



Mitteilungen der Fachgruppe

Umweltchemie und Ökotoxikologie

Gesellschaft Deutscher Chemiker

- Editorial: Von abhängigen und unabhängigen Experten
- UV-Stabilisatoren und UV-Filter in Sedimenten
- Sorption organischer Basen aus wässrigen Lösungen
- Mischungstoxizität von Nanomaterialien und Chemikalien
- Einladung zur Mitgliederversammlung
3. Doktorandentag der Fachgruppe
- Kurz vorgestellt: Chair of Applied Geology,
Universität Erlangen-Nürnberg und
Hydroisotop GmbH
- Veranstaltungsankündigungen,
Kurznachrichten und Personalia



3/2016

22. Jahrgang, September 2016 ISSN 1618-3258

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 –Raum- und Umweltwissenschaften–
 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:

Blick auf die Altstadt Tübingens, dem Veranstaltungsort der gemeinsamen SETAC-GLB/GDCh-Fachgruppentagung, vom Neckar aus gesehen (Photo: B. Honner / © Verkehrsverein Tübingen).

Editorial

- 62 Von abhängigen und unabhängigen Experten

Originalbeiträge

- 63 **C. Apel et al.:** Vorkommen und Verteilung organischer UV Stabilisatoren und UV Filter in Sedimenten europäischer Flussmündungen
 67 **M. Schaffer et al.:** Charakterisierung der Sorption organischer Basen aus wässrigen Lösungen: Aktuelle Ergebnisse und Limitierungen bei der Prognose des Umweltverhaltens
 71 **D. Kühnel und S. Böhme:** Mischungstoxizität von Nanomaterialien und Chemikalien

Aus der Fachgruppe

- 75 Einladung zur FG-Mitgliederversammlung
 75 3. Doktorandentag der Fachgruppe

Kurz vorgestellt

- 76 Chair of Applied Geology, Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg
 77 Hydroisotop GmbH

Informationen

Tagungsbericht

- 79 Kurzbericht über den 16. Nationalkongress der Fachgruppe „Umweltchemie und Kulturerbe“ der Italienischen Chemischen Gesellschaft

Veranstaltungsankündigungen

- 79 Data Analysis and Modeling in Earth Sciences (DAMES) – Int. Conference, 26.-28.09.2016, Hamburg
 80 Int. Symposium on Persistent Toxic Substances, 11.-14.10.2016, Leipzig
 80 15th Symposium on remediation, 13.-14.10.2016, Jena
 80 Int. Workshop: Engineered Nanoparticles in Environmental Systems, 21.-22.10.2016, Landau
 80 Int. Symposium & Workshop: Fish and amphibian embryos as alternative models in toxicology and teratology, 1.-2.12.2016, Aulnay-sous-Bois/Paris, France
 81 2nd Green & Sustainable Chemistry Conference, 14.-17.05.2017, Berlin

Kurznachrichten

- 82 Public consultation on the use of the benchmark dose approach in risk assessment
 82 The Italian Chemical Society's position on climate change
 84 OECD report: Costs of global air pollution are likely to increase significantly by 2060
 85 UBA-Texte 38/2016: POP- und Hg-Emissionen aus abfallwirtschaftlichen Anlagen
 85 Arzneimittelwirkstoffe in der Umwelt: Neue Studie des Umweltbundesamtes Österreich
 86 UBA-Texte 54/2016: Aufklärung der Ursachen von Tierarzneimittelfunden im Grundwasser
 86 Report 0577 (Umweltbundesamt Wien): Bromierte Flammschutzmittel in der Umwelt
 87 UBA-Hintergrundpapier: Nanomaterialien in der Umwelt
 87 UBA-Texte 57/2016: Prüfungslücke bei der Biozidbewertung: Wirkungsrelevanz von Repellentien
 87 UBA-Texte 60/2016: Maßnahmen zur Verminderung des Eintrages von Mikroschadstoffen in die Gewässer
 88 Neues Förderprojekt des Bayerischen Umweltministeriums: „PureAlps“
 88 Bayerisches Landesamt für Umwelt: Abschlussbericht: Untersuchungen zur Akkumulation verschiedener persistenter Schadstoffe in terrestrischen Wildtieren
 88 Chemists urge Israel to ban chemical weapons

Rezension

- 89 Chemiker im „Dritten Reich“ – eine Aufarbeitung des dunkelsten Kapitels der Geschichte der GDCh-Vorläuferorganisationen

Personalia

- 91 Eintritte in die FG 18.05. - 29.08.2016
 91 Geburtstage 4. Quartal 2016

Von abhängigen und unabhängigen Experten

Die hitzige Diskussion um Glyphosat in den Medien hat auch einen Begriff wieder einmal in das Rampenlicht gebracht – den des „unabhängigen Experten“.

In der Tat ist für die Wissenschaft Unabhängigkeit wichtig. Unabhängigkeit in dem Sinne, nur der Wahrheit verpflichtet zu sein, Tatsachen nicht zu verbiegen. Das ist Kern des wissenschaftlichen Arbeitens selbst. An diesem Anspruch müssen Wissenschaftler sich zunächst selbst jeden Tag messen. Und es gelingt wohl nur Wenigen, jeden Tag diesen Anspruch zu erfüllen.

Mit dem „unabhängigen Experten“ ist aber eigentlich etwas anderes impliziert: eine Person die weder im Dienst der Industrie noch der Behörden steht und die deshalb, anders als jene, zu einer objektiven Einschätzung bei gesellschaftlich kontroversen Fragen kommen könne. Oft hört man, zum Beispiel bei Anfragen von Journalisten: Nein, man wolle bewusst keine Mitarbeiter staatlicher Einrichtungen befragen, sondern suche einen „unabhängigen Experten“.

Das ist eine verstörende Position. Denn sie disqualifiziert die Experten in staatlichen Einrichtungen (und die der Industrie sowieso?), auch wenn diese sich mit den Belangen des Umweltschutzes und des Verbraucherschutzes auf hohem fachlichem Niveau befassen.

Diese Position gemahnt in gewisser Hinsicht auch unangenehm an pauschale Argumentationen in rechtspopulistischen Kreisen, dass „man heute die Wahrheit ja gar nicht mehr sagen“ dürfe. In diesem Sinne ist dies auch eine gefährliche Sichtweise. Wenn sich in der Öffentlichkeit nämlich die Einstellung weiter festsetzt, dass staatliche Einrichtungen ausschließlich politischen Vorgaben dienen, dann befördert das die Politikverdrossenheit und die innere Ablehnung staatlichen Handelns und Entscheidens.

Außerdem kommt in dieser Position eine simplifizierte Welt-sicht zum Ausdruck. Auch der Experte in einer nicht-industriellen, nicht-behördlichen oder nicht-staatlichen Einrichtung hat Interessen und kann also in seinen Äußerungen interessen-geleitet sein. Möglicherweise sind diese nicht immer so offensichtlich. Aber es gab im „Falle“ Glyphosat eben auch den „unabhängigen“ Experten, der ein selbständiges Analyselabor betreibt und dort einen neuen Test auf Glyphosat etabliert hat. Er hatte offenbar ein Interesse daran, positive Befunde zu generieren und diese der Öffentlichkeit mitzuteilen.

Selbst wenn es weniger offensichtlich ist: auch Wissenschaftler an einer Hochschule oder Forschungseinrichtung müssen sich um Fördermittel bemühen und können daher ein Interesse daran haben, dass, wenn schon nicht ihr Name, so doch das von ihnen bearbeitete Thema in den Medien als bedeutsam

dargestellt wird. Das ist auch legitim – aber kein Ausdruck von Unabhängigkeit. Das gilt auch für das Mitglied einer Nicht-Regierungsorganisation, die Präsenz in den Medien benötigt, um die von ihr für richtig erachtete politische Wirkung zu entfalten und die hierfür notwendigen Spenden zu gewinnen.

Alle diese Einrichtungen, alle diese Spieler sind essentiell für die gesellschaftliche Diskussion und unsere demokratische Willensbildung. Aber es ist nicht so, dass Mitglieder einer dieser Gruppen aus moralischen Erwägungen heraus wissenschaftlich glaubwürdigere, unabhängigere und damit „bessere“ Experten wären.

Es gibt sicher gute (nicht nur gut gemeinte) Gründe, dem weiteren Einsatz von Glyphosat in diesem enormen Umfang skeptisch gegenüber zu stehen. Aber bei Glyphosat wie bei anderen Themen sollten wir als Fachgesellschaft durchaus offensiv an Folgendes erinnern:

- Es ist richtig, (finanzielle) Abhängigkeiten offen zu kommunizieren und zu thematisieren. Sie taugen aber nicht als Gradmesser von Wissenschaftlichkeit.
- Es ist wichtig, zu differenzieren zwischen dem wissenschaftlichen Disput und der politischen Diskussion eines Themas, auch wenn es gegenseitige Beeinflussungen natürlich gibt.
- Beim Thema Pflanzenschutz hieße das zum Beispiel herauszuarbeiten,
 - welches Wissen verfügbar ist, wo Wissenslücken und Ungewissheiten bestehen, und welche Alternativen es gibt,
 - und dann zu diskutieren, wie wir diese Unsicherheiten gewichten, in welchem Maße sie unsere Einschätzung zum Thema Pflanzenschutz oder zu einem bestimmten Wirkstoff verändern.

Christine Achten, Stefanie Jäger, Thorsten Reemtsma, Markus Telscher, Andreas Willing
Vorstand der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie



Vorkommen und Verteilung organischer UV-Stabilisatoren und UV-Filter in Sedimenten europäischer Flussmündungen

Christina Apel^{1,2} (christina.apel@hzg.de), Hendrik Wolschke^{1,3} (hendrik.wolschke@hzg.de),
Riccardo Massei⁴ (riccardo.massei@ufz.de), Ralf Ebinghaus¹ (ralf.ebinghaus@hzg.de)

¹ Helmholtz-Zentrum Geesthacht, Institut für Küstenforschung, Abteilung für Umweltchemie, Max-Planck-Straße 1, 21502 Geesthacht

² Universität Hamburg, Institut für Anorganische und Angewandte Chemie, Martin-Luther-King-Platz 6, 20146 Hamburg

³ Leuphana Universität Lüneburg, Institut für Nachhaltige Chemie und Umweltchemie, Scharnhorststraße 1, 21335 Lüneburg

⁴ Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung, Abteilung Wirkungsorientierte Analytik, Permoserstraße 15, 04318 Leipzig

Zusammenfassung

Die aktuelle Belastungssituation von Mündungssedimenten großer europäischer Flüsse mit den UV-Stabilisatoren UV 320, UV 326, UV 327 und den UV-Filtern Ethylhexylmethoxycinnamat (EHMC) und Octocrylen (OC) wurde in dieser Studie untersucht. Die höchsten Konzentrationen wurden in den Mündungen der industriell geprägten Flüsse Schelde und Rhein nachgewiesen. Mit 16,7 ng/g dw (Trockengewicht) wies der UV-Filter OC in einer Probe des Rhein-Deltas die höchste in dieser Studie gemessene Konzentration auf. OC und UV 326 konnten in allen Flussmündungen detektiert werden. UV 320 hingegen konnte lediglich in drei Proben nachgewiesen werden; eine Quantifizierung war aufgrund der geringen Mengen jedoch nicht möglich.

Einleitung

Organische UV-Stabilisatoren weisen heutzutage ein breites Anwendungsspektrum auf. In Kunststoffen, Farben und Beschichtungen tragen sie als UV Absorber zur Langlebigkeit der Produkte bei. In Kosmetikprodukten wie Sonnenschutzmitteln dienen UV-Filter dem Schutz der Haut und Haare vor UV-Strahlung und deren schädlichen Folgen für den Menschen. Eine klare Trennung zwischen UV-Stabilisator und UV-Filter ist nicht immer möglich.

Derzeit sind in der EU 27 Substanzen als UV-Filter für die Verwendung in Kosmetikartikeln zugelassen (EC, 2016). Durch Freizeitaktivitäten wie Schwimmen sowie durch Baden und das Waschen von Kleidung können UV-Filter direkt oder indirekt über Kläranlagen (Review Ramos et al., 2016) in die Umwelt gelangen. Sie wurden mehrfach in Oberflächenwasser und in Sedimenten in Konzentrationen bis in den mittleren ng/g dw-Bereich nachgewiesen (Huang et al., 2016; Kaiser et al., 2012a; Langford et al., 2015; Rodil und Moeder, 2008; Sanchez Rodriguez et al. 2015; Tsui et al. 2014; Tsui et al., 2015). Viele UV-Filter weisen in vitro eine hormonähnliche Wirkung auf (Fent et al., 2008). Für EHMC sowie einige andere UV-Filter wurde zudem eine hormonähnliche Wirkung in Fisch nachgewiesen (Fent et al., 2008; Christen et al., 2011).

Eine wichtige Klasse von UV-Stabilisatoren sind Phenol-Benzotriazole. Sie weisen größtenteils hohe Oktanol/Wasser

Verteilungskoeffizienten (mit KOWWIN 1.68 kalkulierte log KOW > 5) auf und besitzen ein großes Sorptions- und Bioakkumulationspotential. Im Labor durchgeführte Abbaustudien deuten auf eine hohe Persistenz in Sedimenten hin (Wick et al., 2016). Daten zum Vorkommen von Phenol-Benzotriazolen in Umweltmatrices sind spärlich. Weltweit wurden sie in Zu- und Abläufen sowie in Schlämmen von Kläranlagen nachgewiesen. Eine Übersicht findet sich in Ramos et al. (2016). Auch in Oberflächensedimenten von Flüssen, Seen und im küstennahen Bereich wurden sie detektiert (Langford et al., 2015, Nakata et al., 2009; Wick et al., 2016; Zhang et al., 2011). Während die Konzentrationen in küstennahen und marinen Sedimenten im unteren ng/g dw-Bereich liegen, wurden in Klärschlämmen Konzentrationen bis in den µg/g dw-Bereich gemessen.

Bisher wurden vier Phenol-Benzotriazole als SVHC (Substance of Very High Concern) eingestuft: UV 320, UV 327, UV 328 und UV 350 (ECHA, 2016). Diese Verbindungen sind als sehr persistent und sehr bioakkumulierend (vPvB) bzw. als persistent, bioakkumulierend und toxisch (PBT) und vPvB bewertet und unter REACH (Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals) in die Kandidatenliste zur Zulassung aufgenommen worden.

Diese Studie untersucht das Vorkommen und Verteilungsmuster von drei häufig eingesetzten organischen UV Stabilisatoren und zwei UV-Filtern in Sedimenten der Mündungen großer europäischer Flüsse.

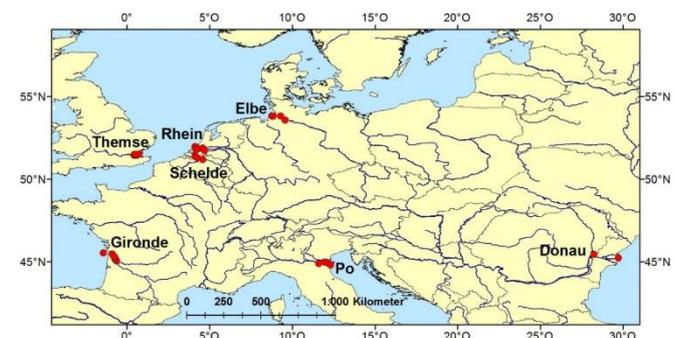


Abb. 1: Beprobte Flussmündungen

Material und Methoden

Zwischen 2013 und 2015 wurden insgesamt 31 Oberflächensedimente der Ästuare von Elbe (4 Proben), Schelde (3 Proben), Gironde (7 Proben) und Themse (6 Proben) sowie des Po- (4 Proben), Donau- (2 Proben) und Rhein-Deltas (5 Proben) genommen (Abbildung 1).

Die Aufarbeitung der Sedimentproben erfolgte adaptiert nach Sühning et al. (2015): Zuerst wurden die Proben zusammen mit wasserfreiem Natriumsulfat homogenisiert. Anschließend erfolgte eine sequentielle ASE-Extraktion (Dionex ASE 350, Thermo Scientific) mit integrierter Aufreinigung. Dafür wurden 22 ml-ASE-Zellen mit 5 g 10 % deaktiviertem Silicagel, 2 g aktiviertem Kupfer und 3-5 g trockenem Sediment befüllt. Zu allen Proben wurden 3-(4-Methylbenzyliden-d₄)-Campher, ¹³C₆-Benzophenon-3 und Triphenylphosphat-d₁₅ als interne Standards dotiert. Die Extraktion der ersten Fraktion erfolgte mit Hexan (2 Zyklen je 8 min bei 120 bar und 100 °C), die der zweiten mit Dichlormethan/Aceton (90:10). Für die zweite Fraktion wurde nach der Extraktion eine weitere Säulen-Aufreinigung (2,5 g 10 % deaktiviertes Silicagel, Elution mit Dichlormethan) durchgeführt. Nach der Volumenreduktion der Extrakte auf 150 µl wurden ¹³C-PCB-141 und ¹³C-PCB-208 als Injektionsstandards zugesetzt. Die instrumentelle Analytik erfolgte an einer GC-(EI)-MS/MS (Agilent 7010). Es wurde jeweils eine Doppelbestimmung durchgeführt. Zur Trocken-

massebestimmung der Proben wurde je ein Äquivalent der Proben bei 105 °C bis zur Massenkonstanz getrocknet.

Die Nachweis- und Bestimmungsgrenzen der Methode lagen zwischen 0,03 ng/g dw für UV 327 und 0,90 ng/g dw für OC bzw. 0,10 ng/g dw für UV 327 und 2,70 ng/g dw für OC. Die Bezeichnungen der detektierten UV-Stabilisatoren und UV-Filter sind in Tabelle 1 zusammengestellt.

Tabelle 1: Gebräuchliche Abkürzungen, CAS-Nummer und Bezeichnung der nachgewiesenen UV-Stabilisatoren und UV-Filter.

Abkürzungen	CAS-Nummer	Bezeichnung
UV-320	3846-71-7	2-Benzotriazol-2-yl-4,6-di-tert-butylphenol
UV-326	3896-11-5	2-(5-Chloro-2H-benzotriazol-2-yl)-6-(1,1-dimethylethyl)-4-methylphenol
UV-327	3864-99-1	2,4-di-tert-Butyl-6-(5-chloro-2H-benzotriazol-2-yl)phenol
EHMC/OMC	5466-77-3	2-Ethylhexyl 4-methoxycinnamat
OC/OCR	6197-30-4	Octocrylen

Ergebnisse und Diskussion

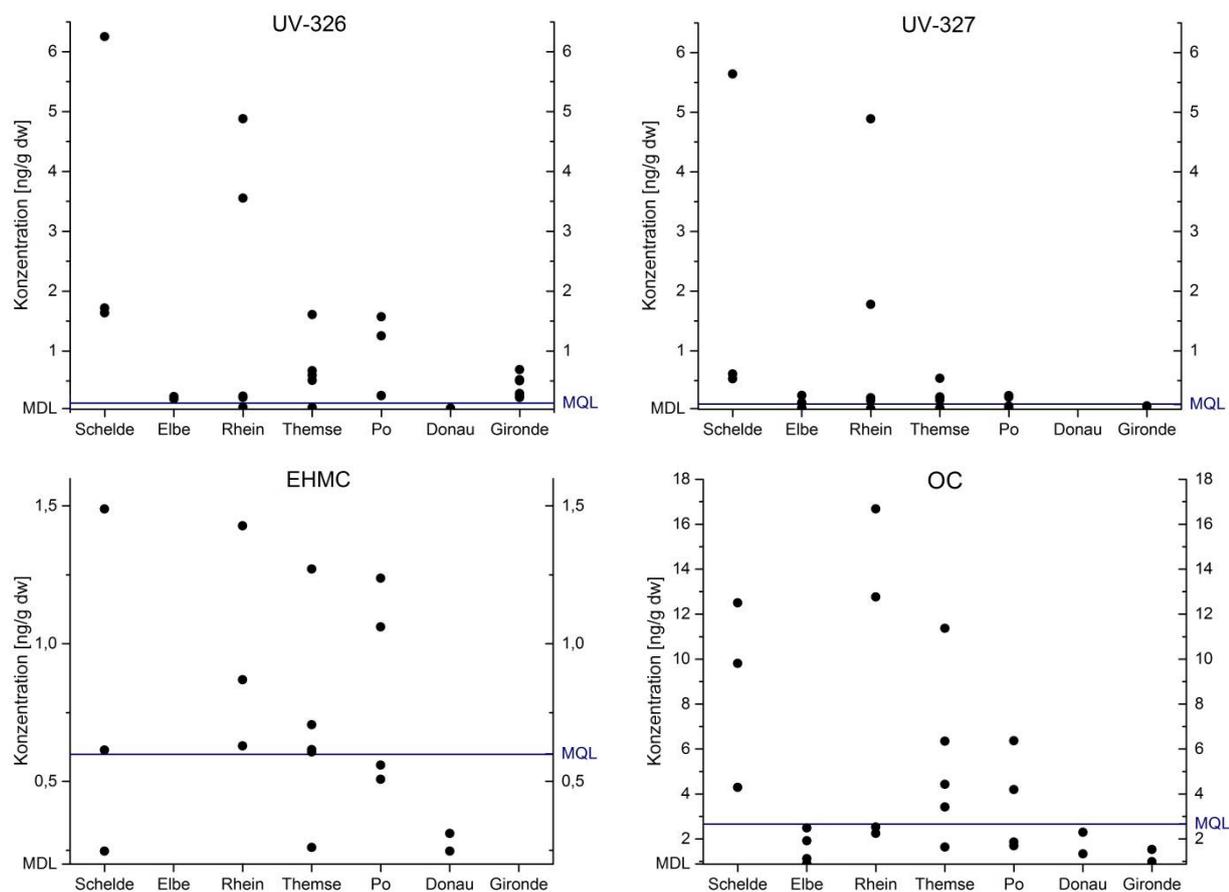


Abb. 2: Konzentrationen der UV-Stabilisatoren UV-326, UV-327, EHMC und OC in Sedimenten bezogen auf das Trockengewicht. Jeder Punkt entspricht dem Mittelwert der Doppelbestimmung an einer Probenahmestelle. MDL = Method Detection Limit; MQL = Method Quantification Limit.

Die Ergebnisse sind in Abbildung 2 graphisch dargestellt. Sowohl UV-Stabilisatoren als auch UV-Filter akkumulieren in Sedimenten und wurden in allen Flussmündungen im unteren ng/g dw Bereich nachgewiesen. Zwischen den Flussmündungen sind deutliche Konzentrationsunterschiede zu erkennen, wobei in den industriell geprägten Flüssen Rhein und Schelde die höchsten Konzentrationen gefunden worden. Die Konzentrationen in den Mündungen von Elbe, Donau und Gironde sind für alle detektierten Substanzen geringer. Besonders überraschend ist, dass in der Donaumündung keine Substanz über der Bestimmungsgrenze lag.

UV-326 wurde in allen Flussmündungen identifiziert und quantifiziert. Sedimente aus dem Schelde-Ästuar und dem Rhein-Delta wiesen mit 6,3 ng/g dw bzw. 4,9 ng/g dw die höchsten Konzentrationen auf. Das Vorkommen und die Konzentrationen von UV 327 in den Flussmündungen ähnelten dem von UV 326 (Korrelationskoeffizient nach Pearson $r = 0,95$). Lediglich in den Proben des Donau-Deltas konnte UV 327 nicht detektiert werden. Eine hohe Korrelation im Verteilungsmuster dieser beiden Substanzen wurde auch von Wick et al. (2016) in Sedimenten deutscher Flüsse beobachtet und lässt auf gemeinsame Quellen und ein ähnliches Umweltverhalten von UV-326 und UV-327 schließen.

UV 320 (nicht dargestellt) wurde lediglich in 2 Proben des Rhein-Deltas und einer Probe des Po-Deltas detektiert. Die Konzentrationen lagen unterhalb der Bestimmungsgrenze von 0,92 ng/g dw. Damit wies UV 320 deutlich geringere Konzentrationen und eine deutlich geringere Detektionsrate als UV 326 und UV 327 auf. Die gleiche Beobachtung machten auch Wick et al. (2016) in Flusssedimenten in Deutschland, Nakata et al. (2009) in Fluss- und küstennahen Sedimenten in Japan und Cantwell et al. (2015) in küstennahen Sedimentkernen in den USA. Eine Ursache könnte ein geringerer Einsatz von UV-320 als von anderen Phenol-Benzotriazolen als UV-Stabilisator sein.

Ein Vergleich mit anderen Arbeiten zeigt eine ähnliche Belastungssituation des Rhein-Deltas und des Schelde-Ästuars wie dem Oslofjord in Norwegen für UV-327 auf (Langford et al., 2015). Verglichen mit Flusssedimenten des Rheins (bis 44 ng/g dw für UV-326) und der Elbe (bis 14 ng/g dw für UV-326) wurden für alle drei UV-Stabilisatoren geringere Konzentrationen detektiert, was mit einer Verdünnung im Mündungsbereich erklärt werden kann.

Der UV Filter OC konnte in den Flussmündungen von Schelde, Rhein, Themse und Po quantifiziert und in den anderen detektiert werden. Eine Probe des Rhein-Deltas wies mit 16,7 ng/g dw die höchste in dieser Studie gemessene Konzentration auf. Auch in den anderen Flussmündungen erreichte OC höhere Konzentration als die anderen untersuchten Substanzen.

Der UV-Filter EHMC konnte weder im Elbe- noch im Gironde-Ästuar detektiert werden. In beiden Proben des Donau-Ästuars wurde EHMC detektiert, eine Quantifizierung war jedoch aufgrund der geringen Konzentrationen nicht möglich. Auch in den anderen Flussmündungen wurde EHMC nur in geringeren Konzentrationen von max. 1,5 ng/g dw nachgewiesen.

Der Konzentrationsbereich der UV-Filter lag im Oslofjord mit max. 16,4 ng/g dw für EHMC und max. 82,1 ng/g dw für OC leicht höher als in den in dieser Studie untersuchten Gebieten (Langford et al., 2015). Im Oslofjord wurde zudem EHMC als dominierender UV-Filter identifiziert und in allen Proben nachgewiesen. Huang et al. (2016) berichten ebenfalls von höheren EHMC-Konzentrationen bis 81,6 ng/g dw in Sedimenten des Perlfloss-Ästuars in China. Hier lag EHMC zudem in um den Faktor 3 höheren Konzentrationen vor als OC. Deutlich höhere Konzentrationen bis um die 500 ng/g dw wurden in küstennahen Sedimenten in Japan und Hong Kong (Tsui et al., 2015) und in Fischereihäfen in China (Huang et al., 2016) gemessen. Besonders an der Küste von Hong Kong dominierte EHMC mit Konzentrationen bis zu 447 ng/g dw im Vergleich zu OC (max. 15,6 ng/g dw). Verglichen mit diesen Gebieten in Asien sind die in dieser Studie untersuchten Gebiete geringer mit UV-Filtern belastet. Vor allem EHMC liegt in deutlich geringeren Konzentrationen vor. Als Ursache könnte ein geringerer Gebrauch von UV-Filter-haltigen Produkten wie Sonnenschutzcreme sein oder der Einsatz von anderen Substanzen. Ein direkter Vergleich der Belastungssituation zwischen Europa und Asien für mehr Substanzen könnte darüber Aufschluss geben.

Im Sediment akkumulierende Substanzen können besonders die benthische Umwelt beeinflussen. Kaiser et al. (2012b) untersuchten in vivo die Auswirkungen von OC und EHMC auf zwei Schneckenarten. Während für OC bei Sedimentkonzentrationen im Bereich von 0,6 ng/g dw bis 50 µg/g dw keine Veränderungen festgestellt werden konnten, wurde für EHMC bei beiden Schneckenarten eine Hemmung der Reproduktion beobachtet. Die NOEC (No Observed Effect Concentrations) für EHMC betragen 80 ng/gdw bzw. 2 µg/g dw. Die in dieser Studie gemessenen Konzentrationen von EHMC in Sedimenten liegen mit max. 1,5 ng/g dw deutlich unter den NOEC Werten, in anderen Gebieten (Huang et al., 2016; Tsui et al., 2015) wurden sie jedoch schon überschritten. Für Phenol-Benzotriazole liegen nach Wissen der Autoren keine toxikologischen Daten für benthische Organismen vor. Um eine aussagekräftige Bewertung der ökotoxikologischen Auswirkungen der Funde treffen zu können, sind mehr toxikologische Daten für benthische Organismen notwendig.

Literatur

Cantwell, M. G.; Sullivan, J. C.; Katz, D. R.; Burgess, R. M.; Bradford Hubeny, J. and J. King (2015). Source determination of benzotriazoles in sediment cores from two urban estuaries on the Atlantic Coast of the United States. *Mar Pollut Bull* 101 (1): 208-218.

Christen, V.; Zucchi, S. and K. Fent (2011). Effects of the UV-filter 2-ethyl-hexyl-4-trimethoxycinnamate (EHMC) on expression of genes involved in hormonal pathways in fathead minnows (*Pimephales promelas*) and link to vitellogenin induction and histology. *Aquat Toxicol* 102 (3-4): 167-176.

EC (2016). List of UV-Filters allowed in cosmetic products. [<http://ec.europa.eu/growth/tools-databases/cosing/> (22.06.2016)]

ECHA (2016). Liste der für eine Zulassung in Frage kommenden besonders besorgniserregenden Stoffe. [<http://echa.europa.eu/de/candidate-list-table> (16.06.2016)]

Fent, K.; Kunz, P. Y. and E. Gomez (2008). UV-Filters in the Aquatic Environment Induce Hormonal Effects and Affect Fertility and Reproduction in Fish. *Chimia* 62: 368-375.

Huang, W.; Xie, Z.; Yan, W.; Mi, W. and W. Xu (2016). Occurrence and distribution of synthetic musks and organic UV-filters from riverine and coastal sediments in the Pearl River estuary of China. *Mar Pollut Bull* (Article in Press).

Kaiser, D.; Wappelhorst, O.; Oetken, M. and J. Oehlmann (2012a). Occurrence of widely used organic UV-filters in lake and river sediments. *Environ Chem* 9: 139-147.

Kaiser, D.; Sieratowicz, A.; Zielke, H.; Oetken, M.; Hollert, H. and J. Oehlmann (2012b). Ecotoxicological effect characterisation of widely used organic UV-filters. *Environ Pollut* 163: 84-90.

Langford, K. H.; Reid, M. J.; Fjeld, E.; Oxnevad, S. and K. V. Thomas (2015). Environmental occurrence and risk of organic UV-filters and stabilizers in multiple matrices in Norway. *Environ Int* 80: 1-7.

Nakata, H.; Murata, S. and J. Filatreau (2009). Occurrence and concentrations of benzotriazole UV stabilizers in marine organisms and sediments from the Ariake Sea, Japan. *Environ Sci Technol* 43: 6920-6926.

Ramos, S.; Homem, V.; Alves, A. and L. Santos (2016). A review of organic UV-filters in wastewater treatment plants. *Environ Int* 86: 24-44.

Rodil, R. and M. Moeder (2008). Development of a method for the determination of UV-filters in water samples using stir bar sorptive extraction and thermal desorption-gas chromatography-mass spectrometry. *J Chromatogr A* 1179 (2): 81-88.

Sanchez Rodriguez, A.; Rodrigo Sanz, M. and J. R. Betancort Rodriguez (2015). Occurrence of eight UV-filters in beaches of Gran Canaria (Canary Islands). An approach to environmental risk assessment. *Chemosphere* 131: 85-90.

Sühling, R.; Barber, J. L.; Wolschke, H.; Kötke, D. and R. Ebinghaus (2015). Fingerprint analysis of brominated flame retardants and Dechloranes in North Sea sediments. *Environ Res* 140: 569-578.

Tsui, M. M.; Leung, H. W.; Wai, T. C.; Yamashita, N.; Taniyasu, S.; Liu, W.; Lam, P. K. and M. B. Murphy (2014). Occurrence, distribution and ecological risk assessment of

multiple classes of UV-filters in surface waters from different countries. *Water Res* 67: 55-65.

Tsui, M. M.; Leung, H. W.; Kwan, B. K.; Ng, K. Y.; Yamashita, N.; Taniyasu, S.; Lam, P. K. and M. B. Murphy (2015). Occurrence, distribution and ecological risk assessment of multiple classes of UV-filters in marine sediments in Hong Kong and Japan. *J Hazard Mater* 292: 180-187.

Wick, A.; Jacobs, B. und T. A. Ternes (2016). Phenol-Benzotriazole in Proben der Umweltprobenbank - Screening und Zeitreihen. Endbericht, Bundesanstalt für Gewässerkunde, Koblenz.

Zhang, Z.; Ren, N.; Li, Y. F.; Kunisue, T.; Gao, D. und K. Kannan (2011). Determination of benzotriazole and benzo-phenone UV-filters in sediment and sewage sludge. *Environ Sci Technol* 45 (9): 3909-3916.



Charakterisierung der Sorption organischer Basen aus wässrigen Lösungen: Aktuelle Ergebnisse und Limitierungen bei der Prognose des Umweltverhaltens

Mario Schaffer^a (Mario.Schaffer@geo.uni-goettingen.de), Susann Kutzner^b (Susann.Kutzner@mailbox.tu-dresden.de), Hilmar Börnick^b (Hilmar.Boernick@tu-dresden.de), Karsten Nödler^c (Karsten.Noedler@tzw.de), Eckhard Worch^b (Eckhard.Worch@tu-dresden.de), Tobias Licha^a (Tobias.Licha@geo.uni-goettingen.de)

^a Geowissenschaftliches Zentrum, Abt. Angewandte Geologie, AG Hydrochemie, Georg-August-Universität Göttingen, Goldschmidtstraße 3, 37077 Göttingen

^b Institut für Wasserchemie, Technische Universität Dresden, 01062 Dresden

^c TZW: DVGW-Technologiezentrum Wasser, Karlsruher Straße 84, 76139 Karlsruhe

Zusammenfassung

Viele organische Spurenstoffe sind basische Stickstoffverbindungen, die als organische Kationen in der Umwelt auftreten. Im Gegensatz zu organischen Anionen können organische Kationen, trotz ihrer hohen Polarität und Wasserlöslichkeit, insbesondere aufgrund von Kationenaustauschprozessen erheblich sorbieren. Das Ausmaß dieser Prozesse hängt von einer Vielzahl an Einflussgrößen ab und kann bisher nicht hinreichend in Prognosemodellen berücksichtigt werden, mit der Folge, dass die Sorption von organischen Basen meist deutlich unterschätzt wird. Die Ergebnisse geben einen Einblick in die Komplexität ihrer Sorption und liefern einen wichtigen Beitrag zum besseren Verständnis der Mechanismen und Abhängigkeiten, welche das Sorptionsverhalten organischer Kationen in der Umwelt bestimmen.

1. Einleitung

In den letzten Jahren haben ionische organische Verbindungen, aufgrund ihrer hohen Wasserlöslichkeit und ubiquitären Detektierbarkeit, in der aquatischen Umweltchemie zunehmend an Bedeutung gewonnen. Ein beträchtlicher Teil dieser organischen Spurenstoffe sind protonierte Stickstoffverbindungen mit pK_s -Werten oberhalb des üblichen pH-Bereichs natürlicher Wässer, weshalb sie hauptsächlich in ihrer geladenen kationischen (ggf. zwitterionischen) Form vorliegen (Schaffer und Licha, 2014). Schätzungsweise 50 % der insgesamt etwa 160.000 vorregistrierten und registrierten REACH-Stoffe (ECHA, 2016) sind in der Lage, bei umweltrelevanten pH-Werten ($pH = 4-10$) Ionen zu bilden, von denen etwa die Hälfte basische (14 %) bzw. zwitterionische (8 %) Eigenschaften besitzt (Franco et al., 2010). Unter den pharmazeutischen Wirkstoffen ist dieser Anteil sogar deutlich höher (Manallack, 2007; 2009).

Neben chemischen und biologischen Transformationsprozessen bestimmen insbesondere Sorptionsprozesse an Feststoff-Wasser-Grenzflächen die Mobilität und somit den Verbleib organischer Spurenstoffe in der aquatischen Umwelt. Während anionische Stoffe üblicherweise kaum zurückgehalten werden, können Kationen (und Zwitterionen), trotz ihrer hohen Polarität, während der Untergrundpassage erheblich retardiert werden. Zur Abschätzung der Sorptionsaffinität von organischen Stoffen werden seit vielen Jahren Korre-

lationen verwendet, mit denen anhand von experimentell bzw. rechnerisch ermittelten $\log K_{ow}$ -Werten über empirische Korrelationsbeziehungen auf den Kohlenstoffgehalt des Sorbens normierte Sorptionskoeffizienten ($\log K_{oc}$) abgeschätzt werden können. Die Gültigkeit dieser Vorgehensweise wurde bereits vielfach für ungeladene Verbindungen gezeigt (Limousin et al., 2007; Schaffer und Licha, 2015). Für ionische Verbindungen ist die Nutzung dieser $\log K_{ow} - \log K_{oc}$ -Korrelationen allerdings oftmals ungeeignet (Abb. 1), da in diesem Konzept nur hydrophobe und keine ionischen Wechselwirkungen berücksichtigt werden (Goss und Schwarzenbach, 2001; Kah und Brown, 2007; Schaffer et al., 2012a; ECETOC, 2013). Die Einbeziehung des pH-abhängigen n-Octanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten $\log D$ führt bei organischen Säuren und deren Anionen meist zu guten Prognosen des Sorptionsverhaltens (z.B. Kah und Brown, 2007; Franco und Trapp, 2008; Schaffer et al., 2012a). Dies ist damit zu erklären, dass aufgrund der meist negativen Oberflächenladung der am häufigsten vorkommenden Geosorbentien keine zusätzlichen (attraktiven) elektrostatischen Wechselwirkungen erwartet werden können und damit nur die Veränderung des Dissoziationsgrades und der damit einhergehenden Änderung der Polarität (erfasst über $\log D$) berücksichtigt werden muss. Die deutlich stärkere Sorption organischer Kationen (und Zwitterionen) im Vergleich zu organischen Anionen kann mit Kationenaustausch als zusätzlichem und entscheidendem Sorptionsprozess erklärt werden, da natürliche Aquifermaterialien (z.B. Sande, Tonminerale, Humusbestandteile) in der Regel, aufgrund der negativen Oberflächenladung, ein gewisses Kationenaustauschpotential besitzen. Folglich müssen auch ionische Wechselwirkungen bei der Abschätzung des Sorptionsverhaltens berücksichtigt werden und die Verwendung der oben erwähnten Korrelationen ist nur wenig zielführend (Abb. 1).

Das Kationenaustauschverhalten wird dabei von zahlreichen Faktoren bestimmt (z. B. pH-Wert und Ionenstärke des Wassers; Kationenaustauschkapazität, Ladungsnulldpunkt, Organikgehalt, spezifische Oberfläche und Vorbelastung des Sorbens), deren genaue Rolle bzw. quantitativer Einfluss jedoch nur in den seltensten Fällen bekannt ist. Die Zusammensetzung der Wasserphase ist dabei von besonderer Bedeutung, da pH-Wert und konkurrierende Ionen einen erheblichen Einfluss auf das Kationenaustauschgleichgewicht

von organischen Kationen haben. Um das Sorptionsverhalten basischer Verbindungen umfassend verstehen und quantifizieren zu können, ist eine intensive Auseinandersetzung mit allen potentiell auftretenden Sorptionsmechanismen (Kationenaustausch, hydrophobe Wechselwirkungen, H-Brücken, etc.) und relevanten Einflussfaktoren unvermeidlich. Aus diesem Grund sind die Ergebnisse der Untersuchungen, die hier exemplarisch für ausgewählte Amine vorgestellt bzw. zusammengefasst werden, für die Charakterisierung des Umweltverhaltens einer großen Bandbreite anthropogener Spurenstoffe von Bedeutung.

2. Sorptionsstudien

Neben der Komplexität ist ein Grund für den Mangel an geeigneten Vorhersagemodellen, dass zwar bereits zahlreiche Untersuchungen zum Sorptionsverhalten ionisierbarer organischer Spurenstoffe existieren, diese aber meist, aufgrund

abweichender Fragestellungen, nicht bei vergleichbaren Randbedingungen durchgeführt wurden. Für eine zukünftig bessere quantitative Vorhersage des Stofftransportverhaltens wurde deshalb damit begonnen, die einzelnen Sorptionsmechanismen und deren Zusammenwirken sowie den Einfluss wesentlicher Randbedingungen systematisch zu studieren. Dabei war bei den hier vorgestellten Untersuchungen zunächst von Interesse, welchen Einfluss ausgewählte Randbedingungen (z. B. Art und Konzentration anderer Ionen in direkter Konkurrenz um Sorptionsplätze, Eigenschaften der Feststoffoberflächen, Molekülstruktur des Sorptivs) auf die beobachtete Sorption ausüben und inwiefern weitere Wechselwirkungsmechanismen (H Brücken, Komplexbildung, etc.) eine relevante Rolle spielen.

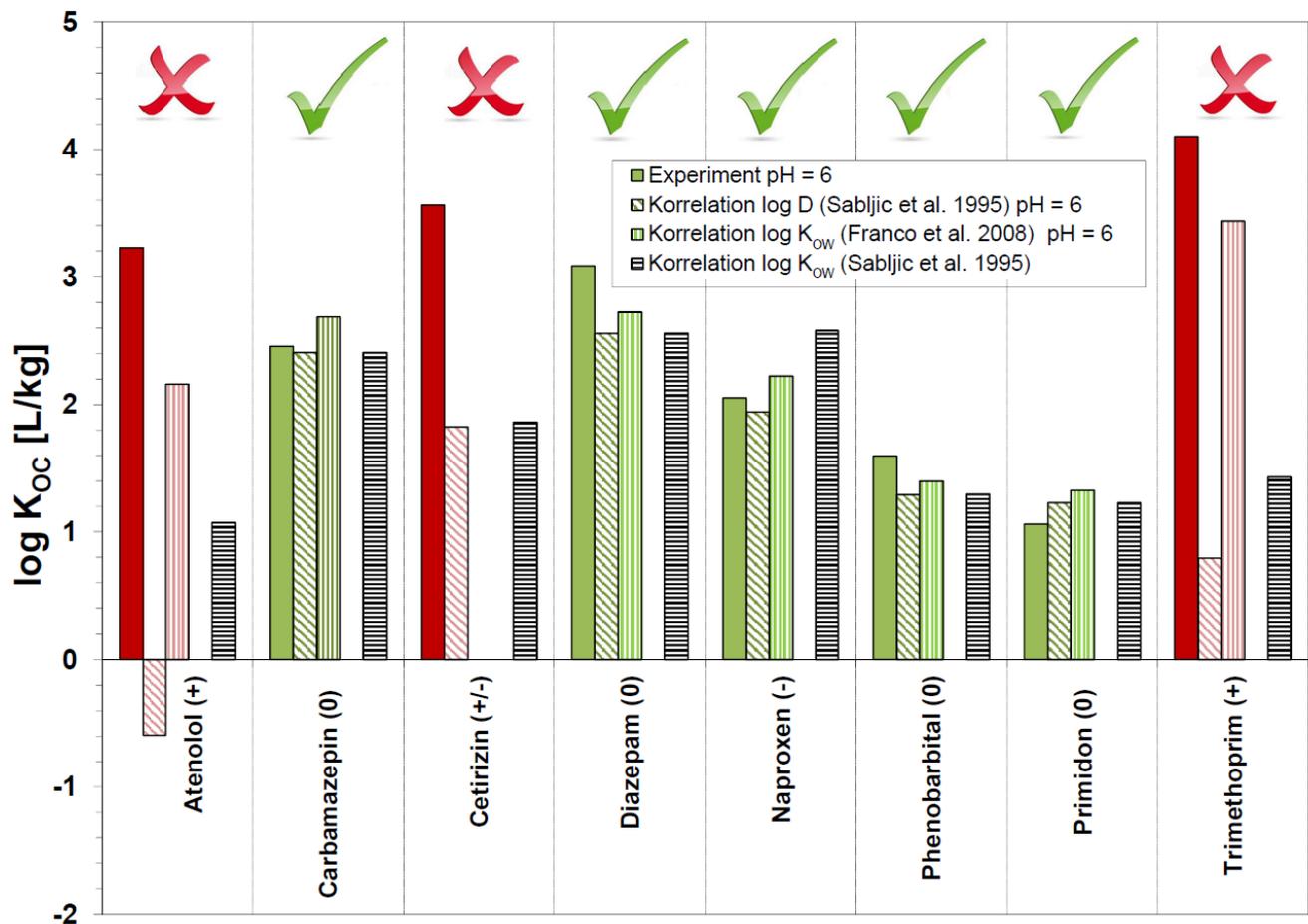


Abb. 1: Vergleich experimentell bestimmter (Schaffer et al., 2012a) und berechneter (Franco und Trapp, 2008; Sabljic et al., 1995) log K_{oc}-Werte ausgewählter de- bzw. protonierbarer Verbindungen bei pH = 6

Hierzu wurden in den vergangenen Jahren mehrere Studien mit ausgewählten, vollständig protonierten Modellaminen ($pK_s > 9$) an unterschiedlichen Sorbentien (Sedimente, Kieselgele, Sandstein, Tonminerale) und bei systematisch variierten Randbedingungen in Batch- und Säulenexperimenten durchgeführt (Schaffer et al., 2012b; Niedbala et al., 2013; Kutzner et al., 2014; Schaffer et al., 2015; Kutzner et al., 2016; Schaffer et al., 2016). Die untersuchten Modellamine umfassen mehrere Stoff-

klassen (z. B. Betablocker, Benzylamine) mit einer gewissen Bandbreite unterschiedlicher Molekülstrukturen (primäre, sekundäre, tertiäre Amine; Mono-, Di-, Triamine; mit/ohne zusätzliche H-Donor/Akzeptor-Funktionalitäten). Um definierte Ausgangsbedingungen und vergleichbare Resultate zu gewährleisten, wurden alle Sorbens/Sorptiv-Systeme vor Versuchsbeginn jeweils einer entsprechenden Vorbehandlung

unterzogen (z. B. Einstellung des pH-Wertes, initiale Vorbelastung der Sorbentien).

3. Ergebnisse und Diskussion

Die Experimente mit den Betablockern Atenolol und Metoprolol zeigten, dass Kationenaustausch bereits bei sehr geringen Kationenaustauschkapazitäten den entscheidenden Sorptionsprozess an natürlichen Aquifermaterialien darstellen kann und hydrophobe Wechselwirkungen nur eine untergeordnete Rolle spielen (Schaffer et al. 2012b). Die unterschiedliche Sorption der beiden Sorptive zeigte allerdings auch, dass weitere polare Interaktionen (z. B. H-Brücken) zur Gesamtsorption beitragen. Dies wurde in separat durchgeführten Experimenten bestätigt, da selbst bei sehr hohen Überschusskonzentrationen konkurrierender anorganischer Kationen noch eine nennenswerte Sorption von Metoprolol beobachtet wurde (Kutzner et al., 2014).

Da die Sorption vom Kationenaustausch dominiert wird, zeichnete sich in den verschiedenen Versuchen eine hohe Sensitivität, insbesondere gegenüber den Oberflächeneigenschaften der Sorbentien und der ionischen Zusammensetzung der Lösung, ab. Generell konnte eine Abnahme der Sorption mit steigender Konzentration konkurrierender Kationen beobachtet werden ($I < 1 \text{ mol/L}$). Die deutliche Abnahme der sorbierten Metoprololmenge lässt sich durch eine Verschiebung des Austauschgleichgewichts zugunsten der in großem Überschuss zugegebenen Kationen erklären. Der Einfluss der Art und der Konzentration konkurrierender anorganischer Kationen wurde separat an zwei unterschiedlichen Sorbentien untersucht, wobei bereits einfache Regressionen zur Bestimmung der Sorptionskoeffizienten im untersuchten Konzentrationsbereich abgeleitet werden (Abb. 2; Niedbala et al., 2013; Kutzner et al., 2014). Generell scheint das Freundlich-Modell für die Beschreibung der Sorption organischer Kationen am besten geeignet zu sein, was vermutlich auf die Überlagerung der unterschiedlichen Teilprozesse zurückzuführen ist. Die Freundlich-Exponenten, d. h. die Nicht-Linearität der Isothermen, ändern sich zudem in Abhängigkeit von dem verwendeten Sorbentien, was ein Hinweis für das Vorhandensein energetisch heterogener Sorptionsplätze darstellt. Darüber hinaus erwies sich der Einfluss der konkurrierenden Kationen mit gleicher Valenz als sehr ähnlich (Abb. 2). Die Übertragung der Ergebnisse der Einzelstudien auf Mischsysteme ($\text{Na}^+ + \text{Ca}^{2+}$) mit mehr als einer konkurrierenden Kationenart war nur für geringe Ionenstärken möglich (Kutzner et al., 2014).

Neueste Ergebnisse zeigen, dass die Sorption bei sehr hohen Ionenstärken keinesfalls auf den Wert null (keine Sorption) zurückgeht, sondern sogar wieder ansteigt und vergleichbare Sorptionskoeffizienten wie bei minimaler Konkurrenz erreicht werden (Kutzner et al., 2016). Als mögliche Ursache kommt der Anstieg der effektiven Konzentration (Aktivität) im Vergleich zur tatsächlichen Konzentration in Betracht, was womöglich zu einer verbesserten Sorption des organischen Kations durch nicht-ionische Sorptionsprozesse (ohne Konkurrenz) führt. Aktuell mit Benzylamin-Homologen

durchgeführte Versuche an Sandsteinmaterialien machen zudem deutlich, dass die resultierende Sorption, trotz dominierenden Kationenaustauschprozessen und ansonsten gleicher Struktur der Sorptive, vom Amintyp (primär < sekundär < tertiär, mehr/weniger H-Akzeptor/Donor-Stellen, Schaffer et al., 2016; Kutzner et al., 2016) und der Ladung (Monoamin << Diamin < Triamin) abhängt. Es ist jedoch auch nicht ausgeschlossen, dass sich die Reihenfolge der Sorptionsaffinitäten der verschiedenen Amintypen je nach Sorbens (Tonminerale bzw. Torf) durchaus ändern kann (Droge und Goss, 2012; 2013).

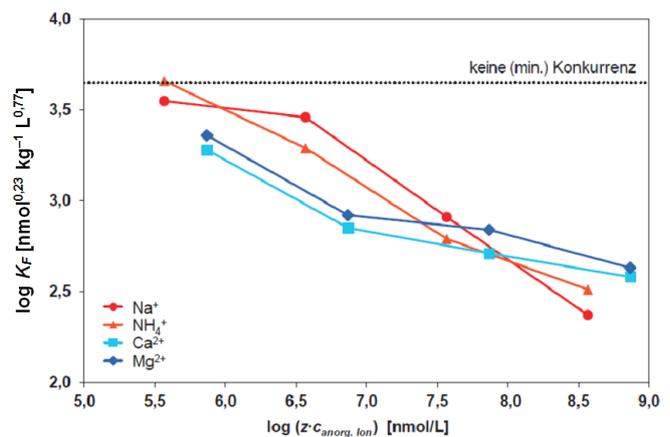


Abb. 2: Zusammenhang zwischen den Freundlich-Koeffizienten K_F von Metoprolol an Silicagel ($n = 0,77$) und den Äquivalentkonzentrationen konkurrierender anorganischer Kationen (Kutzner et al., 2014).

4. Schlussfolgerungen und Ausblick

Die Ergebnisse geben einen Einblick in die Komplexität der Sorption organischer Basen und liefern einen wichtigen Beitrag zum besseren Verständnis der Mechanismen und Abhängigkeiten, welche das Sorptionsverhalten geladener organischer Spurenstoffe in der Umwelt bestimmen (Details können den entsprechenden Zitaten entnommen werden). Derzeitig genutzte Prognosemodelle beziehen sich oft lediglich auf die Sorption ungeladener organischer Verbindungen und berücksichtigen ionische Wechselwirkungen an geladenen Oberflächen nicht, so dass die Sorption anhand dieser Modelle meist deutlich unterschätzt wird. Ein aktuell verfolgter und vielversprechender Ansatz besteht in der Adaption von Poly-Parameter-lineare-Freie-Enthalpie-Beziehungen (pp-LFER, Endo und Goss, 2014). Die Sorptionskoeffizienten werden hier mittels multipler linearer Regression ausgewählter Sorptiv-Parameter, welche repräsentativ für verschiedene Wechselwirkungsarten sind, bestimmt. Der Einfluss der übrigen Randbedingungen (Eigenschaften des Sorbens und der Wasserphase) wird durch die an experimentelle Daten angepassten Regressionsparameter beschrieben. Jede dieser Korrelationen gilt jedoch nur für das untersuchte System und die Übertragbarkeit auf andere (heterogene) Systeme und Bedingungen ist bisher sehr eingeschränkt. Folglich sind universell einsetzbare, prognosefähige Sorptionsmodelle für organische Kationen, die alle relevanten Prozesse und Einflussgrößen miteinander ver-

knüpfen und somit eine ausreichend genaue Vorhersage der Sorption von organischen Kationen erlauben, zurzeit noch nicht verfügbar.

Für eine zukünftig bessere quantitative Vorhersage des Umweltverhaltens ist es daher wichtig, die einzelnen Sorptionsmechanismen und deren Zusammenwirken auch unter dem Einfluss wesentlicher Randbedingungen systematisch zu studieren. Aufgrund der Rückkopplung vieler relevanter Einflussgrößen ist es bisher noch nicht gelungen einzelne bzw. einen Satz an Systemparametern zu identifizieren, welche für quantitative Vorhersagen herangezogen werden können. Auch im Hinblick auf die Trinkwasserversorgung erfordert die immer größer werdende Anzahl von Befunden organischer Stoffe in Gewässern eine zielgerichtete Priorisierung auf diejenigen Substanzen, die für die Wasserversorgung tatsächlich relevant sind. Nicht zuletzt deshalb werden weitere systematische Untersuchungen unter Verwendung zusätzlicher Modellverbindungen und Sorbentien mit bekannten molekularen bzw. oberflächenchemischen Eigenschaften benötigt, um geeignete Voraussetzungen für eine zukünftige Entwicklung von Prognosemodellen zu schaffen.

Danksagung

Die Autoren danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die finanzielle Unterstützung im Rahmen der geförderten Projekte GEOCAT (LI 1314/3-1 bzw. LI 1314/3-2) und SORPOX (BO 4133/1-1 bzw. BO 4133/1-2) sowie dem Deutschen Verein des Gas- und Wasserfaches (DVGW) für die finanzielle Förderung des Projektes „Hot-Target-Analytik“ (W 3/01/14).

Literatur

- Droge, S.T.J., Goss, K.-U., 2012. Effect of sodium and calcium cations on the ion-exchange affinity of organic cations for soil organic matter. *Environmental Science and Technology* 46(11), 5894-5901.
- Droge, S.T.J., Goss, K.-U., 2013. Sorption of organic cations to phyllosilicate clay minerals: CEC-normalization, salt dependency, and the role of electrostatic and hydrophobic effects. *Environmental Science and Technology* 47(24), 14224-14232.
- ECETOC - European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals, 2013. Environmental exposure assessment of ionisable organic compounds. Technical Report 123 (<http://www.ecetoc.org/wp-content/uploads/2014/08/ECETOC-TR-123-Environmental-risk-assessment-of-ionisable-compounds.pdf>), letzter Zugriff: 7. Juli 2016
- ECHA - European Chemical Agency, 2016. ECHA-Datenbank für vorregistrierte (<http://echa.europa.eu/de/information-on-chemicals/pre-registered-substances>) und bereits registrierte (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>) REACH-Stoffe, Stand: 4. Juli 2016
- Endo, S., Goss, K.-U., 2014. Applications of polyparameter linear free energy relationships in environmental chemistry. *Environmental Science and Technology* 48(21), 12477-12491.
- Franco, A., Trapp, S., 2008. Estimation of the soil-water partition coefficient normalized to organic carbon for ionizable organic chemicals. *Environmental Toxicology and Chemistry* 27(10), 1995-2004.
- Franco, A., Ferranti, A., Davidsen, C., Trapp, S., 2010. An unexpected challenge: ionizable compounds in the REACH chemical space. *International Journal of Life Cycle Assessment* 15(4), 321-325.
- Goss, K.-U., Schwarzenbach, R.P., 2001. Linear free energy relationships used to evaluate equilibrium partitioning of organic compounds. *Environmental Science and Technology* 35(1), 1-9.

- Kah, M., Brown, C.D., 2007. Prediction of the adsorption of ionizable pesticides in soils. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 55(6), 2312-2322.
- Kutzner, S., Schaffer, M., Börnick, H., Licha, T., Worch, E., 2014. Sorption of the organic cation metoprolol on silica gel from its aqueous solution considering the competition of inorganic cations. *Water Research* 54, 273-283.
- Kutzner, S., Schaffer, M., Licha, T., Worch, E., Börnick, H., 2016. Sorption of organic cations onto silica surfaces over a wide concentration range of competing electrolytes. *Journal of Colloid and Interface Science*, Article in press.
- Limousin, G., Gaudet, J. P., Charlet, L., Szenknect, S., Barthes, V., Krimissa, M., 2007. Sorption isotherms: a review on physical bases, modeling and measurement. *Applied Geochemistry* 22(2), 249-275.
- Manallack, D.T., 2007. The pKa distribution of drugs: application to drug discovery. *Perspectives in Medicinal Chemistry* 1, 25-38.
- Manallack, D.T., 2009. The acid-base profile of a contemporary set of drugs: implications for drug discovery. *SAR and QSAR in Environmental Research* 20 (7-8), 611-655.
- Niedbala, A., Schaffer, M., Licha, T., Nödler, K., Börnick, H., Ruppert, H., Worch, E., 2013. Influence of competing inorganic cations on the ion exchange equilibrium of the monovalent organic cation metoprolol on natural sediment. *Chemosphere* 90(6), 1945-1951.
- Sabljić, A., Güsten, H., Verhaar, H., Hermens, J., 1995. QSAR modelling of soil sorption. Improvements and systematics of log KOC vs. log KOW correlations. *Chemosphere* 31(11), 4489-4514.
- Schaffer, M., Boxberger, N., Börnick, H., Licha, T., Worch, E., 2012a. Sorption influenced transport of ionizable pharmaceuticals onto a natural sandy aquifer sediment at different pH. *Chemosphere* 87(5), 513-520.
- Schaffer, M., Börnick, H., Nödler, K., Licha, T., Worch, E., 2012b. Role of cation exchange processes on the sorption influenced transport of cationic β -blockers in aquifer sediments. *Water Research* 46(17), 5472-5482.
- Schaffer, M., Licha, T., 2014. A guideline for the identification of environmentally relevant, ionizable organic molecule species. *Chemosphere* 103, 12-25.
- Schaffer, M., Licha, T., 2015. A framework for assessing the retardation of organic molecules in groundwater: Implications of the species distribution for the sorption-influenced transport. *Science of the Total Environment* 524, 187-194.
- Schaffer, M., Kröger, F., Nödler, K., Ayora, C., Carrera, J., Hernández, M., Licha, T., 2015. Influence of a compost layer on the attenuation of 28 selected organic micropollutants under realistic soil aquifer treatment conditions: insights from a large scale column experiment. *Water Research* 74, 110-121.
- Schaffer, M., Warner, W., Licha, T., 2016. Organic molecules as sorbing tracers for the characterization of fracture surface areas in Enhanced Geothermal Systems (EGS). In *Proceedings, 41st Workshop on Geothermal Reservoir Engineering, Stanford, SGP-TR-209*.

Korrespondenzadresse:

Mario Schaffer
Geowissenschaftliches Zentrum
Abt. Angewandte Geologie (AG Hydrochemie)
Georg-August-Universität Göttingen
Goldschmidtstraße 3
37077 Göttingen
Mario.Schaffer@geo.uni-goettingen.de



Mischungstoxizität von Nanomaterialien und Chemikalien

Dana Kühnel (dana.kuehnel@ufz.de), Steffi Böhme (steffi.boehme@ufz.de)

Zusammenfassung

Nanomaterialien (NM) finden aufgrund ihrer Eigenschaften vielfältige Anwendung in Produkten und können so in die Umwelt freigesetzt werden. Dort können sie mit einer Reihe von Chemikalien interagieren. Dabei können NM als Vektoren dienen und eine Aufnahme der Chemikalien in Organismen begünstigen, und in der Folge zu einer Verstärkung der Toxizität führen. Dieser Mechanismus wird als „Trojanischer Pferd“-Effekt bezeichnet. Dabei ist bisher unklar, ob es sich dabei um einen generellen Mechanismus handelt und wie die NM-Chemikalie-Interaktion durch die jeweiligen physikalisch-chemischen Eigenschaften beeinflusst werden. Deshalb wurden insgesamt 119 Studien evaluiert, die sich mit Mischungseffekten von NM und Chemikalien in ökotoxikologischen *in vitro* und *in vivo* Modellen beschäftigen. Anhand der Daten zur Akkumulation und den auftretenden Effekten nach einer Exposition zu NM-Chemikalie-Mischungen wurde deutlich, dass neben dem „Trojanischen Pferd“-Effekt noch diverse andere Mechanismen existieren.

Einleitung

In den vergangenen Jahren wurden NM in verschiedensten Umweltkompartimenten nachgewiesen. Dazu gehören Abwässer von Kläranlagen, Klärschlamm oder Oberflächenwasser (Baun et al. 2008; Brausch et al. 2010). Das Auftreten und die Verteilung von NM in der Umwelt führen zu einer potentiellen Interaktion mit ebenfalls anwesenden Chemikalien. Diese Mischungen weisen ein bisher nicht gut beschriebenes Gefährdungspotential auf, welches bisher schlecht aus den Wirkungen der Einzelsubstanzen abgeschätzt werden kann (Hartmann und Baun 2010). Dabei kann das NM als Substanzträger für verschiedene organische Chemikalien oder Schwermetalle fungieren und deren Aufnahme in Organismen erleichtern. Dieser „Trojanisches Pferd“-Effekt von NM wurde erstmals 2007 durch Limbach et al. postuliert. In diesem Mechanismus einbezogen wurden sowohl eine erhöhte Akkumulation der Chemikalie, als auch Veränderungen auf Ebene der biologischen Effekte.

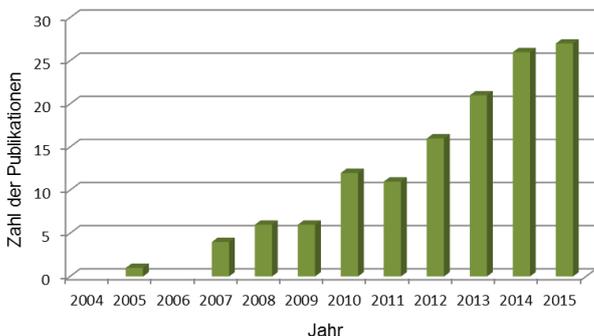
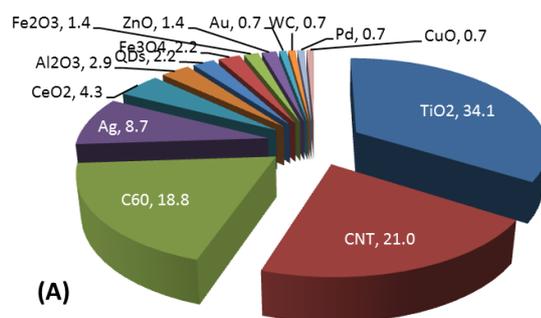


Abb. 1: Zahl der Publikationen in den Jahren 2004-2015 zu Nanomaterialien-Chemikalien Mischungseffekten

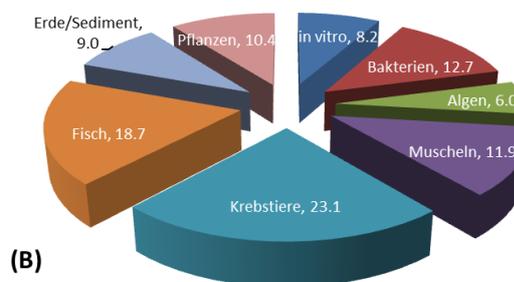
Um die Aussagen zur Wirkung verschiedener NM-Chemikalien-Mischungen systematisch zu betrachten, wurde 119 Literaturstellen (Abb. 1) ausgewertet (Böhme et al.). Dabei ging es vor allem darum, speziess- und chemikalienübergreifende Mischungseffekte zu identifizieren, prinzipielle Mechanismen aufzuzeigen und so zu einer einheitlichen Nomenklatur beizutragen.

Kriterien zur Beurteilung der Studien

Zunächst wurden die identifizierten Mischungsstudien nach untersuchter Chemikalie bzw. NM und nach dem eingesetzten biologischen Modell kategorisiert. Folgende Chemikalien wurden berücksichtigt: polare und unpolare Substanzen, Arzneimittel und Hormone, organometallische Verbindungen, sowie amphiphile Stoffe und Schwermetalle. Die Nanomaterialien wurden in folgende Klassen unterteilt: kohlenstoffhaltige Materialien (SWCNTs, MWCNTs, C₆₀), Metall- oder Metalloxidpartikel (z.B. AuNPs, TiO₂), halbleitende Nanokristalle (z.B. quantum dots) sowie Polymere. Die meisten Studien wurden an den Kohlenstoff-basierten NM CNT und C₆₀, sowie an TiO₂ durchgeführt (Abb. 2A). Die Verteilung der Mischungsstudien nach den eingesetzten biologischen Testmodellen zeigt, dass der Großteil der Studien an Krebstieren (z.B. Daphnien) und an Fischen durchgeführt wurde (Abb. 2B).



(A)



(B)

Abb. 2: Prozentuale Verteilung von genutzten Nanomaterialien (A) und biologischen Testsystemen (B) in Mischungsstudien.

In einem zweiten Schritt wurden die Studien hinsichtlich der durchgeführten Experimente kategorisiert: (1) Akkumulationsstudien, (2) Toxizitätsstudien und (3) Studien, die sowohl die Akkumulation als auch die Toxizität der Mischung untersuchten. Dabei wurde jeweils die Änderung der Akkumulation oder des biologischen Effekts der Mischung zur Wirkung der Einzelsubstanz verglichen.

Akkumulationsverhalten der Chemikalie in Anwesenheit eines Nanomaterials

Eine Ko-Exposition von Chemikalien und NM kann eine erhöhte Akkumulation der Chemikalie im biologischen Testsystem verursachen. Limbach et al. waren die ersten, die 2007 beschrieben, wie NM als potentielle Träger für Chemikalien fungieren können und so deren Aufnahme in Zellen erleichtern. Insgesamt 85 der ausgewählten Studien (entspricht 71 %) haben die Aufnahme der Chemikalien in Organismen quantitativ untersucht. Lediglich 24 % der 85 Studien haben parallel ebenfalls die NM-Aufnahme analysiert.

Die Mehrheit der Studien ermittelte eine erhöhte Akkumulation der Chemikalie im Testsystem nach Co-Exposition mit NM (Abb. 3), und bestätigt damit, das NM als „Trojanisches Pferd“ agieren können. Allerdings wird in 25 der Studien eine Verringerung der Chemikalienaufnahme bei Co-Exposition mit einem NM beschrieben. In 10 Studien wurde eine unveränderte Akkumulation der Chemikalie in Anwesenheit eines NM beobachtet.

Eine entscheidende Rolle für die Modulation der Chemikalienaufnahme in den Organismus spielt dabei die Adsorptionsstärke zwischen dem NM und der Chemikalie. Beispielsweise wurde in der Studie von Dalai et al. (2014) beobachtet, dass Chrom(VI) stärker von TiO₂- (94 %) als von Al₂O₃-Nanopartikeln (79 %) adsorbiert wird. Interessanterweise wurde in dieser Studie jedoch auch eine 10-mal höhere Aufnahme der TiO₂-Partikel im Gegensatz zu Al₂O₃-Partikeln in Algenzellen (*S. obliquus*) beobachtet, so dass auch die Partikeleigenschaften die Aufnahme in Organismen beeinflussen. Die erhöhte Adsorption von Chrom(VI) induzierte gleichzeitig eine erhöhte TiO₂-Partikel-Agglomeration, so dass letztendlich die Mischung zu einer geringeren Verfügbarkeit von Chrom(VI) für die Algen im Vergleich zur Einzelsubstanz führte.

Im Gegensatz dazu wurden für Mischungen von organischen Chemikalien und kohlenstoffhaltigen NM eher eine reduzierte Aufnahme der Chemikalien (bis zu -40 %) beobachtet (De La Torre-Roche et al. 2013; Farkas et al. 2015). Diese Beobachtung wird häufig darauf zurückgeführt, dass die Chemikalie durch die Anwesenheit des NM oder im Organismus modifiziert wird und Abbauprodukte bzw. Metabolite der Ausgangschemikalie gebildet werden. Beispielsweise beobachteten Fang et al. (2015) in Anwesenheit von TiO₂-Partikeln eine Umwandlung der Chemikalie PCP in Tetrachlorohydroquinon.

Außerdem kann die Bioverfügbarkeit der Chemikalie durch das spezifische Verhalten von NM in wässrigen, elektrolythaltigen Lösungen beeinflusst werden. Bestimmte NM neigen unter diesen Bedingungen zu einer Agglomeration, welche je

nach den Versuchsbedingungen zu einer Sedimentation der Partikel führt. Dieser Vorgang führt dazu, dass die Chemikalie für die Organismen nicht mehr verfügbar ist. Das kann insbesondere für Meerwasser mit hoher ionischer Stärke beobachtet werden. So zeigte sich bei der Co-Exposition von Muscheln mit B(a)P und TiO₂, dass der Großteil der Chemikalie durch die Partikel gebunden wurde, welche allerdings durch die schnelle Sedimentation nicht mit den Testorganismen in Kontakt kamen (Farkas et al. 2015).

NM können ebenso indirekt die Aufnahme von Chemikalien erhöhen, indem sie Pflanzenzellen schädigen oder anderweitig die Aufnahme von Chemikalien in Zellen erleichtern, ohne dass die chemischen Substanzen hierbei an die NM binden (Hartmann et al. 2012). Dieser Mechanismus wurde für CNTs, die die Pflanzenzellen des Weizen (*Triticum L.*) schädigen und so die Chemikalie Phenanthren ungehindert in die Zelle eindringen lassen, nachgewiesen (Wild und Jones 2009).

Zusammenfassend beeinflusst die Anwesenheit von NM die Aufnahme von Chemikalien, wenn (i) eine Adsorption der Chemikalie an der Partikeloberfläche stattfindet und (ii) die NM vom biologischen System aufgenommen werden. Wenn beide Konditionen erfüllt sind, kann man von einem „Trojanischen Pferd“-Effekt sprechen. Sofern aber die Chemikalie von NM oder vom Organismus modifiziert wird oder indirekte Effekte die Aufnahme der Chemikalie erleichtern, kann nicht von einem solchen Effekt gesprochen werden.

Veränderungen in toxikologischen Effekten aufgrund einer NM-Chemikalien Mischungsexposition

Insgesamt wurden 119 Studien gefunden, die sich mit den biologischen Auswirkungen von NM-Chemikalien-Mischungen auf verschiedene Testsysteme befasst haben. Die Mehrheit dieser Studien beschrieb eine erhöhte Toxizität (66 %) infolge einer Mischungsexposition (Abb. 3). Von den restlichen Studien beschrieben 19 % eine reduzierte und 15 % eine unveränderte Toxizität der Chemikalie in Anwesenheit des NM.

In Studien, in denen eine erhöhte Toxizität beobachtet wurde, wurden verschiedenste NM-Chemikalien-Mischungen untersucht: metallisches NM / Schwermetall (Han et al. 2011), metallisches NM / organische Chemikalie (Falfushynska et al. 2015), kohlenstoffhaltiges NM / Schwermetall (Chai et al. 2013) und kohlenstoffhaltiges NM / organische Chemikalie (Hu et al. 2013). Bei der Mehrzahl dieser Studien (mit Ausnahme von Mischungen bestehend aus einem metallischen NM mit einer organischen Chemikalie) stand die erhöhte Toxizität in direktem Zusammenhang mit einer erhöhten Akkumulation der Chemikalie im biologischen Testsystem. Dabei zeigte sich, dass insbesondere die Chemikalie für die erhöhte Toxizität verantwortlich ist (Dalai et al. 2014). Eine Erklärung dafür ist, dass die untersuchten NM alleine kaum toxische Effekte hervorrufen.

Akkumulation				Toxizität			
Mischung	Erhöhung	Reduzierung	Gleichbleibend	Mischung	Erhöhung	Reduzierung	Gleichbleibend
Metallisches NM & Schwermetall	68.6 %	17.1 %	14.3 %	Metallisches NM & Schwermetall	64.3 %	23.8 %	11.9 %
Metallisches NM & organische Chemikalie	41.7 %	41.7 %	16.7 %	Metallisches NM & organische Chemikalie	74.2 %	12.9 %	12.9 %
Kohlenstoffhaltiges NM & Schwermetall	86.7 %	13.3 %	0.0 %	Kohlenstoffhaltiges NM & Schwermetall	84.6 %	7.7 %	7.7 %
Kohlenstoffhaltiges NM & organische Chemikalie	34.8 %	52.2 %	13.0 %	Kohlenstoffhaltiges NM & organische Chemikalie	50.0 %	25.0 %	25.0 %
Anzahl Studien insgesamt	50	25	10	Anzahl Studien insgesamt	75	22	17

Abb. 3: Prozentuale Verteilung von Erhöhung, Reduzierung und gleichbleibender Akkumulation bzw. Toxizität der jeweiligen Mischungsexposition. Die Kategorisierung der Mischungseffekte (Akkumulation/Toxizität) erfolgte immer in Bezug auf die entsprechende Exposition mit den Einzelsubstanzen und bezieht sich lediglich auf die eingesetzte Chemikalie. Die Gesamtzahl an Studien, die in die entsprechenden Kategorien `Erhöhung`, `Reduzierung` und `gleichbleibend` eingeordnet wurden, sind in der letzten Zeile aufgeführt

Die Studien, in welchen keine Veränderungen in der toxischen Wirkung auftrat, zeigten eine verstärkte (Hartmann et al. 2012) oder keinerlei Aufnahme (Tedesco et al. 2010) der Chemikalie. Eine verringerte Toxizität trat oftmals dann auf, wenn die Chemikalie aufgrund von Transformationsprozessen zu weniger toxischen Produkten abgebaut wurde. Beide Fälle können durch eine schwache bis ausbleibende Wechselwirkung zwischen NM und Chemikalie begründet werden, so dass sich die internen Konzentrationen der Chemikalie bei Einzel- und Co-Exposition nicht unterscheiden (Vale et al. 2014). Die Sedimentation (Farkas et al. 2015), Agglomeration, Löslichkeit (Stanková 2015) und Modifizierung (Tourinho et al. 2015) von NM im Testmedium (insbesondere im Boden und Meerwasser) können die Wechselwirkung zwischen NM und Chemikalie zusätzlich einschränken.

Zusammenfassung

Nanomaterialien und andere Substanzen, wie z.B. organische Chemikalien oder Schwermetalle, können in die Umwelt freigesetzt und so zusammen in aquatischen und terrestrischen Kompartimenten wiedergefunden werden. Deshalb ist es notwendig, gemeinsame Effekte dieser Stoffgruppen mit Hinblick auf ökotoxikologische Folgen zu untersuchen. Insgesamt konnte in dieser Literaturstudie anhand von 119 Beispielen für untersuchte Mischungseffekte ein deutlicher Einfluss von NM auf die Akkumulation und Toxizität von Chemikalien identifiziert werden. Dabei zeigte sich, dass die Modulation des toxikologischen Effekts von verschiedenen Faktoren abhängig ist. Dazu gehören die Eigenschaften der jeweiligen Substanz, ihre Sorptionsaffinität zum NM, die resultierende Bioverfügbarkeit und die Aufnahme und Verteilung durch das biologische System.

Um die Mischung von NM und Chemikalien ausreichend zu charakterisieren ist es daher notwendig, die Adsorptionspro-

zesse in Hinblick auf den zeitlichen Verlauf und die Bindungsstärke genauer zu untersuchen. Dadurch wird es möglich, präzisere Voraussagen über eine Aufnahme der Chemikalie durch das NM in den Organismus zu treffen. In einem zweiten Schritt sollte dann sowohl die Akkumulation der Chemikalie als auch des NM nach Mischungs- und Einzelsubstanzexposition quantitativ bestimmt werden. Für die anschließende Untersuchung von auftretenden Mischungseffekten sollten umweltrelevante bis hin zu nicht toxischen Einzelkonzentrationen berücksichtigt werden. Dabei muss beachtet werden, dass es zu organismenspezifischen internen Modifizierungen kommen kann und damit die bioaktive Substanz möglicherweise nicht mehr der eingesetzten ursprünglichen Chemikalie entspricht. Gleichzeitig ist es methodisch eine Herausforderung, zwischen der Reduktion des internen Chemikaliengehaltes durch Transformationsprozesse und einer durch das NM verringerten Aufnahme zu unterscheiden. Dafür wird es in Zukunft notwendig sein, analytische Techniken insbesondere auf dem Gebiet des Imaging und der Quantifizierung weiter zu entwickeln.

Literatur

- Baun, A.; Hartmann, N. B.; Grieger, K.; Kusk, K. O. *Ecotoxicology* 2008 17(5), 387-395.
 Böhme, S.; Altenburger, A.; Kühnel, D. submitted 2016.
 Brausch, K. A.; Anderson, T. A.; Smith, P. N.; Maul, J. D. *Environ. Toxicol. Chem.* 2010, 29(11), 2600-2606.
 Chai, M.; Shi, F.; Li, R.; Liu, L.; Liu, Y.; Liu, F. *Plant. Growth. Regul.* 2013, 71(2), 171-179.
 Dalai, S.; Pakrashi, S.; Bhuvaneshwari, M.; Iswarya, V.; Chandrasekaran, N.; Mukherjee, A. *Aquat. Toxicol.* 2014, 146, 28-37.
 De La Torre-Roche, R.; Hawthorne, J.; Musante, C.; Xing, B.; Newman, L. A.; Ma, X.; White, J. C. *Environ. Sci. Technol.* 2013, 47(2), 718-725.
 Falfushynska, H.; Gnatyshyna, L.; Yurchak, I.; Sokolova, I.; Stoliar, O. *Aquatic. Toxicol.* 2015, 162, 82-93.

- Fang, Q.; Shi, X.; Zhang, L.; Wang, Q.; Wang, X.; Guo, Y.; Zhou, B. *J. Hazard. Mat.* 2015, 283, 897-904.
- Farkas, J.; Bergum, S.; Nilsen, E. W.; Olsen, A. J.; Salaberria, I.; Ciesielski, T. M.; Bączek, T.; Konieczna, L.; Salvenmoser, W.; Jenssen, B. M. *Sci. Total. Environ.* 2015, 511, 469-476.
- Han, Z.-X.; He, G.-D.; Wang, J.-H.; Lv, C.-X. *Int. J. Green. Nanotechnol.* 2011, 3(3), 229-237.
- Hartmann, N. B.; Baun, A. *Integr. Environ. Assess. Manag.* 2010, 6, 311-313.
- Hartmann, N. B.; Legros, S.; Von der Kammer, F.; Hofmann, T.; Baun, A. *Aquat. Toxicol.* 2012, 118, 1-8.
- Hu, C.; Cai, Y.; Wang, W.; Cui, Y.; Li, M. *Environ. Sci.* 2013, 15(11), 2125-2130.
- Limbach, L. K.; Wick, P.; Manser, P.; Grass, R. N.; Bruinink, A.; Stark, W. J. *Environ. Sci. Technol.* 2007, 41(11), 4158-4163.
- Stanková, R., Masterarbeit 2015, Norwegische Universität für Wissenschaft und Technologie, Department für Chemie.
- Tedesco, S.; Doyle, H.; Blasco, J.; Redmond, G.; Sheehan, D. *Comp. Biochem. Physiol. C* 2010, 151(2), 167-174.
- Tourinho, P. S.; Waalewijn-Kool, P. L.; Zantkuijl, I.; Jurkschat, K.; Svendsen, C.; Soares, A. M. V. M.; Loureiro, S.; van Gestel, C. A. M. *Ecotox. Environ. Safe.* 2015, 113, 201-206.
- Vale, G.; Franco, C.; Diniz, M. S.; dos Santos, M. M. C.; Domingos, R. F. *Ecotox. Environ. Safe.* 2014, 109, 161-168.
- Wild, E.; Jones, K. C. *Environ. Sci. Technol.* 2009, 43(14), 5290-5294.

Korrespondenzadresse

Dana Kühnel
Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ)
Department Bioanalytische Ökotoxikologie
Permoserstraße 15
04318 Leipzig
Tel.: 0341 235 1515
dana.kuehnel@ufz.de

Einladung zur Mitgliederversammlung der GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie

Termin: Dienstag, den 6. September 2015, 15:30 Uhr

Ort: Saal 2 (HSZ N2): Hörsaalzentrum auf der Morgenstelle Universität Tübingen

Tagesordnung

1. Bericht des Vorstands
Nachwuchsarbeit (Christine Achten)
Entwicklung Postgradualstudiengang (PGS; Andreas Schäffer)
Mitgliederentwicklung, Finanzen (Thorsten Reemtsma)
2. Fachgruppentagung, Kooperation mit SETAC GLB
3. Berichte aus den Arbeitskreisen
4. Verschiedenes

3. Doktorandentag der GDCh Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie

Ort: Fraunhofer Institut für Molekularbiologie und Angewandte Ökologie IME (<http://www.ime.fraunhofer.de/>), Auf dem Aberg 1, 57392 Schmallenberg (Grafschaft)

Termin: 20. Oktober 2016

Uhrzeit: 09.00 Uhr – ca. 15:30 Uhr

Teilnehmerzahl: max. 20

Vorläufiges Programm:

- Vorstellungsrunde der Teilnehmer und Institutsvorstellung
- 2-3 Kurzvorträge durch Nachwuchswissenschaftler aus dem Bereich Angewandte Ökologie
- Laborbesichtigung (z.B. NMR, ¹⁴C-Analytik, Elementanalytik, Umweltprobenbank, Ökotoxikologie)

Hinweise zur Reiseplanung:

Zur Erreichbarkeit: Grundsätzlich empfiehlt sich die Anreise mit dem PKW (Fahrgemeinschaften). Für Teilnehmer, die mit der Bahn anreisen, ist der nächstgelegene Bahnhof „Altenhundem“. Es gibt eine stündliche Busverbindung nach Schmallenberg und teilweise auch nach Grafschaft, das etwa 4 km vom Ortszentrum Schmallenberg entfernt liegt. Die Haltestellen „Kirche, Schmallenberg“ bzw. „Grafschaft Kirche, Schmallenberg“ sind im DB-Buchungsportal auswählbar, die Busverbindungen werden angegeben.

Wir empfehlen eine Übernachtung im Ortsteil Grafschaft. Der Transfer zum Institut (das etwa 1,3 km vom Zentrum Grafschaft entfernt liegt), kann, falls erforderlich, für Teilnehmer

ohne PKW organisiert werden. Nach der Veranstaltung können diese Teilnehmer auch zur Bushaltestelle in Schmallenberg gebracht werden.

Eine Anfahrtsbeschreibung finden Sie unter:

http://www.ime.fraunhofer.de/de/ueber_das_institut/standorte_11/Anfahrt_Schmallenberg.html

Bezüglich der Übernachtung: Eine Übersicht der verfügbaren Pensionen und Gasthöfe in der Nähe des Instituts ist unter www.grafschaft-schanze.de/pensionen.html bzw. www.grafschaft-schanze.de/hotels-gasthoefe.html abrufbar. Dort sind auch Preise angegeben. Für Oktober kann die Nachfrage aber hoch sein, so dass sich eine frühzeitige Buchung empfiehlt.

Am Vorabend der Veranstaltung kann zum Kennenlernen ein gemeinsames Abendessen angeboten werden (Selbstkostenbasis). Bitte geben Sie bei Ihrer Anmeldung an, ob Interesse an diesem Abendessen besteht, so dass wir rechtzeitig ein Restaurant reservieren können.

Reisekosten:

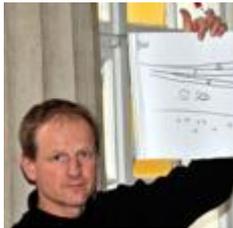
Um möglichst vielen interessierten, jungen Fachgruppenmitgliedern die Teilnahme an dieser Veranstaltung zu ermöglichen, wird es einen Reisekostenzuschuss durch die Fachgruppe geben, den Sie im Nachgang zum Treffen bei der GDCh beantragen können. Aus diesem Grund müssen wir die Teilnehmerzahl auf 20 Personen beschränken.

Detaillierte Fragen hierzu beantworte ich gerne (jaeger.stefanie@baua.bund.de).

Anmeldung:

Bitte melden Sie sich bis spätestens Montag, 5. September 2016 bei jaeger.stefanie@baua.bund.de an. Bitte fügen Sie der Anmeldung Ihre E-Mailadresse und Ihre Arbeitsgruppe/ Institution hinzu. Bitte geben Sie außerdem an, ob Sie an dem geplanten Abendessen am Vorabend teilnehmen möchten und ob Sie am Abreisetag auf einen Transfer zur Bushaltestelle in Schmallenberg angewiesen sind.

Wir freuen uns auf zahlreiche Anmeldungen und ein spannendes Treffen mit Ihnen.
Stefanie Jäger (für den Vorstand)



Chair of Applied Geology GeoZentrum Nordbayern

Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

<https://www.gzn.fau.de/angewandte-geowissenschaften/angewandte-geologie/>

The Chair of Applied Geology has two major working groups, one in Engineering Geology (Prof. Rohn) and another in Hydrogeology and Environmental Geology (Prof. Barth). The research focus of the Engineering Geology group lies on geo-hazards such as landslides and large-scale mass movements, shallow geothermal energy, and the assessment of foundations for buildings and dams. The Hydro- and Environmental Geology group specializes in light stable isotope analyses, water chemistry and karst geology. The group investigates biogeochemical cycles in ground- and surface waters by means of stable isotopes with a focus on water and carbon cycles.

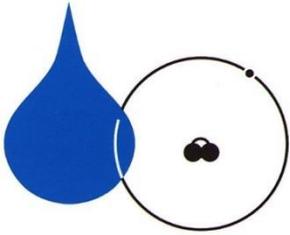
Key parameters of investigation are major ion and trace element chemistry as well as aqueous carbon phases including their stable isotope ratios. The working group's water chemistry and stable isotope facilities host an inductively coupled plasma mass spectrometer (ICP-MS) for measurements of trace elements and toxic heavy metals and two ion chromatographs for measurements of major ions. The laboratory for light stable isotopes is internationally recognized and routinely performs measurements of concentrations and stable isotope ratios of gas, carbonates, dissolved inorganic carbon (DIC), dissolved organic carbon (DOC) and particulate organic carbon (POC). Stable isotope analyses of water and dissolved oxygen are also offered. The stable isotope instrumentation consists of a laser ring-down isotope analyser for water isotopes and three high-vacuum stable isotope ratio spectrometers (IRMS) for measurements of hydrogen, oxygen, carbon and nitrogen. One unique novelty is the analysis of stable isotope ratios of dissolved oxygen. All IRMS-instruments are coupled to automatic extraction and auto-sampling devices that enable online analyses in continuous-flow. In addition, high-precision dual-inlet mass spectrometry is possible for extracted and purified CO₂ and H₂. These combined analytical facilities allow quantification of carbon sources and sinks. They also enable investigations of interactions between dissolved and particulate phases to determine turnover of carbon and related species in aqueous environments.

Projects of the Applied Geology group are funded by DFG, DAAD, BMBF, the Alexander von Humboldt Foundation and the European Commission and cover topics ranging from deep hydrogeological systems and CO₂ dynamics via Karst system Hydrogeology to carbon turnover in small catchments as end members to larger river systems. Groundwater-seawater interactions, island biogeochemical cycles (currently with focus

on Corsica and Sri Lanka), relations between the hydrosphere and plants as well as developments of new analytical techniques are also part of the research portfolio. Projects by the Engineering Geology group include investigations of mass movements in the Alps and their links to changes of glacier systems, slope stability in the Yangtze System (China) in proximity of dams and investigations of shallow geothermal systems in urban areas. Themes of lectures and fieldwork in the Applied Geology group relate to the above research strategies and range from hydrogeology, aqueous chemistry, stable isotope dynamics in the environment to engineering geology.

Principle investigators of the Erlangen Applied Geology group are Profs. J. Rohn and M. Moser for Engineering Geology, Prof. Barth and PD Dr. van Geldern for biogeochemical cycles, hydrogeology and stable isotope research, Dr. Baier for karst system dynamics and a highly-qualified laboratory team for water and stable isotope analyses (I. Wein, S. Meyer, L. Beinert and C. Hanke). Several PhD-, Master- and Bachelor-students are also involved in the above-named research projects. In addition, the Applied Geology group hosts international guests from for instance China, France, Sri Lanka, Mexico, and Canada.





HYDROISOTOP gmbh

Laboratorium zur Bestimmung von Isotopen in Umwelt und Hydrologie

Historie

Die Hydroisotop GmbH wurde 1982 von Dr. Lorenz Eichinger und Dr. Markus Forster (†) gegründet. Beide promovierten als Diplom-Physiker mit Arbeiten zum Nachweis und zur Interpretation von natürlichen Isotopengehalten in der Umwelt. Der Schwerpunkt ihrer Forschung lag vor allem im Grund- und Thermalwasserbereich. In den Folgejahren ergab sich eine enge Zusammenarbeit mit verschiedenen Forschungseinrichtungen, wobei Aufgaben im Bereich Umweltforschung, z.T. in Kooperation mit Universitäten oder mit Großforschungseinrichtungen durchgeführt wurden.

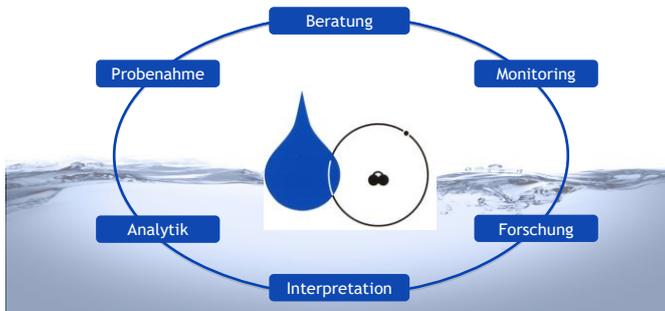


Abb. 1: Konzept der Hydroisotop GmbH

Arbeitsfelder

Nachdem zunächst der Schwerpunkt auf Untersuchungen in den natürlichen Systemen **WASSER, GAS** und **GESTEIN** sowie in spezialisierten geologischen und hydrogeologischen Fragestellungen wie Tiefenwässern, Mineral-, Thermal- und Heilwässern lag, wurde das Arbeitsfeld schrittweise erweitert. Neben der Bestimmung von **natürlichen** und **künstlichen Isotopengehalten** in Umweltsystemen, Lebensmitteln und nachwachsenden Rohstoffen ist die Firma Hydroisotop auf die Untersuchung von **organischer Spurenschadstoffanalytik** in Grundwasser-, Gas-(speziell quantitative Gasgehaltsbestimmungen) und Bodenproben spezialisiert. Auf dem Gebiet der Messung und Interpretation von Isotopensignaturen in Schadstoffen ist die Hydroisotop GmbH führend.

Neben der Chemie und den bekannten „Umweltisotopen“ Sauerstoff-18, Deuterium, Schwefel-34, Stickstoff-15, Tritium, Kohlenstoff-13 und Kohlenstoff-14, werden immer häufiger neu oder weiter entwickelte Isotopenuntersuchungen an organischen Schadstoffen (LHKW, BTEX und PAK) Kohlenwasserstoffen, Strontium, Chlorid, Uran, Blei, Krypton, Helium, Argon, Lithium oder Radium zur Beurteilung von Herkunft und Umweltverhalten von Stoffen bis hin zur Qualitätssicherung im Herstellungsprozess eingesetzt (Abb. 2). Neben der Probenahme und der anerkannten Güte der Analytik zeichnet sich

die Hydroisotop GmbH vor allem durch die fundierte Interpretation der Ergebnisse im Hinblick auf die jeweilige Problemstellung aus.

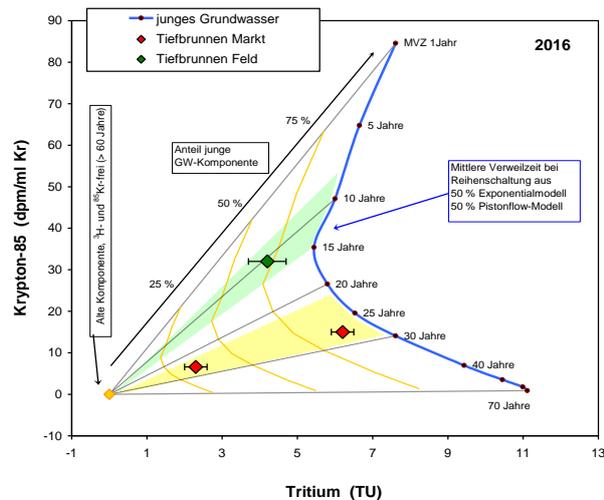


Abb. 2: Harpendarstellung von ^3H - und ^{85}Kr -gehalten, Jungwasseranteil und mittlere Verweilzeit

Neben Isotopengehaltsbestimmungen und hydrochemischen Untersuchungen zählen seit längerem auch die Durchführung und die Analytik von **Markierungsversuchen** (Abb. 3) und hydraulische Untersuchungen, hydrogeologisches und hydrochemisches **Monitoring** zum Leistungsumfang der Hydroisotop GmbH.



Abb. 3: Fluoreszenztracer

Da die Reinheit von Wasser ein Anliegen der Fa. Hydroisotop ist, wurde der Bereich **Filtertechnik** zum Leistungsumfang der Hydroisotop GmbH hinzugefügt. Zusammen mit einer Partnerfirma ist die Hydroisotop GmbH sowohl bei der individuellen Planung und Konzeptionierung von Filter- und Aufbereitungsanlagen (Abb. 4), beim Bau von automatischen Filteranlagen und beim Vertrieb von Filtermaterial engagiert. Die Herausforderung besteht in der selektiven Entfernung von geogenen

Kurz vorgestellt

und anthropogenen anorganischen und organischen Inhaltsstoffen wie z.B. Arsen, Fluorid, Antimon, Bor, Radium oder organischen Kohlenstoffverbindungen aus Trink-, Mineral-, Heilwasser und Abwasser.



Abb. 4: Filtersysteme für Durchfluss von 1 l/s bis 50 l/s

Workshops

Für die Weitergabe von Know-how dienen Workshops im eigenen Konferenzraum in Schweitenkirchen. Hierzu zählen Themen wie

- Tiefe und Oberflächennahe Geothermie,
- Mineralwasser und Heilwasser,
- Organische Schadstoffe - Natural Attenuation
- Gebäudeschäden,
- Isotope im Grundwasser,
- Entfernung von Schadstoffen aus Trinkwasser

Forschung

Hydroisotop übernimmt zusammen mit kooperierenden Firmen, Universitäten und Forschungseinrichtungen Teilaufgaben bei nationalen und internationalen Forschungsprojekten im Bereich der Analytik, Filtertechnik, Lebensmittelauthenzität, Hydrogeologie, Geothermie und Wasserwirtschaft. Hierzu gehören z.B.

- Nachhaltige Trinkwassergewinnung in China,
- Anwendung von Thermoinhibitoren zur Vermeidung von Ausfällung und Korrosion in Tiefengrundwassersystemen,
- Adsorptionsverfahren mit MiniAdsorbentien zur Halb- und Schwermetallentfernung aus Wasser mit Vorrang Arsen,
- Entwicklung einer Methode zur Messung von Deuterium an LCKW,
- Entwicklung einer elektrochemischen Messeinrichtung zur Bestimmung von Basisparametern in Thermalwasser,
- Geographische Identifizierung von Lebensmitteln, der Nachweis von illegalen Zusatzstoffen, die Einstufung der Anbauweise „bio“ von Obst und Gemüse.

Publikationen, Vorträge, Öffentlichkeitsarbeit

u.a. eigene Publikationen in Fachzeitschriften, Kongresse (IAEA, TerraTech), Teilnahme an Podiumsdiskussionen (Futura-Projekt Bad Blumau), Vorträge auf Foren (Altlastenforum) und Öffentlichkeitsarbeit auf Messen wie IFAT oder Pol-

Eco-System, das Engagement für den Deutschen Heilbäderverband.

Team Hydroisotop

Derzeit beschäftigt die Hydroisotop GmbH 32 Mitarbeiter. Neben den Firmeninhabern und Geschäftsführern Dr. Lorenz Eichinger und Dr. Florian Eichinger gehören zum interdisziplinären wissenschaftlichen und technischen Team Physiker, Chemiker, Agrar-Ingenieure, Lebensmittelchemiker, Biologen, Hydro-/ Geologen, Mineralogen, Hydrologen, Chemie-Ingenieure, Chemisch-technische Assistenten, Apothekengehilfen, Laboranten, Techniker und Sekretärinnen.

Das breite Arbeitsspektrum der erfahrenen Fachkräfte steht für Beratung, die Beantwortung von Fragen und die Erstellung individueller Lösungskonzepte am Hauptsitz in Schweitenkirchen (Bayern) (Abb. 5) und in der Zweigstelle in Emmendingen (BW) zur Verfügung.



Abb. 5: Das Wasserhaus – Wasser- und Umweltzentrum – der Hydroisotop GmbH

Kontakt

Hydroisotop GmbH Tel.: 08444 9289-0
Woelkestr. 9 Fax: 08444 9289-29
85301 Schweitenkirchen

E-Mail: info@hydroisotop.de

Internet: www.hydroisotop.de

Tagungsbericht

Kurzbericht über den 16. Nationalkongress der Fachgruppe „Umweltchemie und Kulturerbe“ (Chimica dell' Ambiente e die Beni Culturali) der Italienischen Chemischen Gesellschaft

„ABC-Chemie“ meint im Italienischen die Zusammenfassung der Umweltchemie (A = ambiente) mit Konservierung und Restaurierung, soweit sich diese Kulturdenkmälern und –schätzen (z.B. Gemälde) widmen (BC = bene culturali, international zumeist ‚cultural heritage‘ genannt). Die stärkste inhaltliche Klammer der beiden Teile ist die Luftverschmutzung, während die Tatsache, dass manche bauliche Konservierungsmaßnahme neue Stoffe in die Umwelt einbringt, wohl eher eine ironische Fußnote ist. Dieses Jahr wurde der 16. Nationalkongress dieser Divisione der Societa Chimica Italiana („XVI ABC“, www.congressodabc.it) vom 26.-29. Juni in Lecce, Apulien, abgehalten, einer Stadt, die sich mit bestens restaurierten Kulturdenkmälern aus der Römerzeit und vor allem dem Barock, als sie die zweitgrößte im Königreich Neapel war, um den Titel europäische Kulturhauptstadt 2019 bewirbt. Die ABC gibt es seit 1995, zunächst nur für A, später dann erweitert. Ihre Tagungen finden in jedem dritten Jahr, dem der nationalen Chemiekongresse, nicht statt.

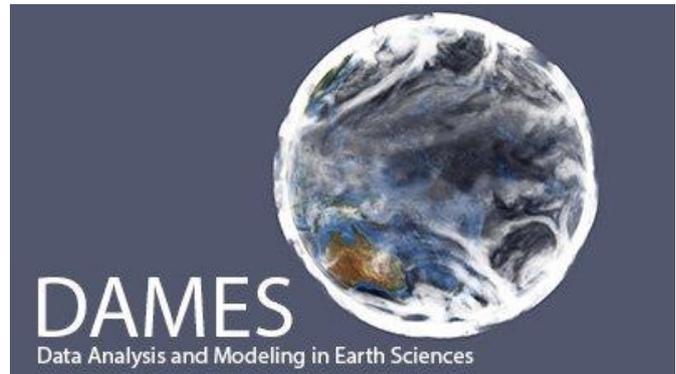
Von den etwa 200 Mitgliedern der Divisione kamen drei Viertel zur dreitägigen Tagung nach Lecce und präsentierten und diskutierten etwa 50 Kurzvorträge (in 2 Parallelsessions, A und BC) und etwa 50 Posterbeiträge. Gesprochene Wörter waren fast durchweg italienische, geschriebene zu mehr als der Hälfte englische. Gastbeiträge lieferten zwei Plenarredner aus der Wissenschaft (Gerhard Lammel, Mainz und Brno, zu großskaligem Zyklieren von Umweltchemikalien unter A, und Maria Teresa Doménech-Carbó, Valencia, zu aktuellen Trends in der chemischen Analytik von Kulturdenkmälern und –schätzen unter BC) und Podiumsgäste regionaler Behörden (zur nationalen Praxis von Umweltgenehmigungen). Letzteres ist ein Thema, das auch Mitglieder einer anderen Standesorganisation (außerhalb der SCI) anzog, die Vereinigung der selbständigen Chemiker (Consiglio Nazionale die Chimici, ebenfalls eine Mitgliedsorganisation der EuChemS). Fabrizio Passarini, Bologna, bis 2015 der Präsident der Divisione, stellte das Positionspapier der SCI zum Klimawandel, Ursachen-, Wirkungs- und Vermeidungsforschung, vor. Dabei ging er auf laufende Projekte in Italien ein. Weitere inhaltliche Schwerpunkte zu A wurden bei Nanopartikeln, Umweltanalytik (Luft, Abfall, Wasser), Emerging contaminants und Risk assessment, sowie regionaler Luftqualität (Apulien) gesetzt. Besonders beeindruckte mich die wohl fast perfekte Multidisziplinarität eines integrierten Forschungsprojektes mehrerer Universitäten, regionaler Behörden, Industriebeteiligung und weiterer Institutionen zur Umweltsituation der Hafen- und Industriestadt Taranto. Universitäre Forschung kann in Italien übrigens nicht auf öffentliche nationale Projektmittel zugreifen

– weil es keine Förderorganisation analog zu DFG oder NSF gibt, auch niemals gab. Dies stellt ein klares Hemmnis universitärer Grundlagenforschung und auch Umweltforschung in Italien dar.

Flankiert wurde die Tagung von Mitgliederversammlung, Treffen der Jungchemiker, Preis- und Stipendienverleihung und einem Rahmenprogramm, das gleich zweimal Tanz unterm Sternenhimmel versprach (und das Wetter hielt's natürlich).

G. Lammel (g.lammel@mpic.de)

Veranstaltungsankündigungen



Data Analysis and Modeling in Earth Sciences (DAMES) - Biannual international conference series, 26.-28. September 2016, Hamburg

During the last few decades, the increasing public and scientific interest in geoscientific problems has triggered enormous efforts to obtain, analyze and interpret data that contain substantial information about the dynamics of the complex system "Earth". For this purpose, novel techniques not only for recording data, but also for their statistical evaluation and data-based modeling had to be developed.

Aims and Scope of the Conference

The objective of the international conference series "Data Analysis and Modeling in Earth Sciences" (DAMES) is to bring together researchers dealing with data analysis and modeling in all fields of Earth Sciences, promoting the exchange of knowledge on both methodological developments and Earth Science applications across disciplines. Specific topics come from all fields of Earth Sciences, including atmospheric sciences, hydrology, oceanography, present-day and paleoclimatology, climate change and its impacts. Contributions on applied topics such as environmental risk analysis and sustainability are welcome as well.

Homepage:

<https://www.clisap.de/research/a:-climate-dynamics-and-variability/a1:-climate-variability-and-predictability/dames-2016-2/>

International Symposium on Persistent Toxic Substances – ISPTS, 11.-14.10.2016, Leipzig

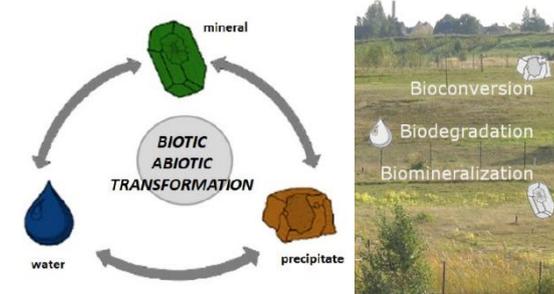
The **International Symposium on Persistent Toxic Substances** (ISPTS) series aims to provide a platform for scientists working on PTS around the globe to discuss and exchange information on the most recent findings, innovative theories, frameworks, and methodologies in PTS research. The symposia covers interdisciplinary topics of significance, ranging from analytical chemistry and the characterization of PTS to environmental fate and eco-toxicology.

Building on the great success of the eleven IS PTS held annually since 2004, the 13th ISPTS will be held at the Leipziger KUBUS on the Science Campus in Leipzig on 11–14 October 2016. It will be co-organized by the following partners:

- Helmholtz-Centre for Environmental Research – UFZ, Department of Environmental Biotechnology, and the
- State Key Laboratory of Environmental Chemistry and Ecotoxicology, Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences.

The IS PTS 2016 will provide a valuable opportunity for environmental science researchers and students from around the world to interact and exchange research ideas and contribute to a global understanding of PTS.

Preliminary program available from the Conference' homepage: <http://www.pts2016-leipzig.de/index.html>



15th Symposium on remediation/ 15. Sanierungskolloquium, 13.-14.10.2016, Jena

From “expert knowledge” to basic science to application:
15 years of bio-geo interactions

We would like to welcome you to Jena for our 15th symposium. We will take the occasion to reflect the results of 9 years of funding of a Research Training Group „Alteration and element mobility at microbe-mineral interfaces“ by the German Science Foundation. This is structured with three sessions on the main topics of conversion of elements forming, e.g., supergene ore bodies of manganese and iron (hydro)oxides with microbial impact, the biological weathering of minerals, or the production of minerals induced or controlled microbiologically.

In addition, we will introduce applications of knowledge gained in bioremediation and with impact on the paths from and to minerals and rocks, through the water phase, with reactive transport, and into nutritional webs.

Homepage:

http://www.gk-alteration.uni-jena.de/cms/index.php?option=com_content&view=article&id=215

International Workshop: Engineered Nanoparticles in Environmental Systems: Fate, Transport, Effects and Analytics, 21.-22.10.2016, Landau in der Pfalz

Engineered nanoparticles (ENP) are widely used in different industrial fields and products. In the last years, the risk potential for the release of ENP in the environment has increased as never before. ENP are expected to pass the waste-water-river-topsoil-groundwater pathway. In the terrestrial and aquatic environment ENP can undergo aging and transformation processes which can influence fate, transport and toxicological effects to different living organisms. The scope of this workshop is to gather researchers, scientists, experts and specialists from nanoparticle and colloid science, soil and environmental chemistry, ecotoxicology or neighbouring disciplines to discuss the latest results and findings in the field of aging, fate, transport and toxicological effects of nanoparticles in the environment.



The Workshop will be held within the INTERNANO project "Mobility, aging and functioning of engineered inorganic nanoparticles at the aquatic-terrestrial interface".

Homepage: <http://www.internano-conference.de/index.html>

International Symposium & Workshop: Fish and amphibian embryos as alternative models in toxicology and teratology, 1.-2. 12. 2016, Aulnay-sous-Bois/Paris, France

Scope

Fish and amphibian embryo models are highly popular in the area of toxicology, both in research, industry and potential regulatory application. These models exhibit a number of advantages which make them superior and/or complementary to others. In compliance with international animal welfare regulations, the fish and amphibian embryo models provide an ethically acceptable small scale analysis system with the

complexity of a complete organism. A suite of available advanced methodologies allows various types of experimental approaches ranging from phenotypic observations, functional assays to “omics” analysis. The ultimate goal of the symposium is to promote the development of the fish and frog embryo models as potential alternatives to animal testing.

The symposium aims to bring together scientists using fish and frog embryo models, exchange knowledge, ideas and latest developments in the field of toxicology and teratology. Invited lectures will focus on specific topics. Breakout sessions will allow to identify major advantages, limitations, new fields and future research needs of the fish/amphibian embryo model and to establish collaborations.

The focus in 2016 will be on but not limited to high-content/ image analysis, behavioral assays and AOPs.

Contributions welcome

Contributions from participants, both poster presentations and a limited number of short platform presentations are welcome. These presentations could cover one of the following topics: human toxicology screening, teratogenicity, nanotoxicology, immunotoxicity, regulatory toxicology, endocrine effects, neurotoxicity, toxicogenomics ('omics'), high throughput technologies, functional genomics, ethics/animal welfare and ecotoxicology (acute and chronic toxicity, bioconcentration, effluent testing).

Homepage:

<http://www.ufz.de/fish-frog-embryo/index.php?en=30159>



2nd Green and Sustainable Chemistry Conference | 14 - 17 May 2017 Hotel Intercontinental Berlin, Germany

As the world's population edges towards 9 billion, the strain on the planet's resources is steadily increasing. In both the developed and developing world there is a growing demand for food, manufactured goods and improved access to clean water and fuel.

Over the past 30 years it has become obvious that the products of human manufacture, even those produced to benefit society, can have negative effects on human health and the environment. The United Nations General Assembly has addressed these challenges in its Sustainable Development Goals (SDGs) which have been adopted in 2015. A closer look

shows that to meet these goals chemistry will play an important role. Also related to this is that the UN Environmental Assembly-2 (UNEA-2) has named sustainable chemistry as an important building block within and beyond sound chemicals management.

Other conferences in this field are focused mainly on the synthesis and technical aspects, however to contribute in a sustainable manner to the SDGs a much broader approach and exchange is necessary. The goal of the conference is therefore to bring together international researchers from academia and industry, from authorities and other institutions to communicate and share the latest developments across the broad and diverse fields of Green and Sustainable Chemistry.

Topics include:

- Mineral resources and recycling
- Resources for organic molecules
- Synthesis and catalysis
- Energy conversion
- Green and sustainable pharmacy
- Sustainable chemistry and legislation
- The UN Sustainable Development Goals and sustainable chemistry
- Sustainable chemistry and developing countries
- Industry and sustainable chemistry
- Education

Elsevier Foundation Green and Sustainable Chemistry Challenge

Another unique feature of this conference will be the [Elsevier Foundation Green and Sustainable Chemistry Challenge](#). Projects can be in any field of Green or Sustainable Chemistry so long as they are applicable for use in developing countries. The top five candidates will be invited to this conference to make presentations to the panel of judges. The winners will be selected from these five finalists and an award ceremony will held at the end of the conference. The winning project in the challenge will receive EUR 50,000; the winner of the second prize will receive EUR 25,000.

Homepage: <http://www.greensuschemconf.com/>

Kurznachrichten

Public Consultation on the draft update of the guidance of the EFSA (European Food Safety Authority) Scientific Committee on the use of the benchmark dose approach in risk assessment

Deadline: 20 September 2016



EFSA's Scientific Committee has launched an open consultation on a draft update of its guidance on the use of the benchmark dose (BMD)

approach in risk assessment. This update confirms that the BMD approach is a scientifically more advanced method compared to the NOAEL approach for deriving a Reference Point (RP), and therefore recommends that the BMD approach, and more specifically model averaging, is used for deriving a Reference Point from the critical dose-response data to establish health-based guidance values and margins of exposure. Because sections 2.1 to 2.4 of the document were only subject to minor editorials, this consultation focusses on section 2.5 and the two appendices. Possibility is given to comment on the other sections if deemed necessary.

Interested parties are invited to submit written comments by 20 September 2016. Please use the electronic template provided to submit comments and refer to the line and page numbers. If you would like to submit additional data to support your comments or file send an email to: SCER.PublicConsult.74@efsa.europa.eu. Please note that comments will not be considered if they:

- are submitted after the closing date of the public consultation
- are presented in any form other than what is provided for in the instructions and template
- are not related to the contents of the document
- contain complaints against institutions, personal accusations, irrelevant or offensive statements or material
- are related to policy or risk management aspects, which is out of the scope of EFSA's activity.

EFSA will assess all comments from interested parties which are submitted in line with the criteria above. The comments will be further considered by the relevant EFSA Panel and taken into consideration if found to be relevant.

All comments submitted will be published. Comments submitted by individuals in a personal capacity will be presented anonymously. Comments submitted formally on behalf of an organisation will appear with the name of the organisation.

Access to the electronic template:

<http://www.efsa.europa.eu/en/consultations/call/160714>



The Italian Chemical Society's Position on Climate Change

Premise

Considering the long term trends, significant variations in the climate have become clearly evident and have been proven by indisputable scientific observations. Said variations will increasingly affect both terrestrial and marine ecosystems and significantly condition human activities such as fishing and agriculture, the availability of natural resources such as fresh water in addition to determining problems specific to coastal areas owing to rising sea levels. Climate change represents one of the primary threats to sustainable development and, precisely for this reason, has been included among the UN Agenda 2030 objectives which emphasizes the urgent need to reduce greenhouse gas emissions and to adopt measures to mitigate the negative impact as projected by current climate patterns.

Fully aware of the gravity of the present situation yet confident in the joint commitment of international institutions, the **Italian Chemical Society:**

- applauds the agreement reached at the **Paris United Nations "COP-21" Conference** undertaking a course of action aimed at attaining a low greenhouse gas emission economy and to structure adaptation plans for the global changes currently underway;
- fully supports and reiterates all the declarations set forth on the subject by other **Chemical Societies** such as the **American Chemical Society**¹, the **Royal Society of Chemistry**² and **EuCheMS**³;
- has identified the drastic reduction of the use of fossil fuels as a high priority strategy in striving towards mitigation of climate change through decreases in greenhouse gas emissions.

The contribution of the Italian chemical scientific community

The problem in the relationship between man and the environment is, above all, cultural in nature. Understanding this intrinsic, essential relationship and encouraging one which is not based exclusively on exploitation yet, at the same time, acknowledging that human activity is not something extraneous, but rather, integral to the natural environment is a cultural task to which the community of chemists can and must give a significant contribution, beginning with schools and proper environmental education.

The following is a presentation of several aspects more specifically related to the problem of climate change to which chemical research - particularly that conducted by the Italian scientific community – may offer a special contribution.

Significant scientific research has been dedicated to the reconstruction of past climates (paleoclimate), through chemical, physical and isotopic stratigraphies in marine sediment and ice cores. These studies have established a relationship between temperature variations and concentrations of greenhouse gases (especially methane and carbon dioxide), amount of particulate matter suspended in the atmosphere and environmental factors such as orbital parameters, solar activity, volcanic eruptions and meteorological events. The results obtained from this interdisciplinary research, characterized by decisive chemical contributions, have determined that the current concentrations of CO₂ in the atmosphere are the highest in the last 800,000 years.

The close relationship between global warming and biosphere pollution, two of the most serious threats to human and environmental health, was also proven: not only certain gases produced by civil and industrial activities, such as carbon dioxide, methane, dinitrogen monoxide, sulphur hexafluoride, halocarbons (CFC, HFC, PFC), but also certain anthropogenic aerosol components, such as black carbon, contribute to global warming. On the contrary, other components (such as ammonium sulphate and ammonium nitrate) contrast the effects of green house gases through direct phenomena (solar radiation distribution) and indirect phenomena (cloud formation and modification). Chemical analysis of the atmosphere has proven to be an indispensable element in attaining an accurate calculation of overall radiation determined by various forcings which influence the climate and make it possible to project reliable forecasts of the evolution of global changes.

Moreover, in relation to climate changes, studies have been conducted on the distribution and toxicity of chemicals present in the environment in order to forecast how these substances may act upon the capacity to adapt of living organisms to future climatic conditions and increase their vulnerability. Therefore, one of the greatest challenges confronting chemical research is that of increasing our knowledge of risk assessments by integrating the effects of climate change on environmental variables (temperature, salinity, pH and nutrient concentrations) of aquatic ecosystems. These factors directly or indirectly alter the behaviour and health of living organisms. In addition to the negative effects of global change on tourism and the agro-food sector, no less important are the effects that global change may have on cultural heritage, in particular those elements which are directly exposed to the external environment, an extremely important consideration for Italy; the results of several international projects have identified the increase in average temperatures and precipitation as one of the main causes of an increase in the deterioration processes

related to oxidation (on a basis proportional to the specific vulnerability of artefacts); a secondary, but no less worrisome, effect is the overall increase in biofilm development and microbial colonization.

These considerations regarding the impact of climate change may produce a rigorous response in terms of overall re-assessment of productive processes in order to limit the emissions of greenhouse gases to the maximum.

Based on the principles of **Green Chemistry** and industrial ecology, the efforts of the chemical industry, whose processes are both energy and material intensive, are gradually being oriented towards greater sustainability: recent data reveal a 57% decrease of specific emissions of greenhouse gases, calculated on the basis of 1990 production levels⁴. A rather particular area in which much research is currently underway is aimed at identifying new means to capture and recycle carbon dioxide, as a starting reagent for the synthesis of new compounds. But in more general terms, considering the life cycle of products and systems, chemical research contributes to extending the impact range from various possible scenarios in order to foster the most favourable alternatives in terms of overall results from an environmental perspective.

Lastly, given that greenhouse gas emissions for energy use in Italy exceed 80% of total GHG emissions⁵, it follows that a key factor in containing this amount is the transition towards a decarbonised economy through improving the efficiency of processes and services, which would result in energy savings as well as energy production which would be progressively less reliant on fossil fuels. Currently, much of the research currently underway in the field of chemistry is aimed at making better use of renewable energy sources, especially solar energy through the use of new devices and materials which, as opposed to solutions already on the market, have enhanced conversion efficiency or which may be composed of renewable organic composites. This is also true of chemical research which, in an attempt to compensate for fluctuations in solar and/or wind energy sources, is aimed at the development of new devices for the storage of electrical energy and is proving to be decisive.

Conclusions and Recommendations

Membership in the Italian Chemical Society includes recognized authorities and experience well suited to analyze the dynamics and effects of climates changes already under way and possible actions of mitigation and adaption. Well aware of its leading role in Italian society the Society forcefully reiterates the need to undertake a course of structural reassessment of productive processes that is oriented towards reducing greenhouse gas emissions.

Within this perspective, the Society urges political decision-makers to rapidly implement the obligations assumed in the recent Paris Conference and, in particular, to accelerate the transition towards greater efficiency and renewable energy

sources, thus progressively lessening dependence on the use of fossil fuels.

For this purpose, the Italian Chemical Society is fully available in offering scientific and multidisciplinary technologies in the fields briefly cited in this document so that our country may strive towards significant objectives of sustainability and make a concrete commitment in ensuring a better future for present and future generations.

June 2016

Please see

¹<http://www.acs.org/content/acs/en/climatescience/about.html> as well as the "Position Statement 2013-2016":

<http://www.acs.org/content/dam/acsorg/policy/publicpolicies/promote/globalclimatechange/climate-change.pdf>

² Cfr., specifically: 1) "Climate Communiqué"

<https://royalsociety.org/~media/policy/Publications/2015/21-07-15-climate-communication.pdf> (in conjunction with other scientific societies); 2) "Statement" (in conjunction with the "Institution of Chemical Engineers"):

<http://www.rsc.org/campaigning-outreach/global-challenges/climate-change/>

³ European Association for Chemical and Molecular Sciences, letter to the President of the European Parliament and the European Commission, 3/11/2014 (http://www.euchems.eu/wp-content/uploads/EuCheMS_letter_greenhouse.pdf): "EuCheMS

agrees with the chemical arguments that lead to the conclusion that it is extremely likely that the current increases in atmospheric carbon dioxide and other greenhouse gases, as well as the increase in global temperatures that have occurred over the last 100 years arise as a result of human activity"

⁴ Federchimica, "Responsible Care. 21° Rapporto Annuale", 2015:

http://www.federchimica.it/docs/defaultsource/responsible-care/rc_2015-navigabile.pdf.

⁵ ISPRA, "Emissioni nazionali di gas serra", 2015:

http://www.isprambiente.gov.it/files/pubblicazioni/rapporti/Rapporto_20_2015.pdf

OECD report: Costs of global air pollution are likely to increase significantly by 2060



(©OECD)

This report, published on 9 June 2016, is part of the CIRCLE project on "Costs of Inaction and Resource scarcity: consequences for Long-term Economic growth", which seeks to take

into account the feedbacks from environmental pressures and resource scarcity to the economy.

The current report provides a comprehensive assessment of the economic consequences of outdoor air pollution in the coming decades, focusing on the impacts on mortality, morbidity, and changes in crop yields as caused by high concentrations of pollutants. Both the consequences for the economy and the welfare costs from premature deaths and pain and suffering are quantitatively assessed. While indoor air pollution is also the cause of a large number of premature deaths, this report focuses on outdoor air pollution only.

The JRC contributed to this analysis by computing global air pollutant concentrations and crop yield impacts from the emission scenarios provided by the CIRCLE project, using the TM5-FASST tool.

Some policy-relevant highlights:

- The projected increase in concentrations of PM2.5 and ozone will in turn lead to substantial effects on the economy. According to the calculations in this report, healthcare costs related to global air pollution are projected to increase from USD 21 billion in 2015 to USD 176 billion in 2060. By 2060, the annual number of lost working days, which affect labour productivity, are projected to reach 3.7 billion (currently around 1.2 billion) at the global level.
- The market impacts of outdoor air pollution, which include impacts on labour productivity, health expenditures and agricultural crop yields, are projected to lead to global economic costs that gradually increase to 1% of global GDP by 2060.
- Policies to limit air pollution emissions would lead to an improvement in air quality, reduce risks of very severe health impacts, and, if properly implemented, generate considerable climate co-benefits.
- The potential economic consequences of both the market and non-market impacts of outdoor air pollution are very significant and underscore the need for strong policy action.

Report download:

<https://ec.europa.eu/jrc/en/news/jrc-contributes-oecd-report-economic-consequences-outdoor-air-pollution>

UBA-Texte 38/2016: POP- und Hg-Emissionen aus abfallwirtschaftlichen Anlagen

Zur Erfüllung von Berichtspflichten zum Stockholmer Übereinkommen zur Begrenzung persistenter organischer Schadstoffe (POPs) und um zur EU-POP-Verordnung beizutragen, sollen die Emissionen an POPs (z.B. PCDD/F, PCB, PAK, u. a.) aus Anlagen der Abfallwirtschaft und Krematorien ermittelt werden. Die Erhebung der Emissionsdaten wird in diesem Rahmen sowohl auf Basis von Literaturrecherchen als auch durch Emissionsmessungen an Praxisanlagen durchgeführt. Die Untersuchungen sollen jeweils an mindestens vier Abfallverbrennungsanlagen, Klärschlammverbrennungsanlagen, Altholzverbrennungsanlagen und Krematorien mit repräsentativen Messungen erfolgen. Bei der Auswahl der Anlagen wurde darauf geachtet, dass die Anlagen mit unterschiedlicher Abgasreinigung arbeiten, sodass die Ergebnisse möglichst repräsentativ für den gesamten Anlagenpark in Deutschland sind.

Download:

<https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/pop-hg-emissionen-aus-abfallwirtschaftlichen>

Arzneimittelwirkstoffe in der Umwelt: Neue Studie des Umweltbundesamtes Österreich

umweltbundesamt^U
PERSPEKTIVEN FÜR UMWELT & GESELLSCHAFT



(Wien, 23.8.2016) Das Umweltbundesamt präsentiert in einer aktuellen Studie eine Bestandsaufnahme des Verbrauchs an Arzneimittelwirkstoffen in Österreich und einen ersten Überblick über ihr Vorkommen in der Umwelt anhand unterschiedlicher Erhebungen.

Der Verbrauch an Arzneimitteln steigt in Österreich von Jahr zu Jahr, täglich sind es mehr als zwei Tonnen. Mehr als 13.000

verschiedene Medikamente sind in Österreich zugelassen. Auch die Palette der enthaltenen Wirkstoffe wird immer größer – und diese hinterlassen Spuren. Mittlerweile sind Arzneimittel in Abwässern, Flüssen und Seen aber auch im Grund- und Trinkwasser sowie im Boden, Klärschlamm und Kompost in ganz Österreich nachweisbar.

Arzneimittelverbrauch in Österreich

Von den untersuchten Arzneimittel-Gruppen sind die Schmerzmittel mit über 30% am Gesamtverbrauch die Spitzenreiter, gefolgt von den Antidiabetika mit mehr als 18% und den Psychopharmaka mit knapp 14%. Antibiotika landen mit einem Anteil von 9% auf Platz vier. Insgesamt wurden 2014 mehr als 805 Tonnen an Medikamenten in Österreich verbraucht. 2014 wurden knapp 245 Tonnen an Schmerzmitteln, Entzündungshemmern und Antirheumatika verschrieben – ein Anstieg um 50% seit 1997. Der Verbrauch an Antidiabetika betrug 2014 knapp 147 Tonnen. Metformin war mit mehr als 141,5 Tonnen der verbrauchsstärkste aller in Österreich zugelassenen Wirkstoffe, sein Einsatz ist seit 1997 um 400% gestiegen. Psychopharmaka, Antiepileptika und Mittel zur Behandlung des Nervensystems (Nootropika) rangieren mit einem Verbrauch von 110 Tonnen an dritter Stelle der Statistik. Am häufigsten eingenommen wurde der pflanzliche Wirkstoff Passiflora incarnata (Passionsblumenkraut) mit knapp 27 Tonnen. Die Gruppe der Antibiotika steht mit einem Verbrauch von 68,5 Tonnen an vierter Stelle – sie haben seit 1997 um 39% zugelegt.

Datengrundlagen

Das Umweltbundesamt Österreich hat in seiner Studie auf die Erhebung des Arzneimittelverbrauchs durch das Institut für medizinische Statistik aus dem Jahr 2014 zurückgegriffen. Insgesamt wurden 24 Gruppen und ihre Entwicklung seit 1997, dem Jahr der letzten umfassenden Umweltbundesamt-Erhebung, analysiert.

Weitere Informationen:

Sabine Enzinger, Pressestelle Umweltbundesamt, Tel.

+43(0)1/31304-5488 sabine.enzinger@umweltbundesamt.at

Download:

http://www.umweltbundesamt.at/aktuell/presse/lastnews/news/2016/news_160823/

UBA-Texte 54/2016: Aufklärung der Ursachen von Tierarzneimittelfunden im Grundwasser – Unter-

suchung eintragsgefährdeter Standorte in Norddeutschland

Um die Ursachen der Funde von Antibiotika-Wirkstoffen (Sulfonamide) im oberflächennahen Grundwasser aufzuklären, wurden an elf Standorten mit deutlich erhöhten Viehbesatzdichten in Nordwestdeutschland räumlich und zeitlich hochaufgelöste Untersuchungen durchgeführt. Die Auswahl der Standorte resultierte aus einem worst-case-Ansatz, bei dem unter ungünstigen Standortbedingungen der Eintrag von Antibiotika in das Grundwasser begünstigt wird. Es erfolgten Recherchen zum möglichen Stoffeintrag über organische Wirtschaftsdünger. An fast allen Standorten konnte eine weitgehende Kooperation der Landwirte unter Mithilfe der Landwirtschaftsverbände erreicht werden. Die Landwirte wurden befragt, welche und wie viele organische Wirtschaftsdünger in den letzten fünf Jahren auf die Schläge im Zustrom der Messstellen aufgebracht und welche Arzneimittel im Betrieb eingesetzt worden waren. Flankierend wurden die von Ihnen zur Verfügung gestellten Dünger beprobt und analysiert. Im Gelände wurden temporäre Grundwassermessstellen errichtet, die wiederholt beprobt und mit denen der Grundwasserzustrom zu den stationären Messstellen hochaufgelöst und zuverlässig ermittelt werden konnte. Dabei zeigten sich lokal große räumliche Unterschiede der Antibiotika-Funde in niedrigen Konzentrationen. Bei neun der elf Messstellen mit Funden waren die Konzentrationen zeitlich betrachtet über drei Jahre konstant. Bei allen elf Standorten wird davon ausgegangen, dass der Stoffeintrag der Antibiotika-Wirkstoffe durch die Düngung mit organischen Wirtschaftsdüngern verursacht worden war, auch wenn die Eintragspfade nicht überall komplett nachvollzogen werden konnten. Die an allen elf Standorten gefundenen Wirkstoffe Sulfadiazin und Sulfadimidin werden in Deutschland fast ausschließlich zur Behandlung von Tieren eingesetzt. Außerdem wurde an zwei Standorten wiederholt der Wirkstoff Sulfamethoxazol im Grundwasser in hohen Konzentrationen zwischen 100 und 300 ng/l gefunden. Dieser Stoff wird in Deutschland in der Humanmedizin in deutlich größeren Mengen als in der Tiermedizin eingesetzt. Dort wurden auch begleitende Wirkstoffe, Transformationsprodukte und Süßstoffe sowohl in Grundwasser- als auch in Abwasserproben lokal benachbarter Kleinkläranlagen gefunden, die direkt in den Boden emittieren. Daher wird hier von einem zusätzlichen Stoffeintrag über das Abwasser ausgegangen, der durch Modellrechnungen zum Verbleib der Wirkstoffe im Untergrund bestätigt werden konnte.

Download:

<https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/aufklaerung-der-ursachen-von-tierarzneimittelfunden>

Report 0577 (Umweltbundesamt Wien): Bromierte Flammschutzmittel in der Umwelt



Im Rahmen der vorliegenden Studie wurden sieben Fisch-, zehn Boden- und drei Klärschlammproben aus Österreich auf verschiedene bromierte Flammschutzmittelwirkstoffe untersucht. Diese umfassten Tetrabrombisphenol A (TBBPA), Hexabromcyclododecan (HBCDD) und dessen Stereoisomere, Decabromdiphenylethan (DBDPE), 1,2 Bis(2,4,6-tribromphenoxy)ethan (BTBPE)

sowie Hexabrombenzol (HBB). Für deren Analyse wurden die Messmethoden vom Umweltbundesamt adaptiert.

Besonders in den untersuchten Fisch- und Bodenproben waren die nachgewiesenen Belastungen an diesen bromierten Flammschutzmitteln auch im Vergleich mit anderen internationalen Untersuchungsergebnissen verhältnismäßig gering. In keiner der Fisch- und Bodenproben konnte TBBPA nachgewiesen werden. Auch die detektierten Konzentrationen an DBDPE, BTBPE und HBB lagen im unteren sowie Gesamt-HBCDD und dessen Stereoisomeren im mittleren Bereich.

Die Klärschlammproben zeigten hingegen durchwegs Belastungen mit allen untersuchten bromierten Flammschutzmittelwirkstoffen. Internationale Untersuchungsergebnisse von Klärschlämmen geben ein heterogenes Belastungsbild und zeigen große Konzentrationsunterschiede. Die im Rahmen der vorliegenden Studie untersuchten Flammschutzmittel wiesen aber zumeist mit anderen Klärschlammuntersuchungen vergleichbare Konzentrationen auf.

Augenmerk ist auf DBDPE zu legen, dessen Konzentrationen in den untersuchten Klärschlammproben im internationalen Vergleich im oberen Bereich einzuordnen sind. Aufgrund der Persistenz, des möglichen Bioakkumulationspotenzials und der endokrinen Wirksamkeit sollten die Konzentrationen im Zeitverlauf beobachtet werden. Zudem zählt DBDPE aufgrund seines Einsatzes als Substitut für das bromierte Flammschutzmittel DecaBDE zu einem der in China am häufigsten verwendeten Flammschutzmittel und ist demnach vermutlich auch in relevanten Mengen in verschiedenen Produkten des europäischen Marktes vorhanden.

Weitere Untersuchungen von Klärschlämmen unterschiedlicher Kläranlagen (kommunale bzw. industrielle Kläranlagen mit unterschiedlicher Einleiterstruktur bzw. Technologie) auf ausgewählte Flammschutzmittel sind notwendig, um ein genaueres Bild der Belastung sowie mögliche punktuelle Eintragsquellen identifizieren zu können.

Download:

http://www.umweltbundesamt.at/aktuell/publikationen/publikationssuche/publikationsdetail/?pub_id=2175

UBA-Hintergrundpapier: Nanomaterialien in der Umwelt

Aktueller Stand der Wissenschaft und Regulierungen zur Chemikaliensicherheit / Empfehlungen des Umweltbundesamtes

(Juni 2016). Nanomaterialien können im Vergleich zu konventionellen Chemikalien und Materialien veränderte oder neue Eigenschaften aufweisen. Bis heute gibt es aber – bis auf wenige Ausnahmen – keine Anpassungen von Stoffgesetzgebungen an Nanomaterialien. Dadurch können potenzielle spezifische Umweltrisiken nicht zureichend abgebildet und bewertet und geeignete Maßnahmen zur Minimierung der Risiken nicht getroffen werden. Schwerpunkt der vorliegenden Veröffentlichung ist daher die Darstellung der notwendigen Weiterentwicklung der Chemikalienregulierung für Nanomaterialien mit Bezug auf die Umwelt aus Sicht des UBA.

Download: <http://bit.ly/1XReH6X>

UBA-Texte 57/2016: Prüfungslücke bei der Biozid- bewertung:

Wirkungsrelevanz von Repellentien (Produktart 19) für Nichtzielorganismen (Insektenlarven, Krebse) in Oberflächengewässern, Teil 2: Laborstudie

Lock- und Schreckstoffe (Attraktanzien & Repellentien) werden gezielt gegen Organismen eingesetzt und gelangen auch in die aquatische Umwelt, wo sie Verhaltensänderungen auslösen können. Sie gehören zu den vom Menschen gemachten Chemikalien, die Wasserorganismen so beeinflussen können, dass sie ihre Umgebung anders wahrnehmen. Man spricht in diesem Fall vom Infochemikalien-Effekt. Viele über ihren Geruch wirkenden Stoffe, wie das auf unserer Haut anzuwendende Mückenmittel DEET (Diethyltoluamid), werden bereits in unseren Oberflächengewässern nachgewiesen und ziehen dort möglicherweise Infochemikalien-Effekte nach sich.

Am Beispiel von Humanarzneimitteln wie dem Tranquilizer Oxazepam konnte gezeigt werden, dass Stoffe unterhalb der Toxizitätsschwelle zum Beispiel das Schwarmverhalten von Flußbarschen verändern. Auch Neonicotinoide, die in geringen Konzentrationen (unterhalb der Toxizitätsschwelle) kurzzeitig in Fließgewässern eingetragen werden, können dort eine aktive, massenhafte Drift von Wasserorganismen auslösen und damit einen nachteiligen Einfluss auf lokale Populationen ausüben. Repellentien werden in der praktischen Anwendung vor allem gegen blutsaugende Gliederfüßer wie Stechmücken, Bremsen oder Zecken eingesetzt. Künstliche Repellentien gegen

Gliederfüßer sind beispielsweise Diethyltoluamid (DEET), Icaridin (Picaridin) oder IR3535 (Ethylbutylacetylaminopropionat, EBAAP). Auch bei bestimmungsgemäßem Einsatz könnten von Repellentien bisher nicht beachtete Wirkungen auf Nicht-Zielorganismen ausgehen.

Um Stoffe mit solchen Effekten aufzuspüren, sind daher neue Teststrategien zu entwickeln und geeignete Testsysteme im Labormaßstab zu etablieren. Das hier durchgeführte Vorhaben leistet dabei einen wichtigen Beitrag, in dem es Testsysteme für ökotoxikologische Fragestellungen anpasst und auf ihre Eignung prüft.

Die Ergebnisse des Vorhabens sind für die Umweltbewertung von bioziden Wirkstoffen von großem Interesse. Bisher wurden nur akute und langfristige Effekte auf Nicht-Zielorganismen bewertet, weil das EU-Bewertungskonzept für Biozide und Chemikalien keine Bewertung repellenter Wirkungen vorsieht (Bewertungslücke). Bei den drei Repellentien wurden hier keine nachteiligen Umweltwirkungen im Verhalten der Testorganismen und unter den hier eingesetzten Testbedingungen ausgelöst. Dies ist zum Beispiel für den repellenten Wirkstoff DEET wichtig, der aktuell in vielen Haushaltsprodukten enthalten ist.

Damit stehen nun erste Testsysteme zur Verfügung, um derartige Wirkungen künftig zuerkennen und gegebenenfalls bei der Bewertung, insbesondere bei Wirkungen auf das Schutzgut Biodiversität, einbeziehen zu können.

Download:

<https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/pruefungsluecke-bei-der-biozidbewertung>

UBA-Texte 60/2016: Maß- nahmen zur Verminderung des Eintrages von Mikro- schadstoffen in die Gewässer – Phase 2

Aufbauend auf den Ergebnissen der Phase 1 wurden in der Phase 2 des Forschungsprojektes weitergehende Arbeiten zur Konkretisierung von quellenorientierten Maßnahmen zur Emissionsminderung von Mikroschadstoffen aus dem Bereich Importtextilien, Arzneistoffe und ausgewählten Bioziden, zur Relevanzbewertung der Stoffe der EU-Watch-List für Deutschland, zur deutschlandweiten Modellierung von Stoffeinträgen und zugehörigen Emissionsminderungsmaßnahmen, zur Aktualisierung und Erweiterung der Kosten- und Effizienzdaten einer 4. Reinigungsstufe auf kommunalen Kläranlagen, zur Kostenträgerschaft sowie zum volkswirtschaftlichen Nutzen der Emissionsminderungsmaßnahmen durchgeführt.

Download:

<https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/massnahmen-zur-verminderung-des-eintrages-von-1>



Neues Förderprojekt des Bayerischen Umweltministeriums: „PureAlps“



Probenahmegeräte zur Bestimmung der Konzentrationen persistenter Schadstoffe in der Luft an der Umweltsforschungsstation Schneefernerhaus (UFS) an der Zugspitze

Das Projekt PureAlps soll die Alpen vor bedenklichen Chemikalien schützen. Im Fokus stehen Schadstoffe wie Quecksilber, bromierte Flammschutzmittel und perfluorierte Chemikalien. Diese Schadstoffe finden sich in der Luft über den Alpen und im Niederschlag. Die Anreicherung in den alpinen Ökosystemen ist bisher wenig erforscht. Für die Alpen besteht das besondere Risiko, dass sich persistente Schadstoffe bevorzugt dort abscheiden, wo es am kältesten ist. Und die kälteste Region in Mitteleuropa sind die Alpen. PureAlps hat dieses Risiko im Blick.

Weitere Informationen:

http://www.lfu.bayern.de/analytik_stoffe/purealps/index.htm

Bayerisches Landesamt für Umwelt: Abschlussbericht: Untersuchungen zur Akkumulation verschiedener persistenter Schadstoffe in terrestrischen Wildtieren

Abschlussbericht zum Projekt vom 15.09.2010 - 31.12.2013.

Für einen Überblick zur Belastung von terrestrischen Wildtieren mit persistenten Schadstoffen wurden Leberproben von Rehen, Gämsen und Wildschweinen aus insgesamt fünf verschiedenen Gebieten in Bayern auf bromierte Flammschutzmittel, perfluorierte Tenside (PFT), polychlorierte Biphenyle (PCB), polychlorierte Dibenz-p-dioxine und Dibenzofurane (PCDD/PCDF), verschiedene überwiegend endokrin wirksame Substanzen sowie Schwermetalle untersucht. In Rehlebern wurden von den bromierten Flammschutzmitteln vor allem mittelbromierte Diphenylether (BDE 47, BDE 99) gefun-

den. In Wildschweinlebern lagen die Gehalte mit bis zu 2 ng/g Fett etwas höher. Hexabromcyclododecan war in drei Rehlebern nachweisbar. Perfluorierte Carbon- und Sulfonsäuren wurden in Reh- und Gämselebern in niedrigen Konzentrationen gefunden. Nur in vier von 15 Rehlebern aus dem Öttinger Forst lagen die Gehalte der Perfluorooctansäure (PFOA) deutlich höher. Wildschweinlebern wurden aus einem Revier untersucht. Die Konzentrationen der Perfluorooctansulfonsäure (PFOS) lagen bei 78 bis 416 µg/kg Frischgewicht. In allen Rehleberproben aus vier Gebieten wurden relativ hohe Konzentrationen an PCDD/PCDF und dioxinähnlichen PCB gefunden. Die Gehalte zeigten zwischen den Gebieten aber z. T. deutliche Unterschiede. Auch in Wildschweinlebern wurden ähnlich hohe PCDD/PCDF-Gehalte gemessen. Fleischproben der untersuchten Rehe und Wildschweine wiesen hingegen jeweils niedrige PCDD/PCDF- und PCB-Konzentrationen auf. Die Gämselebern aus dem Nationalpark Berchtesgaden hatten im Mittel fast dreimal höhere PCDD/PCDF-Gehalte als die Rehlebern aus diesem Gebiet. Auch die Konzentrationen der dioxinähnlichen PCB lagen höher als in den Rehlebern. Bei den Schwermetallen wurden für Cadmium und Quecksilber messbare Belastungen der Leberproben aller drei Tierarten gefunden.

Download: http://www.lfu.bayern.de/analytik_stoffe/index.htm



Chemists Urge Israel to Ban Chemical Weapons

The President of the Israeli Chemical Society has published an open letter to the Prime-Minister of Israel urging the ratification of the Chemical Weapons Convention. Israel, Egypt, Southern Sudan (who plan to sign) and North Korea are the only countries of the 196 recognised countries that have not signed and ratified the Chemical Weapons Convention (CWC) which provides for the supervised elimination and monitoring of all chemical weapons under the auspices of the Organisation for the Prohibition of Chemical Weapons (OPCW).

The State of Israel, which has signed but not ratified the CWC, is a member of the European Association for Chemical and Molecular Sciences (EuCheMS) so the EuCheMS President

has been supporting Professor Ehud Keinan, President of the Israeli Chemical Society in his attempts to remove these dreadful weapons from Israel. These attempts have culminated in the publication of an open letter from Prof Keinan to The President of the State of Israel, Benjamin Netanyahu urging him to sign the CWC. The letter was first published in Hebrew, but is produced here for the first time in English.

Prof Keinan ends his letter with the passionate plea: "The Israeli chemists and chemical engineers, together with the large community of chemists around the world, are working together to remove the curse of chemical weapons from the face of the Earth. We prefer to use these materials to fight cancer and pathogens, to purify drinking water, to produce energy-saving insulation materials and many other useful materials for the sake of humankind. We request that the government of Israel would independently ratify the CWC. We have no doubt that Egypt will quickly follow this move and join the CWC as well, because nobody would like to defy a global consensus and remain on the wrong side of the fence together with North Korea. Not only the chemists, but also all Israeli citizens would rejoice at the ratification and applaud the Israeli government for keeping Israel in the sane part of the world."

EuCheMS President David Cole-Hamilton says: "I applaud Prof. Ehud Keinan's brave action. Chemical weapons have no place in a civilised society. They do not act as a deterrent and their effects are appalling. We have a unique opportunity to rid the world of this scourge and we are so close to doing it. EuCheMS calls upon Prime-Minister Netanyahu to ratify the CWC as soon as possible and for Egypt, Southern Sudan and North Korea to follow this inspiring lead".

Source: EuCheMS News 7.07.2016: <http://www.euchems.eu/>

Rezension



Chemiker im „Dritten Reich“ – eine Aufarbeitung des dunkelsten Kapitels der Geschichte der GDCh-Vorläuferorganisationen

Seit März 2015 liegt die von Helmut Maier im Auftrag der GDCh verfasste Studie „Chemiker im 3. Reich – die Deutsche Chemische Gesellschaft (DChG) und der Verein Deutscher Chemiker (VDCh) im NS-Herrschaftsapparat“ im Wiley-VCH-Verlag vor. Mit der Initiierung und Förderung der von einem ausgewiesenen Wissenschaftshistoriker erarbeiteten Studie hat die GDCh Verantwortung gegenüber ihre Geschichte übernommen und sich dazu bekannt, das Agieren deutscher Chemikerorganisationen und ihrer Repräsentanten einer historischen Wertung zu unterziehen. Damit wurden die Voraussetzungen dafür geschaffen, die Kontinuität der Interessenvertretung deutscher Chemiker kritisch zu überprüfen und zur Entscheidung zu stellen, welchen Traditionen man sich weiterhin verpflichtet sehen möchte und welchen nicht. Mit der Aufdeckung der Funktionen und Strukturen der GDCh-Vorläuferorganisationen in der Zeit von 1933 bis 1945 hat sich die GDCh in einen Prozess eingereicht, der zuvor von anderen deutschen Wissenschaftsorganisationen angestoßen worden war. Es ist bekannt, dass es mehrerer Nachkriegsdekaden bedurfte, bis die Zeit hierfür „reif“ war. Dabei war die frühe Tabuisierung der Geschehnisse während der Nazi-Herrschaft und die Ausgrenzung von Nachfragenden, Nachforschenden als „Störenfriede“ und „Nestbeschmutzer“ kein spezifisches Phänomen der Chemiker bzw. ihrer Standesorganisation, sondern kennzeichnend für weite Teile der deutschen Gesellschaft bis in die 1980'er Jahre.

Zur Aufarbeitung der Vergangenheit bedarf es einer Verständigung über die ethischen Maßstäbe, die an die handelnden Personen anzulegen sind. In diesem Sinne verstehe ich die Aussage des Autors „Historiker müssen werten und die GDCh auch“, die sich im Titel des Interviews findet, das der Redakteur der „Nachrichten aus der Chemie“, Christian Remenyi, mit Helmut Maier im Frühjahr 2015 geführt hat („Nachrichten“ 04/2015, S. 415-418). Eine Vergewisserung dieser ethischen Kriterien liefert zudem Anstöße, um das Selbstverständnis des Chemikers in seiner gesellschaftlichen Rolle und Verantwortung zu hinterfragen. Konsequenterweise kann die Auseinandersetzung mit den Einstellungen und dem

Wirken der Chemiker im 3. Reich nicht als eine durch das vorliegende Buch erledigte Aufgabe betrachtet werden. Sie bietet sich vielmehr als Chance zur eigenen Positionsbestimmung dar. Insofern ist es angemessen, auch anderthalb Jahre nach dessen Erscheinen auf das Buch aufmerksam zu machen und so einer voreiligen „Ad-acta“-Legung entgegen zu wirken.

Welches sind die zentralen Untersuchungsperspektiven des Autors? Ein Fokuspunkt ist die aktive Mitwirkung der Chemikerorganisationen und einzelner ihrer Führungspersönlichkeiten an der Verwirklichung der Ziele des NS-Regimes. Damit verbunden ist die Überprüfung der Behauptung, die GDCh-Vorläuferorganisationen wären ausschließlich wissenschaftlichen Zielen verpflichtet gewesen und hätten nicht politisch agiert. Helmut Maier präsentiert eine Vielzahl von Belegen für die direkte Verstrickung der DChG und VDCh mit dem totalitären Regime. Hierfür steht z.B. die Umsetzung der Arisierungsvorgabe, die zwar von den chemischen Gesellschaften mit unterschiedlichen formalen Mitteln und unterschiedlicher Geschwindigkeit angepackt, gleichwohl weitgehend obrigkeitkonform betrieben wurde. Die Arisierung der Vereinsvorstände war zugleich Bestandteil der „Gleichschaltung“ der Chemikerorganisationen, die sich vielfach ohne gewaltsames Eingreifen von außen als „Selbstgleichschaltung“ vollzog. Mit dem Bekenntnis zu den Zielen des NS-Regimes zeigten sich die Chemieverbände bereit, hierfür ihr Fachwissen zu nutzen, wobei als strategische Ziele u.a. die Erweiterung der Rohstoffbasis und die Schaffung von Ersatzstoffen ausgegeben wurden. Aus der zunehmenden Verquickung mit dem Heereswaffenamt wird klar, dass damit auch die Erreichung militärischer Ziele gemeint war. Dies betraf insbesondere Bereiche der Werkstoffentwicklung, vornehmlich der Kunststoffsynthese. Vieles spricht dafür, dass Chemiefunktionäre nicht nur die Weiterentwicklung von chemischen Kampfstoffen übernommen, sondern deren Wirkung auch an KZ-Häftlingen getestet haben bzw. testen ließen.

Helmut Maier widerlegt zudem die These vom „Befehlsnotstand“, die dazu diente, sich von der Verantwortung für das eigene Tun oder Unterlassen freizusprechen. Er fördert ein gerütteltes Maß an organisatorischer Widerspenstigkeit der Chemiker zu Tage, die auf ihre Sonderrolle nicht verzichten wollten. Hierzu das Fazit des Autors: „Die Chemiker verfügten über einen beachtlichen Handlungsspielraum, doch nutzten sie ihn äußerst selten, um für ihre verfolgten Kollegen einzutreten, sondern um in der Architektur der NS-Verbände eine ihrem Selbstverständnis entsprechende Position einzunehmen“.

Die vermeintliche Beschränkung des Wirkens der Chemikerorganisationen auf das Gebiet wissenschaftlich-technischer Forschung und Entwicklung erweist sich als Schutzbehauptung. Die Studie liefert Anschauungsmaterial darüber, wie entgegen aller Prinzipien wissenschaftlich-rationalen Denkens eine Ideologisierung der Chemie und ihrer Geschichte betrieben wurde. Schlüsseldoktrin sind das Postulat einer „welt-historischen Sonderrolle der deutschen Chemie“ sowie die

Begründung eines „nordrassischen Charakters“ der Chemie. Die Details, die Helmut Maier zum Vorschein bringt, lassen die Schlussfolgerung zu, dass die umformulierte und in den Standesorganisationen fortgesponnene Chemiegeschichte die Rolle einer rasseideologischen Legitimationswissenschaft übernahm.

Besonders hervorzuheben ist der Blick auf die Opfer, den die Studie wirft und uns damit Schicksale vor Augen führt, die ansonsten der Vergessenheit anheim gegeben wären. Die Archive geben die Namen der Chemiker frei, die durch Kriegshandlungen getötet wurden und jener, die als Juden verfolgt und in KZ's deportiert wurden. Viele ließen dort ihr Leben. Auch diejenigen finden Erwähnung, die sich der Verfolgung durch Emigration entziehen konnten. Andere empfanden ihre Lage als ausweglos und setzten ihrem Leben selbst ein Ende. Schließlich sind die zu nennen, die sich der Gleichschaltung nicht unterwarfen und sich in unterschiedlicher Weise dem NS-Regime widersetzen oder aktiv Widerstand leisteten.

Helmut Maier verweist im oben erwähnten Interview im Zusammenhang mit der Frage, warum Funktionäre der GDCh-Vorläuferorganisationen bestehende Handlungsspielräume nicht genutzt haben, auf den Umstand, dass Zivilcourage erst in jüngerer Zeit Wertschätzung erfahren habe. Zivilcourage ist aber auch heute keineswegs eine Selbstverständlichkeit. Vielfach wiegt die Verpflichtung gegenüber Firmeninteressen, Behördenrichtlinien oder sonstigen institutionellen Spielregeln schwerer, als dem eigenen Wissen und Gewissen zu folgen. Vielleicht könnte die Studie von Helmut Maier zum Anlass genommen werden, um neben den forschungsbezogenen Preisen einen Preis für zivilcouragiertes Handeln auszuloben, um damit auch das Andenken an die Chemikerinnen und Chemiker wach zu halten, die sich der Gleichschaltung verweigert haben.

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

Unsere neuen Mitglieder

Neuaufnahmen in die Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie vom 18.05.2016 - 29.08.2016

Dr. Beer, Veronika
FG-Eintritt: 27.07.16

Debong, Marcel
FG-Eintritt: 04.07.16

Dingeler, Maria
FG-Eintritt: 12.07.16

Gai, Julie (Chem.Ing.)
FG-Eintritt: 22.08.16

Gast, Daniel
FG-Eintritt: 04.07.16

Gedik, Deniz
FG-Eintritt: 12.07.16

Göckener, Bernd
FG-Eintritt: 18.05.16

Grosser, Yves
FG-Eintritt: 13.06.16

Grünwald, Annette
FG-Eintritt: 16.08.16

Janssen, Nils
FG-Eintritt: 31.05.16

Klein, Lisa Marie
FG-Eintritt: 11.07.16

Stütz, Lena
FG-Eintritt: 22.07.16

Undütsch, Lars Eric
FG-Eintritt: 16.08.16

Dr. Woiwode, Wolfgang
FG-Eintritt: 08.06.16

Geburtstage

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

Geburtstagsliste Oktober bis Dezember 2016

60 Jährige

- Prof. Dr. Gerrit Schüürmann**, Geburtstag: 10.10.1956
- FG Beisitzer (01.01.1999 31.12.2002)
 - Stellv. FG-Vorsitzender (01.01.2003 31.12.2003)
 - FG Vorsitzender (01.01.2004 31.12.2006)

Dr. Thi Lam Huong Pham, Geburtstag: 26.10.1956

Franke, Peter (Dipl. Chem.), Geburtstag: 02.11.1956

Dr. Rüdiger Peitzsch, Geburtstag: 07.11.1956

Elke Schümann (Dipl. Chem.), Geburtstag: 07.11.1956

Dr. Margret Jobelius Korte, Geburtstag: 07.11.1956

Dr. Ralph Derra, Geburtstag: 28.12.1956

- Prof. Dr. Robert Kreuzig**, Geburtstag: 28.12.1956
- AK-Vorsitzender Bodenchemie und Bodenökologie: (01.01.2010 31.12.2012)

65 Jährige

Dr. Monika Dicke, Geburtstag: 01.10.1951

Prof. Dr. Jürgen Caro, Geburtstag: 27.12.1951

Dr. Claus Henning Rolfs, Geburtstag: 31.12.1951

70 Jährige

Dr. Gunter Meyer, Geburtstag: 10.10.1946

75 Jährige

- Prof. Dr. Fritz H. Frimmel**, Geburtstag: 24.11.1941
- 1992 Environmental Education Award der Society of Environmental Toxicology and Chemistry
 - 01/2000 01/2002 Präsident der International Humic Substances Society (IHSS) und 2010 Ehrenmitglied
 - 2004 Willy Hager Medaille
 - Ehrenmitglied der FG Wasserchemische Gesellschaft

Prof. Dr. Dieter Wolfram Zachmann,
Geburtstag: 08.12.1941