitintervall liefern daher auch die beste lineare OX zu NO<sub>x</sub>-Korrelation. In der Abbildung 3 sind exemplarisch die NO-, NO<sub>2</sub>- und O<sub>3</sub>-Immissionswerte als 1 min-Mittelwerte an der LANUV-Station Wuppertal in der Friedrich-Engels-Allee vom 05.04.2006 dargestellt. Man erkennt einen typischen "Rush Hour Peak" für NO und NO<sub>2</sub> zwischen 5 und 8 Uhr morgens. Die ausgeprägte Antikorrelation zwischen NO und O<sub>3</sub> weist auf eine schnelle Bildung von sekundärem NO<sub>2</sub>(indirekt) hin. Zur Korrelation von OX gegen NO<sub>x</sub> wurden im Folgenden nur die Messdaten im Zeitintervall 5:00 - 8:00 Uhr herangezogen.

Die Abbildung 4 zeigt exemplarisch die Korrelation zwischen OX und  $NO_x$  im Zeitintervall 5:00 - 8:00 Uhr an der LANUV Messstation in Wuppertal am 05.04.2006. Die lineare Regression ergibt ein  $NO_2/NO_x$ -Emissionsverhältnis von (0,13±0,01) und eine  $O_3$ -Hintergrundkonzentration von (32±1) ppbV. Für 2006 ergab sich an der Messstation in Wuppertal im Jahresmittel ein  $NO_2/NO_x$ -Emissionsverhältnis von (0,12 ± 0,01) und eine  $O_3$ -Hintergrundkonzentration von (33±1) ppbV. Vergleichbare Jahresmittelwerte wurden für 2006 mit (0,11±0,01) für das  $NO_2/NO_x$ -Emissionsverhältnis und mit (31±1) ppbV für die  $O_3$ -Hintergrundkonzentration an der Messstation in Hagen erhalten.

Im Vergleich ergab eine Verkehrsstudie der Kfz-Flotte in Wuppertal von 1997 [8] ein deutlich kleineres NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>-Emissionsverhältnis von nur (0,04±0,01). Der beobachtete Anstieg des NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>-Emissionsverhältnisses für den Straßenverkehr und die damit verbundene höhere NO<sub>2</sub>-Emission ist somit ein Grund für die beobachteten stagnierenden NO<sub>2</sub>-Immissionswerte [9,10,11,12]



**Abb. 3:** NO-, NO<sub>2</sub>- und O<sub>3</sub>-Immissionswerte (1 min-Mittelwerte) an der LANUV-Station Wuppertal, Friedrich-Engels-Alle am 05.04.2006.



**Abb. 4:** Auftragung OX gegen  $NO_x$  (1 min-Mittelwerte) für den Zeitraum von 5:00 bis 8:00 Uhr an der LANUV-Station Wuppertal, Friedrich-Engels-Allee am 05.04.2006.

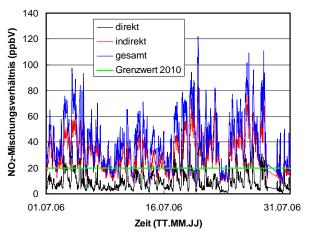
Ursache der zunehmenden NO<sub>2</sub>-Emission bzw. zunehmenden NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>-Emissionsverhältnisses sind gestiegene Anteil an Fahrzeugen mit Dieselmotor an den Kfzsowie neue Kfz-Abgasreinigungssysteme. Zulassungen Moderne Diesel-Pkw sind heute serienmäßig mit Oxidationskatalysatoren ausgestattet, die unter anderem durch Oxidation des NO mit überschüssigem Sauerstoff den NO2-Anteil im Abgas deutlich erhöhen. Des weiteren werden vermehrt sich kontinuierlich regenerierende Partikelfilter (KRP) zur Abscheidung der Russpartikel in Verbindung mit einem Oxidationskatalysator, der dem Filter vorgeschaltet ist, eingesetzt. Das im Oxidationskatalysator gebildete NO2 dient im nachgeschalteten Partikelfilter als Oxidationsmittel zur Verbrennung der dort angesammelten Russpartikel. Konventionelle KRP-Filtersysteme arbeiten mit einem großen NO2-Überschuss, um auch bei ungünstigen Betriebsbedingungen einwandfrei zu funktionieren. Neue geregelte KRP-Filtersysteme mit so genannter NO<sub>x</sub>OPT-Technik [13] reduzieren

den  $NO_2$ -Überschuss um bis zu 75% und verringern somit wesentlich den direkten  $NO_2$ -Ausstoß.

Die Abbildung 5 zeigt exemplarisch die 30 min-Mittelwerte des primären, sekundären und gesamten NO $_2$  an der LANUV-Station in Hagen am Graf-von-Galen-Ring im Juli 2006. Man erkennt, dass das sekundär gebildete NO $_2$ (indirekt) schon überwiegend zur einer Überschreitung des neuen NO $_2$ -Grenzwertes (EU-2010, 40  $\mu$ g/m $^3$ , ~20 ppbV) führt. Dagegen ist der Anteil des primär emittierten NO $_2$ (direkt) deutlich kleiner.

Der an der Station in Hagen bestimmte Jahresmittelwert für 2006 von (35 $\pm$ 17) ppbV NO $_2$  liegt deutlich über dem ab 2010 geltendem Grenzwert und setzt sich überwiegend aus einem sekundär gebildeten NO $_2$ -Anteil von (73 $\pm$ 12) % bzw. (24 $\pm$ 11) ppbV und einem geringeren primär emittierten NO $_2$ -Anteil von (27 $\pm$ 12) % bzw. (11 $\pm$ 8) ppbV zusammen. Dieses Ergebnis deckt sich auch mit einer Studie des Instituts für Energie- und Umweltforschung (IFEU) Heidelberg GmbH [14], die im Auftrag des Umweltministeriums des Landes Baden-Württemberg durchgeführt wurde.

Auch eine drastische Reduzierung des primär emittierten  $NO_2$  bzw. des  $NO_2/NO_x$ -Emissionsverhältnisses durch verbesserte Abgasreinigungssysteme [13] würde die  $NO_2$ -Immission nicht unter den EU-Jahresgrenzwert von ~20 ppbV senken, da die  $NO_2$ -Immission maßgeblich durch die sekundäre  $NO_2$ -Bildung bestimmt wird.

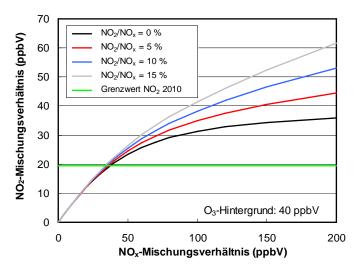


**Abb. 5:** Auftragung des primären (direkten), sekundären (indirekten) und gemessenen NO<sub>2</sub> (gesamt), 30 min-Mittelwerte, LANUV-Station Hagen, Graf-von-Galen-Ring, Juli 2006.

In der Abbildung 6 ist in einer einfachen Box-Modellrechnung die photostationäre NO2-Konzentration bei einer Ozonhintergrundkonzentration von 40 ppbV für vier verschiedene NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>-Emissionsverhältnisse in Abhängigkeit der NO<sub>x</sub>-Konzentration dargestellt. Bei diesen Berechnungen wurde nur die NO<sub>x</sub>/O<sub>3</sub>-Photochemie bei einer typischen Sonneneinstrahlung für den Sonnenhöchststand in Deutschland berücksichtigt. Da NO2 bei Anwesenheit von Kohlenwasserstoffen und Sonnenlicht zusätzlich aus der RO2-Chemie (s. o.) entsteht und zudem bei niedrigerem Sonnenstand weniger photolysiert, liegen  $NO_2$ 

# Originalbeiträge

tatsächlichen  $NO_2$ -Konzentrationen noch höher. Man erkennt, dass zur Einhaltung des neuen  $NO_2$ -Grenzwertes - nahezu unabhängig vom  $NO_2/NO_x$ -Emissionsverhältnis - die  $NO_x$ -Emission noch weiter drastisch gesenkt werden muss, z. B. der  $NO_x$ -Jahresmittelwert für 2007 in Hagen von 92 ppbV bzw. für Wuppertal von 55 ppbV auf rund 35 ppbV. Diese Aussage deckt sich auch mit anderen Studien, die unter anderem eine  $NO_x$ -Reduzierung von mindesten 50% vorschlagen, um eine erkennbare Absenkung der  $NO_2$ -Immission zu erreichen [9, 10].



**Abb. 6:** Auftragung der photostationären NO<sub>2</sub>-Konzentration gegen die NO<sub>x</sub>-Konzentration, für verschiedene NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub>-Emissionsverhältnisse, bei einer Ozonhintergrundkonzentration von 40 ppbV und einer für den Sonnenhöchststand in Deutschland typischen NO<sub>2</sub>-Photolyserate von 8×10<sup>-3</sup> [s<sup>-1</sup>].

#### 4. Zusammenfassung

Die Abnahme der  $NO_x$ -Immission an bundesweiten verkehrsnahen Messstationen deckt sich weitgehend mit der Reduzierung der  $NO_x$ -Emission des Straßenverkehrs. Hingegen stagniert die  $NO_2$ -Immision bundesweit. So lagen in der Bundesrepublik Deutschland 2007 an mehr als der Hälfte der Hauptverkehrsstraßen die Jahresmittelwerte für  $NO_2$  bereits deutlich über dem europaweit ab 2010 geltenden Jahresgrenzwert von 40  $\mu g/m3$  bzw. ~20 ppbV.

Der beobachtete Trend der  $NO_2$ -Immission hat verschiedene Ursachen. So hat sich der Anteil des primär emittierten  $NO_2$ (direkt) und damit das  $NO_2/NO_x$ -Emissionsverhältnis des Straßenverkehrs erhöht. Weiterhin führt der hohe Anteil des sekundären  $NO_2$ (indirekt), der hauptsächlich über die Ozonkonzentration limitiert ist, zu weiterhin hohen  $NO_2$ -Konzentrationen.

Das erhöhte  $NO_2/NO_x$ -Emissionsverhältnis kann aber nur zum kleinen Teil die erhöhten  $NO_2$ -Immissionen erklären, da die sekundäre  $NO_2$ -Bildung maßgeblich die innerstädtische  $NO_2$ -Konzentration bestimmt. Eine Absenkung des primär emittierten  $NO_2$ (direkt) durch verbesserte Abgasreinigungssysteme allein würde die  $NO_2$ -Immission nicht deutlich absenken. Die Einhaltung des für 2010 gültigen  $NO_2$ -Jahresgrenzwertes von ~20 ppbV wird daher nur durch eine

weitere drastische Reduzierung der NO<sub>x</sub>-Emission möglich

#### 6. Literatur

- [1] Tappe, M., Friedrich, A., Höpfner, U., Knörr, W., 2008, Berechnung der direkten Emissionen des Straßenverkehrs in Deutschland im Zeitraum 1995 bis 2010, Umweltforschungsplan des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit – Luftreinhaltung-, Forschungsbericht 105 06 095 UBA-FB 96-087, Texte 73/96 (http://www.umweltbundesamt.de).
- [2] Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz (LANUV) Nordrhein-Westfalen, 2008, Jahreskenngrößen 2007
  - (www.lanuv.nrw.de/luft/immissionen/ber\_tred/berichte.htm)
- [3] Umweltbundesamt, 2008, Luft und Luftreinhaltung, Luftbelastung Deutschland 2007, Feinstaub und Stickstoffdioxid überschreiten die gesetzlichen Grenzwerte – Überblick,
  - www.umweltbundesamt.de/luft/schadstoffe/luftbelastung.htm
- [4] Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N., 1998, Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change, John Wiley & Sons: New York.
- [5] VDI Richtlinie 2453 (1), (2), (3)
- [6] Dunlea, E. J. et al., 2007, Evaluation of nitrogen dioxide chemiluminescence monitors in a polluted urban environment, Atmospheric Chemistry and Physics., 7, 2691-2704.
- [7] Clapp, L. J. and Jenkin, M. E., 2001, Analysis of the relationship between ambient levels of O<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub> and NO as a function of NO<sub>x</sub> in UK, Atmospheric Environment, 35, 6391-6405.
- [8] Lörzer, J. C., 2002, Messung ausgewählter Abgaskomponenten in einem Verkehrstunnel zur Bestimmung von Emissionsfaktoren, Dissertation, Fachbereich C, Bergische Universität – Gesamthochschule Wuppertal.
- [9] Rabl, P. und Scholz, W., 2005, Wechselbeziehung zwischen Stickstoffoxid- und Ozon-Immissionen, Datenanalysen aus Baden-Württemberg und Bayern 1990-2003, Immissionsschutz, Heft 1, Seite 21-25
- [10] Palmgren, F., Berkowicz, R., Ketzel, M., Winther, M., 2007, Elevated NO<sub>2</sub> pollution in Copenhagen due to direct emission of NO<sub>2</sub> from road traffic, 2nd ACCENT Symposium, 23-27 (www.air.dmu.dk).
- [11] Keuken, M., Roemer, M., van Elshout, S., Dernby, B, 2006, Trend analysis of NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub> and PM10 exceedance of daily limit values in Rotterdam, Case study report D7.1.1, Air4EU project (<u>www.air4eu.nl</u>).
- [12] Air Quality Expert Group (AQEG), 2006, Report: Trend in Primary Nitrogen Dioxide in UK.
- [13] UMTEC, 2007, NO2-optimierter Oxidationskatalysator, Bericht 2007 (<a href="https://www.umtecc.ch">www.umtecc.ch</a>).

[14] Dünnebeil, F., Lambrecht, U., Kessler, Ch., 2007, Zukünftige Entwicklung der NO<sub>2</sub>-Emission des Verkehrs und deren Auswirkungen auf die NO<sub>2</sub>-Luftbelastung in den Städten in Baden-Württemberg. Im Auftrag des Umweltministeriums Baden-Württemberg, Heidelberg

#### Korrespondenzadresse:

Ralf Kurtenbach, Bergische Universität Wuppertal (BUW), FB C / Physikalische Chemie, Gaußstraße 20, D-42097 Wuppertal

# Präambel zum Originalbeitrag von E. Jacob

Der folgende Artikel von E. Jacob beruht auf einem Beitrag, den der Autor im Rahmen eines Kolloquiums des Beratergremiums Altstoffe (BUA) zum Thema "QSAR-Methoden in der Chemikalienbewertung und ihre Bedeutung für REACH" Ende 2006 präsentiert hat.

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 früheren Heften der "Mitteilungen Umweltchemie Ökotoxikologie" sind bereits folgende BUA-Kolloquiumsbeiträge erschienen:

- Heft 01/2008: "Datenprobleme und Datenbedarf in der Umweltrisikobewertung von Chemikalien" (M. Scheringer, K. Hungerbühler),
- Heft 02/2008: "Multimediale Modellierung zur Identifizierung von persistenten Stoffen mit Ferntransportpotenzial" (M. Matthies, J. Klasmeier) und "Toxizitätsmodellierung mit kommerziellen (Q)SAR-Systemen: praktische Aspekte für die regulatorische Anwendung" (B. Simon-Hettich).

Mit dem Text von E. Jacob liegt die BUA-Beitragsserie jetzt vollständig vor.

# Originalbeiträge

# QSAR-Ansätze für die toxikologische Bewertung von Industriechemikalien

E. Jacob (elard.jacob@basf-ag.de), Ludwigshafen/Rhein

#### Historie

Die hier betrachteten (Q)SAR Modelle und ihr Einsatz in der toxikologischen Bewertung von Industriechemikalien unterscheiden sich wesentlich von früheren Entwicklungen dieses Namens, die einem anderen Zweck dienten. Sie waren auf die Ableitung pharmakologischer und physikalischchemischer Eigenschaften von Entwicklungssubstanzen in der pharmazeutischen Forschung und im Pflanzenschutz ausgerichtet mit dem Ziel der Vorhersage erhöhter Wirksamkeit strukturverwandter Substanzen mit gleichem zellulären Wirkort.

Insofern fokussierten sie sich fast ausschließlich auf "Congeneren"-Betrachtungen, bei denen in einer Familie strukturverwandter chemischer Substanzen der Einfluss verschiedener "Themen"-Variationen auf eine höhere Wirksamkeit, ggf. in Verbindung mit reduzierten Nebenwirkungen und für die geplante Anwendung günstigeren physikalisch-chemischen Eigenschaften betrachtet bzw. vorausgesagt wurde.

Insofern sind derartige (Q)SAR-Methoden, die teilweise auch den Charakter von "Molecular Modelling" (also lokale Variationen von Substituenten und homologen strukturellen Änderungen im Rückgrat des Moleküls) hatten, in der pharmazeutischen und chemischen Industrie bewährte und qut etablierte Werkzeuge.

Dies gilt insbesondere für die zur direkten Messung alternative Methode der Berechnung physikalisch-chemischer Eigenschaften, die zur Ableitung ökotoxikologischen Verhaltens (u.a. Verteilung in unterschiedlichen Umweltkompartimenten) heran gezogen wird.

Bei den neuen Bewertungsmodellen, die als (Q)SAR-Programme in der Toxikologie eingesetzt werden, gibt es jedoch bedeutende Unterschiede zu den früheren Modellen. Sie liegen vor allem in der sehr viel größeren Strukturvielfalt der Trainingsdaten und der zu bewertenden Substanzen einschließlich der Bewertung völlig unbekannter Moleküle. Der Congenerenansatz ist hier weitgehend in den Hintergrund getreten.

# Begriffsdefinitionen

Es erscheint hilfreich, an dieser Stelle vor einer weiteren Diskussion der verschiedenen Entwicklungen und Einsatzmöglichkeiten, eine kurze Begriffsdefinition einzuführen.

Danach soll mit "QSAR" eine quantitative Beziehung zwischen einer pharmakologischen, chemischen, biologischen, physikalischen (z.B. Siedepunkt) Wirkung eines Moleküls mit seiner chemischen Struktur verstanden werden. Teilweise findet man in der Literatur auch die Bezeichnung QSPR, als Akronym für Quantitative Structure Property Relationship, hier beschränkt man sich darauf, die Beziehung zwischen den physikalischen und chemischen Eigenschaften eines Moleküls und seiner Struktur darzustellen.

Erste Arbeiten in diesem Gebiet sind vermutlich bereits im Jahre 1842 durch Kopp /1/ entstanden, welcher eine lineare Beziehung zwischen den Siedepunkten von Alkanen mit deren Kettenlänge herstellte.

Mit "SAR" (Struktur-Wirkungsbeziehung) ist die quantitative Beziehung in den Hintergrund getreten. Mit diesem Akronym sollen die qualitativen Beziehungen zwischen einer chemischen Struktur und dem Potential für eine bestimmte chemische oder biologische Eigenschaft bezeichnet werden. Beispiele im Bereich Säugertoxizität könnten dafür sein: Mutagenität, Sensibilisierung und Reizwirkung.

SARs geben deshalb i.A. eine Ja/Nein Aussage, während die Skalierung des Effekts häufig nicht vertretbar ist, da ein Vergleich zwischen Wirksubstanzen unterschiedlicher Potenz nicht massenproportional abgebildet werden kann. Exemplarisch für solche Effekte soll hier mutagene Potenz genannt werden, jedoch ist dieses Charakteristikum auch für andere Endpunkte gültig. Eine besondere Stellung zwischen diesen beiden Polen kann eine Bewertung der quantitativen Verteilung von aktiven Metaboliten einnehmen, wie sie z.B. in dem Programm TIMES von LMC implementiert ist (siehe unten).

Da auch in diesem Beitrag häufig ohne direkte Diskriminierung zwischen diesen beiden Vorhersagemethoden gesprochen wird, soll als gemeinsamer Begriff (Q)SAR verwendet werden, der sowohl den qualitativen wie den quantitativen Aspekt berücksichtigen soll.

Schließlich soll der Begriff des Expertensystems kurz angesprochen werden.

Unter "Expertensystem" wird ein computer-gestütztes wissensbasiertes System zur Vorhersage der stofflichen Eigenschaften aus der chemischen Struktur verstanden, das auf einem empirischen Regelwerk ("Rules") aufbaut. Ausgehend von diesen Regeln wird die Information zu einer spezifischen Problemklasse analysiert und auf Grundlage der mathematischen Analyse eine Reaktion (hier eine Bewertung) empfohlen. Damit stellt ein solches Regelwerk u.a. eine strukturell effiziente Organisation bekannten (ökotoxikologischen Wissens dar, das als die Grundlage zu einem "Expert Judgement" dienen kann.

Die Berechnung physikalisch-chemischer und struktureller Parameter als Beitrag zur Einschätzung der (biologischen) Wirksamkeit tritt dabei eher in den Hintergrund.

# (Q)SAR-Methoden und Expertensysteme in der Öko- und Säuger-Toxikologie

In den letzten fünfzehn Jahren wurden (Q)SAR und Expertensystem vermehrt auf (öko-)toxikologische Endpunkte wie Bioabbau, Bioakkumulation, Akute Fischtoxizität, Gentoxizität, Hautsensibilisierung und Kanzerogenität angewendet.

Insbesondere die Vorhersagen zu Mutagenität im Ames-Test mit der verfügbaren breiten Datenbasis haben bei der Entwicklung von (Q)SAR-Systemen eine wichtige Rolle gespielt, wobei in den neueren Entwicklungen zunehmend auch die Rolle metabolischer (De-)Aktivierung in Form der *in*vitro Simulation organspezifischer Stoffwechselleistungen berücksichtigt wurde.

Im Gegensatz zur Mutagenität erscheinen (Q)SAR-Vorhersagen zu anderen, komplexeren Endpunkten eher unterentwickelt, wobei häufig eine unzureichende Datenlage aus experimentellen Prüfungen der begrenzende Faktor ist, jedoch auch mangelnde Erkenntnisse zu den pharmakokinetischen "ADME"-Eigenschaften (ADME: Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion).

Einschränkungen erfahren diese Systeme weiterhin durch ihre fehlende Prädiktivität bei wirtschaftlich wichtigen Stoffklassen, z.B. Polymeren, anorganischen Verbindungen, Metallkomplex-Verbindungen und Fasern.

Für diese Klassen sind Analogieschlüsse in Verbindung mit "Expert-Judgement", ggf. in Verbindung mit strukturierten, behördlich anerkannten Modellen wie OncoLogic (US-EPA) und die Prüfung in *in-vitro* Surrogat Testsystemen (z.B. Reizwirkung, kanzerogenes Potential im Syrian Hamster Embryo (SHE) Zelltransformations-Assay) eine Alternative zur Prüfung im Tierversuch.

In der chemischen Industrie kommen den folgenden Eigenschaften eines (Q)SAR Systems wesentliche Bedeutung

- Mechanistisches Verständnis des vorhergesagten Effekts
- Berücksichtigung des relevanten Metabolismus (z.B. Leber oder Haut)
- Akzeptable Prädiktivität auch bei wenig datenreichen Endpunkten
- Integrierbarkeit von eigenen Prüfdaten mit proprietärer Chemie
- Transparenz der Aussage zur Vorhersage-Domäne
- Vollständigkeit des vorhergesagten Endpunkts (z.B. bei Gentoxizität)

Neben der internen Nutzung als Priorisierungswerkzeug wurde der Umgang mit solchen Software-Tools auch deshalb relevant, um bei Einsatz durch Zulassungsbehörden eigene Erfahrungen und Detailkenntnisse bzgl. ihrer Aussagekraft u. -grenzen zu haben.

Im Rahmen der regulatorischen Akzeptanz von (Q)SAR-Methoden wurden 2002 vor dem ICCA-Setubal Workshop in Portugal von einer ECETOC /2/ Gruppe die zu der Zeit kommerziell verfügbaren Programme bewertet. Die Bewertung /3/ stand für den Workshop als Basisinformation zur Verfügung und wurde später als "Technical Report" veröffentlicht. Die weiteren Aktivitäten in der EU in Zusammenarbeit mit der OECD bauen auf den Ergebnissen dieses Workshops auf.

Die chemische Industrie verfolgt diese Entwicklungen mit großer Aufmerksamkeit, da die behördliche Akzeptanz, vor allem wenn auch negative Vorhersagen als valide betrachtet werden, im Rahmen von REACH signifikante Erleichterungen bzgl. der Priorisierung experimenteller Prüfungen oder als Ersatz von ihnen bedeuten kann.

## Verfügbare (Q)SAR-Modelle

## Vorläufige Bewertung aus industrieller Sicht

Die im Rahmen einer ECETOC /2/ Experten Gruppe 2003 erstellte Bewertung /3/ soll hier aus der gegenwärtigen Sicht einer toxikologischen Fachabteilung differenziert dargestellt werden (Tabelle 1).

Physiko- chemische Eigenschaften		Umweltverhalten/ Ökotoxizität		Säugertoxizität	
Schmelz- punkt	gut	Photo- abbau	einge- schränkt	Akute orale Toxizität	einge- schränkt
Siede- punkt	gut	Hydro- lyse	einge- schränkt	Haut- reizung	einge- schränkt
Dampf- druck	sehr gut	Bio- abbau	gut	Augen- reizung	einge- schränkt
Wasser- löslich- keit	sehr gut	Bioakku- mulation	gut	Haut- sensi- bilisierg.	einge- schränkt
Vertei- lungs- koeff.	sehr gut	Akute Toxizi- tät für Fische	gut	Chro- nische Toxizi- tät	sehr einge- schränkt
		Akute Toxizi- tät für Inverte- braten	einge- schränkt	Muta- genität in vitro	einge- schränkt bis gut
		Akute Toxizi- tät für Algen	einge- schränkt	Karzino- genität	sehr einge- schränkt
		Chro- nische Toxizi- tät	sehr einge- schränkt	Repro- Tox Entw Tox	sehr einge- schränkt

**Tab. 1:** Vorläufige Bewertung verfügbarer (Q)SARs bzgl. verschiedener Endpunkte

# Potenzieller Nutzen von (Q)SARs aus Industrie-Perspektive

Die prinzipiellen Vorteile werden zunächst im Bereich der Vorauswahl von Stoffen im Prozess eines "Screenings" und der Identifizierung von möglichen Problemsubstanzen gesehen. Diese gezielte Auswahl kann als Hilfsinstrument bei den wachsenden Anforderungen der Gesetzgebung genutzt werden.

Insbesondere wird dadurch eine effektivere Nutzung der begrenzten experimentellen und Bewertungs-Ressourcen erwartet. Vor allem im Bereich von Tierversuchen wird eine

# Originalbeiträge

Reduzierung erhofft. Ob ein zumindest teilweiser Ersatz möglich ist, wird von der regulatorischen Akzeptanz der z. Zt. in Entwicklung befindlichen (Q)SAR-Werkzeuge abhängen.

Damit einher gehend sollte eine Beschleunigung von Priorisierungs- und Bewertungsverfahren sowie mehr Transparenz in Stoff- und Produktbewertungen möglich sein.

Jedoch werden die gegenwärtig verfügbaren (Q)SAR-Werkzeuge – speziell für Vorhersagen im Säugertoxizitäts-Bereich - auch kritisch gesehen. Während für die Vorhersage physiko-chemischer Endpunkte und akuter Effekte in der Ökotoxikologie eine gute Verlässlichkeit erkannt wird, erscheinen (Q)SARs im Säugertox-Bereich zwar relativ gut für Endpunkte mit validierten *in-vitro* Assays, können aber nicht die aufwendigen und deshalb teueren *in-vivo* Studien ersetzen.

Gründe dafür sind, dass für *in-vivo* Studien eine kritische Masse zum Aufbau eines verlässlichen Lerndatensatzes fehlt, der Endpunkt häufig stark durch ADME-Effekte beeinflusst wird und der zugrunde liegende Wirkmechanismus oft nur unzureichend verstanden ist.

Unter den derzeit laufenden Aktivitäten in Kooperation zwischen OECD und EU unter Leitung des ECB (European Chemical Bureau) wird die Weiterentwicklung der (Q)SARs auf Basis allgemein akzeptierter Kriterien ("Solna" Prinzipien in der Modifikation gemäß den Setubal-Vereinbarungen) vorangetrieben. Wesentliche Punkte dabei sind die Transparenz des Vorhersage-Algorithmus und des Lerndatensatzes ("Applicability Domain"). Die validierten Modelle müssen allgemein verfügbar sein, und es wird eine Koppelung der Aussage mehrerer unabhängiger Modelle im Sinn eines "Weight of Evidence" angestrebt.

Aus Sicht der Industrie ist für die komplexen *in-vivo* Endpunkte die Erstellung großer gemeinsamer Datenbasen unabdingbar, die allerdings nur mit einem ausreichenden Datenschutz realistisch erscheint.

# Mögliche Anwendungsgebiete für (Q)SAR's

Sie werden auf folgenden Ebenen gesehen:

- Risikobasierte Priorisierung von Stoffen / Produkten
- Risikobewertung (besonders für Stoffe mit niedrigen Produktionsvolumina)
- Einstufung und Kennzeichnung von Stoffen auf Basis der intrinsischen Eigenschaften einschließlich Plausibilitätsüberprüfung (Verunreinigungsproblematik?)
- Entscheidungshilfe bei der Entwicklung von Teststrategien

# Schlussfolgerungen für den Einsatz von (Q)SAR Methoden

Zusammenfassend ergeben sich aus Industriesicht daraus die folgenden Schlussfolgerungen für den Einsatz von (Q)SAR Methoden:

- Ein Ersatz von experimentellen Prüfungen im Bereich Ökotoxikologie und Bioabbau ist möglich.
- Bei Endpunkten der Säugertoxizität ist für die Erstellung von Teststrategien eine Priorisierung von Substanzen

möglich, falls ausreichende Informationen zu den Stoffeigenschaften über ADME-Einflüsse bekannt sind.

Hier könnte - als Denkmöglichkeit - die begrenzte Prüfung (im Sinn eines "Screening"-Verfahrens) von plasmakinetischen Daten durchgeführt werden. Zusammen mit der Vorhersage z.B. leberspezifischer Metaboliten wie es im (Q)SAR-Modell TIMES von LMC möglich ist, könnten daraus Eckwerte für Plasmahalbwertszeiten und potentielle Metaboliten erstellt werden, die als Surrogat-Daten für eine volle ADME-Prüfung herangezogen werden können.

Für den Endpunkt ADME zeichnet sich ein möglicher Einsatz von spezifisch dafür ausgelegten (Q)SAR-Programmen aus dem Pharmabereich ab. Ihre Validierung für den Einsatz an Industrie-Chemikalien mit deren ganz andersartigen proprietären Chemie ist allerdings noch offen und müßte ggf. in Angriff genommen werden.

Bei Congeneren erscheint ein Ersatz von tierexperimentellen Untersuchungen durch (Q)SAR-Betrachtungen möglich, vor allem wenn eine positive Aussage im Sinn einer Belastung der Substanz und ein Kennzeichnungsund Einstufungsvorschlag daraus abgeleitet werden.

Die regulatorische Akzeptanz von negativen Vorhersagen einer Wirkpotenz ("Entlastung" der Substanz) wird z.Zt. allerdings noch als problematisch gesehen.

# Voraussetzungen und Einschränkungen für den gegenwärtigen Einsatz von (Q)SAR- Vorhersagen in der (Öko-)Toxikologie

Die Nutzung von (Q)SAR Vorhersagen unterliegt z. Zt. einer Reihe stringenter Voraussetzungen:

- keine Treffer bei Literatur-Recherchen in in-/externen Datenbanken
- Analogieschluss scheidet aus
- Expert Judgement nicht möglich
- Ausschlusskriterien für die Anwendung von (Q)SAR liegen nicht vor (z.B. Polymere, Anorganika, instabile Substanzen, Mischungen, Salze (einige (Q)SAR-Modelle), Metalle, Metallkomplex-Verbindungen, Fasern)
- Zuverlässigkeit des (Q)SAR-Modells für Stoffklasse und Endpunkt ist bekannt

Hinzu kommen einige technische Einschränkungen, unter denen die Erstellung von (Q)SAR-Vorhersagen nicht sinnvoll erscheint:

So werden für F&E (Forschungs- und Entwicklungs)-Produkte, die z.B. als Muster in kleinen Mengen versandt werden (relativ häufig) keine derartigen Beurteilungen erstellt.

Dies gilt ebenfalls für Zwischenprodukte, wenn sie stofflich nur in kleinen Mengen akkumulieren bzw. eine ausschließliche Handhabung im geschlossenen Systemen erfolgt sowie für Zwischenprodukte, deren Umsetzung innerhalb des Firmengeländes erfolgt ( sehr selten).

Ausnahmen stellen Handels- und Verkaufsprodukte dar, die einer regulären Prüfung unterzogen werden.

# Originalbeiträge

(Q)SAR Bewertungen werden i. A. nicht durchgeführt, wenn Alternativen durch *in-vitro* Testsysteme verfügbar sind. Dazu gehören beispielhaft:

- Reizwirkung am Auge und an der Haut: HetCam (Auge);
   EpiDerm (Haut)
- in-vitro Hautpenetration (Ratten- u. Humanhaut)
- Kanzerogenität SHE (Syrian Hamster Embryo)-Zelltransformationstest
- Entwicklungstoxizität im. Limb-Bud Assay bzw. am Fischei (mit der Einschränkung für parental aktive Substanzen)

## Eigene Bewertungen und Erfahrungen

Eigene Erfahrungen wurden bei der Prädiktion akuter Säugertoxizität, speziell bei oraler Zufuhr, mit dem Einsatz neuronaler Netze gemacht.

Bezüglich Reizwirkung wurde (zeitlich begrenzt) bei dem BfR SAR Expertensystem (Skin Irritation Corrosion Rules Estimation Tool, SICRET; /4/) mitgearbeitet.

Zur Mutagenität als Endpunkt mit der umfangreichsten Datenlage wurden verschiedene (Q)SAR Modelle und Expertensysteme bewertet (DEREK, MultiCase und TopKat) und im Rahmen der Erstellung eigener Trainingsdaten insbesondere mit MultiCase bei der Mutagenitätsvorhersage detaillierte Erfahrungen gesammelt. Eine wesentliche Erfahrung war die Bedeutung, bei dem Einsatz kommerzielle (Q)SAR Modelle eigene Trainingsdaten einzubringen. Da sich die Strukturdomänen kommerzieller Software, die zumeist auf öffentlich zugängigen Trainingsdaten basieren, von Industriechemikalien mit proprietärer Chemie signifikant unterscheiden, entstehen sonst zwangsweise Defizite in der Zuverlässigkeit der Vorhersage. Ein weiteres wichtiges Argument ist die Möglichkeit, die Daten bezüglich des verwendeten Testprotokolls rigoroser zu definieren und Unsicherheiten auf Grund aktiver Nebenkomponenten zu erfassen bzw. zu eliminieren.

In einer neueren Entwicklung wurde an der Modellierung von TIMES (LMC Bourgas, Bulgarien; /5/) mit eigenen Trainingsdaten zur Mutagenität und zur Erweiterung auf den Endpunkt Chromosomenaberration mitgearbeitet.

TIMES (**T**issue **ME**tabolism **S**imulator) ist ein heuristischer Algorithmus, mit dem plausible Metaboliten von einer umfassenden Bibliothek bekannter Biotransformationen und abiotischer Reaktionen abgeleitet und semiquantitativ vorhergesagt werden.

Durch die Integration dieses Moduls gestattet TIMES im Bereich Säugertoxizität neben der Aktivitätsvorhersage für die Parentalstrukturen auch die der wahrscheinlichen Metabolite im Bereich Gentoxizität, Hautsensibilisierung (in Entwicklung) und Estrogen/ Androgen-Rezeptor Bindungsaffinitäten.

Ein weiteres Modul (CATABOL) zur Vorhersage der Kinetik des Bioabbaus wurde ebenfalls in seiner Modellierung mit einer umfassenden Sammlung eigener Prüfdaten unterstützt.

#### **Zusätzliche Motivation**

Abgesehen von der Nutzung als internes Bewertungs- und Priorisierungswerkzeug hat die Beschäftigung mit diesen Modellen ein besseres mechanistisches Verständnis des vorhergesagten Effekts zur Folge gehabt. Dabei spielt auch die Berücksichtigung des spezifischen Metabolismus (z.B. Leber oder Haut) eine wesentliche Rolle.

Insbesondere wurde der Wert von Expertensystemen für die Organisation des eigenen Fachwissens im Bereich "Expert Judgement" deutlich, dem auch bei den Einstufungsbegründungen des GHS (Global Harmonised System) eine zunehmend bedeutende Rolle zugeordnet wird.

#### Nutzen der eigenen Erfahrungen

Die eigenen Erfahrungen im Umgang mit den z.Zt. verfügbaren (Q)SAR Programmen waren eine wesentliche Voraussetzung dafür, in den entsprechenden Expertengremien des Europäischen Chemieverbandes und der OECD eigene Bewertungen der Einsatztauglichkeit und notwendiger Weiterentwicklung – auch im Hinblick auf Akzeptanzkriterien - aus Sicht der Industrie einzubringen. Sie haben sich auch in Behördengesprächen bewährt, wenn Analogien zur Bewertung kritischer Substanzen herangezogen wurden und die eigenen Erfahrungen für eine kritische Wertung dieser Schlussfolgerungen entgegen gestellt werden konnten.

#### Literatur:

- /1/ D. Bonchev, D.H. Rouvray: Chemical Graph Theory: Introduction and Fundamentals. Gordon and Breach Science Publishers, 1990, ISBN 0-85626-454-7
- /2/ www.ecetoc.org
- /3/ (Q)SARs: Evaluation of the commercially available software for human health and environmental endpoints with respect to chemical management applications (2003), ECETOC Technical Report No. 89
- /4/ www.bfr.bund.de/cm/232/
  das neue europaeische chemikalien recht und der\_verbraucherschutz\_langfassung.pdf
- /5/ http://www.oasis-lmc.org/

# Korrespondenzadresse

Dr. E. Jacob

Abt. Produktsicherheit, Chemikalienrecht, Toxikologie und Ökologie,

GUP/CB - Z470, BASF AG

D-67056 Ludwigshafen/Rhein

# Aus der Fachgruppe

# Programm der 3. gemeinsamen Jahrestagung SETAC-GLB und GDCH

"Neue Problemstoffe in der Umwelt - Erfassung, Wirkungen und Lösungsmöglichkeiten"



Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, 23. - 26.09.2008

# **Dienstag 23.09.08**

Zeit	Festsaal 1	Raum 1.811	Raum 1.812
12.00	Registrierung		
14.00	Tagungseröffnung  Eröffnungsvortrag Dr. R. Arndt (BMU, Bonn) SAICM: Der strategische Ansatz für ein inter- nationales Chemikalienmanage- ment im internationalen und nationalen Kontext		
15.00	Plenarvortrag Prof. Dr. Walter Giger (EAWAG, Dübendorf, CH) The Pollutants They Are A- Changin' oder: Was kommt als Nächstes?		
16.00		Kaffeepause/Postersession	
	Session 1: Monitoring von Chemikalien in der Umwelt, Leitung: Elke Fries, Juliane Hollender	Session 2: Effektmodellierung, Leitung: Udo Hommen, Thomas Preuss	Session 3: Biozide/ Pflanzen- schutzmittel: Wirkung und Abbau, Leitung: Andreas Schäffer, Robert Kreuzig
17.00	Quantifizierung von Stoffströmen auf Ereignisbasis als Beitrag zur Identifikation von Schadstoffquellen im Monitoring von Flüssen  Michael Bayerle, CRP Henri Tudor / CRTE, Esch-sur-Alzette, Tom Gallé, CRP Henri Tudor / CRTE, L, Reinhard Bierl, Universität Trier	Reduzierung von Tierversuchen auf der Basis physiko- chemischer Stoffeigenschaften Monika Nendza, AL-Luhnstedt, Luhnstedt	Abbautests von Bioziden in Gülle (Biozid-Projekt: Teil 1) Robert Kreuzig, Technische Universität Braunschweig, Jennifer Hörner, TU Braunschweig, Benjamin Cvetkovic, TU Braunschweig Constanze Hartmann, TU Braunschweig
17.20	Chlorobenzenes – still not well understood Alice Dvorska, RECETOX, Brno, CZ; Gerhard Lammel RECETOX/MPI, Jana Klanova RECETOX, Pavel Cupr RECETOX, Ivan Holoubek RECETOX	Vergleich unterschiedlicher statistischer Verfahren zur Auswertung von Mikrokosmos- Experimenten Markus Rybicki, Technische Universität Dresden, Dirk Jungmann Technische Universität Dresden	Abbau- und Sorptionstests eines Biozides in güllegedüngtem Boden (Biozid-Projekt Teil 2) Constanze Hartmann, Technische Universität Braunschweig, Jennifer Hörner, TU Braunschweig, Benjamin Cvetkovi, TU Braunschweig, Robert Kreuzig, TU Braunschweig
17.40	Auftreten von Benzotriazolen in Oberflächengewässern im Einzugbereich des Flughafens Frankfurt am Main Aliz Kiss, Universität Osnabrück, Elke Fries, Universität Osnabrück	Modellierung des Wiederer- holungspotentials von Räder- tieren Udo Hommen, Fraunhofer IME, Schmallenberg, Helga von Lochow, RWTH Aachen	Methoxychlor und der Einsatz von (P450-transgenen) Pflanzen- zell- suspensions-kulturen als Modellsysteme zur Untersuchung der Metaboli-sierbarkeit von Umwelt-schadstoffen Maren Breuer, RWTH Aachen, Burkhard Schmidt, RWTH Aachen, Andreas Schäffer, RWTH Aachen, Ingolf Schuphan RWTH Aachen

# **Dienstag 23.09.08**

Zeit	Festsaal 1	Raum 1.811	Raum 1.812
18.00	Persistente Rückstände bei Reh- und Schwarzwild aus der Mulde- aue Fritz Voigt, Landesamt für Verbraucherschutz Sachsen-Anhalt, Stendal	Zeitlich aufgelöstes Effektmodell für <i>Daphnia magna</i> – Messung und Modellierung der Toxiko- kinetik von Diazinon Andreas Kretschmann, EAWAG, Dübendorf, CH, Roman Ashauer, Kathrin Fenner, Piet Spaak, Juliane Hollender, Beate Escher, EAWAG, Dübendorf	Combined effects of insecticide exposure and the presence of a competitor (Daphnia magna) on the population development of <i>Culex pipiens</i> Anne Becker, UFZ Leipzig, Sabine Duquesne UFZ Leipzig, Enken Hassold UFZ Leipzig, Matthias Liess UFZ Leipzig
18.20	Einsatz der Leuchtbakterien Vibrio fischeri in Kopplung mit der Dünnschichtchromatographie und Massenspektrometrie zur Bestimmung von Wasserinhalts- stoffen Wolfgang Schulz, Wolfram Seitz, Walter H. Weber, Zweckverband Landeswasserversorgung, Langenau,	Auswirkung variabler Exposition auf die Populationsentwicklung von <i>Daphnia magna</i> Katrin Hoffmann, RWTH Aachen, Peter Dohmen, BASF SE, Hans Toni Ratte, RWTH Aachen	Hormesis und indirekte Effekte – Wirkungen des Herbizids Prometryn auf Organismen in einem aquatischen Mikrokosmos Jürgen Schmidt, ECT Flörsheim, Kuhl Roland, IBACON Rossdorf, Georg Streck, UFZ Leipzig, Liebig Markus, ECT Flörsheim
18.40	-	-	-
19.00	Come together		

# Mittwoch, 24.09.2008

Zeit	Festsaal 1	Raum 1.811	Raum 1.812
9.00	Vorträge SETAC-GLB Nachwuchspreisträger 2008		
10.00	Plenarvortrag Prof. Dr. Thomas Braunbeck (Universität Heidelberg) "Neue Problemstoffe in der Umwelt" oder: "Es wird zunehmend spezifischer" – Methoden und Strategien zu ihrem Nachweis		
11.00		Kaffeepause/Postersession	
	Session 4a: Pharmazeutika, Leitung: Bettina Rechenberg, Florian Keil	Session 5: Tools zur Wirkungserfassung, Leitung: Anja Coors, Thomas Knacker	Session 7: Umweltanalytik, Leitung: Christine Achten, Wilhelm Lorenz
11.40	Zeitliche Dynamik und Bilan- zierung saurer Pharmaka in einem Abschnitt des Roten Mains Michael Radke, Universität Bayreuth	Wie kann der Infochemical Effekt gemessen werden? Ursula Klaschka, Hochschule Ulm	Entwicklung einer analytischen Methode zur Erfassung von Polyvinylpyrrolidon PVP in Umweltproben auf Basis pyrolytischer Verfahren Jan Schwarzbauer, RWTH Aachen, Antic Vesna, University of Belgrad, Antic Malisa University of Belgrade
12.00	Der Transport des Tierarzneimittels Sulfadiazin und seiner Metabolite im Boden  Myriam Unold, Forschungszentrum Jülich, Roy Kasteel, Forschungszentrum Jülich, Joost Groeneweg, Forschungszentrum Jülich, Harry Vereecken, Forschungszentrum Jülich	Development of a new approach for the characterization of genotoxic effects: Gen-TEQ Christopher Fassbender, Universität Heidelberg, Thomas Braunbeck, Universität Heidelberg, Steffen Keiter, Universität Heidelberg	Dibenzopyrene in Steinkohlen Christine Achten, Universität Wien, A, Jan Schwarzbauer RWTH Aachen, Wilhelm Püttmann, Universität Frankfurt am Main, Michael A. Kruge, Montclair State University, Reinhard Sachsenhofer Montanuniversität Leoben

# Aus der Fachgruppe

# Mittwoch, 24.09.2008

Zeit	Festsaal 1	Raum 1.811	Raum 1.812
12.20	Effekt-dirigierte Analytik von Phototransformationsprodukten von Diclofenac Tobias Schulze, Sara Weiss, Emma Schymanski, Peter C. von der Ohe, Mechthild Schmitt-Jansen, Georg Streck, Rolf Altenburger Werner Brack, alle UFZ Leipzig	Sauerstoffbedingungen im Sedimentkontakttest mit dem Zebrabärbling ( <i>Danio rerio</i> ) Ruben Strecker, Universität Heidelberg, Thomas-Benjamin Seiler, RWTH Aachen, Henner Hollert, RWTH Aachen, Thomas Braunbeck, Universität Heidelberg	Umweltanalytische Charakterisierung organischer Kontaminanten in industriellen Direkteineinleitungen Nordrhein- Westfalens Oxana Botalova, RWTH Aachen, Jan Schwarzbauer RWTH Aachen, Tom Frauenrath RWTH Aachen, Nadia Al-Sandouk RWTH Aachen
12.40	Physiologische Wirkmechanismen von Fluoxetin und seinen Humanmetaboliten in synchronen Algenkulturen Judith Neuwöhner, EAWAG, Dübendorf, CH, Beate I. Escher, EAWAG Dübendorf, CH	Auf Feinstaub gebundene organische Stoffe beeinflussen die Immunantwort von Lungenepithelzellen Kerstin Ulrich, Universität Heidelberg, Sabine Wölfle, Heidelberg, Thomas Braunbeck, Universität Heidelberg, Lothar Erdinger, Universität Heidelberg, Klaus Heeg, Universität Heidelberg, Holger Bartz, Sanofi Pasteur, Leimen	Transformationsprodukte von Mikroverunreinigungen im Wasser –Identifizierung mit hochauflösender Massen- spektrometrie Susanne Kern, EAWAG, Dübendorf, CH, Heinz Singer EAWAG, Dübendorf, CH, Juliane Hollender EAWAG, Dübendorf, CH, René P. Schwarzenbach, ETH Zürich, Kathrin Fenner, EAWAG, Dübendorf, CH
13.00		Mittagspause	
	Session 4b: Pharmazeutika, Leitung: Bettina Rechenberg, Florian Keil	Session 6: Biologisches Effektmonitoring, Leitung: Henner Hollert, Lennart Weltje	Session 8: Verteilung zwischen verschiedenen Umweltkompartimenten, Leitung: Gerhard Lammel, Werner Manz
14.20	Histopathologische Veränderungen im Schilddrüsensystem des Zebrabärblings (Danio rerio) nach Belastung mit Propylthiouracil (PTU) Florian Schmidt, Weingarten, Susanne Knörr, Universität Heidelberg Thomas Braunbeck, Universität Heidelberg	Amazonasfischart Astronotus ocellatus für das Biomonitoring von Umweltauswirkungen durch die Ölindustrie Nislanha Ana dos Anjos, UFZ Leipzig, Adalberto Luis Val, UFZ Leipzig, Stefan Scholz, UFZ Leipzig	Trends, Ferntransport und atmosphärischer Abbau von DDT in und über Mitteleuropa Gerhard Lammel, Max-Planck-Institut für Chemie, Mainz, Alice Dvorská Masaryk University, Brno, CZ, Ivan Holoubek Masaryk University, Brno, CZ, Jana Klánová Masaryk University, Jiri Kohoutek Masaryk University, Brno, CZ, Ludwig Ries Umweltbundesamt, Schneefernerhaus, Zugspitze, Andreas Stohl, Kjeller, Norway
14.40	Bewerten Regulatoren zu protektiv? – Auswertung ökotoxikologischer Effektdaten aus Zulassungsverfahren von Arzneimitteln Jean Bachmann, Umweltbundesamt, Dessau, Ina Ebert, Umweltbundesamt, Berlin	Optimierung des Fischembryotestes mit dem Zebrabärbling (Danio rerio) Kirsten Wendler, Schrießheim, Erik Leist, Universität Heidelberg, Thomas Braunbeck, Universität Heidelberg	Sorption anionischer organischer Umweltchemikalien an boden- organische Substanz Holger C. Tülp, EAWAG, Dübendorf, CH, Kai-Uwe Goss, UFZ Leipzig, Kathrin Fenner, ETH Zürich, René P. Schwarzenbach, ETH Zürich

# Mittwoch, 24.09.2008

Zeit	Festsaal 1	Raum 1.811	Raum 1.812
15.00	Environmental Risk Assessment of Pharmaceuticals - Übersicht über Ergebnisse des EU-Projektes ERAPharm Anja Coors, ECT Flörsheim, Karen Duis, ECT Flörsheim, Thomas Knacker, ECT Flörsheim	Vergleich verschiedener Methoden zur Sedimentextraktion im Fischeitest mit dem Zebrafisch (Danio rerio) Hanno Zielke, Aachen, Thomas- Benjamin Seiler RWTH Aachen, Sabine Niebergall, Universität Heidelberg, Georg Streck, UFZ Leipzig, Erik Leist, Universität Heidelberg , Holger Zimmer, Universität Heidelberg Lothar Erdinger, Universität Heidelberg, Werner Brack, UFZ Leipzig Thomas Braunbeck, Universität Heidelberg, Henner Hollert, RWTH Aachen	Einsatz von Passivsammlern bei der Spurenanalytik von persistenten organischen Schadstoffen in verschiedenen Umweltkompartimenten Tilmann Gocht, Universität Tübingen, Peter Grathwohl, Universität Tübingen
15.20	The Swedish environmental information and classification system for pharmaceuticals - an empirical investigation of the motivations, intentions and expectations underlying its development and implementation Marlene Ågerstrand, Universität Stockholm, Schweden	Biologisches Effektmonitoring mit Sedimenten aus hessischen Oberflächengewässern Simone Galluba, Universität Frankfurt am Main, Jörg Oehlmann, Universität Frankfurt am Main	Zur Verteilung und Konzentration von Platingruppenelementen (PGE) in der Umwelt Fathi Zereini, Universität Frankfurt am Main
15.40	Integrative Lösungsansätze Florian Keil, ISOE Frankfurt am Main	Organophosphat-Flammschutz- mittel und -Weichmacher – Verbreitung und ökotoxiko- logische Charakterisierung Maren Heß, Universität Frankfurt am Main, Patrizia Di Benedetto, Universität Frankfurt am Main, Kristin Quednow, Universität Frankfurt am Main, Wilhelm Püttmann, Universität Frankfurt am Main, Jörg Oehlmann, Universität Frankfurt am Main	Chlorierte und unchlorierte Organophosphate (Flamm- schutzmittel, Weichmacher) in Niederschlägen und Ober- flächengewässern Julia Regnery, Universität Frankfurt am Main, Wilhelm Püttmann, Universität Frankfurt am Main
16.00	Umweltsichere Entsorgung von Arzneimitteln (Arbeitstitel) Markus Gleis, Umweltbundesamt Dessau	Wieviel Effekt darf sein? Zwischen Propagation und Kompensation Matthias Liess, UFZ Leipzig	Verkehrsbürtige Schwermetalle in Gewässern: Verteilung und Transfer zwischen dem Sediment und der Körbchenmuschel Corbicula sp. Nadine Haus, Universität Duisburg- Essen, Bernd Sures, Universität Duisburg-Essen
16.20	Kaffeepause/ Postersession		
17.20	M	itgliederversammlung (SETAC, GDC	h)

# Aus der Fachgruppe

# Donnerstag, 25.09.2008

Zeit	Festsaal 1	Raum 1.811	Raum 1.812
8.30	Plenarvortrag Prof. Dr. Hansruedi Siegrist (EAWAG, Dübendorf, CH) Verhalten von Mikroverunreini- gungen in kommunalen Kläranlagen und technische Möglichkeiten zur Verbesserung der Eliminations- leistung		
	Session 9a: <b>Technische Lösungen</b> , Leitung: Adriano Joss, Hansruedi Siegrist	Session 10: Effekte auf Lebens- gemeinschaften/ Biodiversität, Leitung: Peter Ebke, Tobias Frische	Session 12: Risikobewertung und regulatorische Aspekte, Leitung: Jan Ahlers, Adolf Eisenträger
9.30	In-situ-Remediation schwer- metallbelasteter Böden in der Region Bolnisi, Georgien Thomas Hanauer, Universität Giessen, Besik Kalandadze, Tbilisi State University, Tbilisi, Georgia, Peter Felix-Henningsen, Universität Giessen	Indirekte Effekte von herbziden Substanzen auf Makrophyten in aquatischen Mesokosmen- Studien Silvia Mohr, Umweltbundesamt, Berlin, Rüdiger Berghahn, Jörn Wogram, Ronny Schmiediche, Ralf Schmidt, Umweltbundesamt, Berlin	Regulative Stoffbewertung und Monitoring: Neue Impulse durch REACH Christiane Heiß, Umweltbundesamt, Dessau
9.50	Untersuchungen zur Oxidation der Farbstoffkomponente p- Phenylendiamin (PPD) unter anwendungsnahen Reaktionsbedingungen Klaus Fischer, Universität Trier, Stephan Elesenberg, Universität Trier	Sulfadiazin in Ackerböden: Mechanismen und Modellierung der Wirkung auf Umweltmikroorganismen Andreas Focks, Universität Osnabrück, Jörg Klasmeier, Universität Osnabrück, Michael Matthies, Universität Osnabrück	Ein semi-quantitativer Ansatz zur Abschätzung erhöhter Toxizität bei Tetrahymena pyriformis Norbert Ost, UFZ Leipzig, Ralph Kühne UFZ Leipzig, Ralf-Uwe Ebert, UFZ Leipzig, Gerrit Schüürmann, UFZ Leipzig
10.10	Eliminiation of organic micro- pollutants in a full scale waste- water treatment plant using ozonation  Juliane Hollender, EAWAG, Dübendorf, CH, Beate Escher, Stephan Koepke, Martin Krauss, Christa S McArdell, Christoph Ort, Hansruedi Siegrist, Heinz Singer, Marc Suter, Urs von Gunten, Saskia G. Zimmermann EAWAG, ETH Zürich	Genetic erosion – eine unterschätzte Gefahr für belastungsexponierte Populationen? Carsten Nowak, Forschungsinstitut Senckenberg, Gelnhausen	Recent Developments in the European Union regarding Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Rupert Simon, EU, Geel, B, Ruis Jose Gomez, Laszlo Angel Hollosi
10.30	Kaffeepause/ Postersession		
	Session 9b: Technische Lösungen, Leitung: Adriano Joss, Hansruedi Siegrist	Session 11: Sozial-ökologische Ansätze/integrative Lösungen, Leitung: Florian Keil, Martin Scheringer	Session 13: Integrative Expositionserfassung, Leitung: Oliver Licht, Annekatrin Dreyer
11.00	Vergleichende ökotoxikologische Bewertung von ozoniertem und konventionell behandeltem Abwasser  Axel Magdeburg, Universität Frankfurt am Main, Daniel Stalter, Universität Frankfurt am Main, Mirco Weil, ECT Flörsheim, Thomas Knacker, ECT Flörsheim, Jörg Oehlmann, Universität Frankfurt am Main	Ökotoxikologische Untersuchungen und Effekt-dirigierte Analysen zur Bewertung des Konfliktpotentials zwischen der Errichtung von Retentionsräumen und der Sicherstellung der Trinkwasserversorgung Jan Wölz, RWTH Aachen, Katja Großhans, RWTH Aachen, Urte Luebcke-Von Varel, UFZ Leipzig, Tobias Schulze, UFZ Leipzig, Sibylle Maletz, RWTH Aachen, Lisa Bragenheim, Universität Heidelberg, Werner Brack, UFZ Leipzig, Henner Hollert, RWTH Aachen	BCF – Wert Bestimmung von Substanzen in Zebrafischeiern (Danio rerio) Rene Schreiber, UFZ Leipzig, Rolf Altenburger, UFZ Leipzig, Albrecht Paschke, UFZ Leipzig, Gerrit Schüürmann, UFZ Leipzig, Eberhard Küster, UFZ Leipzig

# Donnerstag, 25.09.2008

Zeit	Festsaal 1	Raum 1.811	Raum 1.812
11.20	Ozon-Applikation in Abwasser – Ökotoxikologische Evaluation Mirco Bundschuh, Universität Landau, Ralf Schulz, Universität Landau	Qualitätskriterien für Chemi- kalienleasing - ein Geschäfts- modell für eine nachhaltige Chemie Susanne Walther-Rohde, Umweltbundesamt, Dessau, Steffi Richter, Umweltbundesamt, Dessau, Reinhard Joas, BiPRO München	Berücksichtigung verschiedener biologischer Integrationsebenen und Umweltkompartimente im geschlossenen aquatischen Labor-Mehrartensystem AquaHab® und ihre Bedeutung für die prospektive Chemikalienbewertung  Matthias Dünne, OHB-System AG, Bremen, Klaus Slenzka, OHB-System AG, Bremen
11.40	Möglichkeiten zur Elimination von Arzneimitteln aus Kranken- hausabwasser Silvio Beier, RWTH Aachen, Johannes Pinnekamp, Horst Fr.Schröder, Wilhelm Gebhardt, Claudia Cramer, Uwe Bieling, Aachen; Christian Mauer, Essen; Friedhelm Courth, Waldbröl; Martin Weber, Gummersbach; Jörg Mielcke, Herford; Dorothea Selke, Düsseldorf	Vortrag zum Themenfeld Sozialökologie (genauer Titel folgt) Engelbert Schramm, ISOE Frankfurt am Main	Modellierung von Fremdstoffen in Fließgewässern: ein MCMC-Ansatz Modeling foreign substances in riversystems: MCMC approach Ronja Düffel, Universität Frankfurt am Main, Kristin Quednow, Universität Frankfurt am Main, Dirk Metzler, Universität Frankfurt am Main
12.00	Aktivkohleanwendung in der kommunalen Abwasserbehandlung Steffen Metzger, FH Biberach, Helmut Kapp, FH Biberach	Gesellschaftlicher Umgang mit Komplexizität und Unsicherheit Anforderung an vorsorgeorientierte Risikobewertungsverfahren Immanuel Stieß, ISOE Frankfurt am Main, Florian Keil, ISOE Frankfurt am Main	Consumer Exposure to Bisphenol A: Total Exposure Levels relating to Everyday Life of the General Western European Population Natalie von Götz, ETH Zürich, Matthias Wormuth, ETH Zürich, Martin Scheringer, ETH Zürich, Konrad Hungerbühler, ETH Zürich
12.20	Mittagspause		
13.30	Exkursionen (Senckenb	erg-Museum, Kläranlage Wiesbaden, F	Palmengarten Frankfurt)
19.30		Dinner Party im SCHIRN-Restaurant	

# Freitag 26.09.08

Zeit	Festsaal 1	Raum 1.811	Raum 1.812
	Session 14: Ökotoxizität von Mischungen, Leitung: Bettina Hitzfeld, N.N.	Session 15: Polyfluorierte Substanzen, Leitung: Ralf Schulz, Ralf Ebinghaus	Session 16: Sekundäres organisches Aerosol, Leitung: Hartmut Herrmann, Peter Wiesen
9.00	Migration of Endocrine disruptors from food packaging materials: The case of mineral water Martin Wagner, Universität Frankfurt am Main	Modellierung der Umweltver- teilung von PFOA Irene Stemmler, MPI für Meteoro- logie, Hamburg, Gerhard Lammel Masaryk University, Brno, CZ und MPI f. Chemie, Mainz	Secondary Organic Aerosols from Plant Emissions: A Study of Atmosphere-Biosphere Couplings in the Jülich Plant Chambers Thomas Mentel, Astrid Kiendler-Scharr, Jürgen Wildt, alle Forschungszentrum Jülich
9.20	"Chemo-Sensitivierung": Ein Mechanismus hinter der toxischen Wirkung von Chemikalienmischungen Till Luckenbach, Mady Ahnert, Stephan Fischer, alle UFZ Leipzig, Kristin Schirmer EAWAG, Kathrin Schlüssler, Robert Suchsland, alle UFZ Leipzig	Jahresgänge der Luftkonzen- trationen polyfluorierter Verbin- dungen an 2 Standorten bei Hamburg Annekatrin Dreyer, GKSS, Geesthacht, Christian Temme, GKSS, Geesthacht, Ralf Ebinghaus, GKSS, Geesthacht	Chemistry of Secondary Organic Aerosols Thorsten Hoffmann, Universität Mainz, Jörg Warnke, Universität Mainz, Christopher Kampf, Universität Mainz, Lars Müller, Universität Mainz, Christopher Reinnig, Universität Mainz

# Aus der Fachgruppe

# Freitag 26.09.08

Zeit	Festsaal 1	Raum 1.811	Raum 1.812
9.40	Ökotoxizität und Metalleintrag in esterbasierten Schmierfluidmischungen nach ihrem Einsatz im Tribosystem  Jana Bressling, RWTH Aachen, Sabrina Michael, RWTH Aachen, Wolfgang Dott, RWTH Aachen, Patrick Mattfeld, RWTH Aachen, Fritz Klocke, RWTH Aachen, Carsten Warnke, RWTH Aachen, Kirsten Bobzin, RWTH Aachen, Marko Küppers, RWTH Aachen, Lasse Greiner, RWTH Aachen, Marcel Liauw, RWTH Aachen, Sonja Einsporn, RWTH Aachen	Der Beitrag volatiler Vorläufer- ubstanzen (Fluortelmeralkohole und Perfluorsulonamidoethanole) zur Deposition von Perfluorotan- äure in der Arktis  Martin Scheringer, ETH Zürich, CH, Urs Schenker, ETH Zürich, CH, Matthew MacLeod, ETH, CH, Zürich, Konrad Hungerbühler, ETH Zürich, CH, Ian Cousins, Universität Stockholm, S, Jonathan Martin, Universität Alberta, Kanada	Recent Advances in Molecular Characterization of monoterpene SOA Constituents Yoshiteru linuma, IfT Leipzig, Olaf Böge, IfT Leipzig, Ariane Kahnt, IfT Leipzig, Hartmut Herrmann, IfT Leipzig
10.00	Wirkungen dreier Abfälle auf Bodenorganismen und Pflanzen: Ergebnisse eines internationalen Ringtests Corinna Firla-Heß, ECT Flörsheim, Andreas Haller, ECT Flörsheim, Thomas Moser, ECT Flörsheim, Jörg Römbke ECT Flörsheim, Adam Scheffczyk, ECT Flörsheim	The Elimination and Mineralisation of Fluorinated Surfactants Contained in Wastewater, Surface and Groundwater by Physicochemical Treatment Horst Schröder, RWTH Aachen	Numerische Simulationen zur räumlichen und zeitlichen Verteilung von sekundärem organischem Aerosol auf der regionalen Skala Bernhard Vogel, Forschungszentrum Karlsruhe
10.20	Untersuchungen zur akuten und chronischen Toxizität organicher Lösemittel für die Substanzestung in der aquatischen Ökotoxikologie Tania Jarosz, BASF SE, Limburgerhof, Lennart Weltje, BASF SE, Limburgerhof	Rekonstruktion der räumlichen und zeitlichen Belastung von Nord- und Ostsee mit polyfluorierten organischen Verbindungen anhand von Robbengewebeproben Lutz Ahrens, GKSS, Geesthacht, Zhiyong Xie, GKSS, Geesthacht, Renate Sturm, GKSS Geesthacht, Ralf Ebinghaus GKSS, Geesthacht	
10.40	Kombinationswirkungen von Umweltchemikalien: Ein Verfah- rensvorschlag zur Regulation aus dem Forschungsprojekt INTAFERE Patrizia Di Benedetto, Universität Frankfurt am Main, Jörg Oehlmann, Universität Frankfurt am Main	Biological effects of perfluorinated chemicals (PFCs) Susanne Jernbro, Universität Heidelberg, Henner Hollert, RWTH Aachen, Thomas Braunbeck, Universität Heidelberg	
11.00		Kaffeepause/ Postersession	
12.00	Abschlussveranstaltung (Preise, Diskussion, Fazit)		Fazit)
13.00		Ende der Veranstaltung	

# Aus der Fachgruppe







## **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)

#### Anreiseinformationen

Bei Ankunft am Hauptbahnhof:

S-Bahnen 1/2/3/4/5/6/8 über Hauptwache zur Konstabler Wache, Aufstieg zur Bushaltestelle in der Kurt-Schuhmacher-Straße zur Buslinie 36 mit Fahrtziel Westbahnhof, Ausstieg an der Haltestelle Oberlindau/Universität.

# Anreise mit dem PKW:

Über die Autobahn **A5** bis Abfahrt **Nordwestkreuz**; auf die Autobahn **A66** in Richtung **Miquel-Allee**, am **Autobahnende** (Kreuzung **Hansaallee**) nach rechts; nach der zweiten Ampel rechts in die **Bremer Straße**; nächste Ampel rechts in die **Fürstenberger Straße**.

#### Bitte beachten Sie:

Die Anzahl der Teilnehmer ist auf 300 begrenzt.

Die Anmeldung ist nur online (<a href="www.setac-glb.de">www.setac-glb.de</a>) möglich. Anmeldungen für Vorträge und Poster ist leider nicht mehr möglich.

Sie erhalten einige Wochen nach Registrierung eine **Rechnung.** 

# Einladung zur Mitgliederversammlung der Fachgruppe

Im Namen des Fachgruppenvorsitzenden Herrn Professor Lammel laden wir Sie herzlich zur Mitgliederversammlung der GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie ein. Die Versammlung findet statt in Verbindung mit der 3. gemeinsamen Jahrestagung der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie und SETAC-GLB am 24. September 2008 um 17.20 Uhr im Casino-Gebäude der Universität Frankfurt, Campus Westend, Grüneburgplatz 1,in 60323 Frankfurt.

#### Tagunsordnung:

- 1. Aktivitäten der Fachgruppe (Gerhard Lammel)
- 2. Mitteilungsblatt der Website (Klaus Fischer)
- 3. Berichte aus den Arbeitskreisen
- 3.1: Atmosphärenchemie (Hartmut Herrmann)
- 3.2: Bodenchemie und Bodenökologie (Robert Kreuzig)
- 3.3: Chemikalienbewertung (Martin Scheringer)
- 3.4: Forschung und Lehre (Wilhelm Lorenz)
- 3.5: Umweltmonitoring (Heinz Rüdel)
- 4. Verschiedenes

# **Arbeitskreis Chemikalienbewertung**

Neuwahl des Arbeitskreisvorstandes

Die Mitglieder des Arbeitskreises haben für die Jahre 2009 bis 2012 per Briefwahl folgenden Vorstand gewählt:

- zum Vorsitzenden:
   Prof. Dr.-Ing. Adolf Eisenträger, UBA, Dessau
  - und zu den beiden Stellvertretern: Dr. Rüdiger Vincent Battersby, EBRC Consulting GmbH, Hannover

Dr. Stefan Hahn, ITEM, Hannover

# **Kurz vorgestellt**

# Lehrstuhl für Landschaftsökologie der Hochschule Vechta

Winfried Schröder (winfried.schroeder@uni-vechta.de), Vechta



Der Lehrstuhl für Landschaftsökologie (LLÖK) der Hochschule Vechta verfügt über langjährige wissenschaftliche Kenntnisse und praktische

Erfahrungen aus zahlreichen Projekten, die von EU BMU, BMBF, DFG und Landesbehörden gefördert wurden. Die Forschungsschwerpunkte sind:

- Umweltmonitoring,
- Ökosystemforschung,
- Umweltinformationssysteme / Umweltstatistik sowie die Kartierung mariner und terrestrischer Biotope.

Hierbei kommen zur Analyse und Verarbeitung der Umweltdaten Verfahren der multivariaten Statistik und der Geostatistik ebenso zum Einsatz wie Geografische Informationssysteme, relationale Datenbanken und Internettechnologien. In der Lehre sowie bei der Weiterbildung von Externen (Behörden, Lehrer) werden diese Kenntnisse und Methoden weitervermittelt und einer breiten Anwenderschaft zugänglich gemacht.

In den Jahren 2000 und 2005 hat das das LLÖK im Auftrag des Umweltbundesamtes (UBA) die bundesweiten Moos-Monitoring-Kampagnen im Rahmen des UN ECE Heavy Metals in Mosses Surveys geleitet. Neben der bundesweiten Bestimmung der Stickstoffgehalte in Moosen zählte die räumliche Vernetzung des Moos-Messnetzes mit Standorten der ICP-Programme Forests Level II und Integrated Monitoring, der Umweltprobenbank sowie des Luftmessnetzes des UBA zu den wichtigsten neuen Ergebnissen aus der Kampagne 2005. Aktuell wurde gerade erstmals – ebenfalls im Auftrag des UBA – eine Studie zur Verknüpfung von terrestrischen Umweltdaten mit den Daten des Human-Biomonitoring durchgeführt, die in den vergangenen Jahren im Rahmen des bundesweiten Kinder-Umwelt-Surveys (KUS) gewonnen wurden.

Ein weiterer Schwerpunkt des LLÖK ist die Entwicklung von Internet-fähigen Informationsportalen, die den technischen Standards von PortalU entsprechen: Für das Moos-Monitoring wurde für die nach den von PortalU vorgegebenen Standards das webbasierte Geografischen Informationssystem WebGIS "MossMet" entwickelt. Es umfasst ein Dateneingabe-Tool, das eine standardisierte Datenzusammenführung garantiert, sowie Messdaten, Standortbeschreibungen und rund 60 relevante Themenkarten (Topografie, Landnutzung, Böden etc.) enthält. Das WebGIS "MossMet" erlaubt definierten Nutzergruppen den effizienten Austausch und die Analyse von standortspezifischen Metadaten und Messergebnissen über eine nutzerfreundliche Formular- und Kartenoberfläche.

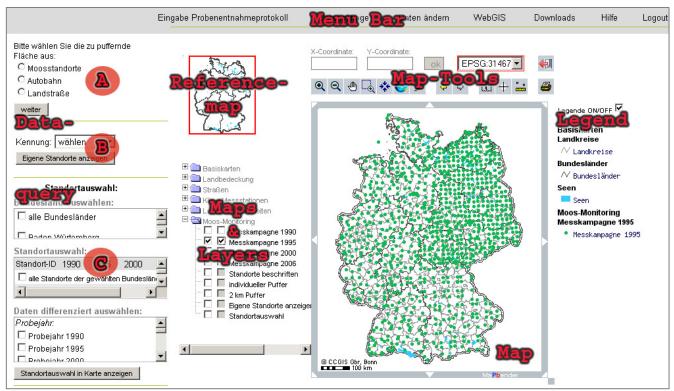
Die Untersuchungen möglicher Folgewirkungen eines großflächigen Anbaus von gentechnisch veränderten Organismen (GVO) in Deutschland und Europa sind ein weiterer Schwerpunkt der Arbeiten des LLÖK. Auch hierfür wird derzeit in einem vom BMBF geförderten Projekt ("GeneRisk") eine WebGIS-Plattform für das Monitoring von GVO entwickelt. Mit Hilfe von geostatistischen und multivariat-statistischen Verfahren sowie unter dem Einsatz von GIS wurden repräsentative Standorte für die Modellierung der Ausbreitung von GVOs bestimmt und die Modellierungsergebnisse flächenhaft extrapoliert sowie mögliche naturschutzspezifische Nutzungskonflikte aufgedeckt. Zu diesem Zweck wurden auch bundes- und europaweite ökologische Raumgliederungen verwendet, die ebenfalls im Hause entwickelt wurden und flächenhafte Informationen über potenziell natürliche Vegetation, Bodenverhältnisse, Klima orografische Höhe mit Hilfe eines statistischen Entscheidungsbaummodells in einer Karte integrieren. Auch für die forstliche Umweltbeobachtung wird derzeit eine anschlussfähige WebGIS-Applikation "PortalForst" in einem von der DFG geförderten Projekt ("Evaluierung von Hypo-thesen und Entwicklung eines Referenzdatensystems zum Zustand von Waldökosystemen anhand von Langzeitdaten der Walddauerbeobachtung") entwickelt.

Der Lehrstuhl für Landschaftsökologie beschäftigt sich schon seit mehreren Jahren mit biologischen Wirkungen des Klimawandels auf die Entwicklung von Pflanzen und Tieren oder human- und tiermedizinisch relevante Vektoren. Dazu wurden für das gesamte Bundesgebiet klimatologische und phänologische Messdaten zusammengeführt, geostatistisch kartiert und statistisch zueinander in Beziehung gesetzt. Aus dem von der DFG geförderten Projekt "Klimawandel und Pflanzenphänologie" können in diesem Zusammenhang Ergebnisse genutzt werden, welche den Einfluss des Klimas räumlich hoch aufgelöst abbilden. Hierbei handelt es sich um Karten, die aus pflanzenphänologischen Daten des Deutschen Wetterdienst (DWD) - an bis zu 6.400 Standorten Deutschlands seit 1951 erhoben - vom LLÖK geostatistisch berechnet wurden. Für Handlungsempfehlungen zur Anpassung an den Klimawandel kann die räumliche Auflösung dieser Informationen durch Karten über die Korrelation der Pflanzenphänologie mit ebenfalls geostatistisch regionalisierten meteorologischen Messdaten erheblich gesteigert werden. Dies hat u.a. für das Precision Farming eine große Praxisrelevanz, da diese hoch aufgelösten Daten wichtige Kenngrößen für die Steuerung von Landmaschinen (Mähdrescher etc.) bilden.

Abiotische Folgen des Klimawandels wie temperaturabhängige Stoffumsätze in Böden oder in Waldökosystemen als Kohlenstoffspeicher wurden bereits für einzelne Bundesländer (Schleswig-Holstein, Nordrhein-Westfalen) erfolgreich untersucht. Die Auswirkungen des prognostizierten Klimawandels auf den Bodenwasser- und -stoffhaushalt wurden mit dem GIS-gekoppelten Modellsystem WASMOD untersucht. Ziel dieser Untersuchungen war die Prognose des Austrags von Phosphor (P) und Stickstoff (N) in das Grundwasser. Hierfür wurden Daten der Agrarstatistik, des Deutschen Wetterdienstes, der REMO-Klimaprognosen sowie der Reichsbodenschätzung verwendet.

#### Weitere Informationen unter:

http://www.uni-vechta.de/landschaftsoekologie http://www.mapserver.uni-vechta.de



Anwenderoberfläche des WebGIS "MossMet"

# Korrespondenzadresse:

Prof. Dr. Winfried Schröder Hochschule Vechta, Postfach 1553, 49364 Vechta Tel. 04441-15559, FAX 04441-15583

# Kurznachrichten

# UBA-Forschungsbericht 206 67 470 erschienen

Charakterisierung endokrin vermittelter Wirkungen in Fischen: Relevante Parameter für die Entwicklung einer neuen OECD-Testmethode und die Anwendung in der gesetzlichen Umweltrisikobewertung (FKZ 206 67 470)

Die bisher vorliegenden Anwendungserfahrungen von Lebenszyklus-Studien mit Fischen bei endokrin wirksamen Substanzen wurden gesammelt und verglichen, um allgemeine Aussagen zur Empfindlichkeit von Endpunkten ableiten und Bewertungsunsicherheiten reduzieren zu helfen. Charakteristische populationsrelevante und indikative Endpunkte wurden für die relevanten sexual-endokrinen Wirkmechanismen herausgearbeitet und ein Vergleich der Empfindlichkeiten vorgenommen. Verwendet wurden Daten aus Full Life Cycle Tests (FLCT) und Zwei-Generationen-Tests des Fraunhofer IME und aus der Literatur. Anhand der Ergebnisse erfolgte anschließend eine Einordnung von Studiendaten aus FLCT aus der Datenbank des Umweltbundesamtes. Im zweiten Teil der Studie wurden Biomarkermessungen aus Fish Screening Assays (FSA) den Effektdaten von populationsrelevanten Endpunkten aus FLCT gegenübergestellt und bezüglich Empfindlichkeit und Vorhersagepotenzial bewertet. Auf der Grundlage der Resultate wurde ein Vorschlag für eine gestufte Teststrategie für potenziell sexual-endokrin wirkende Stoffe vorgelegt.

Für Interaktionen mit dem Östrogenrezeptor (ÖR) stellt die Sexualentwicklung das empfindlichste Expositionsfenster da. Eine sexual-endokrine Wirkung manifestiert sich am empfindlichsten im Reproduktionsparameter Befruchtungsrate; die Sensitivitäten von Wachstum und Geschlechtsentwicklung liegen nah daran. Ein FSA mit Erfassung der Blutkonzentration von Vitellogenin (VTG) als Wirkindikator reagiert vergleichbar empfindlich und lässt keine falsch negativen Ergebnisse erwarten. Die Androgenrezeptor-(AR-) Interaktionen müssen nach agonistischer und antagonistischer Wirkweise unterschieden werden. VTG ist hier als Biomarker nicht immer aussagekräftig. Der empfindlichste populationsrelevante Endpunkt für den untersuchten AR-Antagonisten ist die Fekundität.

Empfindlicher indikativer Endpunkt im FSA und Zwei-Generationen-Test ist das Sexualsteroid 11-keto-Testosteron. Bezüglich der AR-Agonisten ist die Sexualentwicklung das empfindlichste Belastungsfenster und das Geschlechterverhältnis der sensitivste Endpunkt, ausreichend empfindliche Biomarker wurden nicht untersucht. Auch für die Aromatase-Inhibitoren ist die Sexualentwicklung das empfindlichste Belastungsfenster.

Eine sexual-endokrine Wirkung manifestiert sich in unterschiedlichen Endpunkten, deren Empfindlichkeit in den

untersuchten Tests meistens nur eine Konzentrationsstufe auseinander lag: In einer Verschiebung des Geschlechterverhältnisses, in Wachstumsverzögerungen oder einer Reduktion der Eizahl. VTG als Wirkindikator reagierte empfindlich im FSA. Die untersuchten Fischspezies reagieren grundsätzlich ähnlich empfindlich auf Hormonrezeptor-Interaktionen. Die Ausprägung der Wirkungen kann differieren. So reagieren Medaka und Dickkopfelritze mit einer Verweiblichung auf ÖR-Agonisten, während der protogyne Zebrabärbling mit einer Verzögerung oder Hemmung der männlichen Entwicklung reagiert; auf Aromatase-Hemmer scheint der Zebrabärbling empfindlicher mit einer Vermännlichung zu reagieren, während die Dickkopfelritze empfindlicher mit reduziertem juvenilen Wachstum reagiert.

Die Frage nach der Notwendigkeit eines Zwei-Generationen-Tests anstelle eines FLCT hängt von der Relevanz maternalen Transfers von Wirkungen ab und kann aufgrund der fehlenden Vergleichbarkeit der Daten nicht geklärt werden. Um ein verkürztes Testverfahren anstelle des FLCT oder Zwei-Generationen-Tests anzuwenden bedarf es genauer Informationen über den vorliegenden Wirkmechanismus und des Nachweises, dass das Verfahren das empfindlichste Expositionsfenster und den empfindlichsten populationsrelevanten Endpunkt für diesen Wirkmechanismus erfasst. Partielle Life Cycle Tests (Kurzzeit-Reproduktionstests) sind daher immer ungeeignet. Der Fish Sexual Development Test (FSDT) kann für AR-Agonisten und Aromatase-Hemmer ausreichen. Ein Early Life Stage oder Juvenile Growth Test kann für DMI-Fungizide eine ausreichend sichere Extrapolation auf FLCT-Ergebnisse ermöglichen, um eine vorläufige Risikobewertung im Zulassungsverfahren vorzunehmen.

Der Bericht im Umfang von 97 Seiten, erschienen im September 2007, kann kostenlos über den Link <a href="http://www.umweltdaten.de/publikationen/fpdf-l/3483.pdf">http://www.umweltdaten.de/publikationen/fpdf-l/3483.pdf</a> heruntergeladen werden.

# BfR und UBA empfehlen, den Einsatz von Organozinnverbindungen in Verbraucherprodukten weiter zu begrenzen

Aktualisierte gemeinsame Stellungnahme Nr. 032/2008 des UBA und des BfR

Zusammenfassung. Organozinnverbindungen werden synthetisch hergestellt und in vielen Bereichen des täglichen Lebens eingesetzt. Ihre Toxizität ist sehr unterschiedlich. Einige dieser Verbindungen haben sich im Tierversuch als immunschädigend erwiesen. Für bestimmte Organozinnverbindungen belegen tierexperimentelle Daten eine nachteilige Wirkung auf die Fortpflanzung und auf das Kind im Mutterleib.

Von technischer Bedeutung sind Monobutylzinn- (MBT), Dibutylzinn- (DBT), Tributylzinn- (TBT), Monooctylzinn-(MOT), Dioctylzinn- (DOT) und Triphenylzinnverbindungen (TPT). Die di-substituierten DBT- und DOT-Verbindungen werden als Stabilisatoren in dem Kunststoff Polyvinylchlorid (PVC) eingesetzt. Sie sorgen dort für Hitze- und Lichtbeständigkeit und sind deshalb in Verpackungsmaterialien und in vielen anderen Verbraucherprodukten aus PVC enthalten. Als Katalysatoren werden sie bei der Herstellung von Polyurethanschäumen und Silikondichtungsmassen verwendet. Die tri-substituierten TBT- und TPT-Verbindungen wurden als Biozide eingesetzt. Seit September 2006 dürfen sie in der Europäischen Gemeinschaft für diesen Zweck nicht mehr vermarktet werden. Der Einsatz von Tributylzinnverbindungen (TBT) als Antifoulingmittel in Schiffsanstrichen wurde bereits 2003 verboten. Da diese Organozinnverbindungen sehr persistent sind und sich in Meeresorganismen anreichern, werden europäische Verbraucher sie trotz dieser Minimierungsmaßnahmen noch für längere Zeit über Fische, Fischereiprodukte und Meeresfrüchte aufnehmen. Substanzen tragen damit zur Gesamtbelastung Verbrauchers mit zinnorganischen Verbindungen bei. Ob weitere Minimierungsmaßnahmen erforderlich sind, um Verbraucher besser vor möglichen gesundheitlichen Risiken zu schützen, wird aktuell auch auf europäischer Ebene diskutiert.

lm Auftrag der Europäischen Kommission wurden Bewertungsberichte erarbeitet, die unter verschiedene anderem Aufnahmeschätzungen und Optionen für weitere Beschränkungen von Organozinn-Anwendungen enthalten. Die Berichte beschränken sich auf Tributyl- (TBT), Triphenyl-(TPT), Dibutyl- (DBT) und Dioctylzinnverbindungen (DOT). Da die immunschädigende Wirkung dieser Verbindungen auf einem ähnlichen Wirkmechanismus beruht, ist eine Addition der Wirkungen wahrscheinlich. Die Autoren der Berichte deshalb vor, für die schlagen täglich tolerierbare Daily Aufnahmemenge (Tolerable Intake, TDI) zinnorganischen Verbindungen TBT, TPT, DBT und DOT einen Summenwert zugrunde 7U legen. Das Umweltbundesamt (UBA) und das Bundesinstitut für Risikobewertung (BfR) haben zu den Bewertungsberichten gemeinsam Stellung genommen. Die gemeinsame Bewertung von Stoffen mit ähnlicher Wirkung durch einen Gruppen-TDI halten beide Institute unter bestimmten Voraussetzungen für sinnvoll.

In seiner Expositionsabschätzung gelangt das BfR zu dem Ergebnis, dass einige verbrauchernahe Produkte so hohe Mengen an zinnorganischen Verbindungen freisetzen könnten, dass die täglich tolerierbare Aufnahmemenge unter worst-case-Bedingungen schon durch diese Produkte in hohem Maße ausgeschöpft wird. Das BfR sieht für Erwachsene in Produkten wie PVC-Handschuhen und Sandalen, 2-Komponenten-Silikonmassen sowie Hygieneprodukten für Frauen bedeutende Quellen für die Aufnahme dieser Substanzen. Bei Kindern können dies ebenfalls PVC-

Sandalen sein, daneben aber auch T-Shirts (mit PVC-Aufdrucken), Windeln und PVC-Spielzeug, das kleinere Kinder in den Mund nehmen

Da Verbraucher mit zinnorganischen Verbindungen nicht nur über verbrauchernahe Produkte in Kontakt kommen, sondern auch über die Umwelt, resultiert insgesamt eine hohe Belastung. UBA und BfR empfehlen deshalb, auf die Verwendung von DOT- und DBT-Verbindungen als Stabilisatoren in PVC- und Weich-PVC-Verbraucherprodukten zu verzichten und sie in spezifischen Verbraucherprodukten zu begrenzen, wenn sie zu mehr als 10 Prozent zur TDI-Auslastung beitragen könnten, um eine Überschreitung der täglich tolerierbaren Aufnahmemenge aus allen Quellen zu verhindern. Eine Reduktion der Anwendung kann außerdem über die Einstufung und Kennzeichnung von DBT-Verbindungen als reproduktionstoxische Stoffe der Kategorie 2 erreicht werden.

Die vollständige, 15 Seiten umfassende und am 29.05.2008 aktualisierte Stellungnahme ist über die Homepages von UBA und BfR zugänglich.

# BfR empfiehlt europaweit einheitliche Regelung für den Einsatz neuer Duftstoffe in kosmetischen Mitteln

Stellungnahme Nr. 024/2008 des BfR vom 5. März 2008

Duftstoffe mit allergenem Potenzial müssen gekennzeichnet werden, sobald sie bestimmte Konzentrationen in kosmetischen Produkten überschreiten. In den kosmetikrechtlichen Vorschriften der EU sind 26 kennzeichnungspflichtige Duftstoffe aufgelistet. Allerdings ist diese Liste nicht vollständig. Neu entwickelte Duftstoffkomponenten fallen nicht unter die Deklarationspflicht, weshalb ungeprüfte Duftstoffe mit allergenem Potenzial auf den Markt gelangen könnten.

Ein neuer, noch nicht regulierter Duftstoff ist Majantol. Da Majantol bereits in vielen kosmetischen Produkten enthalten ist, hat das Bundesinstitut für Risikobewertung (BfR) das allergene Potenzial dieses Duftstoffes bewertet. Ergebnis der Bewertung war, dass Majantol ein allergenes Potenzial aufweist, obwohl auf molekularer Ebene kein Hinweis auf die Ursache erkennbar ist. Bei Allergikern kann der Duftstoff eine Kontaktdermatitis hervorrufen und zur Bildung von Ekzemen führen. Deshalb empfiehlt das BfR, das Auftreten von Kontaktallergien weiterhin durch epidemiologische Studien zu kontrollieren und gegebenenfalls die Liste der deklarationspflichtigen Duftstoffe fortzuschreiben.

# **Informationen**

# Hormonaktive Stoffe: Risiko für Mensch und Umwelt?

Zusammenfassender Bericht des Schweizer Nationalen Forschungsprogramms 50 (NFP 50) ,Hormonaktive Stoffe: Bedeutung für Menschen, Tiere und Ökosysteme' (Juni 2008)

Zusammenfassung. Stoffe mit hormoneller Aktivität können Menschen, Tiere und ganze Ökosysteme auf verschiedene Arten schädigen. Beim Menschen werden sie mit Entwicklungsstörungen im Mutterleib, sinkender Fruchtbarkeit sowie Brust-, Hoden- und Prostatakrebs in Verbindung gebracht. Nachgewiesen sind Fruchtbarkeitsstörungen wegen hormonaktiver Stoffe bei vielen Tierarten, vom Fisch bis zu Säugetieren im Meer und auf dem Land.

## ,Tarnkappen-Chemikalien'

Hormonaktive Stoffe schalten sich gemäß heutiger Kenntnis auf zwei Arten in den Hormonhaushalt ein: Gewisse Stoffe können an die Hormonrezeptoren in den Körperzellen andocken. Dort imitieren sie entweder die Wirkung eines Hormons oder sie blockieren den Rezeptor. Andere hormonaktive Substanzen stören den Transport oder den Auf- und Abbau von Hormonen im Körper.

Hormonaktive Stoffe können als 'Tarnkappen'-Chemikalien bezeichnet werden. Sie unterlaufen den 'Radar' der allgemeinen toxikologischen Sicherheitsprüfungen chemischer Substanzen. Der Ausdruck 'Tarnkappen'-Chemikalien lässt sich wie folgt illustrieren:

- i) Derartige Chemikalien können in Konzentrationen wirken, die mehrere Größenordnungen unterhalb der Schwelle der konventionellen Toxizität liegen.
- ii) Gewisse hormonaktive Stoffe wirken besonders schädlich im jenem engen Zeitfenster, in dem die embryonale, fötale und nachgeburtliche Entwicklung stattfindet. Außerhalb dieses kritischen Zeitfensters reagiert der Organismus weniger sensitiv auf diese Substanzen, selbst wenn deren Konzentration viel höher liegt.
- iii) Die Wirkung verschiedener hormonaktiver Stoffe addiert sich auf, wenn sie auf den gleichen Rezeptor wirken. Dadurch können diese in Mischungen wirkungsrelevante Konzentrationen erreichen, selbst wenn die Konzentrationen der Einzelstoffe nicht wirksam sind.
- iv) Hormonaktive Stoffe können nicht-genetische Änderungen in einem Organismus hervorrufen, die sich vererben und noch in späteren Generationen Auswirkungen haben. So hat eine kürzlich durchgeführte Studie an Ratten Effekte in Nachkommen bis zur vierten Generation nachgewiesen, wenn die Mutter im kritischen Zeitfenster mit hormonaktiven Stoffen in Berührung gekommen ist. Diese Entdeckung begründet einen Paradigmenwechsel in der Biologie und der Toxikologie.

Die Forschungsarbeiten im Rahmen des NFP 50 begannen 2002 und wurden Ende 2007 abgeschlossen. In drei Staffeln genehmigte die international zusammengesetzte Leitungsgruppe insgesamt 31 wissenschaftliche Projekte. Weiter wurden auf der Basis der Forschungsresultate gemeinsam mit Behörden und Industrie in drei Konsensplattformen Empfehlungen ausgearbeitet, die mithelfen sollen, negative Folgen hormonaktiver Chemikalien zu vermeiden.

#### Resultate in der Übersicht

(Schlusskurzberichte der Projekte siehe unter <a href="http://www.nrp50.ch/publications/final-summaries.html">http://www.nrp50.ch/publications/final-summaries.html</a>)

- Identifikation gewisser Chemikalien und Chemikaliengruppen als potenziell hormonaktive Stoffe (beispielsweise verschiedene UV Filter, bromierte Flammschutzmittel)
- Entdeckung neuer Wirkmechanismen und bisher unbekannter Wechselwirkungen zwischen hormonaktiven Stoffen und verschiedenen Rezeptoren (z.B. Corticoidrezeptor)
- Identifikation neuer potenzieller Aufnahmewege für hormonaktive Stoffe (z.B. Muttermilch, Haut) und der Wirkung beim Menschen
- Entwicklung neuer Nachweismethoden für hormonaktiver Stoffe und Modelliertechniken zur Wirkungsabschätzung (Zebrafisch als Biosensor, Elektrospray-Massenspektrometrie, In-silico-Methode zur Vorhersage von Struktur-Wirkungsbeziehungen)
- Daten zur Belastung von Gewässern mit hormonaktiven Stoffen
- Identifikation von ,Hot Spots' in der Umwelt und Stoffflussanalysen wichtiger hormonaktiver Substanzen als Grundlage für die Risikobeurteilung
- 7. Flächendeckende Daten zur Spermienqualität bei jungen Schweizer Männern (Zwischenresultate)

Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe in der Nahrung - Wissenschaftliches Gutachten des Gremiums für Kontaminanten in der Lebensmittelkette (CONTAM)

#### Gekürzte Zusammenfassung.

Im letzten Jahrzehnt wurden PAK vom International Programme on Chemical Safety (Internationales Programm für Chemikaliensicherheit, IPCS), dem Wissenschaftlichen Lebensmittelausschuss (SCF) und dem gemeinsamen FAO/ WHO-Sachverständigenausschuss für Lebensmittelzusatzstoffe (JECFA; Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additives) geprüft. Der SCF gelangte zu dem Schluss, dass für 15 PAK, und zwar Benz[a]anthracen, Benzo[b] fluoranthen, Benzo[i]fluoranthen, Benzo[k]fluoranthen, Benzo[g,h,i]perylen, Benzo[a]pyren, Chrysen, Cyclopenta[c,d] pyren, Dibenz[a,h]anthracen, Dibenzo[a,e]pyren, Dibenzo[a,h] pyren, Dibenzo[a,i]pyren, Dibenzo[a,l]pyren, Indeno[1,2,3c,d]pyren und 5-Methylchrysen, aus In-vivo-Tierversuchen eindeutige Nachweise einer Mutagenität/Genotoxizität in somatischen Zellen vorliegen. Diese PAK zeigen, mit Ausnahme von Benzo[g,h,i]perylen, außerdem eine eindeutige karzinogene Wirkung in verschiedenen Arten von Bioassays in Tierversuchen. Der SCF war daher der Ansicht, dass diese Verbindungen als potenziell genotoxisch und karzinogen für den Menschen zu betrachten sind und daher eine Prioritätsgruppe bei der Bewertung des Risikos langfristiger gesundheitlicher Schäden nach Aufnahme von PAK über die Nahrung darstellen. Der SCF schlug auf der Grundlage von Untersuchungen der PAK-Profile in der Nahrung und der Bewertung einer Karzinogenitätsstudie von zwei Steinkohleteergemischen bei Mäusen vor, Benzo[a] pyren als Marker für das Vorkommen und die Wirkung der karzinogenen PAK in Lebensmitteln heranzuziehen.

Mit den Bewertungen des IPCS und des SCF als Ausgangspunkt und unter Berücksichtigung neuerer Studien unternahm der JECFA 2005 eine erneute Bewertung der PAK. Insgesamt gelangte der JECFA zu dem Schluss, dass 13 PAK eindeutig genotoxisch und karzinogen sind. Mit Ausnahme von Benzo[g,h,i]perylen und Cyclopenta[c,d]pyren waren die Verbindungen dieselben, die auch vom SCF genannt wurden. Auch der JECFA schlug die Anwendung von Benzo[a]pyren als Marker für die Aufnahme und die Wirkung der 13 genotoxischen und karzinogenen PAK vor. Darüber hinaus empfahl der JECFA, als weitere Verbindung Benzo[c]fluoren in zukünftige Analysen einzubeziehen, da noch immer sehr wenige Daten über dessen Auftreten in der Nahrung vorliegen, Studien bei Ratten aber darauf hinweisen, dass Benzo[c]fluoren nach oraler Aufnahme von Steinkohleteer möglicherweise zur Bildung von Lungentumoren beiträgt.

Das Gremium für Kontaminanten in der Lebensmittelkette der EFSA (CONTAM-Gremium) überprüfte die vorliegenden Daten zu Vorkommen und Toxizität von PAK.

Dem CONTAM-Gremium zufolge sollte die Risikocharakterisierung auf solchen PAK beruhen, über deren orale Karzinogenität Daten zur Verfügung stehen, d. h. Benzo[a]pyren und die anderen PAK, die in den beiden von Culp et al. (1998) durchgeführten Karzinogenitätsstudien verwendeten Steinkohleteergemischen gemessen wurden: Benzo[b]fluoranthen, anthracen, Benzo[k]fluoranthen, Benzo[g,h,i]perylen, Chrysen, Dibenz[a,h]anthracen und Indeno[1,2,3-c,d]pyren. Das CONTAM-Gremium gelangte zu dem Schluss, dass diese acht PAK (PAK8), entweder einzeln oder in Kombination, derzeit die einzigen möglichen Indikatoren der karzinogenen Potenz von PAK in Lebensmitteln darstellen.

Abgesehen von der Summe der oben genannten acht PAK (PAK8) wurde die Summe von Benzo[a]pyren, Chrysen, Benz[a]anthracen und Benzo[b]fluoranthen (PAK4) sowie die Summe von Benzo[a]pyren und Chrysen (PAK2) berechnet. Die Korrelation zwischen PAK2 und PAK4 oder PAK8 betrug 0,92 und zwischen PAK4 und PAK8 0,99. Von den für PAK2 negativen Proben wiesen 26 % der auf alle PAK15 und 18 % der auf alle PAK8 getesteten Proben für mindestens einen weiteren PAK Konzentrationen über der Nachweisgrenze auf. Die Häufigkeit variierte hinsichtlich der einzelnen PAK oder der PAK-Kombinationen zwischen 2 % und 9 %. Von den für PAK4 negativen Proben wiesen 14 % der auf alle PAK15 und 6 % der auf alle PAK8 getesteten Proben für mindestens einen weiteren PAK Konzentrationen über der Nachweisgrenze auf. Die Häufigkeit variierte hinsichtlich der einzelnen PAK oder der PAK-Kombinationen zwischen 1 % und 6 %. Insgesamt gelangte das Gremium zu dem Schluss, dass PAK4 und PAK8 bessere Indikatoren für das Auftreten von PAK sind als PAK2.

Das CONTAM Panel kam zu dem Schluss, dass Benzo[a]-pyren kein geeigneter Indikator für das Vorkommen von PAKs in Lebensmitteln ist. Ausgehend von den derzeit vorliegenden Daten über Vorkommen und Toxizität folgerte das CONTAM-Gremium, dass PAK4 und PAK8 die geeignetsten Indikatoren für PAK in Lebensmitteln darstellen, wobei PAK8 gegenüber PAK4 keinen wesentlichen zusätzlichen Nutzen erbringt.

Die ungekürzte Zusammenfassung des Gutachtens, angefertigt im Auftrag der European Food Safety Authority (EFSA), ist betitelt "Scientific Opinion of the Panel on Contaminants in the Food Chain on a request from the European Commission on Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Food" und erschienen in *The EFSA Journal* (2008) 724.

# Tagungsankündigungen



# 9th. European Meeting on Environmental Chemistry

Girona, Catalonia, Spain from 3-6th December 2008

On the behalf of the European Association of Chemistry and the Environment (ACE), we are glad to invite you to participate in the 9th.

European Meeting on Environmental Chemistry.

EMEC9 will provide a forum for exchange of ideas on recent advances in research and development in environmental chemistry and technology. The main topics of interest are:

- Atmospheric chemistry
- · Pollutant chemistry
- · Aquatic and marine chemistry
- Soil chemistry
- · Soil water atmospheric systems
- · Biogeochemical cycling
- Ecotoxicology
- · Emerging contaminants
- · Analytical methods for environmental science
- · Clean technologies and green chemistry
- Waste treatment and management
- Water treatment and reuse

**Presentations format:** plenary lectures, oral communications and poster session.

This meeting will be hosted by **Metal and Environment Group** of Chemical Engineering Dept **University of Girona**.

	On or before 31 <sup>st</sup>	After 31 <sup>st</sup>
	October 2008	October 2008
Full registration	300 €	350 €
(ACE member)		
Full registration	350 €	400 €
Student	220 €	270 €
registration		
Student	270 €	320 €
registration		
(+ Membership of ACE)		
Accompanying	150 €	200 €
Person		

Further details can be found on the conference web site (http://www.udg.edu/deqata/mma/emec9). For specific information that you can not locate on the site contact the conference secretary (emec9@eps.udg.edu)





# MICROPOL & ECOHAZARD 2009

6th IWA/GRA Specialized Conference on Assessment and Control of Micropollutants/Hazardous Substances in Water

June 8-10, 2009 San Francisco, California, USA

Co-Organizers:

Malcolm Pirnie, Inc. | University of California at Berkeley
Federal Institute of Hydrology, Germany | United States
Environmental Protection Agency



Micropollutants and hazardous substances. including pharmaceuticals, biocides, fluorinated ingredients compounds and personal care products in wastewater, surface water, sediments,

ground water and drinking water present numerous technical and institutional challenges to society and environmental and public health professionals. In June 2007, the Micropol & Ecohazard 2007 Conference in Germany provided an international platform for drinking water and wastewater engineers, environmental chemists, water and wastewater utility managers, hydrogeologists, and ecotoxicologists to discuss the effects of micropollutants and hazardous substances and their removal from water systems. Because of the tremendous success of the 2007 conference, the International Water Association (IWA) has partnered with the Groundwater Resources Association of California (GRA) to invite you to attend Micropol & Ecohazard 2009 to be held in June 2009 in San Francisco, California. This threeday event will profile the latest developments in the detection, risk assessment, treatment and regulation of micropollutants and hazardous substances in water systems.

# **Conference Topics:**

## Environmental Chemistry

- Advances in analytical methods
- Occurrence, fate and transport, process studies
- Modeling approaches

## Toxicity and Risk Assessment

- Biological effects of micropollutants and hazardous chemicals in the environment
- Mixture toxicity
- Exposure and hazard assessment
- Ecological risk evaluation and assessment criteria for effluents
- Approaches to determine the toxicological relevance of micropollutants in drinking water

# Wastewater Treatment and Water Reuse

- New concepts and methods to reduce and/or remove micropollutants and hazardous chemicals from water
- Fate, transport, process kinetics, and modeling in wastewater treatment plants

- Treatment efficiencies, costs and resource/energy requirements
- Fate and removal in reuse and reclamation facilities, and soil aquifer treatment, ground water recharge and surface water replenishment efforts
- Stormwater overflow and sewer exfiltration

#### Drinking Water Treatment

- Fate and removal of micropollutants and hazardous chemicals during water treatment (and relevant water processes such as flocculation, ozonation, AOPs, GAC, PAC, nanofiltration, reverse osmosis and bank filtration)
- Formation of emerging disinfection byproducts during water treatment including those from the reaction of micropollutants with disinfectants

# Regulations and Management

- Wastewater, recycled water, ground water, surface water, drinking water
- Urban water management
- River basin management
- Source control

#### Emerging Issues

- Nanotechnology related industrial applications and environmental implications

Submit abstracts by e-mail to Mary Megarry (mmegarry@nossaman.com) no later than October 15, 2008

## **Important Abstract Deadlines**

- October 15, 2008: Abstract submissions due
- December 15, 2008: Abstract acceptance notifications distributed
- January 9, 2009: Acceptance to present deadline
- February 2, 2009: Final program distributed

# **Conference Contact Information**

Groundwater Resources Association of California

Attention: Mary Megarry

915 L Street, Suite 1000; Sacramento, CA 95814

Phone: +001 / 916-446-3626 Fax: +001 / 916-442-0382

E-Mail: mmegarry@nossaman.com

Homepage: <a href="http://www.grac.org/micropol.asp">http://www.grac.org/micropol.asp</a>



# 12th EuCheMS International Conference on Chemistry and the Environment

14-17 June 2009, Stockholm, Sweden







Swedish Chemical Society

European Association for Chemical and Molecular Sciences

#### **Topics**

This conference invites oral and poster contributions illustrating the importance of a range of important, novel issues related to chemicals and the environment. We particularly like to welcome presentations on emerging issues for all sessions during ICCE 2009. Please have a look under the special topics below for some more information. The program is relying on You and Your suggestions. We therefore hope that you will contribute to a successful meeting!



Photo: A. Colmsö

## **Analytical Methodology**

Improved methods for analysis, smaller sample amounts, lower detection- and quantification limits and robots in chemical analysis.

- Sampling
- Sample extraction and cleanup
- Compound identification and quantification
- Chemometrics Analysis of data

#### **Atmospheric Chemistry**

The focus of this topic is on chemical processes of relevance for aerosols and particles in the atmosphere. The fundamental importance of such particles for climate has made it an urgent matter to develop new techniques to further explore their chemical and physical properties.

- Interaction between the gas and particulate phases
- Determination of particulate organic compounds and black carbon ("soot")
- Assessment of particle morphology and state of mixture
- · Determination methods in precipitation chemistry

# Informationen

#### **Sustainable Chemistry**

Environmentally friendly synthetic methods and chemical products are of great importance for the development of a sustainable society. Green or sustainable chemistry is a tool for progressing towards this goal.

- · Chemical catalysis
- Recycling and the eco-cycle

#### **Inorganic Environmental Chemistry**

We would like to encourage contributions related to inorganic and materials chemistry, illustrating their importance in a sustainable society. This could include studies of metals in different environments as in the context of mining, processing, waste treatment but also natural waters.

- · Emerging metals in the environment
- · Recycling of metals
- · Mining, leaching and refining
- · New batteries and fuel cells
- Porous material
- Contaminated sites

## **Organic Environmental Chemistry**

This session will address the chemical phenomena and mechanisms governing the behaviour of organic contaminants in the environment. The session will focus on process understanding garnered from organic pollutants that is of emerging interest.

- Persistence and bioaccumulation: The underlying principles
- Emerging pollutants: New chemicals, new mechanisms
- · Assessment and characterisation of reactive compounds
- Biofuel combustion
- Contaminated sites

## **Chemical Environmental Toxicology**

This session addresses the chemical aspects of toxicant actions in humans and biological systems.

- Chemical methods for the identification of toxic compounds/metabolites
- · Metabolism/kinetics of toxic compounds
- Chemical interaction between toxicants and target molecules
- Novel approaches for the measurement of toxic compounds/metabolites in vivo.

#### In-silico tools in chemical risk assessment

This session will address how chemical understanding can be incorporated into computer-based tools that serve the risk assessment process.

- QSPRs and QSARs: Regression- or mechanism-based; is extrapolation possible?
- Fate and exposure models: expanding the chemical range
- PBPK modelling: Potential and limitations in environmental risk assessment

#### Chemistry in Conservation, Archaeology and Art

In this session we will discuss and explore the chemical problems in archaeology and art conservation in interdisciplinary studies of our cultural past. Recent research accomplishments will be highlighted to catalyse new interactions between the different fields in Archaeology, Archaeological and Art Conservation and Materials Science.

#### Contact

For further information, please, contact Ulrika Örn at the Swedish Chemical Society by e-mail: <a href="mailto:ulrika@chemsoc.se">ulrika@chemsoc.se</a> or phone: + 46 8 411 52 60.

Conference homepage:

http://www.chemsoc.se/sidor/KK/icce2009.htm