



Mitteilungen der Fachgruppe

Umweltchemie und Ökotoxikologie

Gesellschaft Deutscher Chemiker

- PAK in niedersächsischen Fließgewässern
- Non extractable residues
- Oxidation des Tolyfluorid-metaboliten
- Verleihung des Fachgruppen-Publikationspreises
- In memoriam
Dr. Thomas Knacker
- Tagungsankündigungen, Kurznachrichten
und Personalia



4/2011

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:

Der Fachgruppenvorsitzende, Prof. Andreas Schäffer, überreicht im Rahmen der ICCE 2011 den FG-Preis für die beste Publikation eines/r jungen Umweltwissenschaftlers/in an Dr. Karolina Nowak und Dr. Andreas Kretschmann

Originalbeiträge

- 82 **A.-K. Siemers et al.:** Vorkommen von heterocyclischen PAK in niedersächsischen Fließgewässern
- 86 **K. M. Nowak et al.:** Non-extractable residues formed during biodegradation of 2,4-D in soil are biogenic
- 88 **N. Schatz et al.:** Oxidation des Tolyfluoridmetaboliten N,N-Dimethylsulfamid (DMS)

FG-Beiträge in der ESEU

- 90 Stellungnahmen und Berichte der Fachgruppen-Arbeitskreise "Umweltmonitoring" und "Bodenchemie und Bodenökologie" (Abstract)

Aus der Fachgruppe

- 91 Verleihung des Fachgruppen-Publikationspreises 2011 an Dr. Karolina Nowak und Dr. Andreas Kretschmann
- 91 Protokoll des DFG Rundgesprächs am 08.07.2011 an der RWTH Aachen
- 92 Protokolle der Vorstandssitzung der GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie vom 15. Juli und
- 94 19.11. 2011

Kurz vorgestellt

- 96 Das Institut für Umweltforschung an der RWTH Aachen

Informationen

Tagungsankündigungen

- 99 Gordon Research Conference on Environmental Endocrine Disruptors, 3.-8.06.2012, West Dover, Vermont, USA
- 99 Conference "Urban Environmental Pollution", 17.-20.06.2012, Amsterdam
- 100 6th Int. Conference on Environmental Science and Technology, 25.-29.06.2012, Houston, Texas, USA
- 101 Eurosoil 2012, 2.-6.07.2012, Bari, Italien
- 102 4th European Chemical Societies Congress, 26.-30.08.2012, Prag
- 102 2nd Int. Conference on Environmental Pollution and Remediation, 28.-30.08.2012, Montreal, Canada

Tagungsberichte

- 103 Bericht vom 23. Int. Symposium über polycyclische aromatische Verbindungen in Münster, September 2011

Kurznachrichten

- 103 Neue VDI-Richtlinie zur Bioindikation: Probenahme von Brachsen (*Abramis brama*)
- 104 UBA-Presseinformation 56/2011: Mineralölfreie Farben für den Zeitungsdruck
- 104 UBA-Texte 63/2011 erschienen
- 105 Prognose der Konzentration von PSM-Wirkstoffen im Grundwasser

Personalia

- 106 In memoriam Dr. Thomas Knacker
- 107 Neue Fachgruppenmitglieder (Eintritte 12.07.-06.09.2011)
- 108 Geburtstag 1. Quartal 2012



Vorkommen von heterocyclischen PAK in niedersächsischen Fließgewässern

Anne-Kathrin Siemers¹ (Siemers@uni.leuphana.de), Jan Sebastian Mänz¹ (Maenz@uni.leuphana.de), Wolf-Ulrich Palm¹ (Palm@uni.leuphana.de), Dieter Steffen² (Dieter.Steffen@NLWKN-Hi.Niedersachsen.de), Wolfgang K. L. Ruck¹ (Ruck@uni.leuphana.de)

¹Leuphana Universität Lüneburg, Fakultät Nachhaltigkeit, Institut für Umweltchemie

²Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz, BSt. Hannover-Hildesheim, An der Scharlake 39, 31135 Hildesheim

Zusammenfassung

Polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK), insbesondere die 16 von der Environmental Protection Agency (EPA) definierten Leitsubstanzen (EPA-PAK), werden seit Jahrzehnten in Umweltproben analysiert. Die heterocyclischen PAK (HET) rückten durch die Untersuchung teerölkontaminierter Altlaststandorte und deren Sanierung in den wissenschaftlichen Fokus. In der vorliegenden Studie wurde erstmals großflächig das Vorkommen von HET in Fließgewässern untersucht. Dafür sind zwei analytische Methoden zur Extraktion von 86 Verbindungen aus wässrigen Proben im Konzentrationsbereich von wenigen ng L⁻¹ entwickelt und auf insgesamt 20 Proben aus acht niedersächsischen Flüssen angewandt worden. Die Ergebnisse zeigen, dass HET in vergleichbaren oder höheren Konzentrationen als EPA-PAK gefunden wurden und Stickstoff-Heterocyclen (N-HET) dominieren.

1. Hintergrund und Ziel

Zur Gruppe der Heterocyclen (HET) gehören alle polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffe, in denen zumindest ein Ring-Kohlenstoffatom durch ein Heteroatom, insbesondere durch ein Stickstoff-, Sauerstoff- oder Schwefelatom ersetzt ist. Besonders bei den Stickstoff-Heterocyclen (N-HET) resultiert daraus eine erhöhte Wasserlöslichkeit (Abb. 1). Die Toxizität dieser Verbindungen wurde in verschiedenen Studien belegt und einige Substanzen weisen sogar eine höhere Toxizität auf als die strukturanalogen homocyclischen PAK [1]. Die Ergebnisse aus den BMBF-Projekten KORA und RUBIN verdeutlichen die Relevanz dieser Verbindungen an teerölkontaminierten Altstandorten. Während der Massenanteil von HET in Teerölen bei ca. 5 % liegt, weisen die Schadstofffahnen im Grundwasser einiger Altlaststandorte Massenanteile zwischen 10 und 40 % auf [2].

Grenzen Altlasten unmittelbar an Fließgewässer, so sind sie als direkte Punktquellen anzusehen. Damit kann in Abhängigkeit von der Persistenz der Substanz von einem weiträumigen Transport in die aquatische Umwelt ausgegangen werden. Im Rahmen eines vom Niedersächsischen Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz (NLWKN) geförderten Forschungsprojektes wurden 2009 erstmalig umfangreiche Untersuchungen von 86 Substanzen der

Heterocyclen, Alkylphenole, EPA- und alkylierte PAK (siehe Tab. 1) in niedersächsischen Fließgewässern durchgeführt. Zusätzlich dazu wurden 2010 Wasserproben der Elbe und der Weser im Ästuar bis ca. 100 km flussaufwärts analysiert.

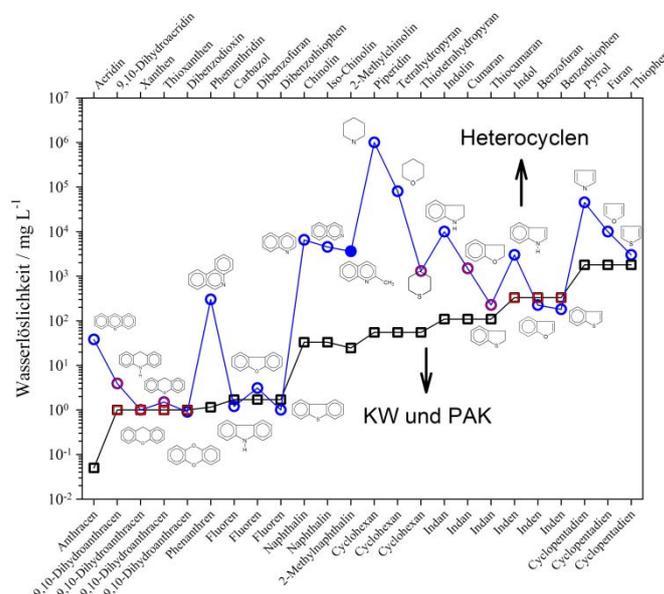


Abb. 1: Vergleich der Wasserlöslichkeiten einiger Heterocyclen (blaue Kreise) mit den entsprechenden PAK bzw. Kohlenwasserstoffen (schwarze Quadrate). Experimentelle Daten aus EPI-Suite [3], rote Symbole Schätzungen nach [3], 2-Methylchinolin (ausgefüllter Kreis) eigene Messungen.

2. Material und Methoden

2.1. Probenherkunft

Für die Messkampagne im Sommer 2009 wurden acht Flusswasserproben von Messstellen des niedersächsischen Gewässerüberwachungsprogrammes analysiert: Aller (Verden), Elbe (Schnackenburg), Ems (Herbrum), Ilmenau (Bienenbüttel), Jade (Hohenberge), Leine (Neustadt am Rübenberge), Oker (Groß Schwülper) und Weser (Drakenburg). Bei der Messkampagne im Herbst 2010 fand die Probenahme mit Hilfe des Forschungsschiffes Ludwig Prandtl des Helmholtz-Zentrums Geesthacht statt. Dabei wurde die Elbe entlang der Flusskilometer 609, 639, 669, 699 und 724, die Weser entlang der Flusskilometer 2, 32 und 72 beprobt und eine Probe in der Deutschen Bucht genommen.

Tab. 1: Analysiertes Substanzspektrum

Homocyclische PAK		Heterocyclische PAK		Alkylphenole
Naphthalin	2-Methylnaphthalin	1-Benzothiophen	6-Methylchinolin	Phenol
Acenaphthylen	1-Methylnaphthalin	2-Methylbenzothiophen	7-Methylchinolin	2-Methylphenol
Acenaphthen	Biphenyl	3-Methylbenzothiophen	3-Methylchinolin	3-Methylphenol
Fluoren	2-Ethyl-naphthalin	Dibenzothiophen	4-Methylchinolin	4-Methylphenol
Phenanthren	1-Ethyl-naphthalin	4,6-Dimethyldibenzo- thiophen	2,6-Dimethylchinolin	2,6-Dimethylphenol
Anthracen	2,7-Dimethylnaphthalin	Benzo(b)furan	2-Phenylpyridin	2,4-Dimethylphenol
Fluoranthren	2,6-Dimethylnaphthalin	2-Methylbenzofuran	3-Phenylpyridin	2,5-Dimethylphenol
Pyren	1,3-Dimethylnaphthalin	2,3-Dimethylbenzofuran	4-Phenylpyridin	3,5-Dimethylphenol
Benzo(a)anthracen	1,6-Dimethylnaphthalin	Dibenzofuran	Acridin	2,3-Dimethylphenol
Chrysen	1,4-Dimethylnaphthalin	Xanthen	9-Methylcarbazol	3,4-Dimethylphenol
Benzo(b)fluoranthren	2,3-Dimethylnaphthalin	2-Hydroxydibenzofuran	Phenanthridin	2,4,6-Trimethylphenol
Benzo(k)fluoranthren	1,5-Dimethylnaphthalin	Xanthon	Carbazol	2,3,6-Trimethylphenol
Benzo(a)pyren	1,2-Dimethylnaphthalin	Chinolin	9-Methylacridin	2,3,5-Trimethylphenol
Indeno(1,2,3-cd)pyren	1,8-Dimethylnaphthalin	Isochinolin	2-Hydroxycarbazol	3,4,5-Trimethylphenol
Dibenzo(a,h)anthracen	1-Indanon	Indol	Phenanthridinon	
Benzo(g,h,i)perylene	1-Cyanonaphthalin	2-Methylchinolin		
Indan	1-Naphthol	8-Methylchinolin		
Inden	2-Naphthol	3-Methylisochinolin		
2-Methylinden	1-Aminonaphthalin	1-Methylisochinolin		

2.2. Probenvorbereitung und Analytik

Das analysierte Substanzspektrum ist in Tab. 1 dargestellt. Neben den Heterocyclen wurden EPA-PAK, alkylierte PAK sowie Alkylphenole quantifiziert. Im Rahmen des Forschungsprojektes 2009 wurden zwei Verfahren für die Analytik der 86 Substanzen aus wässrigen Proben entwickelt. Sowohl die Flüssig-Flüssig- (LLE) als auch die Festphasen-Extraktion (SPE) lieferten mit einem Anreicherungsfaktor von 5000 Bestimmungsgrenzen zwischen 0,5 und 10 ng L⁻¹. Für das SPE-Verfahren wurden die Proben durch Filtration in Wasser- und Schwebstoffphase getrennt, während bei dem LLE-Verfahren die Gesamtprobe einschließlich Schwebstoff analysiert wurde. Die Analytik erfolgte über GC-MS. Für die Elbe/Weser-Kampagne 2010 wurde die SPE-Methode um eine Fraktionierung der Stickstoff-Heterocyclen erweitert, um eine empfindlichere Analytik über LC-MS/MS zu ermöglichen. Abgetrennte Schwebstoffe und Sedimente wurden separat extrahiert und analysiert (Ergebnisse hier nicht dargestellt).

3. Ergebnisse und Diskussion

HET wurden bislang nur wenig in der flüssigen Phase untersucht. Diese Studie liefert erstmals Konzentrationen dieser Substanzen in norddeutschen Fließgewässern. Hervorzuheben ist, dass in nahezu allen Wasserproben aus dem Jahr 2009 die Verbindung mit der höchsten Konzentration ein N-HET (Acridin, Chinolin bzw. 2-Methylchinolin) war. Während in der wässrigen Phase des Rheins keine Stickstoff-Heterocyclen gemessen werden konnten [4], wurden in den hier vorgestellten Messungen der niedersächsischen Fließ-

gewässer maximale Konzentrationen zwischen 8 – 20 ng L⁻¹ pro N-HET gefunden.

Abb. 2 und 3 zeigen Summenkonzentrationen des Substanzspektrums (Tab. 1) der in dieser Studie durchgeführten Messkampagnen. Da die Alkylphenole über das LLE-Verfahren, welches in der Niedersachsen-Kampagne 2009 benutzt wurde, nicht extrahierbar sind, werden deren Konzentrationen hier nicht dargestellt und diskutiert.

Vor allem vor dem Hintergrund der aktuellen Diskussion über die Beurteilung von prioritären Stoffen und deren Aussagefähigkeit bezüglich der Gewässergütebewertung [5], erscheinen weiterführende Forschungen und Diskussionen der HET notwendig. Insbesondere die in dieser Studie häufig Konzentrationsbestimmenden N-HET könnten eine besondere Relevanz bei der Bewertung der wässrigen Phase besitzen, da diese im Vergleich zu den EPA-PAK als gut wasserlöslich beschrieben werden. Ziel dieser Forschungen ist es, geeignete Leitsubstanzen ergänzend zu den EPA-PAK zu identifizieren.

Danksagung

Besonderer Dank gilt dem Niedersächsischen Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz (NLWKN) für die Bereitstellung von Forschungsmitteln im Jahr 2009 und dem Helmholtz-Zentrum Geesthacht (HZG) für die Probenahme 2010 mit Hilfe des Forschungsschiffes Ludwig Prandtl.

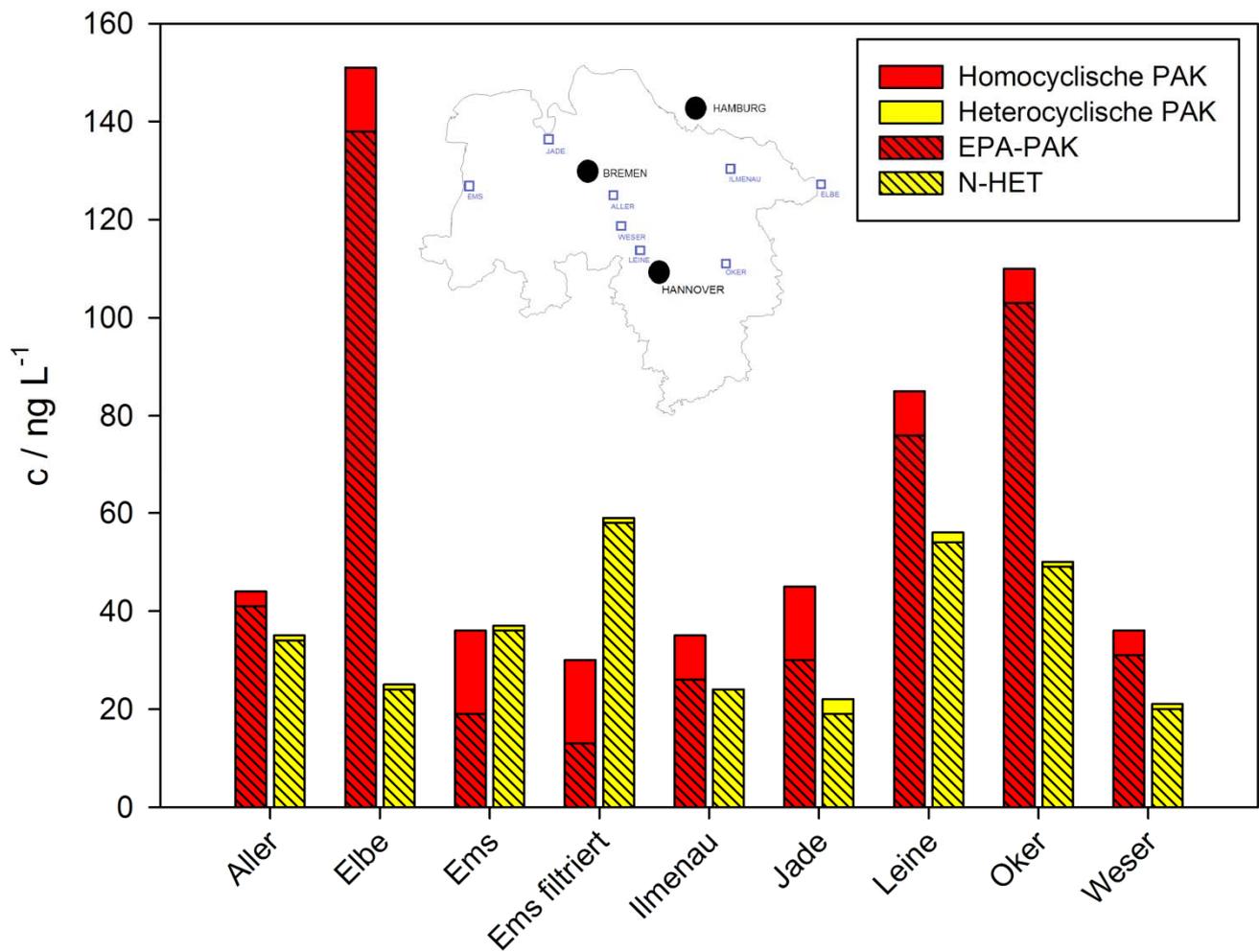


Abb. 2: Niedersachsen-Kampagne 2009, extrahiert mittels LLE-Verfahren. Summenkonzentrationen der homo- und heterocyclischen PAK und Anteile der EPA-PAK bzw. der N-HET in ng L^{-1} . Bei der Addition wurden nur blindwert- und wiederfindungskorrigierte Konzentrationen oberhalb der Bestimmungsgrenze berücksichtigt. Die genauen Probenahmeorte sind Kapitel 2.1 zu entnehmen.

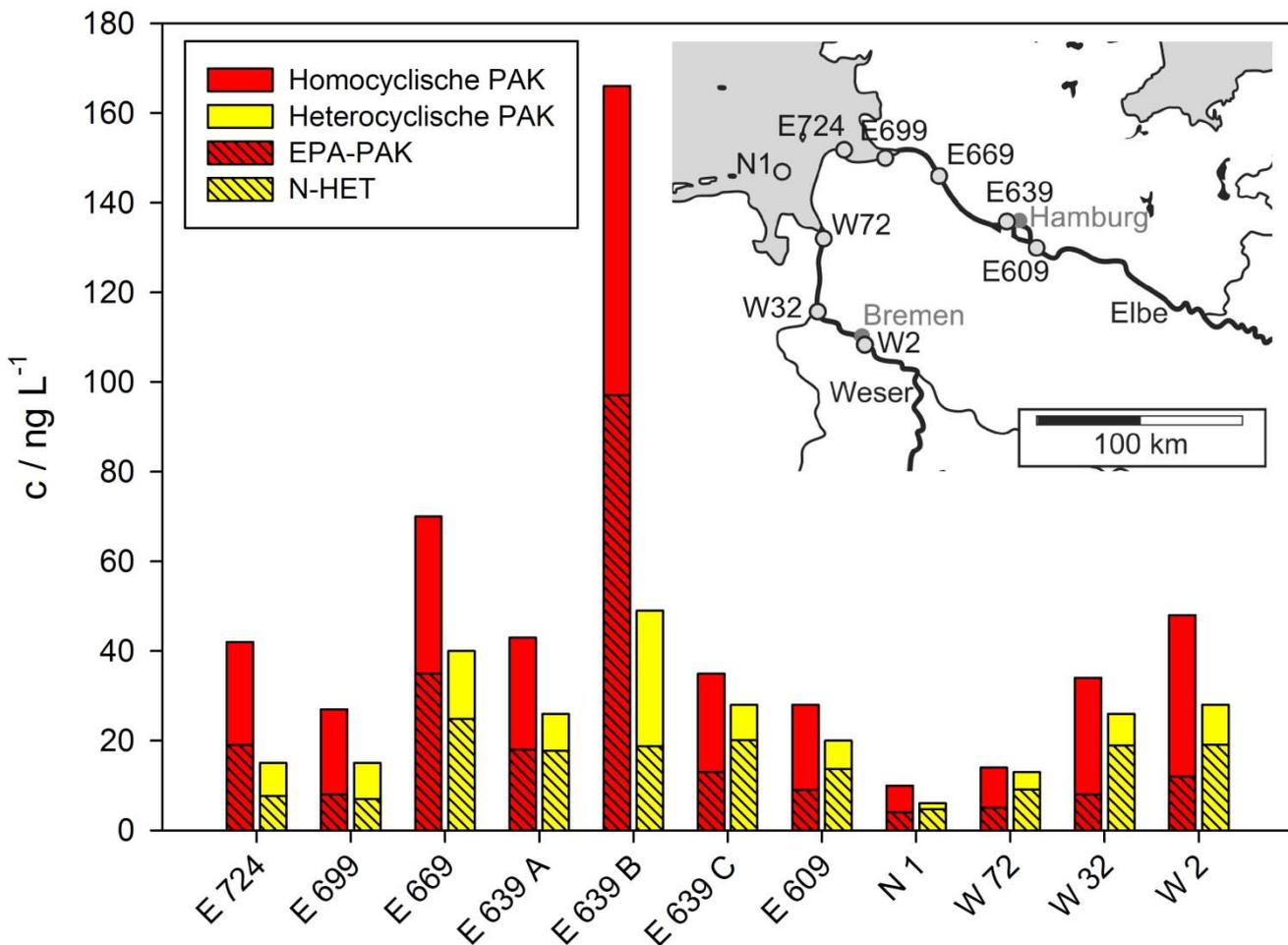


Abb. 3: Elbe/Weser-Kampagne 2010 extrahiert mittels SPE-Verfahren. Summenkonzentrationen der homo- und heterocyclischen PAK und Anteile der EPA-PAK bzw. der N-HET in ng L⁻¹. Bei der Addition wurden nur blindwert- und wiederfindungskorrigierte Konzentrationen oberhalb der Bestimmungsgrenze berücksichtigt. Der Buchstabe steht jeweils für den Fluss (E = Elbe, W = Weser, N = Nordsee) und die Zahlen für die Flusskilometer. An der Probenahmestelle E 639 wurden drei Proben unabhängig voneinander genommen. Die Konzentration in der B-Probe wird im Besonderen durch Naphthalin, 1-Methylnaphthalin und Dibenzofuran bestimmt und könnte unter Umständen über die unabhängige Probenahme erklärt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] J. Blotevogel, A-K. Reineke, J. Hollender, T. Held: Identifikation NSO-heterocyclischer Prioritäts-substanzen zur Erkundung und Überwachung Teeröl-kontaminierter Standorte. Grundwasser – Zeitschrift der Fachsektion Hydrogeologie, 13:147-157, 2008.
- [2] I. Schlanges, D. Meyer, W.-U. Palm, W. Ruck: Identification, Quantification and Distribution of PAC-Metabolites, Heterocyclic PAC and Substituted PAC in Groundwater Samples of Tar-Contaminated Sites from Germany. Polycyclic Aromatic Compounds, 28:310-338, 2008.
- [3] US EPA. Estimation Programs Interface Suite for Microsoft Windows, v 4.00. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA, 2010.
- [4] R.W.P.M. Laane, P. de Voogt, M.H. Bik: Assessment of Organic Compounds in the Rhine Estuary. Handbook of Environmental Chemistry Vol.5, Part L:307-368, 2005.

- [5] R. B. Schäfer, P. C. von der Ohe, R. Kühne, G. Schüürmann, M. Liess: Occurrence and Toxicity of 331 Organic Pollutants in Large Rivers of North Germany over a Decade (1994 to 2004). Environ. Sci. Technol. in press, 2011.

Korrespondenzadresse

Anne-Kathrin Siemers
 Leuphana Universität Lüneburg
 Fakultät Nachhaltigkeit
 Institut für Umweltchemie
 Scharnhorststraße 1
 21335 Lüneburg
 Tel. 04131 677 2885, Fax. 04131 677 2822



Non-extractable residues formed during biodegradation of 2,4-D in soil are biogenic

Karolina M. Nowak^a (karolina.nowak@ufz.de), Anja Miltner^a (anja.miltner@ufz.de), Matthias Gehre^b (matthias.gehre@ufz.de), Andreas Schäffer^c (andreas.schaeffer@bio5.rwth-aachen.de), Matthias Kästner^a (matthias.kaestner@ufz.de)

^a UFZ - Helmholtz Centre for Environmental Research, Department of Environmental Biotechnology, Permoserstraße 15, 04318 Leipzig, Germany,

^b UFZ - Helmholtz Centre for Environmental Research, Department of Isotope Biogeochemistry, Permoserstraße 15, 04318 Leipzig, Germany,

^c Department of Environmental Biology and Chemodynamics, Institute for Environmental Research (Biology V), RWTH Aachen University, Worringerweg 1, 52074 Aachen, Germany

Abstract

During degradation of organic pollutants, non-extractable residues (NER) are formed. NER are believed to be composed of parent compounds or primary metabolites with hazardous potential. However, some part of NER may be biogenic and contain harmless microbial biomass components, which are stabilised in soil organic matter. We investigated the formation of biogenic residues from biodegradation of ¹³C₆-2,4-dichlorophenoxyacetic acid in soil during a 64-day incubation. The results showed that at the end biogenic components accounted for virtually all the NER. Therefore, in the case of biodegradable organic contaminants, the environmental and toxicological risks related to NER formation may be overestimated.

Introduction

Biodegradation of organic contaminants in soils results in the formation of mineralisation products (CO₂ + H₂O), metabolites, microbial biomass and non-extractable residues (NER). Studies on NER formation are limited to simple systems containing the target compound and humic acids [1] and to quantitative analyses using ¹⁴C tracers after extraction with polar and/or non-polar solvents in soils [2]. The chemical composition of NER thus remains unclear. Due to the lack of this knowledge, it is assumed that NER consist of largely unaltered molecules and are formed by various physical and chemical interactions between the compound and soil organic matter (SOM, [2]). They may be remobilised and thus pose an environmental and toxicological risk [3].

During biodegradation of natural organic compounds in soil biogenic residues are formed [4]. The carbon from organic compounds is used by the microorganisms for synthesis of their biomass compounds such as fatty acids (FA) and amino acids (AA). After cell lysis, these components are incorporated into non-living SOM and stabilised ultimately forming biogenic residues. However, biogenic residue formation from biodegradation of organic contaminants in soil has not been considered yet. Biogenic residues thus could be included in the NER fraction in radio-isotope mass balance studies. This may result in an overestimation of pollutant-derived NER, and thus of the environmental risk associated with them. We investigated biogenic residue formation during

biodegradation of the most commonly used herbicide 2,4-dichlorophenoxyacetic acid (2,4-D) in soil and traced their fate during 64 days of incubation.

Materials and Methods

A Haplic Chernozem was taken from the agricultural long-term experiment "Statischer Düngungsversuch" located in Bad Lauchstädt (Germany). Labelled ¹³C₆-2,4-D (Alsachim, Illkirch, France) was added to the soil yielding a final concentration of 20 mg/kg soil [5]. Incubation experiments were performed according to the OECD guideline 307 [6] in the dark and at constant temperature (20°C) for 64 days. The soil systems were sampled after 2, 4, 8, 16, 32 and 64 days of incubation and analysed for the amount and the isotopic composition of AA in two fractions: in the living biomass fraction (bioAA) and in the total fraction of SOM (tAA).

AA from proteins in the total SOM were hydrolysed with 6 M HCl for 22 hours at 110°C according to Miltner et al. [7]. After hydrolysis, samples were filtered through glass-fibre membrane filters, evaporated and purified over cation exchange resin [8]. After purification, the carboxyl groups of AA were esterified with a mixture of isopropanol/acetyl chloride and the amino groups were trifluoroacetylated with a mixture of dichloromethane/trifluoroacetic acid anhydride [7]. After derivatisation, the samples were dissolved in chloroform and the remaining impurities extracted into phosphate buffer [9]. For the determination of the AA in the living biomass, the biomass was first extracted from the soil with 1 g Chelex 100 and sodium deoxycholate/polyethyleneglycol solution [7]. Biomass pellets containing AA were further hydrolysed, purified and derivatised as AA in the total SOM.

The AA in both fractions were identified and quantified after separation on a BPX-5 column by means of gas chromatography-mass spectrometry; their isotopic composition was determined by gas chromatography combustion-isotope ratio mass spectrometry [5].

Results and Discussion

This study provides the first evidence for a significant contribution of microbial residues to NER formation from ¹³C₆-2,4-D. The ¹³C-label was detected in AA in both the living (bioAA) and the total SOM (tAA) which clearly indicated a

biogenic origin of NER [5]. The difference between the total and the biomass AA fractions represents the refractory AA in the non-living SOM and thus provides information about the stabilisation of biogenic residues.

Since $^{13}\text{C}_6\text{-2,4-D}$ was biodegraded rapidly, incorporation of the ^{13}C -label into AA in the living fraction was fast (after 4 days). The amounts of ^{13}C -AA in the living SOM were highest on days 4 and 8 (2.2 and 2.5% of $^{13}\text{C}_6\text{-2,4-D}$ equivalents, respectively; see Figure 1).

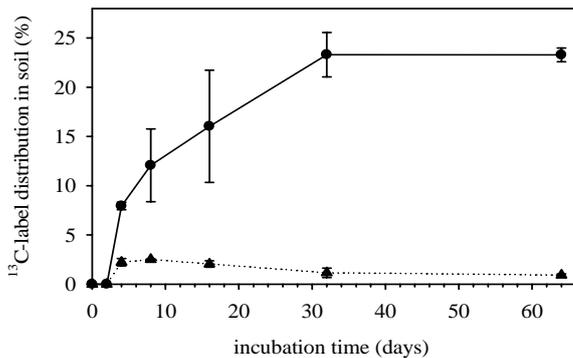


Figure 1. ^{13}C -label incorporation during $^{13}\text{C}_6\text{-2,4-D}$ biodegradation in soil in tAA (●) and bioAA (▲) [5]

Thereafter, their contents decreased continuously until the end of the incubation, and the label was incorporated to the non-living SOM pool. From day 32 to 64, ^{13}C -AA in the living and in the non-living SOM were surprisingly stable, demonstrating a rapid stabilisation of the proteins from the decaying microbial biomass [5]. At the end, the amount of ^{13}C in total AA (nonliving SOM + bioAA fraction) was high, reaching 22% of the initially added $^{13}\text{C}_6\text{-2,4-D}$ equivalents. The proteins containing AA are the most abundant components (~50% of dry mass) of bacterial cells [5]. Therefore, the total content of biogenic residues derived from this ^{13}C -labelled pesticide could be determined by correcting the amount of ^{13}C found in total AA in SOM (22% of the initially added $^{13}\text{C}_6\text{-2,4-D}$ equivalents) considering the general abundance of proteins in microbial cells (conversion factor of two). At the end of the incubation nearly all of the $^{13}\text{C}_6\text{-2,4-D}$ -derived NER (44% of $^{13}\text{C}_6\text{-2,4-D}$ equivalents) could be explained by microbial compounds (Figure 2).

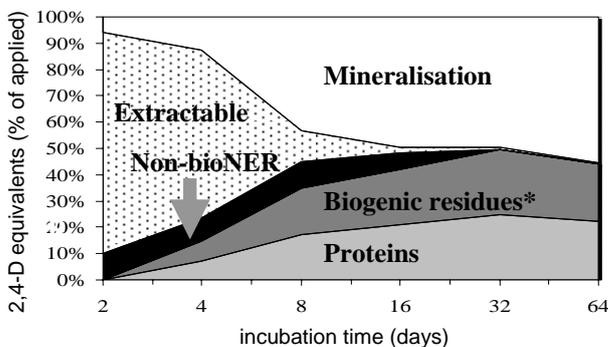


Figure 2. Mass balance including biogenic residue formation during microbial degradation of $^{13}\text{C}_6\text{-2,4-D}$ in soil [5]. *The biogenic residues were estimated from AA by using a conversion factor of 2.

Conclusions

The results show that microbial biomass is a source for NER formation during biodegradation of $^{13}\text{C}_6\text{-2,4-D}$ in soil: cellular components (e.g. AA) carrying the isotope label are incorporated into SOM. The fact that the amount of NER can be almost completely explained by biogenic components contradicts the generally accepted view that NER mainly consist of the parent compounds or their metabolites [2]. Biogenic residue in soil contain only microbial components, therefore, the toxicological risk related to NER formation from readily biodegradable pollutants may be overestimated. The estimation of a proper mass balance and proper risk assessment of a contaminant in soil thus requires considering a possible biogenic origin of NER.

Acknowledgements

The authors thank the European Commission for funding the RAISEBIO Project (Contract: MEST-CT-2005-020984) under the Human Resources and Mobility Activity within the 6th Framework Programme, in particular the fellowship of K. M. N. We also thank U. Günther (UFZ, Department of Isotope Biogeochemistry) for assistance in the compound-specific isotope analysis and Dr. H.-H. Richnow for providing the possibility to analyse the samples in his laboratory.

Literature

- [1] Hatcher, P.G.; Bortiatynski, J.M.; Minard, R.D.; Dec, J.; Bollag, J.-M. 1993. Use of high-resolution ^{13}C -NMR to examine the enzymatic covalent binding of ^{13}C -labeled 2,4-dichlorophenol to humic substances. *Environ. Sci. Technol.* 27, 2098–2103.
- [2] Barriuso, E.; Benoit, P.; Dubus, I.G. 2008. Formation of pesticide nonextractable (bound) residues in soil: magnitude, controlling factors and reversibility. *Environ. Sci. Technol.* 42, 1845–1854.
- [3] Barraclough, D., Kearney, T., Croxford, A., 2005. Bound residues: environmental solution or future problem? *Environ. Pollut.* 133, 85–90.
- [4] Stott, D.E.; Kassim, G.; Jarrel, W.M.; Martin, J.P.; Haider, K., 1983. Stabilisation and incorporation into biomass of specific plant carbons during biodegradation in soil. *Plant Soil* 70, 15–26.
- [5] Nowak, K.M.; Miltner, A.; Gehre, M.; Schäffer, A.; Kästner, M. 2011. Formation and fate of bound residues from microbial biomass during 2,4-D degradation in soil. *Environ. Sci. Technol.* 45 (3), 999–1006.
- [6] OECD, 2002. Guideline for testing of chemicals. Aerobic and anaerobic transformation in soil, 307.
- [7] Miltner, A., Kindler, R., Knicker, H., Richnow, H.-H., Kästner, M., 2009. Fate of microbial biomass-derived amino acids in soil and their contribution to soil organic matter. *Org. Geochem.* 40, 978–985.
- [8] Amelung, W., Zhang, X., 2001. Determination of amino acids enantiomers in soil. *Soil Biol. Biochem.* 33, 553–562.
- [9] Ueda, K., Morgan, S.L., Fox, A., Gilbert, J., Sonesson, A., Larsson, L., Odham, G., 1989. D-Alanine as a chemical marker for the determination of streptococcal cell wall levels in mammalian tissues by gas chromatography/negative ion chemical ionization mass spectrometry. *Anal. Chem.* 61, 265–270.

Corresponding author:

Karolina M. Nowak

Department of Environmental Biotechnology
UFZ - Helmholtz Centre for Environmental Research
Permoserstraße 15, 04318 Leipzig
Tel.: +49(0)341 235 1766, Fax: +49(0)341 235 1471



Oxidation des Tolyfluanidmetaboliten *N,N*-Dimethylsulfamid (DMS)

Nina Schatz (nina.schatz@tzw.de), Oliver Happel (oliver.happel@tzw.de),
Doreen Richter (doreen.richter@tzw.de)

Abstract

Das Auftreten von Pestiziden und deren Metaboliten in Oberflächen- und Grundwässern ist aufgrund ihrer Persistenz und der von ihnen ausgehenden potentiellen adversen Effekte als ein schwerwiegendes Problem einzustufen. *N,N*-Dimethylsulfamid (DMS) ist ein persistenter Metabolit, der durch mikrobielle Prozesse aus dem Fungizid Tolyfluanid gebildet wird. Bei der zur Trinkwasseraufbereitung eingesetzten Ozonung kann aus DMS das kanzerogene wirkende *N,N*-Nitrosodimethylamin (NDMA) gebildet werden. Ob neben NDMA weitere Oxidationsprodukte (OP) gebildet werden und wie eine Identifizierung der Strukturen dieser OP stattfinden kann, ist Gegenstand dieser Arbeit.

Einleitung

Eine Vielzahl von Rückständen an anthropogenen Verbindungen, wie z.B. pharmazeutische Wirkstoffe, Kosmetika, Reinigungsmittel und Pestizide gelangen über diverse Eintragspfade in die Umwelt, wo sie natürlichen Abbauprozessen unterliegen. Oberflächen- und Grundwässer, die zur Gewinnung von Trinkwasser verwendet werden, durchlaufen bei der Trinkwasseraufbereitung unterschiedliche Aufbereitungsverfahren. Die Ozonung ist ein effizientes Verfahren bei der Trinkwasseraufbereitung, um eine Vielzahl von organischen Spurenstoffen, wie z.B. Pestizide aber auch pharmazeutische Wirkstoffe oxidativ zu behandeln und somit zu entfernen [1; 2]. In Untersuchungen von Borséus et al. wurde z.B. im Rohwasser eines Wasserwerkes 17 β -Estradiol (Steroidhormon) nachgewiesen, das durch den Einsatz von Ozon verringert werden konnte [3]. Die in der Praxis eingesetzten Ozonkonzentrationen führen i. d. R. nicht zu einer Mineralisation, sondern zu einer Transformation von organischen Verbindungen [4].

2008 stellten Schmidt et al. die Herkunft erhöhter *N,N*-Dimethylnitrosamin (NDMA)-Konzentrationen in verschiedenen Roh- und Trinkwässern fest [4]. *N,N*-Dimethylsulfamid (DMS), ein durch mikrobielle Prozesse gebildeter Metabolit des Fungizids Tolyfluanid, wird bei der Ozonung unter Wasserwerksbedingungen zu NDMA umgewandelt. Messungen des Bayerischen Landesamtes für Umwelt (LfU) von 2007 und 2008 belegen die Belastung von Grund- und Fließgewässern mit DMS. Somit kann bei einer Ozonung nicht zwangsläufig von einer detoxifizierenden Wirkung von Umweltkontaminanten ausgegangen werden. Daher steigt das Interesse an der Identifizierung von Ozonungsprodukten (OP) und deren Reaktionspfaden.

Ein Mechanismus der oxidativen Transformation von DMS zu NDMA, bei dem Bromid eine entscheidende Rolle einnimmt, wurde postuliert [5]. Die weiteren Produkte, die bei der Reaktion von DMS mit Ozon entstehen, sollen aufgeklärt und die Rolle von Bromid am DMS-Abbau bestätigt werden. Hierzu wurden bromidhaltige ozonierete Wasserproben mittels LC-QToF (Quadrupol-time-of-flight, Flugzeitmassenspektrometer) und IC-ICP-MS (ion exchange chromatography coupled to inductively-coupled-plasma mass-spectrometry) analysiert.

Material und Methoden

Ozonhaltiger Sauerstoff wird über eine Glasritze direkt in die Proben geleitet. Über den Gasfluss, die Ozonkonzentration und die Expositionszeit kann der Ozoneintrag reguliert werden. Durch das Probenwasser (Trinkwasser [TW] mit 40 $\mu\text{g/L}$ Bromid, demineralisiertes Wasser [DW]) wurde 10 Minuten lang ozonhaltiges Gas geleitet, was einem Ozoneintrag von ca. 100 mg/L entspricht. Der DMS-Ausgangsgehalt betrug 12,4 mg/L (100 $\mu\text{mol/L}$, Summenformel: $\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2\text{O}_2\text{S}$). Bromid wurde in aufsteigenden Konzentrationen so zugegeben, dass in den Proben die molaren Verhältnisse zwischen DMS und Bromid 1:0,3; 1:0,6; 1:0,9; 1:1,2 und 1:1,5 betragen. Zum Abstoppen der Ozonungsreaktion wurde ein Überschuss an Natriumsulfit zugegeben. Die quantitative Bestimmung von DMS erfolgte mittels Flüssigchromatographie und Massenspektrometrie (LC-MS/MS) und die von NDMA mittels Gaschromatographie und Massenspektrometrie (GC-MS). Das Flugzeitmassenspektrometer (Agilent 6540) wurde aufgrund der hohen Massengenauigkeit zur Strukturaufklärung verwendet. Mittels der IC-ICP-MS-Kopplung (Trennsäule: STAR-ION A300 [Phenomenex], Eluent: Ammoniumnitrat, ICS 3000 [Dionex], Agilent 7500ce) kann eine schnelle, standardfreie Quantifizierung von schwefelhaltigen Oxidationsprodukten erfolgen, da die Empfindlichkeit (m/z 48 für SO^+) vom Oxidationsprodukt (OP) unabhängig ist.

Ergebnisse und Diskussion

Bei der Ozonung von demineralisiertem Wasser ohne Bromid-Zusatz findet keine nennenswerte Reaktion von DMS mit Ozon statt (Abb. 1A). Im Gegensatz hierzu liegen nach der Ozonung in Trinkwasser nur noch ca. 3,7 mg/L (~30 %) DMS vor. Diese Ergebnisse verdeutlichen, dass auch die Wassermatrix den DMS-Abbau beeinflusst. In keiner der beiden Proben ohne Bromidzusatz konnte jedoch eine signifikante NDMA-Bildung (1,2 $\mu\text{g/L}$) festgestellt werden (Abb. 1 A). Erst durch eine Zugabe von Bromid konnte sowohl eine erhöhte DMS-Umsetzung als auch eine steigende NDMA-Bildung

beobachtet werden. Auffallend ist, dass es in undotiertem Trinkwasser zu einer 70 %-igen DMS-Transformation kommt, allerdings zu keiner nennenswerten NDMA-Bildung. Dies war Anlass für weitere Untersuchungen, um die noch unbekannt Oxidationsprodukte zu identifizieren.

Die Aufklärung der noch nicht identifizierten Oxidationsprodukte ist Gegenstand aktueller Arbeiten.

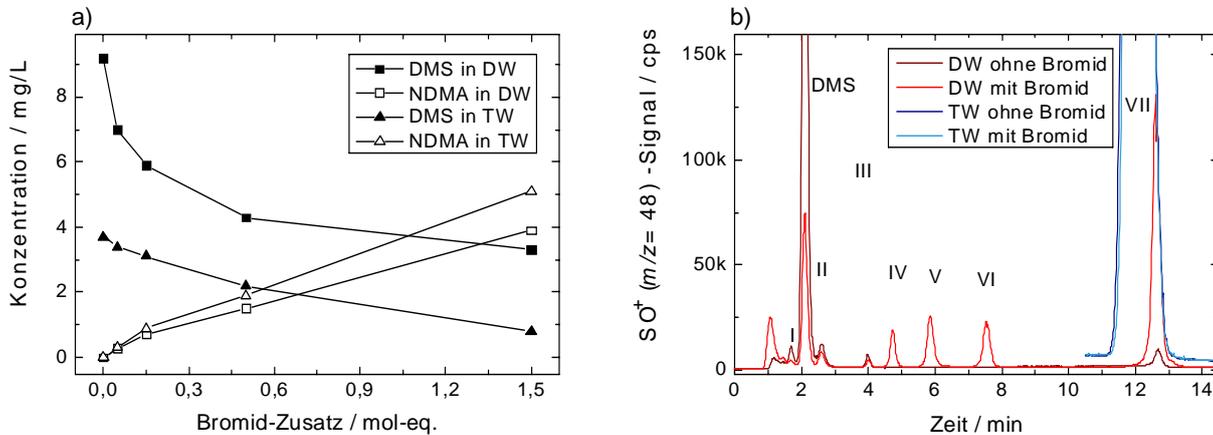


Abb. 1: a) DMS-Umsetzung und NDMA-Bildung in demineralisiertem Wasser (DW: pH 5; TOC 0,08 mg/L; 0 µg/L Bromid) und in Trinkwasser (TW: pH 7,4; TOC 0,65 mg/L; 40 µg/L Bromid) während der Ozonung in Abhängigkeit von der zudosierten Bromidmenge.

b) Ionenchromatogramm gebildeter schwefelhaltiger Oxidationsprodukte (OP) bei der Ozonung von DMS in demineralisiertem Wasser (DW) und Trinkwasser (TW) mit und ohne Zugabe von 1,5 mol-Äquivalenten Bromid. Identifizierte Verbindungen (III) Amidosulfonsäure und (VI) Dimethylsulfamsäure.

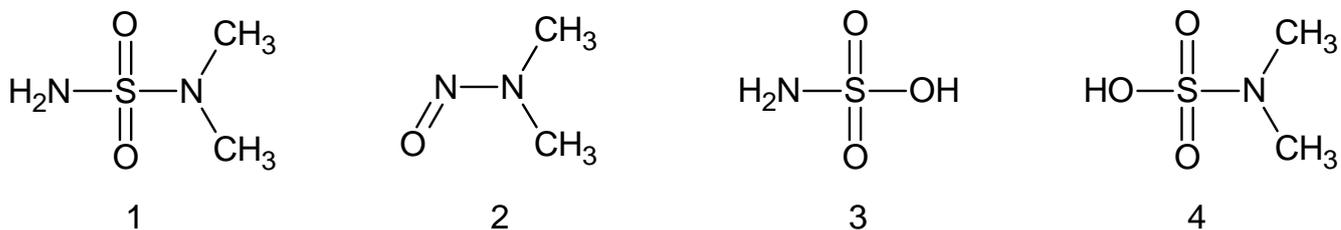


Abb. 2: Strukturen von DMS (1), NDMA (2), Amidosulfonsäure (3) und Dimethylsulfamsäure (4).

Literatur

- [1] Ikehata K and El-Din MG (2005) *Ozone: Science & Engineering* 27:83-114.
- [2] Ikehata K, El-Din MG, and Snyder SA (2008) *Ozone: Science & Engineering* 30:21-26.
- [3] Broséus R, Vincent S, Aboufadi K, Daneshvar A, Sauve S, Barbeau B, and Prévost M (2009) *Water Research* 43:4707-4717.
- [4] Schmidt CK and Brauch H-J (2008) *Environmental Science & Technology* 42:6340-6346.
- [5] von Gunten U, Salhi E, Schmidt CK, and Arnold WA (2010) *Environmental Science & Technology* 44:5762-5768.

Korrespondenzadresse:

Nina Schatz
 DVGW – Technologiezentrum Wasser (TZW)
 Karlsruher Straße 84
 D-76139 Karlsruhe



Rüdel *et al.* Environmental Sciences Europe
2011 **23**:35

<http://www.enveurope.com/content/23/1/35/>

Beitragsserie "Informationen aus der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie" der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh)"

Stellungnahmen und Berichte der Arbeitskreise "Umweltmonitoring" und "Bodenchemie und Bodenökologie"

Heinz Rüdel, Dieter Hennecke, Werner Kördel and Klaus Fischer

Zusammenfassung

Eine ständige Aufgabe des Arbeitskreises "Umweltmonitoring" bildet die Entwicklung von Methoden und Richtlinien für eine systematische und langfristig angelegte analytische Bestandsaufnahme der chemischen Belastung von Umweltkompartimenten und Organismen. Eine neue Empfehlung zum stoffbezogenen Umweltmonitoring wurde kürzlich in der Zeitschrift "Environmental Science and Pollution Research" veröffentlicht (Rüdel *et al.*, 2009). Auch die im gleichen Journal erschienene Artikelfolge zum chemischen und biologischen Monitoring geht auf Beiträge des Arbeitskreises oder einzelner AK-Mitglieder zurück. Einige zentrale Anliegen dieser Veröffentlichungen werden im vorliegenden Bericht aufgegriffen und weitergeführt. Gegenwärtige Tätigkeitsschwerpunkte des AK sind die Entstehung von Transformationsprodukten von Pharmaka und die daraus folgenden Konsequenzen für das Umweltmonitoring sowie das Monitoring von Bioziden und Nanopartikeln.

Neben anderen Aufgaben widmet sich der Arbeitskreis "Bodenchemie und Bodenökologie" besonders der Entwicklung und Standardisierung von Methoden zur chemischen, physikalischen und biologischen Charakterisierung von Bodenbelastungen durch verschiedene Schadstoffe, verbunden mit der Erarbeitung von Methoden zur Bewertung möglicher Schadefekte auf den Boden, die Bodenökologie und auf andere, eventuell betroffene Umweltmedien. Kürzlich hat der AK seine wichtigsten diesbezüglichen Forschungsergebnisse und Schlussfolgerungen in dem Positionspapier "Zielgerichtete Expositionsabschätzung in der Bodenbewertung" zusammengefasst, das Bestandteil dieses Berichts ist. Darüber hinaus werden weitere Initiativen und Aktivitäten des Arbeitskreises vorgestellt.

Der vollständige Artikel ist unter dem angegebenen Link frei zugänglich.

Verleihung des Fachgruppen-Publikationspreises 2011 an Dr. Karolina Nowak und Dr. Andreas Kretschmann



Der Fachgruppenvorsitzende, Prof. Andreas Schäffer, überreicht im Rahmen der ICCE 2011 den FG-Preis für die beste Publikation eines/r jungen Umweltwissenschaftlers/in an Dr. Karolina Nowak und Dr. Andreas Kretschmann

Im Rahmen der diesjährigen "EuCheMS International Conference on Chemistry and the Environment", die vom 11.-15.09. in Zürich stattfand, wurde der Fachgruppenpreis 2011 für die beste Publikation von jungen Umweltwissenschaftlern an Dr. Karolina Nowak und Dr. Andreas Kretschmann vergeben. Der Fachgruppenvorsitzende, Prof. Dr. Andreas Schäffer, stellte die Preisträger mit ihren wissenschaftlichen Werdegängen und den zentralen Aussagen ihrer prämierten Publikationen vor und übergab die Preisurkunden, verbunden mit einem Preisgeld in Höhe von jeweils 1500,- Euro.

Frau Dr. Nowak wurde für ihre Publikation "Formation and fate of bound residues from microbial biomass during 2,4-degradation in soil", erschienen in Heft 45 (2011), S. 999-1006 der Zeitschrift "Environmental Science and Technology", ausgezeichnet (s. a. den Beitrag der Preisträgerin in diesem Heft). Die Autorin erlangte im Jahr 2004 ihren Master of Science in Umweltschutz an der Universität Olsztyn, Polen und erhielt im Jahr 2006 ein Marie-Curie Forschungsstipendium. 2011 promovierte sie an der RWTH Aachen. Das Preiskomitee begründete seine Entscheidung u. a. mit der herausgehobenen Bedeutung der wissenschaftlichen Fragestellung, der sich Frau Dr. Nowak gewidmet hat, mit ihrer beispielhaften Kombination von Laborexperiment und leistungsfähiger Analytik sowie mit der hohen Relevanz der erzielten Forschungsergebnisse, die nachweisen, dass die untersuchten organischen Schadstoffe teilweise unter Verlust ihrer molekularen Strukturen in die biogene Bildung von organischer Bodensubstanz eingehen und damit ihren Charakter als Bodenkontaminanten verlieren.

Der Titel der prämierten Publikation von Dr. Kretschmann, erschienen in Heft 45 (2011), S. 4995-5002 der Zeitschrift

"Environ. Sci. Technol.", lautet "Toxicokinetic model describing bioconcentration and biotransformation of diazinon in *Daphnia magna*". Dr. Kretschmann, der im Jahr 2010 an der ETH Zürich promovierte und seit 2011 als Post-Doc an der Universität Kopenhagen tätig ist, konnte sein toxikokinetisches Modell, das die Diazinondynamik im exponierten Organismus abbildet, mit LC-MS/MS-Messungen bestätigen. Darüber hinaus gelang es ihm, die Bedeutung des Enzyms P450 für die biologische Transformation von Diazinon zu belegen und Pyrimidinol sowie Diazoxon als Metabolite zu identifizieren. Die Jury hob auch hier die Bedeutung des Forschungsansatzes, die überzeugende Formulierung des experimentellen Konzepts und dessen erfolgreiche Umsetzung sowie die gelungene Verknüpfung von chemischer Analytik und toxikokinetischer Modellierung hervor. Darüber hinaus betonte sie den exemplarischen Charakter der Arbeit für das Zusammenwirken und die wechselseitige Förderung von umweltchemischer und ökotoxikologischer Forschung.

K. Fischer, Trier (fischerk@uni-trier.de)

Protokoll des DFG Rundgesprächs am 08.07.2011 an der RWTH Aachen

Am 8. Juli 2011 trafen sich an der RWTH Aachen gut 30 Wissenschaftler aus dem deutschsprachigen Raum auf Einladung der DFG, um in einem Rundgespräch über das Thema schadstoffbezogene Umweltwissenschaften zu diskutieren.

Nach einer kurzen Einführung durch Herrn Schäffer, in der Hintergrund und Ziele der Veranstaltung erläutert wurden, einem kurzen Referat über die Fördersituation in diesem Themenbereich in D, CH und A durch Herrn Hollert, einer Darstellung der DFG Strukturen und Förderinstrumente durch Frau Schmitz-Möller eröffnete Herr Althaus von der ETH Zürich den fachlichen Teil mit einem beeindruckenden Vortrag über ein Verbundprojekt des schweizerischen SNF über endokrin wirksame Umweltchemikalien. Im Vortrag wurde klar, dass durch eine langjährige und umfangreiche Förderung eines interdisziplinären Wissenschaftlerteams, wie es z.B. auch durch die DFG Schwerpunktprogramme abgebildet wird, möglich ist, auch zu einem „angewandten“ Thema, das aufgrund eines konkreten, durch Schadstoffe verursachten Umweltproblems beachtliche Öffentlichkeitswirksamkeit erzielte, exzellente Grundlagenforschung über viele Jahre zu betreiben, die zu Erkenntnisgewinn, zahlreichen Veröffentlichungen, z. T. in höchstrangigen Journalen, weiterführenden Forschungsanträgen, Politikberatung und einer hervorragenden weltweiten Vernetzung von Forschungsinstituten geführt hat.

In einer ersten Diskussionsrunde in kleineren Gruppen wurde die mögliche Einrichtung einer DFG Senatskommission bzw.

deren Aufgaben und Ziele besprochen. Hierbei wurde nach anfänglichen Unklarheiten deutlich, dass ein solches Gremium vor allem beratende Funktion hat, z.B. für die Politik, den DFG Senat etc., jedoch durch diese Tätigkeit eine bessere Sichtbarkeit des Fachgebiets erreichen würde. Im zweiten Diskussionsteil, ebenfalls in Kleingruppen, wurden erste Ideen für Themen gesammelt, die für ein Schwerpunktprogramm geeignet wären. Es gab mehrere Vorschläge, jedoch noch keine Einigung auf ein übergreifendes SPP-Thema. Zudem wurde klar, dass das Selbstverständnis und die grundlegenden Forschungsfragen in Umweltchemie und Ökotoxikologie klar definiert und skizziert werden müssen. Vertreter der beiden maßgeblichen deutschen Fachgesellschaften SETAC GLB und GDCh, Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie, bestärkten die Notwendigkeit, das Fachgebiet bei der DFG zu stärken und eine kombinierte grundlagenorientierte und zugleich angewandte, Hypothesengetriebene Forschung seitens der DFG zu fördern.

Folgende Maßnahmen sind als Folge des DFG Rundgesprächs geplant:

- Es wird ein Antrag zur Einrichtung einer DFG Senatskommission gestellt.
- Die DFG Förderungsrate umweltchemischer und ökotoxikologischer Projekte unterscheidet sich prinzipiell nicht von denen anderer Forschungsrichtungen, nur sind in diesem Bereich bisher zu wenige Anträge eingereicht bzw. sichtbar worden. Auf Basis der insgesamt eingereichten Anträge eines Faches wird jeweils das zukünftige Fördervolumen für das Fach berechnet, so dass ein einheitliches Label von großer Bedeutung für das Fach ist. Es wurde angeregt, dass deutlich mehr Anträge zu diesen Themen gestellt werden sollen, die jeweils mit einem konkreten, einheitlichen Label zu kennzeichnen sind. In einer Abstimmungsrunde wurde dafür aus mehreren Vorschlägen die Bezeichnung „Environmental Chemistry and Toxicology“ bzw. „Umweltchemie und Ökotoxikologie“ gewählt. Im Nachgang zum Rundgespräch wurden über die Email-Verteiler der SETAC GLB und GDCh Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie alle Mitglieder auf die Notwendigkeit der einheitlichen Klassifizierung hingewiesen und das zukünftige Label mitgeteilt.
- Es soll ein Antrag auf Einrichtung eines Schwerpunktprogramms zu den Fachrichtungen Environmental Chemistry and Toxicology gestellt werden. Ein übergeordneter Themenbereich ist noch zu definieren: dazu wird eine kleine Gruppe von Kolleginnen und Kollegen eine Skizze entwerfen, die in einem weiteren Rundgespräch fokussiert und geschärft werden soll. Als Zeitplan für die Einreichung eines SPP Antrags ist Nov. 2012 vorgesehen.

A. Schäffer, Aachen

(andreas.schaeffer@bio5.rwth-aachen.de)

Protokoll der Vorstandssitzung der GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie am 15. Juli 2011

Ort und Zeit: GDCh-Geschäftsstelle in Frankfurt a. M., Beginn 9.00 Uhr

Teilnehmer: Christine Achten, Elke Fries, Stefanie Jäger, Thomas Knacker, Thorsten Reemtsma, Andreas Schäffer (Vorsitz), Andreas Willing (Protokoll)

1. Tagesordnung (siehe Vortag)
2. Protokoll der letzten Sitzung, Protokollführung
3. AK Forschung und Lehre
4. ICCE, Sep. 2011
5. Preis beste Veröffentlichung 2010
6. Betreuung der Arbeitskreise durch Vorstandsmitglieder
7. Tagung 2012
8. Vorstandsvorsitz 2012
9. ESEU Beiträge der FG
10. Finanzstatus
11. Deutscher Umweltpreis
12. Ziele der Fachgruppe
13. Varia: Geburtstagsliste GDCh Mitglieder X-XII 2011
14. Termin der nächsten Sitzung

1. Tagesordnung

Die Tagesordnung wurde bereits am Vortag verabschiedet.

2. Protokoll der letzten Sitzung, Protokollführung

Das Protokoll der letzten Sitzung wurde durchgegangen und in der vorliegenden Form angenommen.

3. AK Forschung und Lehre

Als Veranlassung aus dem letzten Protokoll hat Andreas Schäffer alle Arbeitskreisleiter kontaktiert. Herr Prof. Lorenz (Halle), Leiter des Arbeitskreis Lehre und Forschung, sieht keine Notwendigkeit, den Arbeitskreis weiterzuführen. Der Vorstand folgt dem Votum von Prof. Lorenz und beschließt, den Arbeitskreis Lehre und Forschung zum Jahresende 2011 aufzulösen. Der Vorstand dankt Herrn Prof. Lorenz für die langjährige Leitung des Arbeitskreises.

4. ICCE, Sep. 2011

Folgende Vorstandsmitglieder planen ihre Teilnahme an der ICCE im September in Zürich: Christine Achten, Thorsten Reemtsma, Elke Fries, Andreas Schäffer.

5. Preis beste Veröffentlichung 2011

Der Vorstand hat die Vergabekriterien überarbeitet (präzisiert) und beschlossen, das Preisgeld für den Preis 2011 auf 1000,- Euro festzusetzen. Frau Bechler wird gebeten, die Ausschreibung 2011 zeitnah (ab 1.10.2011) auf die Internetseite der Fachgruppe zu stellen. Informationen werden ferner via Mitteilungen, den Nachrichten und der Homepage kommuniziert.

6. Betreuung der Arbeitskreise durch Vorstandsmitglieder

Folgende Mentoren werden festgelegt:

Stefanie Jäger: Umweltmonitoring

Thorsten Reemtsma: Atmosphärenchemie

Andreas Willing: Chemikalienbewertung

Andreas Schäffer: Boden

Der Vorstand beschließt, die Leiter der Arbeitskreise zur nächsten oder übernächsten Vorstandssitzung einzuladen, je nach Verfügbarkeit der SETAC Vorstandskollegen, die prioritär zur nächsten Sitzung eingeladen werden sollen. Falls es zu einer gemeinsamen GDCh FG und SETAC GLB Vorstandssitzung am 30.9. bzw. 1.11. kommen sollte, wäre das Programm zu umfangreich, um auch noch die AK-Vorsitzenden einzuladen.

7. Tagungen 2012

- Die nächste Mitgliederversammlung ist im Rahmen der nächsten gemeinsamen Tagung mit der SETAC (Leipzig?) geplant.
- Andreas Schäffer spricht Herrn Ebke/SETAC hinsichtlich der Abrechnungen der zurückliegenden gemeinsamen Tagungen an.

8. Vorstandsvorsitz 2012

Andreas Schäffer wird sich definitiv Ende 2012 vom Vorsitz zurückziehen. Thorsten Reemtsma wird ab 2012 den stellvertretenden Vorsitz von Thomas Knacker übernehmen und dann vermutlich ab 2013 den Vorsitz übernehmen. Christine Achten wird ab 2013 dann den stellvertretenden Vorsitz übernehmen.

9. ESEU Beiträge der FG

Bislang sind erst zwei Beiträge aus der Fachgruppe zur Publikation in ESEU geplant (Fischer, Willing). Die Fachgruppenmitglieder werden noch mal daran erinnert, dass insgesamt 8 kostenlose Publikationsslots (Waiver) für die Mitglieder der GDCh-Fachgruppe pro Jahr reserviert sind. Falls bis zur nächsten Vorstandssitzung keine weiteren Waiver beansprucht werden, erwägt der Vorstand die Hälfte der 2011 nicht genutzten Waiver an ESEU zurückzugeben (Ergänzung vom 25.7.: Herr Fischer rechnet damit, dass bis Jahresende 6 Beiträge, u.a. durch die AK Vorsitzenden, eingereicht werden und schlägt vor, dass jetzt 2 Waiver zurück gegeben werden.)

10. Finanzstatus

2010 14.575,- Guthaben

2011 22.144,- Guthaben

11. Deutscher Umweltpreis

Der Vorstand ist um Stellungnahme bzgl. der Nominierung von Herrn Fischer, Geschäftsführer der Auro AG (Naturlacke), bis 29. Juli gebeten worden.

Veranlassung: Stefanie Jäger evaluiert, ob es im UBA schon eine Meinung zur Firma Auro gibt. Parallel wird Andreas Willing seine Einschätzung abgeben.

12. Ziele und Aufgaben der Fachgruppe

Einstieg: Thomas Knacker stellte noch mal die Ergebnistabelle der Klausurtagung 2010 zu den Zielen und Aufgaben des Vorstandes vor. Diskussion zum Aspekt Stellungnahmen des Fachgruppenvorstandes. Wo? Blaue Blätter, überregionale Tageszeitungen?

Beschluss: wenn ein aktueller Anlass gegeben ist, diskutiert der Vorstand noch mal konkret via Email oder Telefonkonferenz.

Tab.1: Themen / Aktivitäten zugeordnet zu Zielen und bewertet im Hinblick auf die Wichtigkeit und die Machbarkeit/Beeinflussbarkeit

Aktivitäten/ Themen	Ziel			Score	
	Ausbildung	Etablierung d. Disziplin	Fachlicher Austausch	Wichtig	Machbar
Arbeitskreise			+	3	3
Kooperation SETAC GLB		+		3	2
Aktionen	Treffen mit SETAC für Herbst 2011 geplant				
Postgradualstudium Fach-Ökotoxikologie	+	+	+	2	2
Aktion	Vorschlag an PGS-Gruppe zur besseren Berücksichtigung der Belange von Behörden und Industrie (Ziel: Erhöhung der Anzahl an Abschlüssen)				
Kooperation. mit weiteren wissenschaftlichen Gesellschaften		-		2	1 oder 2
FG-Tagung	+	+	+	3	3
Mandat für allg. Stellungnahmen			+	2	1
Ausbildung / Nachwuchssicherung	+	+		3	1
Aktion	Doktorandentreffen organisieren (Münster?), alleine oder zusammen mit anderen Organisationen				
	Patenschaft für Studenten				
	Doktorandentreffen in der Industrie				
	Exkursion zu Instituten / Firmen				
Kooperation UBA		+		3 oder 2	1 oder 2
Kooperation Industrie	+		+	3	1

Was ist das Alleinstellungsmerkmal der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie? Gegenüber der SETAC gibt es hohe Überschneidungen. Unsere Fachgruppe hat Arbeitskreise, SETAC nicht. Statt Arbeitskreise evt. Etablierung

themengebundener ad-hoc Arbeitsgruppen, die sich nach erfolgreicher Bearbeitung des Themas auch wieder auflösen.

Aufgreifen von aktuellen Themen, z.B. Mischungstoxizität. Etablierung eines entsprechenden Arbeitskreises. Themen anreißen, die z. Zt. noch nicht in der aktuellen Diskussion sind. Beispiel: wie realitätsnah ist das Standardumweltmodellierungsmodell EUSES? Kinetische Betrachtung von Persistenz. Was fehlt bei der regulatorischen Bewertung (REACH)? Wird der Trinkwasserpfad bei REACH ausreichend berücksichtigt? Verzahnung von Hygiene (EHEC) und Ökotoxikologie? Spannungsfeld Forschung und Regulatorik

13. Varia: Geburtstagsliste GDCh Mitglieder X-XII 2011

- Grußkarten werden zu folgenden runden Geburtstagen verschickt: 70, 80, 90, 100 Jahre.

14. Termin der nächsten Sitzung

Entweder 30. September oder 11. November 2011, abhängig von der Verfügbarkeit der SETAC-Kollegen.

- Topic: Besprechung des Tagungskonzepts und der finanziellen Aspekte der gemeinsamen Tagung
- TOP für die nächste Vorstandssitzung: Internet-Präsenz

Protokoll der Vorstandssitzung der GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie am 19.11.2011

Telefonkonferenz von 10:00h-11:30h

Teilnehmer: Andreas Schäffer (Vorsitz), Andreas Willing, Thorsten Reemtsma, Elke Fries, Stefanie Jäger (Protokoll)

1. Tod von Thomas Knacker

Der Vorstand ist tief betroffen über den plötzlichen und unerwarteten Tod von Thomas Knacker. Es wurde über eine eventuell nötige Nachfolge diskutiert. Zwar sieht die Satzung der Fachgruppe nicht notwendigerweise sieben Vorstandsmitglieder vor, allerdings fehlt nun ein ausgewiesener Ökotoxikologe. Eine Entscheidung zu diesem Thema wird in der nächsten Sitzung getroffen. Als stellvertretender Vorsitzender wurde Thorsten Reemtsma von allen Teilnehmenden der Telefonkonferenz ohne Gegenstimme (bei einer Enthaltung) gewählt.

2. Protokoll der letzten Sitzung

Das Protokoll der letzten Sitzung wird ohne Änderungen angenommen.

3. Klausurtagung des GDCh-Präsidenten und der GDCh-Geschäftsstelle mit den Fachgruppen-Vorsitzenden am 23./24. Oktober 2011 in Blaubeuren

Stefanie Jäger hat in Vertretung für Andreas Schäffer an der Sitzung teilgenommen und berichtete von den wichtigsten Themen:

- Barbara Albert (TU Darmstadt) war anwesend und wurde als Nachfolgerin von Herrn Dröscher im Amt des GDCh-Präsidenten ab 2012 vorgestellt.
- Auf der GDCh-Mitgliederversammlung, die im Rahmen des Wissenschaftsforums in Bremen stattgefunden hat, wurde eine stärkere Positionierung der GDCh beim Thema „Plagiatsaffären“ gefordert. Im anwesenden Gremium wurde allerdings eher gesehen, dass sich diese Problematik in der Chemie anders darstellt. Prof. Erhard Haupt (Uni Hamburg) hat hierzu am Abend des ersten Sitzungstages einen Vortrag mit dem Titel „Umgang mit /Bearbeitung von wissenschaftlichen Daten – Science oder Fiction?“ gehalten.
- Das **Jahr der Chemie** erzielte lokal im Allgemeinen eine sehr gute Presseresonanz, ist aber in der bundesweiten Berichterstattung eher untergegangen
- Die GDCh-Präsidentenkommission hat ein Dokument erarbeitet, welches den Titel „**Perspektiven der Chemie**“ trägt und sich mit möglichen Schwerpunktthemen der Chemie in der Zukunft beschäftigt. Hiermit möchten wir unsere Fachgruppen-Mitglieder auf dieses Papier aufmerksam zu machen, das als lebendiges Dokument gedacht ist. Kommentare und Ergänzungen, wenn wir unsere Fachthemen nicht ausreichend berücksichtigt sehen, sind jederzeit möglich und an Herrn Weinig zu schicken (h.weinig@gdch.de). Das Ganze ist ein

Sammlung persönlicher Einschätzungen und auch als solche konzipiert. Es wurde 2011 bereits auf der Chemiedozententagung und dem GDCh-Wissenschaftsforum vorgestellt. Das Dokument ist auf der GDCh-Homepage zu unter: https://www.gdch.de/index.php?eID=tx_nawsecuredl&u=0&file=fileadmin/downloads/Service_und_Informationen/Presse_Oeffentlichkeitsarbeit/PDF/Perspektiven_der_Chemie.pdf&t=1322904957&hash=01d5c21944ed78f06b7f64314e7701f0dbc719a1

- Auf dem **Wissenschaftsforum 2011** in Bremen wurde der Negativtrend in den Teilnehmerzahlen dieses Jahr durchbrochen. Es gab 250 Teilnehmer mehr als 2009 in Frankfurt. Kritik/Anregungen zu dieser Veranstaltung können schriftlich an Herrn Karger von der GDCh-Geschäftsstelle gerichtet werden.
- Frau Lindhorst (Uni Kiel, Vorstandsmitglied des Arbeitskreises **Chancengleichheit in der Chemie**) hielt einen Vortrag mit dem Titel „Chancengleichheit kommt nicht von selbst“.
- **Hochschullehrernachwuchs:** Es wurde über die Problematik des fehlenden Hochschullehrernachwuchses diskutiert und Gründe zusammengetragen: niedrige Gehälter, Perspektivlosigkeit, da der akademische Mittelbau abgebaut wird/wurde, eine klassische Habilitation scheint chancenlos gegenüber einer Nachwuchsförderung im Rahmen eines Emmy Noether Programmes.
- Im Vorstand der FG U&Ö wurden während der Telefonkonferenz weitere Gründe gesammelt: es könnte der Eindruck entstanden sein, an deutschen Hochschulen sei wenig zu bewegen und die angebotenen Seminare des Deutschen Hochschulverbands für Nachwuchswissenschaftler sind oft nicht sehr hilfreich.
- **DFG-Fachkollegienwahl/DFG-Förderung:** Die Wahl ist seit dem 7.11. freigeschaltet. Wahlberechtigt ist jeder promovierte und hauptamtlich an einer Hochschule oder Forschungseinrichtung tätige Mitarbeiter. Herr Gauglitz (Fachgruppensprecher und selbst DFG-Kollegiat) bat darum, möglichst viele Anträge mit mindestens 3-jähriger Dauer einzureichen, da das Mittelvolumen zwar im Moment sehr niedrig, sich das bewilligte Mittelvolumen aber aus den beantragten Mittel von vor zwei Jahren errechnet.
- **GDCh-Sonderfond:** setzt sich zusammen aus 10 % der Zeitschriftenerträge und wird verwendet für
 - a) Reisestipendien für Nachwuchswissenschaftler und
 - b) Veranstaltungen/Aktionen, die die Sichtbarkeit in der Community erhöhen (z. B. Kolloquien unter Einbindung der Jungchemiker oder Kolloquien zu Trends und Perspektiven in der Chemie). Anträge können bei Herrn Karger eingereicht werden.
- **Wahl des neuen Fachgruppensprechers:** Als Nachfolger für Günter Gauglitz (Uni Tübingen) im Amt des Fachgruppensprechers wurde Erhard Haupt (Uni Hamburg) gewählt.

4. Zukunft des AK Bodenchemie und Bodenökologie

Der AK-Leiter Robert Kreuzig muss aufgrund immer weiter zunehmenden anderen Verpflichtungen den Vorsitz des AK aufgeben. Der AK ist im Augenblick nicht aktiv. Als Grund hierfür wird die parallel existierende und sehr aktive Deutsche Bodenkundliche Gesellschaft gesehen. Sollte sich kein Nachfolger für dieses Amt finden, wird der AK eventuell aufgelöst. Eine Entscheidung hierzu fällt in der nächsten Vorstandssitzung.

5. ICCE Tagung 2015 in Deutschland

Die nächste ICCE Tagung wird 2013 stattfinden. Deutschland wird sich eventuell für die Ausrichtung 2015 bewerben.

6. Doktorandenseminar: Zur Planung eines eigenen Doktorandenseminars hat Thorsten Reemtsma Erkundigungen vom AK Separation Science der Fachgruppe Analytische Chemie eingeholt, der seit vielen Jahren ein erfolgreiches Doktorandenseminar in Hohenroda organisiert. Das Thema wird in der nächsten Vorstandssitzung aufgegriffen.

7. AK-Leiter:

Eine zeitnahe Weiterleitung der finalisierten Protokolle der Vorstandssitzungen an die AK-Leiter soll künftig erfolgen. Die AK-Leiter sollen zur nächsten Vorstandssitzung eingeladen werden (ist bereits erfolgt), um dort auch von ihren Aktivitäten im Jahr 2011 zu berichten.

8. Risikomanagement/Regulierung von Chemikalien:

Christoph Schulte (Umweltbundesamt) wird zu einer der kommenden Vorstandssitzungen (Mitte 2012) eingeladen, um über fehlende Instrumente zu sprechen, die eingreifen könnten, wenn Umweltqualitätsnormen nicht eingehalten werden und zu diskutieren, welche Möglichkeiten REACH hier bietet.

9. Internet-Präsenz: Auf der nächsten Sitzung werden Punkt für Punkt die nötigen Änderungen/Aktualisierungen besprochen (inkl. Faltblatt der Fachgruppe).

10. Termin der nächsten Sitzung: Die nächste Vorstandssitzung wird am 15. Februar 2012 in Frankfurt, in der GDCh Geschäftsstelle stattfinden.

11. Personalia: Stefanie Jäger wird ab 2012 auch Vorstandsmitglied der Fachgruppe Analytische Chemie sein und hier die Junganalytiker vertreten.



Institut für Umweltforschung

Das Institut für Umweltforschung an der RWTH Aachen

Das Institut für Umweltforschung an der RWTH Aachen ist in die Fachgruppe Biologie integriert und besteht aus zwei Einheiten, dem Lehrstuhl für Umweltbiologie und –chemodynamik und dem Lehr- und Forschungsgebiet Ökosystemanalyse. Zwei Professoren, sechs Postdoktoranden und im Schnitt 20-30 Doktoranden arbeiten zusammen mit Studierenden und technischen Mitarbeitern und einer mit chemischen, optischen und bioanalytischen Geräten ausgestatteten Infrastruktur an zwei Themenbereichen: der Verbleibsforschung von Umweltschadstoffen in Böden und Gewässern (Umweltchemie) einschließlich der Remediation belasteter Kompartimente mit Hilfe von Pflanzen und der Effektforschung der Schadstoffe und deren Metaboliten auf aquatische und terrestrische Organismen und Lebensgemeinschaften (Ökotoxikologie). Mehrere Dozenten anderer Forschungsinstitute sind in die Lehre eingebunden; gemeinsame Berufungsverfahren weiterer Professoren mit den Helmholtz Umweltforschungszentren in Leipzig und Jülich sind geplant. Eine Beschreibung des Instituts sowie eine Liste mit den bearbeiteten Projekten und Veröffentlichungen finden sich unter www.bio5.rwth-aachen.de.

Für BSc und MSc Studierende der Biologie bieten wir in der Vertiefungsrichtung Umweltwissenschaften entsprechende Lehrmodule, die im 2010 neu eingerichteten MSc Studiengang Ökotoxikologie durch weitere Module ergänzt werden: Umweltanalytik, Umweltchemie, Konzepte der Ökotoxikologie, Praktische Methoden der Ökotoxikologie, Statistische und mechanistische Modellierung in der Ökotoxikologie, Modellierung des Verhaltens und der Ausbreitung von chemischen Stoffen in der Umwelt, Statistik in der Ökotoxikologie und Regulatorische Ökotoxikologie, ergänzt durch mindestens zwei Wahlmodule aus den Bereichen Pflanzenwissenschaften, Mikrobiologie, Toxikologie, Siedlungswasserwirtschaft, Wasserbau, Geographie, Klimatologie und Hydrologie.

Eine besondere Initiative der Instituts ist das Studentenlabor Faszination Umwelt (<http://www.studentenlabor-faszination-umwelt.de/>). Es wurde 2008 gegründet, um die Ausbildung und Lehre in der Umweltforschung durch eine moderne bioanalytische und chemische Ausstattung zu stärken. Es ist ein multifunktionales Labor, das fachgruppenübergreifend für die studentische Ausbildung im Bereich der Umweltforschung (Praktika in Bachelor-, Diplom-, Master- und Lehramtsstudiengängen), für experimentelle Arbeiten bei studentischen Abschlussarbeiten und Forschungspraktika genutzt wird.

Darüber hinaus bietet das Studentenlabor eine Plattform für Produktentwicklungen der Industrie, mit der Praxis-Erfahrungen in Zusammenarbeit mit Studenten gewonnen werden

können. Für die Einrichtung des aus Berufungsmitteln, Studiengebühren und Geldern aus der DFG-Exzellenzinitiative finanzierten Labors konnte seit der Eröffnung eine Vielzahl von Industrieunternehmen als Sponsoren und Förderer gewonnen werden.

Die Dozenten unseres Instituts beteiligen sich zusätzlich am Postgradualstudiengang zum geprüften Fachökotoxikologen der Society of Environmental Toxicology and Chemistry und der GDCh, der den deutschsprachigen Raum umspannt; www.fachokotoxikologie.de. Vier von zehn Kursen im Umfang von jeweils fünf Tagen werden derzeit durch Mitarbeiter unseres Instituts geleitet.

Verbleib und Sanierung

Anthropogene Chemikalien verteilen sich großflächig (z.B. Pflanzenschutzmittel und andere Industriechemikalien) oder regional begrenzt (z.B. Tierarzneimittel, Schwermetalle) in der Umwelt. Unsere Arbeitsgruppe untersucht die Umwandlung solcher Stoffe in der Umwelt und in Organismen, ihre Festlegung und ihre Freisetzung in Wasser, Boden und Atmosphäre. In Organismen interessieren uns die chemischen, biochemischen und genetischen Mechanismen der Aufnahme, Umwandlung und Bindung dieser Chemikalien. Besonders interessieren wir uns für Stoffrückstände, die nicht mit Lösemitteln aus Böden und Pflanzen extrahiert werden können und sich deshalb der konventionellen Analytik entziehen. Dabei ist neben ihrer chemischen Struktur speziell die Frage von Bedeutung, unter welchen Bedingungen und in welcher Form solche "nicht-extrahierbaren Rückstände" bioverfügbar sind, also von Pflanzen und Tieren aufgenommen werden können. Den Mechanismus der Festlegung untersuchen wir zum Beispiel durch die Charakterisierung der dabei beteiligten extrazellulären oxidativen Enzyme und gezielte Fraktionierung der an den Ton-Humus-Komplexen gebundenen Rückstände. Wir entwickeln Techniken, die Konzentration problematischer Substanzen in Böden und Gewässern mit Hilfe von Pflanzen zu verringern (Phytoremediation). Ein wichtiger Aspekt ist dabei die Auswahl der Pflanzen, die einerseits möglichst unempfindlich gegen den vorliegenden Schadstoff sein sollen, ihn andererseits jedoch in ausreichender Menge aufzunehmen vermögen. Entsprechende Vorversuche werden mit Pflanzenzellkulturen durchgeführt, in denen der Metabolismus der Fremdstoffe rascher und einfacher bestimmt werden kann, bevor er dann mit den Ergebnissen der jeweiligen ganzen Pflanzen verglichen wird. Ein neuer Aspekt dieser Forschungsrichtung besteht in der Nutzung der dabei anfallenden Biomasse für die Bioenergieerzeugung und chemische Produktgewinnung. Dabei interessiert uns der Schadstoffverbleib innerhalb der entsprechenden Prozessketten.

Als analytische Methoden werden chromatographische Verfahren, die Massenspektrometrie (GC-MS, LC-MS-MS) und die Kernresonanzspektroskopie angewendet. Häufig werden kommerziell verfügbare oder selbst synthetisierte radioaktiv markierte (^{14}C) Chemikalien untersucht, mit denen die Lokalisation der Rückstände z.B. in verschiedenen Humusfraktionen und eine bilanzierende Quantifizierung möglich ist. Eine entsprechende Radioaktivmarkierung haben wir auch in Kohlenstoff-Nano-Röhrchen (Carbon NanoTubes, CNT) integriert, so dass wir auch deren Verbleib in Wasser-Sedimentsystemen und Organismen bilanzieren können.

Effekte und Monitoring

Monitoring ist die Messung von Veränderungen in biologischen Systemen in Labor und Freiland. Im Freiland verstehen wir darunter das zeitlich regelmäßig wiederholte Beobachten, Überwachen und Messen des Zustandes von Ökosystemen. Aus Zustands- oder Bestandsänderungen der biologischen Systeme werden Rückschlüsse auf Qualität und Quantität von chemisch-physikalischen Umweltveränderungen unter besonderen Nutzungs- und Belastungssituationen gezogen. Gemessene Veränderungen gegenüber dem Normalzustand werden mit Hilfe indikativer Eigenschaften der Organismen bzw. bestimmter indikativ bedeutsamer Prozesse in Organismen oder suborganismischen Testsystemen bewertet. Das Effektmonitoring im Labor oder komplexeren Modellsystemen (aquatische und terrestrische Modellökosysteme) dient der Erkennung und Bewertung von akuter und Mechanismus-spezifischer Toxizität sowie chronischer Schädigung, welche bei ausgewählten Testspezies, Laborpopulationen und Gemeinschaften in Labor- und Freilandmodellökosystemen gemessen werden. Die beobachteten Effekte dienen der Extrapolation von Risiken der untersuchten Chemikalien für die Umwelt.

Zur Charakterisierung des betrachteten Ökosystemzustands werden geeignete Indikatororganismen gewählt, für die akute, chronische und Mechanismus-spezifische Tests entwickelt werden. Im Freiland klassifizieren wir die jeweilige Lebensgemeinschaft an geeigneten Referenzflächen, die von den jeweiligen Standorteigenschaften geprägt werden, um Veränderungen durch Schadstoffeinfluss erkennen zu können. Ein Projektbeispiel, in dem die Verknüpfung der Umweltchemie und der Ökotoxikologie bedeutsam ist, führt uns zu Untersuchungen im Yangtze Fluss im Raum des Dreischluchten-Damms, der im halbjährlichen Wechsel teilweise trocken fällt und in den Wintermonaten wieder aufgefüllt wird. Wir haben als Modellschadstoff ein Herbizid gewählt, das in den landwirtschaftlich genutzten Uferbereichen dieser Gegend eingesetzt wird und als Hauptmetaboliten den prioritären Schadstoff 3,4-Dichloranilin bildet. Wir interessieren uns für den Verbleib des Schadstoffs und eines weiteren toxischen Folgeprodukts des Anilins, den Wirkungen auf die dort vorhandenen Lebensgemeinschaften und messen und modellieren deren Bioakkumulation in den Organismen. Dabei wird auch die Remobilisierung und Bioverfügbarkeit

Sediment-gebundener Rückstände durch Flutungswellen untersucht.

Modellierung

Neben diesen experimentellen Untersuchungen spielen an unserem Institut die Modellierung und Simulation eine wichtige Rolle bei der strukturellen Erforschung ökologischer Systeme. In der Umweltrisikoaanalyse werden bei Expositions- und Effektabschätzung, und auch der letztendlichen Risikocharakterisierung, verschiedene Arten von Modellen zur Extrapolation eingesetzt. Simulationsmodelle sind in der Lage, konzentrationsabhängige Effekte und deren Ausmaß abzubilden und vorherzusagen. Dies ist auf Populationsebene und Ökosystemebene möglich. Die individuenbasierte Simulation nutzt Modelle zum Lebenslauf von Einzelorganismen, um aus den konzentrationsabhängig veränderten Lebensdaten eine Extrapolation von Effekten auf die Population in Ein- oder Mehrartensystemen zu ermöglichen. Auf Ökosystemebene werden Populationen oder Gemeinschaften meist als Kompartimente behandelt und deren Wechselwirkungen im Zusammenspiel mit variablen Umweltbedingungen quantifiziert. Statistische Modellierungsansätze entwickeln die Modellstruktur auf induktivem Weg, d.h. sie gehen von vorhandenen Daten aus, um auf die Verknüpfungen und die Natur der Prozesse im untersuchten System zu schließen. Zur Modellierung der räumlichen und zeitlichen Dynamik finden neben diesen mathematischen Methoden auch Ansätze aus dem Bereich der Mustererkennung und der künstlichen Intelligenz Anwendung.

Das Aninstitut gaiac, Aachen



gaiac
Forschungsinstitut für
Ökosystemanalyse und -bewertung e.V.

2003 gründeten wir das Aninstitut gaiac als „kleines, mittelständisches Unternehmen (KMU)“, in dem ehemalige Mitarbeiter unseres Instituts im Auftrag von Ministerien, Industrie und gefördert durch Forschungsträger ökologische und ökotoxikologische Forschungsarbeiten durchführen. Eine Beschreibung des Kompetenzspektrums findet sich unter www.gaiac.rwth-aachen.de. Durch enge Kooperation mit den erfahrenen Mitarbeitern von gaiac und durch deren Einbindung in die ökologische und ökotoxikologische Lehre des Instituts generieren wir für das Institut für Umweltforschung an der RWTH und für gaiac eine echte „Win-Win“ Situation für beide Partner in Forschung und Lehre.

Kurz vorgestellt



Terrestrische Modellökosysteme, in denen wir den Verbleib und die Effekte von Umweltschadstoffen auf Bodenorganismen in verschiedenen Bodenschichten untersuchen. Entsprechende Untersuchungen in Wasser und Sediment führen wir in angepassten Systemen ebenfalls unter Freilandbedingungen durch. Radioaktiv markierte Testsubstanzen setzen wir in Isotopenlabors in entsprechenden Bodenkernen ein, mit denen der Verbleib in der Umweltmatrix und in den Organismen lokalisiert und bilanziert werden kann.

Prof. Dr. Andreas Schäffer
RWTH Aachen
Institut für Umweltforschung (Biologie V)
Worringerweg 1, 52074 Aachen
Tel.: 024180-26678/-26815
Fax.: 024180-22182
Homepage: <http://www.bio5.rwth-aachen.de>
E-Mail: andreas.schaeffer@bio5.rwth-aachen.de

Institute for Ecosystem Analysis and Assessment (gaiac)
Mies-van-der-Rohe Str. 19
52074 Aachen
Tel.: 02418027600
Homepage: <http://www.gaiac.rwth-aachen.de>

Tagungsankündigungen

Announcing 2012 Gordon Research Events on
Environmental Endocrine Disruptors

June 3-8, 2012, Mount Snow Resort, West Dover,
Vermont

2012 is the 50th anniversary of the publication of Rachel Carson's *Silent Spring*, the book that called attention to the devastation caused by what are now referred to as Environmental Endocrine Disruptors (EEDs). The 2012 GRC on EEDs will be held June 3-8, 2012 at the Mount Snow Resort, VT. The unifying goal for the 2012 conference is to link basic research, clinical investigation, epidemiological studies, and public health research to the real world environment. Session Topics are: EEDs, Society and Public Policy; Women's Health and EEDs; Men's Health and EEDs; Gene-Environment Interactions, Epigenetics, and EEDs; Thyroid and Immune System Disruptors; Neuroendocrine Disruptors; Resolving Controversies in Endocrine Disruption; Evolution in a Contaminated Environment; and EEDs and Ecosystems: In Honor of Rachel Carson. The scientific presentations, discussions and poster sessions at this conference are designed to expand our understanding of the mechanisms by which endocrine disruptors may contribute to disease processes, including effects of developmental exposures on human health, epidemiological studies, outcomes for wildlife and ecosystems, and underlying mechanisms of action of endocrine disruptors. The collegial and cooperative atmosphere that has traditionally characterized the GRC on EEDs will provide the perfect setting for intellectual development and collegial discussions to further basic and biomedical research in this field. This year, a Gordon Research Seminar (GRS) will be held the day prior to the GRC, and we encourage applicants at the trainee level to apply to both meetings. The 2012 GRC will be a unique forum for learning about interdisciplinary, cutting-edge research on EEDs, and to see just how far we have come in the 50 years since *Silent Spring*.

A detailed program is available at:

www.grc.org/programs.aspx?year=2012&program=enviendoc



Creating Healthy, Liveable Cities

People all over the world are migrating to cities in search of jobs and cultural advantages, especially in Asia. This has resulted in the formation of huge megapolitan areas and surrounding periurban environs. In China, a 40 million urban area is planned.

The effects of cities on people are not well-understood. Cities require huge amounts of energy, resulting in large quantities of waste products, causing unsustainable environments. Cities are sources of air, water and soil pollution. Light and noise pollution are now known to adversely affect urban people. The role of urban heat islands and air pollution, Pm 2.5 and ozone, on human health is beginning to emerge. Lack of green space may have psychological effects for urban dwellers.

We began to explore the nature of the urban environment and pollution on human health and well-being at UEP2010 in Boston in June of 2010. This very successful conference identified many areas of urban life that warranted further investigation. UEP2012 aims to pick up where UEP2010 left off and continue the exploration of the urban environment and how we can begin to create a healthy and liveable environment in cities.

Attendance at this meeting will enable to you to:

- Present your latest research as Oral or Poster presentation
- Learn from internationally renowned researchers in a programme covering all aspects of biomaterials, colloids and drug delivery
- Understand the current state of research and the challenges to future discovery
- Network with international colleagues and grow your LinkedIn connections
- Experience a UNESCO World Heritage Site at the beginning of summer!

Topics List

- New information about urban environments and how they function
- Pollution problems and possible solutions
- Role of the built environment in alleviating heat islands
- Human health problems and solutions

- Role of vegetation in mitigating urban pollution and human health problems
- Innovative methods for alleviation of urban stress problems

Submit abstract here. Deadline: 16 January 2012

For revisions or queries regarding abstracts already submitted:

If you do not receive acknowledgement for your abstract submission or you wish to make any essential revisions to an abstract already submitted, please DO NOT RESUBMIT your abstract, as this may lead to duplication. Please email the Publishing Content Coordinator with details of any revisions or queries. Please quote your reference number if you have one.

A Special Issue of Environmental Pollution has been published with selected papers from the conference Urban Environmental Pollution 2010: Overcoming Obstacles to Sustainability and Quality of Life, 20-23 June 2010, Boston, USA. This Special Issue is now freely available (Volume 159, Issues 8-9, pp. 1963-2210).

The other papers of UEP2010 are published in Procedia Environmental Sciences (Volume 4, Pages 1-336). Also freely available via SciVerse ScienceDirect

Important Conference Deadlines

Abstract Submission Deadline Young Scientist Award	30 December 2011
Abstract Submission Deadline	16 January 2012
Author Registration Deadline	9 March 2012
Early Bird Deadline	20 April 2012

Conference' Homepage:

<http://www.uepconference.com/index.html>



IC EST2012

The Sixth International Conference on Environmental Science and Technology

June 25-29, 2012, Hilton Hotel, Houston, Texas, USA

The objective of the Sixth International Conference on Environmental Science and Technology will be to provide a major interdisciplinary forum for presenting new approaches from relevant areas of environmental science, to foster integration of the latest developments in scientific research into engineering applications, and to facilitate technology transfer from well-tested ideas into practical products, waste management, remedial processes, and ecosystem restoration. Environmental humanity and sociality such as environmental ethics, environmental law, environmental economy and environmental management are also included in the scope of the conference. Researchers, engineers, site managers, regulatory agents, decision-making officials, consultants, and vendors will all benefit from the opportunity to exchange information on recent research trends, to examine ongoing research programs, and to investigate worldwide public and regulatory acceptance of environmental protection and remediation technologies.

Environmental disturbance and pollution are complex problems worldwide. The current development of modern science and technology combined with management on social and economic activities are contributing more and more to solution of the problems. Although considerable environmental protection work has been and is presently being conducted, a multidisciplinary platform for environmental scientists, engineers, management professionals and governmental officials to discuss the latest developments in environmental research and applications will be very helpful for protecting our global village.

Cosponsors and the participating partners of the conference will include governmental, academic, and private organizations that are international leaders in environmental research and technology applications.

Link to the Conference' Homepage:

<http://www.aasci.org/conference/env/2012/index.html>



The Congress will focus on and develop the various aspects of fundamental and applied soil science and technology, field approaches and social, economical and political implications in relation to the present and future needs and emergencies of mankind and environment. Special emphasis will be devoted to the fundamental role of soil as a central ecosystem and instrumental but limited and sensible resource for a correct, sustainable and harmonized development of mankind and its benefit and welfare.

The Congress structure is based on a very general thematic framework, in which various symposia, workshops, roundtables, open debates, short courses, technical specialized meetings and/or demonstrations, and business meetings are included upon received proposals. Any accepted event will be held in one of the 6 main meeting halls of the venue, and will be reasonably distributed along the time schedule of the event. The Congress is scientifically structured on bottom-up proposals received from scientists, educators, and decision makers involved in soil science and related disciplines. This approach will strongly contribute to bringing in new and updated ideas, to develop strategic topics and actual and modern issues that hold promise and need further investigation.

The scientific programme of EUROSOIL 2012 is structured in 13 general topics that include 83 symposia and 16 workshops focused on the variety and complexity of Soil Science disciplines. Further, a number of roundtables, open debates, short courses and technical and business meetings will enrich the Congress programme.

More information is available at the Conference' homepage: <http://www.eurosoil2012.eu/index.php>



4th EuCheMS Chemistry Congress, August 26-30 2012, Prague, Czech Republic

Following the very successful conferences in Budapest (2006), Torino (2008) and Nürnberg (2010) we are now invited by the Czech Chemical Society to come to Prague for the 4th European Chemistry Congress.

Prague is the ideal setting for addressing the challenges of today's chemistry. The 4th European Chemistry Congress provides the opportunity to present the latest progress in all areas of chemistry. It will bring together chemists from academia, industry and governments and provides a platform for discussing the contributions of chemistry to innovation in Europe and to meeting the big global challenges.

The congress also has a social function that is a "family celebration" of the European chemistry community. EuCheMS has more than 40 member societies in over 30 countries across Europe, which in total represent about 150.000 individual chemists. I would be delighted to meet a large proportion of them in Prague, as well as many friends from all over the world.

Main Congress Topics

- Analytical Chemistry, Electrochemistry
- Education and History, Professional Chemists
- Food Chemistry
- Environment and Green Chemistry
- Environmental Radiochemistry
- Mining and the Environment
- Green and Inorganic Chemistry, Life Sciences
- Nanochemistry, Nanotechnology
- Organic Chemistry, Polymers
- Physical, Theoretical and Computational Chemistry
- Solid State Chemistry

Important dates

Registration opening	October 23, 2011
Online abstract submission opening	October 23, 2011
Regular registration deadline	May 5, 2012
Abstract submission deadline	May 5, 2012
Exhibition space booking deadline	May 31, 2012

Conference' homepage:

<http://euchems-prague2012.cz/conference/programme.htm>



The International Academy of Science, Engineering and Technology (International ASET Inc.) is pleased to organize the 2nd International Conference on Environmental Pollution and Remediation. Environmental pollution is considered the most important threat to human being and other creature lives. Every day at different places, thousands of various types of pollutants and chemicals from different sources are exposed to the environment. These sources include industries, vehicles, and even human activities like cooking. Pollutants affect different environmental resources such as air, water, soil, and generate serious danger to the ecosystem. These encountered problems require immediate scientific attention to find appropriate and cost effective solutions.

This conference will provide a golden opportunity to develop new collaborations and gather world experts on the different topics including pollution detection, environmental remediation, and pollution prevention. Through the 2nd conference a great opportunity to share knowledge and expertise will be created taking advantage from the synergy of the 1st conference. The ICEPR'12 program will include invited keynote talks, oral presentation sessions, and poster sessions.

Topics

- Water pollution and treatment
- Air pollution and treatment
- Soil pollution and treatment
- Groundwater issues
- Wastewater management and treatment
- Green manufacturing and technologies, Pollution prevention
- Desalination
- Renewable and non-renewable energies
- Energy management
- Oil spills and Biofuels
- Environmental safety regulations
- Greenhouse effect, global warming, and climate change
- Environmental protection
- Impact of industrialization on the environment
- Pollution and health issues
- Environmental sustainability and development
- Environmental education programs
- Nanotechnology impacts on environment
- Environmental risk assessments

For further information, visit the website at:
<http://ICEPR2012.International-ASET.com>

Tagungsberichte

Neues über Altes

23. Internationales Symposium über polycyclische aromatische Verbindungen in Münster, September 2011

Polycyclische aromatische Verbindungen (PAC; PAC = PAK + Heterozyklen) sind unsere täglichen Begleiter. Da manche sehr gesundheitsgefährdend sein können und dies seit langer Zeit bekannt ist, gehört die Gruppe der PAC zu den am intensivsten untersuchten Verbindungen. Wissen wir denn dann nicht schon alles über die Substanzen?

Die Besucher des 23rd International Symposium on Polycyclic Aromatic Compounds (ISPAC 23) konnten sich leicht vom Gegenteil überzeugen, als das Symposium in der ersten Septemberwoche zum ersten Mal in Deutschland an der Universität Münster, unter der Leitung von Prof. Christine Achten, Angewandte Geologie, und Prof. Jan Andersson, Analytische Chemie, stattfand.

In sechs Plenarvorträgen, 91 Vorträgen und über 110 Postern wurde mit 200 Gästen aus 34 Ländern das breite Gebiet der PAC diskutiert. Die eingeladenen Gäste gaben die thematische Vielfalt vor, sie variierte von PAC im Weltraum (Douglas M. Hudgins, Washington) über die epidemiologischen Belege für die Karzinogenität von PAC (Manolis Kogevinas, Barcelona) und die Synthese von sehr großen PAK aus graphenähnlichen Molekülen (Klaus Müllen, Mainz) bis zu PAC in der umweltforensischen Analytik (Scott Stout, Boston). Außerdem wurde der diesjährige ISPAC Research Award an Jocelyn Hellou (Halifax, Kanada) überreicht, die sich mit einem Vortrag über PAC in der marinen Umwelt bedankte.

Neben analytisch ausgerichteten Sessions zu Chromatographie und Massenspektrometrie, in denen u.a. mittels hochauflösender Fourier Transform-Techniken oder Laserionisierung bei Atmosphärendruck in der Massenspektrometrie neue Einblicke gegeben wurden, lagen die Themen auch im Bereich der Exposition von PAC auf den Mensch, z. B. PAC in Schokolade oder hydroxylierte Metabolite im Urin. Aus geowissenschaftlicher Sicht wurden Vorkommen von PAK in der Erdgeschichte präsentiert.

In der Umwelt wurden PAC im Zusammenhang mit Umweltforensik, Verhalten in der Umwelt, Atmosphäre, Bioverfügbarkeit, Black Carbon und kontaminierte Standorte diskutiert. Themen waren die Untersuchung, Bewertung und Sanierung von PAC in Wässern, Sedimenten und Böden, z. B. nach Öl-Unfällen aber auch im Untergrund von Altstandorten. Wie sind die von diesen Standorten ausgehenden Gefahren einzuschätzen? Was wissen wir zur Toxizität der Heterozyklen? Wie können diese Standorte saniert werden?

In vielen Fällen konzentriert sich die Analyse von PACs auf die sogenannten 16 EPA-PAK, die vor 35 Jahren eingeführt

wurden. Ist diese Auswahl noch zeitgemäß? Brauchen wir andere PAC? Brauchen wir mehrere Listen für verschiedene Zwecke? Dies war das Thema einer Podiumsdiskussion, die deutlich machte, dass die 16 EPA-PAK keineswegs über Bord geworfen werden können. Allerdings sollten in vielen Fällen andere Vertreter von höherer Relevanz analysiert werden, wie zum Teil bereits von der EU empfohlen wird. Es wird geplant, diese Diskussion in einem Sonderheft der Zeitschrift *Polycyclic Aromatic Compounds* aufzugreifen und einer breiten Meinungsvielfalt Raum zu geben.

Die Abstracts der Tagung sind auf der Homepage www.ispac23.uni-muenster.de abrufbar. Das 24. Symposium findet 2013 in den USA statt.



Verleihung des ISPAC Research Award an Jocelyn Hellou (Mitte) aus Halifax, Kanada, durch Prof. Christine Achten und Prof. Jan Andersson, Universität Münster

C. Achten, Münster (achten@uni-muenster.de)

Kurznachrichten



Neue VDI-Richtlinie zur Bioindikation: Probenahme von Brachsen (*Abramis brama*)

Brachse (Bild: LfL; Institut für Fischerei, Starnberg)

Die Überwachung von Schadstoffen mit Fischen liefert wichtige Belege für den Zustand unserer Umwelt. Der neue **Richtlinienentwurf VDI 4230 Blatt 4** beschreibt die Probenahme von Brachsen als Akkumulationsindikatoren.

Für die Überwachung von Schadstoffen in Gewässern eignen sich Fische als Indikatororganismen besonders gut. Gegenüber vielen anderen Bioindikatoren haben sie den Vorteil, dass sie als Bestandteil der menschlichen Nahrungskette einen direkten Transfer des Risikos auf den Menschen ermöglichen.

Eine zuverlässige Indikation des Gewässerzustands durch Organismen kann nur dann erreicht werden, wenn qualitativ hochwertige Proben vorliegen. Damit kommt der Probenahme eine zentrale Bedeutung zu. Das Ziel des Richtlinienentwurfs besteht daher darin, Standards für den Erhalt reproduzierbarer und repräsentativer Umweltproben zu definieren, um über Zeit und Raum vergleichbare Ergebnisse über den stofflichen Umweltzustand zu erhalten.

Die Probenahme der Fischart *Abramis brama* (Brachsen) wird von der Planung bis zur Durchführung im Labor beschrieben. Hilfreiche Beispiele für Probedatenformulare sowie Hinweise zur Altersbestimmung von Fischen sind im Anhang aufgeführt.

Herausgeber ist die Kommission Reinhaltung der Luft im VDI und DIN. Die Richtlinie VDI 4230 Blatt 4 (Entwurf) ist ab Oktober 2011 zum Preis von 62,20 € in deutscher Fassung beim Beuth Verlag in Berlin erhältlich. Unter der Telefonnummer +49 (0)30 2601-2260 ist der Verlag erreichbar. Die Einspruchsfrist endet am 31. Januar 2012. Onlinebestellungen sind unter www.vdi.de/richtlinien oder www.beuth.de möglich.

Fachauskünfte erteilt:

Frau Dr. Isabelle Franzen-Reuter
Tel.: +49 211 6214 268
E-Mail: franzen-reuter@vdi.de
Links: www.vdi.de/4230-4 , www.krdl.de



UBA-Pressinformation 56/2011: Mineralölfreie Farben für den Zeitungsdruck

Die Schweizer Supermarktketten COOP und Migros drucken seit November Teile Ihrer Kundenzeitungen mit mineralölfreien Farben!

Untersuchungen des Kantonalen Labors Zürich vom Herbst 2009 hatten ergeben, dass Tageszeitungen durchschnittlich ca. 3000 mg Mineralöl pro kg Tageszeitung und daraus hergestellte Lebensmittelkartonverpackungen 300-1000 mg Mineralöl pro kg Verpackungskarton enthalten. Diese Mineralöle können über die Gasphase - teilweise auch durch Zwischenverpackungen hindurch - auf Lebensmittel übergehen. Somit können unbedruckte Verpackungen aus Recyclingkarton um den Faktor 10 höhere Mineralölgehalte als Frischfaserkartonverpackungen aufweisen. Die erhöhte Mineralölbelastung in den Recyclingkartons ist nach Expertenmeinung auf das Recycling von Zeitungspapier und die darin enthaltene Druckfarbe zurückzuführen. Auch in Deutschland wurden Gehalte an Mineralöl in verschiedenen Lebensmitteln gefunden, die deutlich über den tolerierbaren Mengen liegen. Wegen des hohen Anteils an Mineralölfractionen mit kürzerkettigen und aromatischen Kohlenwasserstoffen sind derartige Kontaminationen von Lebensmitteln unerwünscht. Kürzerkettige Kohlenwasserstoffe werden vom Körper leicht aufgenommen, so dass bei häufigerem Verzehr belasteter Lebensmittel die toxikologischen Grenzwerte überschritten werden können. Aus Sicht des UBA und des Bundesinstituts für Risikobewertung (BfR) sollten daher die Übergänge von Mineralöl aus Recyclingpapier und minimiert werden.

Durch den Ersatz mineralöhlhaltiger Druckfarben könnte auch in Deutschland ein wichtiger Schritt in Richtung Ausschleusung unerwünschter Stoffe aus dem Altpapierkreislauf getan werden. Damit könnte sowohl dem Verbraucherschutz wie auch dem Umweltschutz nachhaltig Rechnung getragen werden. Verpackungen aus recyceltem Altpapier sind im Vergleich zu Verpackungen aus Frischfasern als umweltfreundlicher und ökologisch sinnvoller zu betrachten. Die deutschen Verlagshäuser und die Druckbranche sind aufgefordert, eine Übertragbarkeit der Ergebnisse aus der Schweiz auf den Druck von Presseprodukten in Deutschland zu prüfen.

Mineralölfreie Druckfarben können einen wichtigen Beitrag für eine umfassende und schadstoffärmere Kreislaufwirtschaft leisten. Das UBA plant derzeit großtechnische Druckversuche zur Gebrauchstauglichkeit und Recyclingfähigkeit dieser neuen Druckfarben zur Absicherung der Schweizer Ergebnisse zur Herstellung anspruchsvoller, mineralölfreier Druckzeugnisse.



UBA-Texte 63/2011 erschienen: Basic principles for the develop- ment of a concept for environ- mental exposure assessments of single substances released from multiple uses under REACH

Kurzbeschreibung

Die ECHA Leitfäden R.12 bis R.18 enthalten detaillierte Vorgaben zur Durchführung der Expositionsbeurteilung im Rahmen des Stoffsicherheitsberichts. Die Leitfäden gehen allerdings nur eingeschränkt auf die Berücksichtigung von Einträgen eines Stoffes in die Umwelt ein, falls die lokalen Einträge aus verschiedenen Verwendungen des gleichen Stoffes stammen und in einer kumulativen Exposition resultieren. Bei einer Chemikalie mit mehreren Verwendungen an einem Standort kann es jedoch dazu kommen, dass sich die Einträge von verschiedenen und für sich betrachtet risikoarmen Verwendungen addieren und die resultierende Konzentration ein unannehmbares Risiko für die Umwelt darstellt. Vor diesem Hintergrund zielt die vorliegende Studie auf die weitere Ausgestaltung der Leitlinien zur kumulativen Risikobewertung gemäß REACH-Verordnung.

Neben der Definition wichtiger Fachbegriffe werden bereits vorhandene Vorgaben zur kumulativen Expositionsabschätzung aus anderen rechtlichen Regelungsbereichen ausgewertet und deren Übertragbarkeit auf die Umweltexpositionsbeurteilung gemäß REACH geprüft. Des Weiteren werden Anwendungsbereiche herausgearbeitet, für die eine kumulative Expositionsabschätzung als relevant betrachtet wird. Dabei wird unterschieden zwischen Fällen, in denen die Verantwortung für kumulative Umweltexpositionsabschätzungen beim Registranten im Rahmen des Stoffsicherheitsberichts liegt und anderen Fällen, in denen diese Aufgabe den nachgeschalteten Anwendern (DU) oder bewertenden Behörden der Mitgliedsstaaten (MS-CA) zufällt.

Es werden erste Vorschläge für eine technische Umsetzung der kumulativen Expositionsschätzung von Chemikalien im Rahmen der Erstellung und Evaluierung von Stoffdossiers durch den Registranten bzw. MS-CA gegeben sowie Vorschläge für die Berücksichtigung kumulativer Exposition durch den DU.

Die Publikation ist online erhältlich unter:

<http://www.uba.de/uba-info-medien-e/4183.html> .



UBA-Texte 56/2011

Empfehlungen für Simulationen zur Prognose der Konzentration von Pflanzenschutzmittelwirkstoffen und -metaboliten im Grundwasser (PEC_{gw}) in der nationalen Bewertung für die Zulassung in Deutschland

Zusammenfassung

Im Rahmen des nationalen Zulassungsverfahrens für Pflanzenschutzmittel in Deutschland wird das Versickerungsverhalten von Wirkstoffen und Metaboliten in einem schrittweisen Verfahren nach FOCUS geprüft. Die Stufe 1 in der EU-Wirkstoffprüfung basiert auf den neun in den FOCUS Groundwater Reports beschriebenen Standardszenarien. Die FOCUS-Szenarien „Hamburg“ und „Kremsmünster“ werden im Hinblick auf die klimatischen und pedologischen Bedingungen als relevant für das Deutsche Zulassungsverfahren betrachtet. Die Böden dieser beiden Szenarien decken weitgehend die pH-Bereiche landwirtschaftlicher Böden ab und erlauben es daher, die pH-Abhängigkeit des Umweltverhaltens von Pflanzenschutzmitteln in der nationalen Bewertung einzubeziehen.

Die Parametrisierung des Abbau- und Transformationsverhaltens sowie der Sorption von Wirksubstanzen und Metaboliten erfolgt nach FOCUS. Normalisierte Abbauraten können dabei entweder aus Labor- oder Freilandstudien stammen. Im Hinblick auf die Korrelation des Abbau- und/oder Sorptionsverhaltens zu Bodeneigenschaften, wie pH oder OC, werden detaillierte Vorgaben gemacht, um die Auswahl von konservativen Parametern für eine Abschätzung des Versickerungsverhaltens zu ermöglichen, wobei auch die Parametervariabilität zu beachten ist.

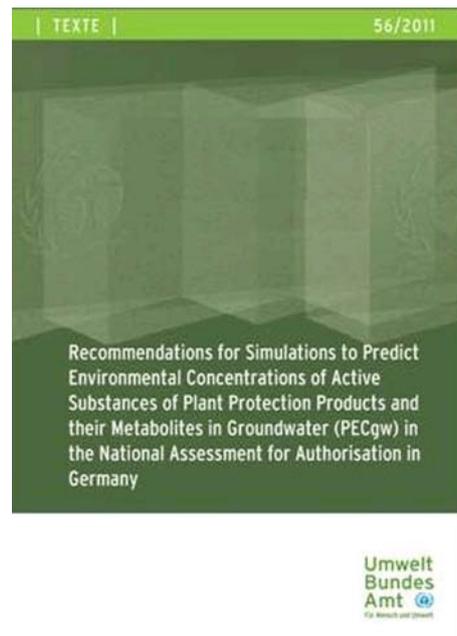
Es werden Empfehlungen gegeben, wie entsprechende Modellierungsparameter wie Adsorption, Fruchtwechsel, Aufnahme durch die Pflanze, Abbauprodukte und deren Entstehung, Prüfung auf Existenz von Korrelationen zwischen einzelnen Parametern sowie die statistischen Methoden zur Prüfung auf Signifikanz anzuwenden sind. Des Weiteren wird empfohlen, die neueste veröffentlichte Version von FOCUS PELMO für entsprechende Submissions in Deutschland anzuwenden.

Stufe 2 beinhaltet verfeinerte Modellparameter. Einerseits werden hierbei spezifische Prozesse, wie Abbau auf Oberflächen oder die kinetische Sorption betrachtet und andererseits spezifische Szenarien in Betracht gezogen, wenn die Standardszenarien nicht repräsentativ sind.

In dieser Publikation werden nur die Stufen 1 und 2 im Rahmen der nationalen Bewertung für die Pflanzenschutzmittelzulassung betrachtet. Es ist geplant, in einer weiteren Veröffentlichung auch die anderen Verfahrensschritte (Stufe 3 und 4) unter Berücksichtigung der in FOCUS beschriebenen Grundsätze auszugestalten.

Das Dokument ist online erhältlich unter:

<http://www.uba.de/uba-info-medien-e/4167.html>



In Memoriam

Dr. Thomas Knacker (29.04.1951 – 30.10.2011)



Nach kurzer, schwerer Krankheit ist am 30. Oktober 2011 unser Freund und Kollege Dr. Thomas Knacker verstorben.

Thomas stammte aus Wüsten-sachsen, einem kleinen Dorf in Ost-hessen, dem er sein ganzes Leben lang verbunden blieb. Von 1972 bis 1981 studierte er an der Johann-Wolfgang Goethe Universität in Frank-

furt am Main Biologie, speziell Pflanzenphysiologie, Bio-chemie und Mikrobiologie. Nach seiner Promotion 1981 (Thema: Messungen des Lipidgehalts und des CO₂-Gas-wechsels sowie Bestimmungen der Wachstumscharakteristika von *Amaranthus paniculatus* bei Anzucht in verschiedenen Sauerstoffkonzentrationen) und einem kurzen Aufenthalt am Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen verbrachte Thomas ein Jahr in der Abteilung Biochemie der Universität von Wales in Cardiff. Die Zeit dort hat ihn wissenschaftlich aber auch privat tief geprägt: sein Interesse an der englischen Sprache und Kultur nahmen dort ihren Anfang, wobei bis zuletzt andauernde persönliche Freundschaften ihn mit dieser Zeit verbanden.

Nach seiner Rückkehr nach Deutschland und dem Eintritt in das Frankfurter Battelle-Institut e.V. (1983), einem privaten amerikanischen Forschungszentrum, änderte sich Thomas berufliche Ausrichtung erheblich. Von nun an fokussierte sich sein Interesse auf die angewandten Wissenschaften, vor allem auf das damals noch sehr junge Fachgebiet der Ökotoxikologie. Aufbauend auf sein umfassendes biologisches Wissen hat er dort in kurzer Zeit, ausgehend von einer dreiköpfigen Arbeitsgruppe, die Abteilung für aquatische Ökotoxikologie und Bioabbau mit über 20 Mitarbeitern aufgebaut. Schon damals zeigten sich Thomas' besondere Stärken: seine Fähigkeit, auf ganz unterschiedliche Personen zuzugehen - Mitarbeiter, Kunden oder Fachkollegen - und sie dabei ernst zu nehmen und einzubinden. Zugleich war Thomas fähig, sowohl wissenschaftliche Details als auch strategische Zusammenhänge zu erkennen und aktiv weiterzuentwickeln. Dies war bei vielen, sehr unterschiedlichen Anlässen der entscheidende Faktor für seine erfolgreiche wissenschaftliche Arbeit und die eigenverantwortliche Gestaltung seines Arbeitsumfeldes.

Seine Fähigkeiten waren besonders gefordert, als das Battelle-Institut 1993 geschlossen wurde. Ohne sie - und den festen Vorsatz, auf eigenen Füßen zu stehen - wäre die Gründung einer eigenen Firma, der ECT Oekotoxikologie GmbH, zusammen mit zwei Kollegen, nicht möglich gewesen. Thomas' klare Vorstellungen, seine wissenschaftlichen Kenntnisse und seine Fähigkeit, sich in für Biologen fachfremde und oftmals eher trockene Gebiete wie Finanzen oder Verträge

einzuarbeiten, waren von Anfang an ein Garant für den Erfolg der ECT. Damit ist vor allem der Erfolg des Geschäftsmodells gemeint: einer bis heute durchgehaltenen Gratwanderung zwischen angewandter Forschung und Dienstleistung. Trotz der vielfältigen Aufgaben als Geschäftsführer (von Personalverantwortung über Projekt- und Finanzverwaltung bis hin zu strategischen Fragen der Ausrichtung) einer auf mehr als 30 Mitarbeiter angewachsenen Firma fand er noch die Zeit, wichtige wissenschaftliche Publikationen, vor allem auf dem Gebiet der Umweltrisikobeurteilung von Chemikalien, speziell Pharmaka, zu schreiben und diese Themengebiete entscheidend mit zu prägen.

Zwei Aspekte seiner Persönlichkeit sind in den vielen Wortmeldungen seiner Freunde und Kollegen nach seinem Tod immer wieder hervorgehoben werden: seine Qualität als Wissenschaftler, mit einem breiten, reflektierenden Wissen, das weit über die Ökotoxikologie hinausging. Für viele unter denen, die ihn kannten, war seine Fähigkeit wichtig, Anderen zuhören zu können und damit sich und ihnen Zeit zu geben. Er verfügte über eine immense Geduld, fragte nach, war einfach da - eine Eigenschaft, die mit Zuwendung oder Präsenz nur unzureichend beschrieben werden kann. In jedem Fall befähigte sie ihn in seinem Umfeld, innerhalb wie außerhalb der Firma, gerade bei gegensätzlichen Standpunkten und Interessen, zu vermitteln und zu moderieren, ohne dabei sich selbst oder seine Position aufzugeben.

Thomas hat fast sein gesamtes Berufsleben der Ökotoxikologie gewidmet. Durch seine Auftritte in der wissenschaftlichen Öffentlichkeit, speziell als Projektkoordinator (besonders hervor zu heben ist seine Rolle im EU-Projekt ERAPharm von 2004-2007), sein Engagement in der Ausbildung von Nachwuchswissenschaftlern und seine Publikationen hat er als Mitgründer und Geschäftsführer der ECT Oekotoxikologie GmbH sowie als langjähriges und führendes Mitglied der deutschen Sektion der „Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC)“ sowie der „Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh)“ die Entwicklung der Ökotoxikologie stark beeinflusst.

Bis zuletzt hat Thomas, obschon von Krankheit beeinträchtigt, Freude am Leben, an der Arbeit und vor allem am Gespräch und der Diskussion, gezeigt. Er hat uns ein nachdrückliches Beispiel dafür gegeben, dass es auch im oftmals stressigen und hektischen Berufsleben möglich ist, zugewandt, offen und verlässlich zu bleiben – und er war so die Seele der ECT GmbH.

Thomas Knacker hinterlässt seine Frau, Margitta, und seine Tochter, Katharina. Wir, seine Kollegen, Freunde und Mitarbeiter in der ECT Oekotoxikologie GmbH, möchten ihm mit diesem Beitrag ein ehrendes Andenken bewahren.

In tiefer Trauer,

- Karl-Heinz Bauer and Lilo Weber, Hessenwasser Groß-Gerau, Germany
- Werner Brack, UFZ Leipzig
- Alistair Boxall, University of York, U.K.
- Thomas Braunbeck, University of Heidelberg, Germany
- Eric Bruns, Bayer CropScience Aktiengesellschaft, Leverkusen-Monheim,
- Anja Coors, ECT Oekotoxikologie GmbH, Flörsheim a.M.,
- Klaus Peter Ebke, Mesocosm GmbH, Homberg (Ohm),
- Adolf Eisenträger, Umweltbundesamt, Dessau,
- Tobias Frische, Umweltbundesamt, Dessau,
- Henner Hollert, Institut für Umweltforschung, RWTH Aachen University,
- Udo Hommen, Fraunhofer Institut für Molekularbiologie und Angewandte Oekologie, Schmallenberg,
- Ulrike Kammann, Institut für Fischereiökologie, Hamburg,
- Christine Kula, Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit (BVL), Braunschweig,
- Jörg Oehlmann and Ulrike Schulte-Oehlmann, University of Frankfurt, Germany
- Chris Metcalfe, Trent University, Canada
- Christoph Schäfers, Fraunhofer IME, Aachen
- Andreas Schäffer, RWTH Aachen University
- Julia Schwaiger, Bavarian LFU, Germany
- Helmut Segner, University of Berne, Switzerland
- Mark Servos, University of Waterloo, Canada
- Inge Werner, Oekotoxzentrum, Eawag/EPFL, Dübendorf
- Thomas Ternes, Bundesanstalt für Gewässerkunde Koblenz, Germany
- Rita Triebkorn and Heinz Köhler, University of Tübingen, Germany

Unsere neuen Mitglieder

Neuaufnahmen Umweltchemie und Ökotoxikologie vom 12.07. bis 06.09.2011

Dipl.-Chem. Bierschenk, Maik

Eintrittsdatum FG: 20.07.2011

Brzezina, Ewelina

Eintrittsdatum FG: 27.07.2011

Dr. Coors, Anja

Eintrittsdatum FG: 20.07.2011

Mayer, Michael

Eintrittsdatum FG: 03.08.2011

Priebe; Jacqueline

Eintrittsdatum FG: 04.08.2011

Dipl.-Chem. Zilkens, Peter

Eintrittsdatum FG: 21.07.2011

We mourn for our
company's founder,
managing director,
colleague and friend.

Dr. Thomas Knacker

* 29.04.1951 † 30.10.2011



"Those who still think that listening isn't an art should see if they can do it half as well!" - Michael Ende, Momo

Thank you for the time you shared with us.

Traueranzeige auf der Webseite der ECT Oekotoxikologie GmbH (www.ect.de)

Geburtstage

Der Vorstand und die Redaktion der Mitteilungen unserer Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie gratulieren unseren Jubilaren aufs herzlichste

Geburtstagsliste Januar bis März 2012

60 Jährige

Dr. Anna Marx

Leverkusen

Geburtstag: 20.01.1952

Dr. Hinrich Timmann

Hamburg

Geburtstag: 30.01.1952

Dr. Gerhard Geipel

Dresden

Geburtstag: 22.03.1952

Dipl.-Chem. Rüdiger Gruschka

Zeppernick

Geburtstag: 23.03.1952

Dr. Manfred Hempel

Dresden

Geburtstag: 28.03.1952

Dr. Sigrid Rembold

Pfeffingen (Schweiz)

Geburtstag: 31.03.1952

65 Jährige

Dr. Hans Dvorak

Brühl

Geburtstag: 17.03.1947