



Mitteilungen der Fachgruppe

# Umweltchemie und Ökotoxikologie

Gesellschaft Deutscher Chemiker

- Umgang mit Pestiziden im Regionalen Wassermanagement
- Analyse von PAK in Umweltmatrices
- Adieu 16 EPA-PAK ?
- Aus der Fachgruppe:  
Ausschreibung Paul-Crutzen-Preis  
Forum Junger Umweltwissenschaftler  
Aktuelles aus dem AK "Chemiekalibewertung"
- Kurz vorgestellt:  
Instrumentelle Analytik Hochschule Mannheim  
"Nachhaltigkeit in der Chemie" Univ. Bremen  
NABU Bundesfachausschuss Umweltchemie  
und Ökotoxikologie
- Veranstaltungsankündigungen,  
Kurznachrichten und Personalia



1/2017

## Impressum

Mitteilungen der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie

Herausgegeben von der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie der Gesellschaft Deutscher Chemiker  
[www.gdch.de/umweltchemie](http://www.gdch.de/umweltchemie)

### Redaktion:

Prof. Dr. Dr. Klaus Fischer  
Analytische und Ökologische Chemie  
FB VI –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](mailto:fischerk@uni-trier.de)

### Abkürzung:

Mitt Umweltchem Ökotox

### Design/ Technische Umsetzung:

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

### ISSN: 1618-3258

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

### Titelbild:

Elterninitiative „Albert-Schweitzer-Schule Standort Wittekindstraße retten“ (<http://ass-standort-retten.de/>)

## Originalbeiträge

- 2 **K. Kümmerer et al.:** MUTReWa - Maßnahmen für einen nachhaltigeren Umgang mit Pestiziden und deren Transformationsprodukten im Regionalen Wassermanagement
- 6 **J. B. Thiäner, C. Achten:** Analyse von hochmolekularen, polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (6-8 Ring PAK) in diversen Umweltmatrices mittels Flüssigchromatographie – Atmosphärendruck-Laserionisation – Massenspektrometrie (LC-APLI-MS)
- 11 **J. T. Andersson:** Adieu 16 EPA-PAK? Zeit für die Berücksichtigung von 40 Jahren PAK-Forschung

## Aus der Fachgruppe

- 14 Aktuelles aus dem Arbeitskreis Chemikalienbewertung der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie
- 14 Ausschreibung des Paul-Crutzen-Preises 2017
- 15 Forum Junger Umweltwissenschaftler, 19.-21.06.2017, Münster

## Kurz vorgestellt

- 16 Professur für Instrumentelle Analytik, Fakultät Biotechnologie, Hochschule Mannheim
- 18 Abteilung „Nachhaltigkeit in der Chemie“ der Universität Bremen
- 20 Der NABU Bundesfachausschuss Umweltchemie und Ökotoxikologie stellt sich vor

## Informationen

### Veranstaltungsankündigungen

- 22 BfG-Workshop: Möglichkeiten und Perspektiven von Biotestverfahren in der Gewässerüberwachung und Bewertung, 30.-31. März 2017, Koblenz
- 22 Annual Meeting of the Analytical Forum Water Contaminants (AFWC), 24.-26. 04. 2017, Freising
- 22 Workshop: Glyphosate: Harmless Chemical or Silent Killer? 10.05.2017, Brussels
- 22 10<sup>th</sup> Int. SedNet Conference "Sediments on the move", 14.-17. 06. 2017, Genoa, Italy
- 23 RIVER BASINS, 19.-20.06.2017, Wien
- 23 14<sup>th</sup> Int. Symposium on the Interactions between Sediments and Water - Taormina, Italy 17.-22. 06. 2017
- 23 16<sup>th</sup> Int. Conference on Chemistry and the Environment ICCE, 18.-22.06.2017, Oslo
- 24 4<sup>th</sup> Int. Symposium on the Environmental Dimension of Antibiotic Resistance (EDAR), 13.-17. 08. 2017, East Lansing, Michigan/USA
- 24 6<sup>th</sup> Int. Symposium on Soil Organic Matter, 3.-7. 09. 2017, Harpenden, UK
- 25 23<sup>rd</sup> Int. Symposium of the International Society for Environmental Biogeochemistry (ISEB), 24.-29.09.2017, Palm Cove, Australia
- 25 12. Langenauer Wasserforum, 13.-14.11.2017

### Kurznachrichten

- 26 EU-Commission: The Environmental Implementation Review (EIR)
- 26 EU-Commission registers 'Ban Glyphosate' European Citizens' Initiative
- 27 EU-Commission: Reduction of national emissions of atmospheric pollutants
- 27 EFSA-OpenFoodTox: Open Access to Scientific Output
- 28 Endocrine disruptors: EFSA and ECHA outline Guidance plans
- 28 European Environment Agency (EEA): More action is needed to protect the natural environment and people's health
- 29 EEA Report No 32/2016: European water policies and human health
- 29 Neuer DFG-Sonderforschungsbereich 1253 "CAMPOS"
- 29 Veraltete 16 EPA-PAK?
- 30 Blei und Cadmium in Modeschmuck
- 30 TFA in Gewässern und im Trinkwasser in NRW
- 31 UBA-Texte 74/2016: Ökotoxikologische Bewertung von Bauprodukten
- 31 UBA-Texte 82/21016: Aggregated Environmental Exposure Assessment and Risk Characterisation of Biocidal Products

## Personalia

- 32 Eintritte in die FG 22.11.2016.-6.02.2017
- 32 Geburtstag 2. Quartal 2017

## MUTReWa - Maßnahmen für einen nachhaltigeren Umgang mit Pestiziden und deren Transformationsprodukten im Regionalen Wassermanagement



**BMBF-MUTReWa Projektteam:** Klaus Kümmerer<sup>1</sup> ([Klaus.Kuemmerer@leuphana.de](mailto:Klaus.Kuemmerer@leuphana.de)), Oliver Olsson<sup>1</sup> ([oliver.olsson@leuphana.de](mailto:oliver.olsson@leuphana.de)), Jens Lange<sup>2</sup> ([jens.lange@hydrology.uni-freiburg.de](mailto:jens.lange@hydrology.uni-freiburg.de)), Fritzi Lang<sup>2</sup> ([Fritzi.Lang@bodenkunde.uni-freiburg.de](mailto:Fritzi.Lang@bodenkunde.uni-freiburg.de)), Nicola Fohrer<sup>3</sup> ([nfohrer@hydrology.uni-kiel.de](mailto:nfohrer@hydrology.uni-kiel.de)), Uta Ulrich<sup>3</sup> ([uulrich@hydrology.uni-kiel.de](mailto:uulrich@hydrology.uni-kiel.de)), Matthias Pfannerstill<sup>4</sup> ([Matthias.Pfannerstill@llur.landsh.de](mailto:Matthias.Pfannerstill@llur.landsh.de)), Christof Martin<sup>5</sup> ([c.martin@gfmbh.de](mailto:c.martin@gfmbh.de)), Malte Unger<sup>5</sup> ([m.unger@gfmbh.de](mailto:m.unger@gfmbh.de)), Thomas Weber<sup>6</sup> ([Thomas.Weber@stadt.freiburg.de](mailto:Thomas.Weber@stadt.freiburg.de)), Michael Bruder<sup>7</sup> ([bruder@eichstetten.de](mailto:bruder@eichstetten.de)), Alex Krämer<sup>8</sup> ([alexander.kraemer@wwl-web.de](mailto:alexander.kraemer@wwl-web.de)) und Johannes Engel<sup>8</sup> ([johannes.engel@wwl-web.de](mailto:johannes.engel@wwl-web.de))

<sup>1</sup> Leuphana Universität Lüneburg

<sup>2</sup> Universität Freiburg

<sup>3</sup> Christian-Albrechts-Universität Kiel

<sup>4</sup> Landesamt für Landwirtschaft, Umwelt und ländliche Räume Schleswig-Holstein

<sup>5</sup> GFN mbH - Gesellschaft für Freilandökologie und Naturschutzplanung

<sup>6</sup> Stadt Freiburg

<sup>7</sup> Gemeinde Eichstetten (Bürgermeister)

<sup>8</sup> WWL Umweltplanung und Geoinformatik GbR

### Abstract

In den vergangenen Jahren haben Politik, wasserwirtschaftliche Praxis, Wissenschaft und Gesellschaft viel zur Verbesserung des ökologischen Zustands von Grund- und Oberflächengewässern unternommen. Bislang wird bei der Bewertung von Gewässerschutzmaßnahmen jedoch die verstärkte Mobilisierung von organischen Spurenstoffen und insbesondere ihrer Transformationsprodukte vernachlässigt. Das Verbundprojekt MUTReWa möchte diese Wissenslücke über Prozesse zur Mobilisierung und Transformation von Pflanzen-

schutzmitteln aus der Intensivlandwirtschaft sowie Bioziden aus urbanen Gebieten schließen. Die Projektpartner wollen die Effektivität und Nachhaltigkeit ausgewählter Gewässerbewirtschaftungsmaßnahmen zur Verbesserung des ökologischen Zustands von Grund- und Oberflächengewässern unter diesen Aspekten bewerten. Daraus abgeleitete Empfehlungen sollen in Kooperation mit der Praxis ins regionale Wassermanagement implementiert werden.

## Einleitung

Pflanzenschutzmittel (PSM) sind Substanzen, die in der Landwirtschaft ausgebracht werden, um Pflanzen vor Schädlingen zu schützen (PflSchG, 2012; RICHTLINIE 2009/128/EG), wohingegen Biozide für alle Zwecke eingesetzt werden, die nicht dem Pflanzenschutz dienen (Biozid-Verordnung, EU/528/2012). Das heißt, PSM und Biozide definieren sich über ihren Einsatz, können aber chemisch identisch sein, und werden im Weiteren unter dem Begriff Pestizide zusammengefasst. Gleichzeitig können jedoch Stoffe aus beiden Gruppen aufgrund ihrer Toxizität, ihrer Tendenz zur Bioakkumulation und insbesondere ihrer ggf. vorhandenen endokrinen Aktivität schon in geringen Konzentrationen unerwünschte Effekte bei nicht im Zielbereich der Anwendung liegenden Organismen und in der Umwelt hervorrufen. So werden in Regionen mit intensiver Landwirtschaft oder urbanen Gebieten immer häufiger Pestizide in Grund- und Oberflächenwasserproben gefunden (LAWA, 2016). Die in Flusseinzugsgebieten dominierenden Prozesse des diffusen Gewässereintrags von PSM durch Abdrift, Abwaschung von Pflanzen, Oberflächenabfluss sowie Transport im Boden sind bekannt. Für Biozide geschieht der Eintrag in Gewässer über die Kanalisation durch nicht ausreichend geklärtes Abwasser oder durch Auswaschung aus Schutzanstrichen auf Fassaden sowie durch die Abwaschung von versiegelten Flächen (Burkhardt et al., 2012). Während des Transports in der Umwelt beeinflussen Sorptionsprozesse, Verflüchtigung und Transformationsprozesse die Mobilität von Pestiziden. Transformation beinhaltet biotische sowie abiotische Prozesse wie z.B. Photolyse, Hydrolyse, Oxidation, Reduktion, welche unter der Bildung von sich einem weiteren Abbau entziehenden Transformationsprodukten (TPs) (Fenner et al., 2013) oft unvollständig verlaufen.

Die Untersuchung von TPs in der Umwelt kam erst in den letzten Jahren vermehrt in den Fokus der Wissenschaft und der Behörden im regulären Monitoring (LAWA, 2016). TPs konnten bereits in sämtlichen Wasserkörpern, im Trinkwasser und im Mineralwasser nachgewiesen werden (z.B. Kolychalow et al. 2012; Stiftung Warentest, 2014). Ebenso können nicht relevante TPs im Sinne der EU-Verordnung Nr.1107/2009 bei der Trinkwasseraufbereitung zu karzinogenen Substanzen umgewandelt werden (Schmidt und Brauch, 2008). TPs können mobiler, persistenter und toxischer sein als ihre Muttersubstanzen. Zudem sind TPs in der aquatischen Umwelt oft nicht bekannt und können in ihrer Bedeutung nicht eingeschätzt werden.

Im Zuge europäischer Umweltgesetzgebung wurden in den letzten Jahren zahlreiche Gewässerbewirtschaftungsmaßnahmen zur Verbesserung des ökologischen Zustands von Grund- und Oberflächengewässern initiiert. Jedoch werden bei der Bewertung dieser Maßnahmen mögliche Effekte auf eine verstärkte Mobilisierung von organischen Spurenstoffen und insbesondere ihrer TPs vernachlässigt. TPs von Pestiziden in der wässrigen Phase, die nicht mehr im Sinne der Muttersubstanz aktiv sind, wurden bisher nicht ausreichend untersucht und deshalb nicht entsprechend im Gewässermanagement berücksichtigt.

Das Projekt MUTReWa befasst sich daher, als eines von 15 Verbundprojekten in der BMBF-Fördermaßnahme „Regionales Wasserressourcen-Management für den nachhaltigen Gewässerschutz in Deutschland“ (ReWaM), mit relevanten Prozessen zur Mobilisierung und Transformation von PSM aus der Intensivlandwirtschaft sowie Bioziden aus urbanen Gebieten. Weiter wollen die Partner des Verbundprojekts MUTReWa die Effektivität und Nachhaltigkeit ausgewählter Gewässerbewirtschaftungsmaßnahmen (GBM) zur Verbesserung des ökologischen Zustands von Grund- und Oberflächengewässern bewerten. Daraus abgeleitete Empfehlungen sollen in Kooperation mit der Praxis in das regionale Wassermanagement implementiert werden. Weitere Ziele des Projekts sind:

- Verbesserung des Prozessverständnisses zur Mobilisierung und Transformation von Pestiziden in Flusseinzugsgebieten
- Bestimmung aktueller Belastungen durch ausgewählte Pestizide und ihre TPs, der ökotoxikologischen Relevanz sowie des Gefährdungspotenzials für das Trinkwasser
- Bewertung der Effektivität und Nachhaltigkeit ausgewählter Maßnahmen und Strategien zur Eintragsminimierung von Pestiziden und deren TPs
- Erarbeitung von Empfehlungen zur Anpassung und Umsetzung geeigneter Maßnahmen und die gemeinsame Umsetzung mit zentralen Akteuren der Wasserbewirtschaftung

Durch eine enge fachliche Verzahnung der Verbundprojektpartner mit assoziierten Partnern aus der regionalen Wasserwirtschaft erfolgt die Bearbeitung des Projekts in enger Abstimmung und unter fachlicher Begleitung. Ein Transfer und die Verstetigung des MUTReWa-Konzepts in den Modellregionen erfolgt durch kontinuierliche Öffentlichkeitsarbeit unter Einbeziehung aller relevanten Akteure.

## Methoden/Durchführung

Das Verbundprojekt greift auf Erfahrungen aus vorhergehenden Projekten zum Umweltverhalten von Pestiziden und der Umsetzung von GBM zur Vermeidung des Eintrags in Gewässer zurück.

Im ersten Schritt ist vorgesehen, den Forschungsstand und die praktische Umsetzung um bisher nicht beachtete Stoffe und TPs zu erweitern. Basierend auf den gewonnenen Ergebnissen sollen allgemeine Erkenntnisse abgeleitet werden. Dafür werden die Entstehung und das Verhalten der analysierten TPs im Labor (Wasserphase im Laborreaktor, Mesokosmos, Bodensäulen) sowie auf Ebene von Einzugsgebieten untersucht und modelliert. Der Lösungsansatz kombiniert experimentelle Untersuchungen und computerbasierte Modelle zur Bewertung der Umwelteigenschaften sowie des Umweltverhaltens in den Modellregionen (Abb.1).

Anhand von mehreren Beispielsubstanzen und zwei unterschiedlich geprägten Einzugsgebieten werden die Wirksamkeit von bestehenden und geplanten Bewirtschaftungsmaßnahmen und -strategien bewertet und neue Konzepte zur Verbesserung einer einzugsgebietsweiten Wasserbewirtschaftung abgeleitet. Das Einzugsgebiet des Mühlbachs im Süden Baden-Würt-

tembergs, südwestlich der Stadt Freiburg steht hierbei als Modellregion für Intensivlandwirtschaft mit Sonderkulturen (Weinanbau) und urbaner Landnutzung, das Tiefland-Einzugsgebiet der Kielstau südöstlich von Flensburg ist charakteristisch für Drainagen und laterale Abflüsse aus landwirtschaftlich intensiv genutzten Flächen (Raps, Getreide, Mais).

Neben der Prozessforschung zur Mobilisation und Transformation von Pestiziden steht die Entwicklung und Bewertung von GBM im Fokus des Projektes. Mit Hilfe von integrativen Strategien wie z.B. Kooperations- und Kommunikationsmaßnahmen sollen Maßnahmen eines vorbeugenden Gewässerschutzes zur Reduzierung des Pestizideintrags in Gewässer entwickelt und umgesetzt werden. Ziel einer solchen

integrativen Strategie ist es, eine freiwillige Zusammenarbeit zwischen den Vertretern der Landwirtschaft, Städten und Kommunen und der Wasserwirtschaft zu initiieren. Bei den untersuchten GBM handelt es sich um Retentionsteiche und künstliche Feuchtgebiete im ländlichen Raum sowie um Regenwasserversickerungsanlagen im urbanen Raum. Die Bewertung dieser GBM erfolgt über eine Effektivitätsabschätzung, die Nachhaltigkeit und das (öko-)toxikologische Gefährdungspotential durch TP's. Als Abschluss sollen Empfehlungen für das regionale Wassermanagement gegeben werden, wie unter Einbindung aller Beteiligten geeignete GBM für bestimmte Regionen zur Eintragsreduzierung von Pestiziden und ihren TP's implementiert werden können.

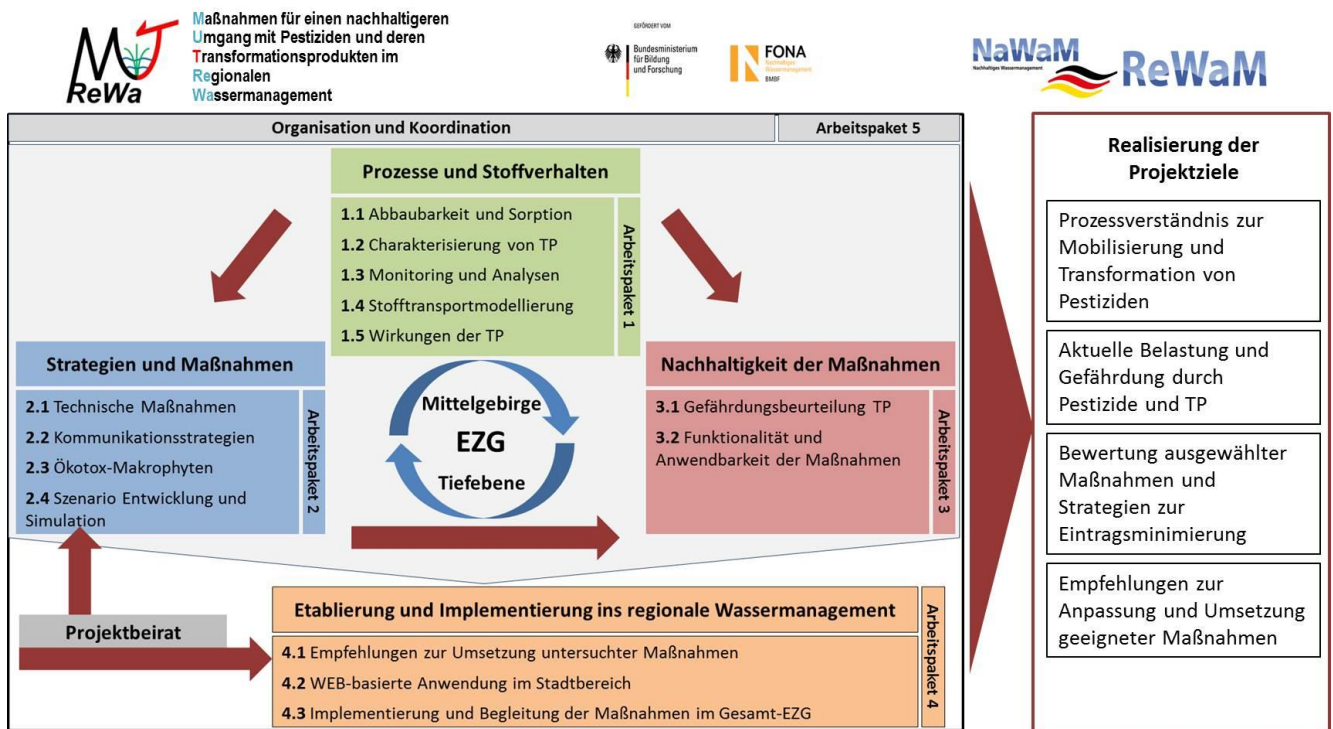


Abbildung 1: Konzept und Arbeitspakete des MUTReWa Projekts

## Zwischenergebnisse

In der ersten Projekthälfte wurden Analysen zur Abbaubarkeit ausgewählter Biozide (Diuron, Terbutryn, Othilidon und Mecoprop) und Pflanzenschutzmittel (Boscalid, Penconazol, Metazachlor und Flufenacet) durch Sonnenlicht und Mikroorganismen durchgeführt. Erste Ergebnisse zeigen, dass die exemplarisch untersuchten Substanzen nur zu TP's umgebaut und nicht vollständig abgebaut werden. Laborstudien lieferten darüber hinaus neue Erkenntnisse über die Entstehung und Eigenschaften der zum Teil noch unbekannt TP's. Im Vergleich zur Muttersubstanz zeigten einzelne durch Lichteinwirkung entstandene TP's eine bessere biologische Abbaubarkeit. Darüber hinaus konnte bei einigen TP's auch eine erhöhte Toxizität beobachtet werden. Weiter konnten unter Verwendung von Kartierungen und Toxizitäten nur geringe Auswirkungen der Pflanzenschutzmittel auf heimische Makrophytenarten nachgewiesen werden. Ergänzend zu diesen

Studien belegen Vorversuche mit Fluoreszenztracern den Einfluss von pH-Wert, organischer Substanz und Tongehalt auf die Sorption und den Einfluss von Pflanzen auf den biochemischen Abbau dieser Fluoreszenztracern. Hierdurch lassen sich Rückschlüsse auf das Umweltverhalten von Pestiziden ziehen.

Im EZG der Kielstau zeigen die Ergebnisse aus dem Herbstmonitoring 2015, dass in Oberflächengewässern und in einer Drainage noch vor der Applikation 2015 TP's der beiden Herbizide, Metazachlor und Flufenacet, aus dem Vorjahr nachzuweisen waren. Sowohl im Fließgewässer als auch in den stehenden Kleingewässern war erkennbar, dass die Muttersubstanzen und auch die TP's (jeweils die Sulfon- und Oxalsäure) nach Regenereignissen in die Gewässer transportiert werden. Im Roh- bzw. Trinkwasser zeigte sich, dass Brunnen mit geringer Deckschicht ein höheres Kontaminationsrisiko

durch diese TPs aufweisen als durch die Muttersubstanzen. Hier traten vereinzelte Positivbefunde für Metazachlor-Sulfonsäure auf. Während an den untersuchten Grundwassermessstellen vereinzelt Muttersubstanzen nachgewiesen wurden, treten die Befunde der zugehörigen TPs weitaus häufiger auf. Die Untersuchungen zeigen, dass die Gestaltung der Fruchtfolgen im Anstrombereich der Messstellen und die Bodenart einen wesentlichen Einfluss auf die Konzentration der untersuchten Zielsubstanzen haben. Die Ergebnisse im EZG Kielstau werden die Einzugsgebietsmodellierung (Modell SWAT) entscheidend verbessern und wurden im Rahmen des vom Projekt initiierten Praxis- und Expertenrates und in einer öffentlichen Infoveranstaltung mit den Landwirten vor Ort diskutiert.

Im Untersuchungsgebiet Mühlbach (Freiburg) wurde der Zulauf zu städtischen Regenwasserversickerungsanlagen beprobt. Erste Analyseergebnisse zeigen Positivbefunde für die ausgewählten Biozide Diuron, Terbutryn und Othilidon, wobei die Biozidkonzentrationen im Regenwasserabfluss denen anderer mitteleuropäischer Städte entsprachen. Dies ist besonders bedenklich, da in einer durchgeführten Untersuchung mit hydrologischen Tracern ein schneller Durchbruch in einem Mulden-Rigolensystem dokumentiert werden konnte. Eine Gefährdung des Grundwassers durch solche Rigolensysteme scheint somit wahrscheinlich. Gegenwärtig werden die gemessenen Zulaufkonzentrationen in ein WEB-basiertes Planungstool (FReWaB-neu) integriert, um das Risiko beliebiger Regenwasserversickerungsanlagen im Untersuchungsgebiet abzuschätzen.

Mit Unterstützung der Gemeinde Eichstetten am Kaiserstuhl (Südbaden) wurde in einem intensiv bewirtschafteten Weinbaugebiet ein Bachlauf umgestaltet. Er besteht nun aus zwei Feuchtfächen, die nacheinander durchflossen werden und Pestizide zurückhalten: eine dicht bewachsene Schilffläche und eine offene Wasserfläche. Beide zeichnen sich durch hohe biologische Aktivität aus, jedoch sind Beschattung, Sauerstoff- und Temperaturdynamik verschieden. Dies führt zu unterschiedlichen Ab- und Umbaumechanismen, was am Beispiel von Fluoreszenztracern und Stofftransportmodellierung (OTIS) gezeigt werden konnte. Infolge witterungsbedingter hoher PSM-Ausbringung im Studiengebiet wurden im Bachlauf im Frühsommer 2016 hohe Konzentrationen für Boscalid, Penconazol und Metazachlor gemessen, die durch die Feuchtfächenkombination spürbar reduziert werden konnten. Unter Verwendung des Modells ZIN-AgriTra wurde der reaktive Stofftransport für dieses Teileinzugsgebiet erfolgreich simuliert, wobei die Analyseergebnisse vor und nach der Applikation sowie die Effekte von Niederschlagsereignissen auf den Stoffaustausch bestätigt wurden. Die Simulationsergebnisse zeigen, dass besonders auf den Straßenflächen angesammelte PSM sofort abgeschwemmt werden und dass aufgrund unterschiedlicher Stoffeigenschaften die Austragspfade der PSM und TPs variieren können.

## Ausblick

Bis Projektende sind weitere Untersuchungen zur möglichen Gefährdung durch identifizierte TPs, Prozessuntersuchungen von hydrologischen Tracern und Pestiziden in relevanten Umsatzräumen sowie eine weitere Verbesserung der erstellten Simulationsmodelle (FReWaB-neu, OTIS, ZIN-AgriTra und SWAT) geplant. Letztere werden belastbare Szenarioanalysen ermöglichen, wodurch sich die Wirkung weiterer Gewässerbewirtschaftungsmaßnahmen abschätzen lässt und diese als Kommunikationsmittel eingesetzt werden können. Die Kommunikationskonzepte in den Studiengebieten werden weiter umgesetzt und unterstützen den Transfer und Austausch von neuen Erkenntnissen über den Verbleib von Pestiziden und TPs in der Umwelt, mögliche Gefährdungspotenziale durch TPs und zur Implementierung von nachhaltigen Gewässerbewirtschaftungsmaßnahmen in das regionale Wassermanagement.

## Literatur

- Biozid-Verordnung, EU/528/2012. Verordnung (EU) No. 528/2012 des Europäischen Parlaments und des Rates über die Bereitstellung auf dem Markt und die Verwendung von Biozidprodukten.
- Burkhardt, M., Zuleeg, S., Vonbank, R., Bester, K., Carmeliet, J., Boller, M., Wangler, T., 2012. Leaching of biocides from façades under natural weather conditions. *Environ. Sci. Technol.* 46 (10), 5497–5503.
- Fenner K., Canonica S., Wackett L., Elsner M. 2013. Evaluating pesticide degradation in the environment: blind spots and emerging opportunities, *Science* 341(6147): 752-758.
- Kolychalow, O., Schmalz, B., Matthesen, A., Ostendorp, G., Hippelein, M., Fohrer, N., 2012. Pflanzenschutzmittelwirkstoffe und deren Metaboliten in privaten Trinkwasserbrunnen in Schleswig-Holstein. *Hydrologie & Wasserbewirtschaftung* 56 (4), 193-202.
- LAWA 2016. Mikroschadstoffe in Gewässern. Ständiger Ausschuss „Oberirdische Gewässer und Küstengewässer“ (LAWA-AO) Bund/Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA).
- PflSchG 2012. Gesetz zum Schutz der Kulturpflanzen (Pflanzenschutzgesetz - PflSchG). Pflanzenschutzgesetz vom 6. Februar 2012 (BGBl. I S. 148, 1281), das zuletzt durch Artikel 4 Absatz 87 des Gesetzes vom 7. August 2013 (BGBl. I S. 3154) geändert worden ist.
- Schmidt, C.K., Brauch, H.J., 2008. N,N-dimethylsulfamide as precursor for N-nitrosodimethylamine (NDMA) formation upon ozonation and its fate during drinking water treatment. *Environ. Sci. Technol.* 42, 6340-6346.
- Stiftung Warentest 2014. Die Reinheit geht baden, Natürliches Mineralwasser Test 08/2014, 20-27.

## Korrespondenzadresse:

Prof. Dr. Klaus Kümmerer  
Institut für Nachhaltige Chemie und Umweltchemie  
Leuphana Universität Lüneburg  
Scharnhorststr. 1  
21335 Lüneburg  
Telefon: 04131-677-2894  
Email: [mutrewa\[at\]leuphana.de](mailto:mutrewa[at]leuphana.de)  
Webseite: [www.mutrewa.de](http://www.mutrewa.de)



## Analyse von hochmolekularen, polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (6-8 Ring PAK) in diversen Umweltmatrices mittels Flüssigchromatographie – Atmosphärendruck-Laserionisation – Massenspektrometrie (LC-APLI-MS)

Jan B. Thiäner ([janthiaener@uni-muenster.de](mailto:janthiaener@uni-muenster.de)), Christine Achten ([achten@uni-muenster.de](mailto:achten@uni-muenster.de))

### Abstract

Für den sensitiven und selektiven Nachweis von hochmolekularen polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK) mit 6-8 Ringen wurde eine Methode mittels Flüssigchromatographie – Atmosphärendruck-Laserionisation – Massenspektrometrie entwickelt. Die LC-APLI-MS-Methode ist etwa um den Faktor 1.000 empfindlicher, als die etablierte GC-MS Methodik und ermöglicht erstmals die Detektion von 7-8 Ring PAK in Umweltproben. Verschiedene Proben zeigen ähnliche, wiederkehrende Verteilungsmuster für 6-8 Ring PAK. Möglicherweise befinden sich toxikologisch bedeutsame Verbindungen darunter, die in der Umwelt auftreten; dies ist bisher noch unklar.

### Einleitung

Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK) entstehen bei unvollständigen Verbrennungen oder in geologischen Prozessen durch Kondensationsreaktionen während der Kohle- und Erdölgenese. PAK sind aufgrund der zahlreichen Emissionsquellen, wie beispielsweise Hausfeuerung, Verkehr, Industrie, Müllverbrennung, Vulkanausbrüche oder Waldbrände weltweit verbreitet und in unterschiedlichsten Umweltmatrices wie Böden, Sedimenten, Grundwasser, Klärschlämmen, Gletschereis, Ruß, Kohle oder Öl nachweisbar (Ravindra et al., 2008; Achten und Hofmann, 2009; Lima et al., 2005; Becker et al., 1997).

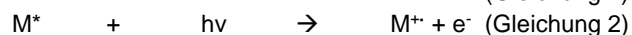
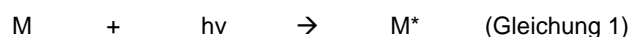
Die Stoffgruppe der PAK umfasst Hunderte bis Tausende Verbindungen, von denen üblicher Weise meist nur ein Bruchteil der niedermolekularen PAK (ausgewählte Muttersubstanzen) bis zu einem Molekulargewicht von  $m/z$  278 auf die Umweltbedeutung untersucht werden (16 EPA-PAK). Mit zunehmender Ringanzahl der PAK nimmt auch die Toxizität meist zu, so dass es möglich wäre, weitere PAK mit sieben bis acht Ringen und starker Umweltrelevanz nachzuweisen. Es existieren hierzu jedoch kaum optimale Analysemethoden und folglich auch kaum Erkenntnisse über das Umweltvorkommen solcher Verbindungen. Einige wenige Studien belegen das erwartungsgemäße Vorkommen in pyrogenen Matrices (Bagley und Wornat, 2013; McClaine et al., 2006).

Die Toxizität von PAK wird analog dem Konzept bei den Dioxinen und polychlorierten Biphenylen (PCB) mittels Toxizitätsäquivalenzfaktoren (TEF) angegeben, wobei der am stärksten karzinogenen Substanz der 16-EPA-PAK, dem Benzo[ $\alpha$ ]pyren, per Definition der Wert 1 zugeordnet wird. Die Toxizität aller

weiteren PAK wird als Vielfaches zum TEF von Benzo[ $\alpha$ ]pyren angegeben. Als besonders toxisch und karzinogen gelten die Dibenzopyrene ( $m/z$  302, 6-Ring PAK, TEF = 10, 10, 10 und 1 für die vier Isomere), die bis zu 31% der Gesamttoxizität von Dieselruß (Bergvall und Westerholm, 2009) und 63% der Gesamttoxizität von Holzruß (Achten et al., 2015) ausmachen können. Üblicherweise werden die Toxizitäten der Dibenzopyrene und höhermolekularer Verbindungen in Untersuchungen nicht erfasst. Auch mittels Flüssigchromatographie-Fluoreszenzdetektion werden meist nur die 16 EPA-PAK analysiert. Dies ist darauf zurückzuführen, dass höhermolekulare PAK meist hohe Siedepunkte aufweisen und somit nicht über die nötige Volatilität für die etablierte Kopplung von Gaschromatographie und Massenspektrometrie (GC-MS) verfügen. Zudem fehlt es an kommerziell erhältlichen 6-8 Ring PAK Referenzstandards.

Das Ziel dieser Studie ist die Methodenentwicklung und eine erste Anwendung zum Nachweis von PAK, einschließlich der 6-8 Ring PAK, in diversen Umweltproben mittels Flüssigchromatographie – Atmosphärendruck-Laserionisation – Massenspektrometrie (LC-APLI-MS).

Als Ionisationsquellen für unpolare Aromaten eignen sich Photoionisations- und Laserionisationsquellen (Schiewek et al., 2007). Hierbei gewinnen die Atmosphärendruckquellen in den letzten Jahren zunehmend an Bedeutung. Bei der Atmosphärendruck-Laserionisation (APLI) werden die aromatischen Moleküle in einem resonanzverstärkten Mehrphotonenionisationsprozess (1+1 REMPI) bei einer Wellenlänge von 248 nm (entspricht 5 eV) ionisiert. Hierbei wird das Ausgangsmolekül M durch den Einfang eines ersten Photons in einen angeregten Zwischenzustand überführt  $M^*$  (Gleichung 1). Im zweiten Schritt wird ein weiteres Photon eingefangen und ein Radikalkation  $M^+$  erzeugt (Gleichung 2).



Da lediglich aromatische Verbindungen ein ausreichend langlebigen Zwischenzustand  $M^*$  für den Einfang des zweiten Photons besitzen, wird mit der APLI eine starke Selektivität erreicht. Weitere nicht aromatische Moleküle, wie sie beispielsweise in der Probenmatrix auftreten können, werden aufgrund der niedrigen Photonenenergie von 5 eV nicht ionisiert. Da vor allem PAK einen hohen linearen Absorptionsquerschnitt auf-

weisen und die eingesetzten Lösungsmittel bei einer Wellenlänge von 248 nm nicht absorbieren, ermöglicht die APLI zudem Messungen mit sehr guter Sensitivität.

Während eine Kopplung von GC-APLI-MS bereits auf Umweltproben angewandt wurde (Stader et al., 2013), ist mit einer Kopplung von LC-APLI-MS bisher nur Rohöl untersucht worden (Lababidi et al., 2013).

## Material und Methoden

### Analytisches Setup

Für die Methodenentwicklung wurde ein Standard-Mix mit 59 PAK genutzt. Dieser Standard-Mix enthält neben den 16 EPA-PAK auch alkylierte PAK sowie Dibenzopyrene und Naphthofluoranthene ( $m/z$  302). Der Schwerpunkt bei der Methodenentwicklung lag auf einer guten chromatographischen Trennung und sensitiven Detektion der höhermolekularen PAK ( $m/z >300$ ). Für die Flüssigchromatographie wurde eine Shimadzu Prominence XR UFLC Anlage mit einer Macherey-Nagel Nucleodur C18 PAH Säule (100 mm, 2 mm ID, 1,8 $\mu$ m Partikel) ausgestattet. Im Gradientenverfahren mit Methanol und Acetonitril wurden 15  $\mu$ l bei einer Flussrate von 0,3 ml/min injiziert. Die Laserionisation erfolgte über eine spezielle, kommerziell erhältliche Ionenquelle (iGenTrax, Deutschland), in die Laserlicht mittels eines KrF-Excimerlasers (ATL Lasertechnik, Deutschland, 100 Hz, 5 mJ, 248 nm, 5eV) eingestrahlt wird. Die Detektion erfolgte mittels eines hochauflösenden Flugzeitmassenspektrometers (Bruker Maxis 3G, Deutschland).

### Probenmaterial und Extraktion

Für die PAK-Analytik wurden drei Probenmaterialien und ein zertifiziertes Referenzmaterial (CRM), das auch höhermolekulare PAK enthält, ausgewählt und analysiert:

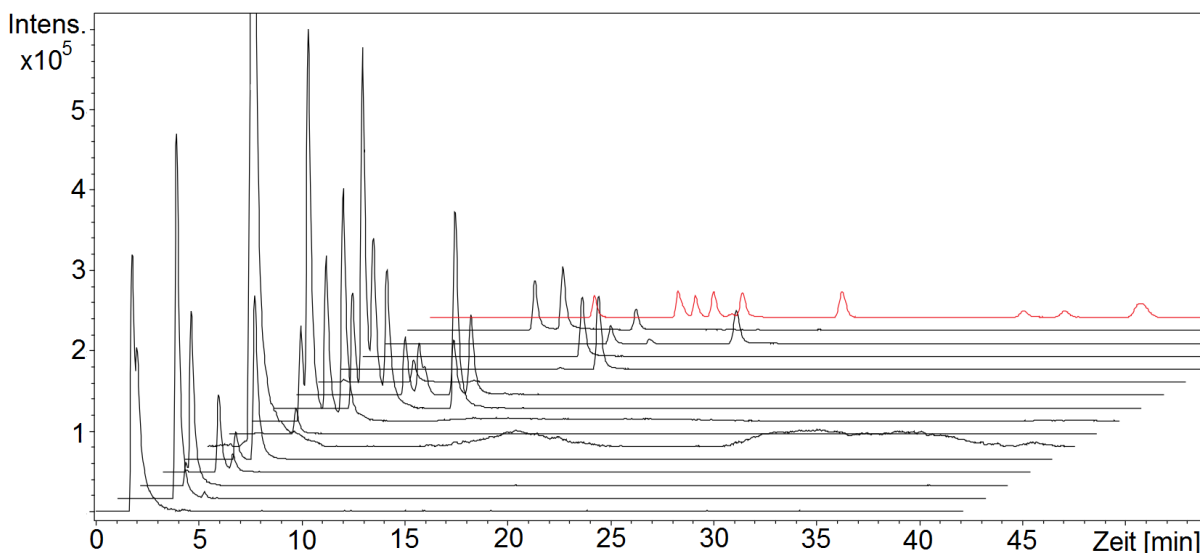
- (1) CRM „Organics in Marine Sediment“ entnommen am Chesapeake Bay an der Mündung des Hafens von Baltimore, Maryland, USA (NIST 1941b)
- (2) Steinkohle aus dem Midland Valley Becken, nahe Edinburgh, Schottland
- (3) Urbane Boden, eine Mischung aus Flugasche, Bauschutt, Kalkstein, Holz und Mergel aus dem Ruhrgebiet
- (4) Seesediment aus dem Aasee, Innenstadt von Münster (Westfalen)

Die Proben wurden mittels beschleunigter Lösungsmittel-extraktion mit Dichlormethan bei 120°C und 110 bar extrahiert (Büchi Speedextractor E-916).

## Ergebnisse und Diskussion

### Analyse des Standard-Mix

Anhand der entwickelten Methode lassen sich 52 der 59 PAK trennen und detektieren (Abbildung 1). In Methodenrobustheitstests wurde ermittelt, dass die Methode hinsichtlich Temperatur ( $\pm 2^\circ\text{C}$ ) Injektionsvolumen ( $\pm 5\mu\text{l}$ ), Lösungsmittelbeschaffenheit (+ 5% $\text{H}_2\text{O}$ ) und Zeit (min. für 142 h) hinsichtlich PAK mit mehr als drei aromatischen Ringen robust ist. Zudem ermöglicht LC-APLI-MS auch eine äußerst sensitive Detektion, die im Mittel etwa um den Faktor 1.000 empfindlicher ist, als die etablierte GC-MS Methodik (Tabelle 1). Die Nachweisgrenzen (LOD,  $S/N >3$ ) reichen bei LC-APLI-MS von 0,009 pg für Benzo[a]anthracen bis 2,002 pg für Naphtho[2,3-j]fluoranthen.

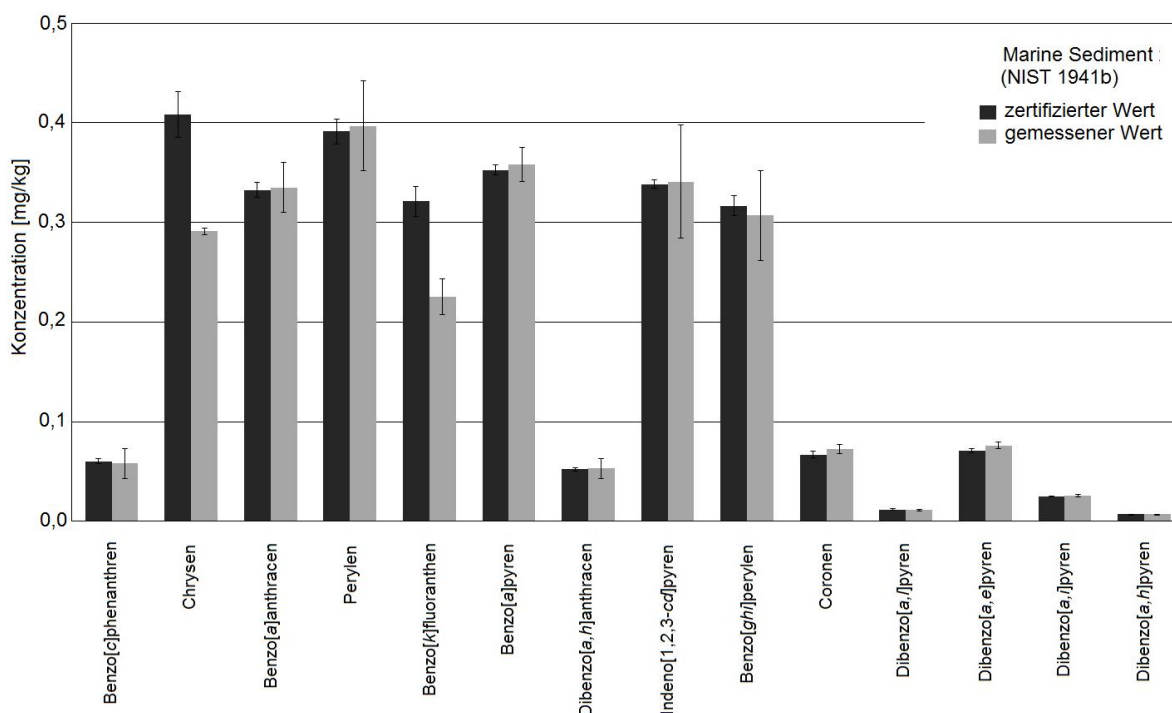


**Abbildung 1:** Ionenspur-Chromatogramme des Standard-Mix. Rot hervorgehoben sind die höhermolekularen PAK (hinterste Ionenspur) mit  $m/z$  302.



**Tabelle 1:** Nachweisgrenzen für exemplarisch ausgewählte PAK und toxikologisch relevante Dibenzopyrene.

Verbindung	LOD LC-APLI-MS [pg]	LOD GC-MS [pg] (Stader et al, 2013)	Faktor GC-MS / LC-APLI-MS
9,10-Dimethylantracen (3-Ring PAK)	0,023	9	385
Benzo[c]phenanthren (4-Ring PAK)	0,026	31	1.214
Benzo[a]pyren (5-Ring PAK)	0,024	6	253
Anthanthren (6-Ring-PAK)	0,029	50	1.707
Dibenzo[a,l]pyren	0,116	49	424
Dibenzo[a,e]pyren	0,060	38	634
Dibenzo[a,i]pyren	0,177	68	384
Dibenzo[a,h]pyren	0,403	88	218



**Abbildung 2:** Validierung mittels zertifiziertem Referenzmaterial (NIST 1941b). Die Fehler des zertifizierten Wertes beruhen auf den Angaben im Zertifikat, der Fehler des gemessenen Wertes basiert auf einer Dreifachmessung (n = 3).

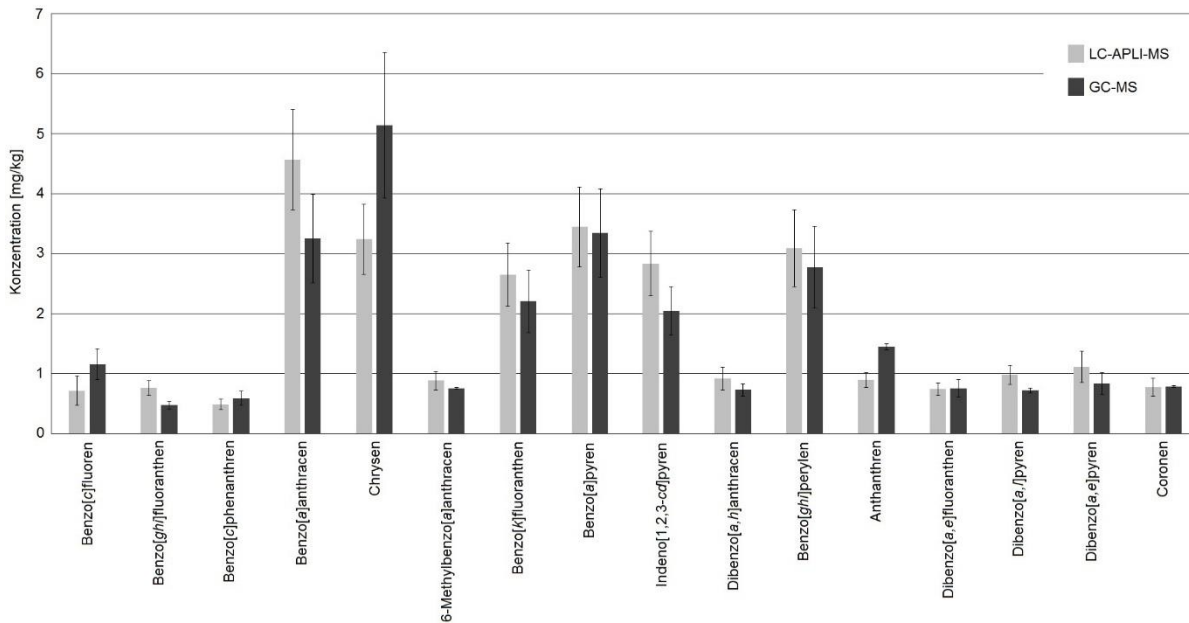
### Methodenvalidierung mittels zertifiziertem Referenzmaterial (CRM)

Eine Validierung mittels CRM zeigt, dass die gemessenen Werte mit den zertifizierten Werten gut übereinstimmen (Abbildung 2). Dies zeigt sich vor allem für die Dibenzopyrene. Abweichungen vom zertifizierten Wert treten für Chrysen und Benzo[k]fluoranthren auf. Dies ist auf eine geringe Überlappung dieser Peaks mit den Peaks benachbart eluierender Isomere zurückzuführen.

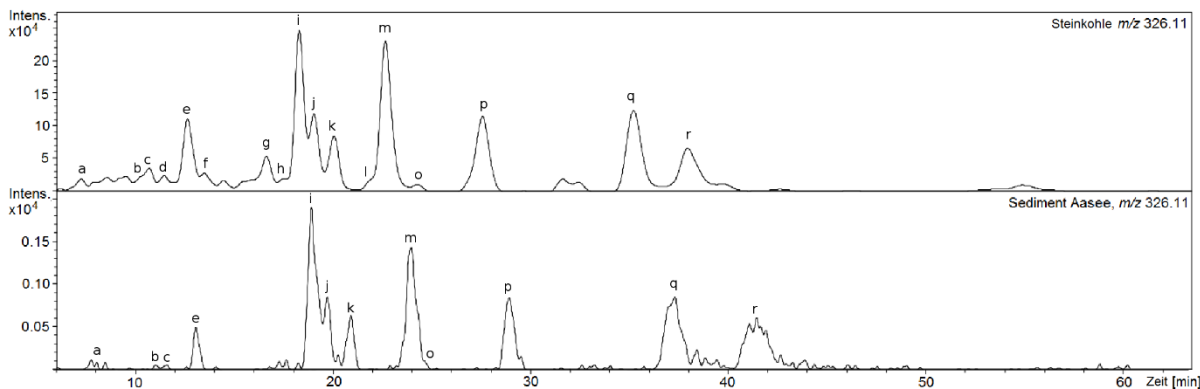
### Vergleich LC-APLI-MS mit etablierter GC-MS Methodik

Für einen Methodenvergleich von LC-APLI-MS mit der etablierten GC-MS Technik wurde ein urbaner Boden als komplexe Matrix gewählt. Über einen zweiseitigen t-Test kann

mathematisch ermittelt werden, ob die beiden Methoden signifikant bei einer Toleranz von 5% voneinander abweichen. Der t-Test bestätigt mit einem Wert von 1,03 unterhalb des Grenzwertes von 2,12 die Übereinstimmung beider Techniken. In Abbildung 3 wird dies grafisch veranschaulicht. Eine Schwierigkeit beim Methodenvergleich stellen alkylierte Verbindungen dar, da diese in der GC separiert und in der LC als Summe erfasst werden. Dibenzo[a,l]pyren und Dibenzo[a,h]pyren wurden in geringsten Konzentrationen lediglich mit LC-APLI-MS aufgrund der hohen Sensitivität dieser Methode detektiert.



**Abbildung 3:** Vergleich von LC-APLI-MS und GC-MS anhand einer komplexen Bodenprobe aus dem urbanen Raum (Fehler beruhen auf  $n = 3$ ).



**Abbildung 4:** Ionenspur-Chromatogramm für  $m/z$  326 der Steinkohle und des Seesedimentes. Beide Proben zeigen ähnliche Verteilungsmuster.

### Hochmolekulare PAK und PAK-Muster

Steinkohlen zeigten bereits in früheren Studien ein breites Spektrum an PAK (Meyer et al., 2013). Bei einer Analyse einer Steinkohle mittels LC-APLI-MS wurden 211 vorläufige Peaks für PAK mit 6-8 Ringen ermittelt. Diese Identifizierung erfolgte auf Ebene der Summenformel. Analysen anderer Probenmatrices, wie beispielsweise Sedimente des Aasees in Münster, zeigten ebenfalls zahlreiche höhermolekulare PAK mit  $m/z$  326,1. Bei einem Vergleich dieser Proben fällt auf, dass ähnliche Verteilungsmuster für  $m/z$  326 auftreten, wie es auch bei umweltrelevanten, niedermolekularen PAK bekannt ist (Abbildung 4). Dies ist ein Indiz, dass zahlreiche noch toxikologisch unbekannte PAK mit 6 oder mehr Ringen in diversen Umweltmatrices auftreten.

### Zusammenfassung

In dieser Studie wurde eine robuste LC-APLI-MS Methode zum sensitiven und selektiven Nachweis von höhermolekularen PAK mit 6-8 aromatischen Ringen und  $m/z > 300$  in verschiedenen Umweltmatrices entwickelt. Die Methode wurde mittels zertifiziertem Referenzmaterial validiert und ist durch Nachweisgrenzen im Mittel etwa um den Faktor 1.000 empfindlicher, als die etablierte GC-MS Methodik gekennzeichnet. Derzeit ist es unklar, ob über die sehr stark toxischen Dibenzopyrene hinaus noch weitere höhermolekulare, ggf. ebenfalls stark toxische PAK in der Umwelt auftreten. Die höhermolekularen PAK, die in dieser Studie mittels LC-APLI-MS detektiert werden konnten, treten in mehreren Probenmatrices in ähnlichen Mustern auf. Eine genauere Identifizierung dieser Verbindungen und Untersuchungen des toxikologischen Potentials ist für zukünftige Studien geplant.

## Literatur

- Achten, C., Hofmann, T. (2009): Native polycyclic aromatic hydrocarbons (PAH) in coals – A hardly recognized source of environmental contamination. *Sci Total Environ* 407: 2461-2473.
- Achten, C., Beer, T., Stader, C. et al. (2015): Wood-specific polycyclic aromatic hydrocarbons (PAH) patterns in soot using gas chromatography – atmospheric pressure laser ionization – mass spectrometry (GC-APLI-MS). *Environ Forensics* 16: 42-50.
- Bagley, S., Wornat, M. (2013): Identification of six- to nine-ring polycyclic aromatic hydrocarbons from the supercritical pyrolysis of n-decane. *Energy & Fuels* 27: 1321-1330.
- Becker, L., Glavin, D., Bada, J. (1997): Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in Antarctic Martian meteorites, carbonaceous chondrites and polar ice. *Geochim Cosmochim Acta* 61: 475-481.
- Bergvall, C., Westerholm, R. (2009): Determination of highly carcinogenic dibenzopyrene isomers in particulate emissions from two diesel-and two gasoline fueled light-duty vehicles. *Atmos Environ* 43: 3883-3890.
- Lababidi, S., Panda, S., Andersson, J., et al. (2013): Direct coupling of normal phase high-performance liquid chromatography to atmospheric pressure laser ionization fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry for the characterization of crude oil. *Anal Chem* 85: 9478-9485.
- Lima, A., Farrington, J., Reddy, C. (2005): Combustion-derived polycyclic aromatic hydrocarbons in the environment – A Review. *Environ Forensics* 6: 109-131.
- McClaine, J., Ona, J., Wornat, M. (2006): Identification of a new C<sub>28</sub>H<sub>14</sub> polycyclic aromatic hydrocarbon as a product of supercritical fuel pyrolysis: Tribenzo[*cd,ghi,lm*]perylene. *J Chrom A* 1138: 175-183.
- Meyer, W., Seiler, T., Reininghaus, M., et al (2013): Limited waterborne acute toxicity of native polycyclic aromatic compounds from coals of different types compared to their total hazard potential. *Environ Sci Technol* 47: 766-775.
- Ravindra, K., Sokhi, R., van Grieken, R. (2008): Atmospheric polycyclic aromatic hydrocarbons: Source attribution, emission factors and regulation. *Atmos Environ* 42: 2895-2921.
- Schiewek, R., Schellenträger, M., Mönnikes, R., et al. (2007): Ultrasensitive determination of polycyclic aromatic compounds with atmospheric-pressure laser ionization as an interface for GC/MS. *Anal Chem* 79: 4135-4140.
- Stader C., Beer, F., Achten, C. (2013): Environmental PAH analysis by gas chromatography atmospheric pressure laser ionization time-of-flight mass spectrometry (GC-APLI-MS). *Anal Bioanal. Chem.* 405:7041-7052.

## Korrespondenzadresse:

Jan. B. Thiäner  
Institut für Geologie und Paläontologie – Angewandte Geologie  
Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
Corrensstraße 24  
48149 Münster



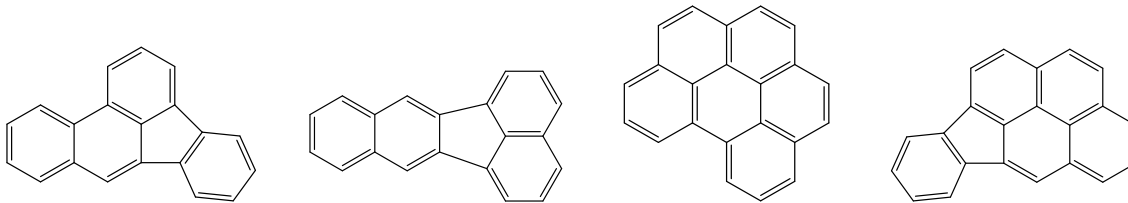
## Adieu 16 EPA-PAK? Zeit für die Berücksichtigung von 40 Jahren PAK-Forschung

Jan T. Andersson ([anderss@uni-muenster.de](mailto:anderss@uni-muenster.de))

Die 16 EPA PAK haben einen fast gesetzesähnlichen Status erreicht, aber sie waren nicht für die toxikologische Einschätzung einer Umweltprobe gedacht. Ist es an der Zeit, die Nutzung dieser Liste neu zu überdenken und in vielen Fällen andere, besser geeignete Stoffe auszusuchen?

Unter den vielfältigen Verbindungen, die in der Umwelt und damit auch in Wasser auftreten, jedoch dort unerwünscht sind, finden sich auch die polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffe, PAK. Durch die lang bekannte Toxizität mehrerer Vertreter dieser Stoffgruppe gehören sie zu den am häufigsten

studierten Chemikalien in der Umwelt. Der Gesetzgeber hat auf diese potentielle Bedrohung der menschlichen Gesundheit längst reagiert. Zum Beispiel darf die PAK-Konzentration in Trinkwasser einen Höchstwert von 0,10 µg/L nicht überschreiten (Summe der Konzentrationen von Benzo[*b*]fluoranthen (Alternativname: Benzo[*e*]acephenanthrylen), Benzo[*k*]fluoranthen, Benzo[*ghi*]perylen und Indeno[1,2,3-*cd*]pyren) (Abb. 1). Hier stehen die vier PAK-Substanzen also stellvertretend für die gesamte Stoffgruppe der PAK von hunderten Substanzen.



**Abbildung 1.** Die vier PAK, deren Konzentrationen in Trinkwasser geregelt sind: Benzo[*b*]fluoranthen, Benzo[*k*]fluoranthen, Benzo[*ghi*]perylen und Indeno[1,2,3-*cd*]pyren).

Dieses Beispiel zeigt exemplarisch das Nutzen einer Stellvertreterliste – anstatt sämtliche PAK zu messen, die durchaus in die Hunderte oder noch mehr gehen können, oder zumindest sämtliche bekanntermaßen toxischen PAK, werden die Untersuchungen auf einige wenige Stellvertreter begrenzt. Diese müssen in der Routine mit herkömmlichen analytischen Geräten gut analysierbar sein und im Idealfall das Vorkommen und die negativen (toxikologischen) Eigenschaften der ganzen Stoffgruppe abbilden, bzw. müssen diese von den Stellvertretersubstanzen ableitbar sein.

Die bekannteste Stellvertreterliste ist wohl die der 16 EPA-PAK, benannt nach der U.S. amerikanischen Umweltbehörde Environmental Protection Agency. Diese Behörde ließ 1976 die Liste bestehend aus 16 Vertretern erstellen, welche im Laufe der Zeit einen beinahe oder nicht selten auch tatsächlichen gesetzlichen Charakter erlangt hat. Dabei ist es von besonderer Bedeutung, die Entstehungsgeschichte der Liste zu studieren: Die Verbindungen wurden ausgewählt, u.a. weil sie im genannten Jahr als chemisch-analytischer Standard kommerziell verfügbar und mit Gaschromatographie (mit Flammenionisations- oder massenselektiver Detektion) analysierbar waren sowie (zum Teil) auf einer Liste von 65 Verbindungen standen, die im Trinkwasser von New Orleans gefunden worden waren und in einem Gerichtsurteil aufgeführt wurden (1). *Es war zu dieser Zeit also keineswegs das Ziel, karzinogene PAK auszuwählen sondern solche, die für den Nachweis einer industriellen*

*Verschmutzung, besonders von Gewässern, genutzt werden konnten.*

Die Liste wurde in den darauf folgenden Jahren weltweit aufgegriffen und zum Quasi-Standard erhoben. Hier stellt sich die wichtige Frage, welchem Zweck die Liste dienen soll und für welchen Zweck sie in der Realität benutzt wird. Sie stellt eine gute Auswahl von Substanzen für die Ausarbeitung von analytischen Methoden und Überprüfung der eigenen Analysemethoden dar, auch deswegen, weil sowohl Kalibrierlösungen, als auch Referenzmaterialien mit genau bestimmten Konzentrationen dieser 16 PAK in ganz unterschiedlichen Umweltmaterialien kommerziell erhältlich sind. Auch gibt sie Informationen zum Vorkommen von toxikologisch relevanten Verbindungen von industriellen oder Verbrennungsprozessen.

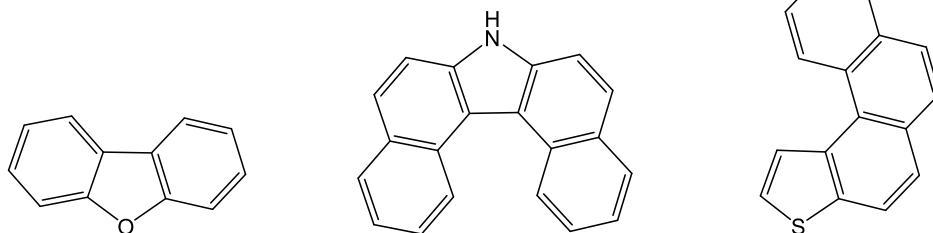
Probleme tauchen auf, wenn diese Liste für eine Abschätzung des toxischen Potentials von Umweltproben benutzt wird. Wie gerade angedeutet, hatte die Liste ursprünglich keineswegs diesen allgemeinen Zweck - einige Verbindungen sind nicht-toxisch und andere PAK, die in der Tat hochtoxisch sind und aus Umweltstudien bekannt sind, sind nicht vertreten. Trotzdem werden die Stoffe auf der Liste bis zum heutigen Tag als Zielsubstanzen bei zahlreichen Umweltanalysen aus den unterschiedlichsten Bereichen, einschließlich der toxikologischen Bewertung, angesehen und sind z. B. auch im Bundesbodenschutzgesetz enthalten.

Trotz dieser intensiven und vielfältigen Nutzung der 16 EPA-PAK mehren sich in den letzten Jahren die Anzeichen dafür, dass sie für viele Zwecke nicht mehr zeitgemäß sind. Auf der 23. Tagung der *International Society for Polycyclic Compounds* (ISPAC 23, Münster 2011) wurde darüber intensiv diskutiert und als Ergebnis wurde ein Sonderband der Zeitschrift *Polycyclic Aromatic Compounds* (Vol. 35, Nr. 2-4, 2015) mit Diskussionen über die Stellung der Liste in der Analyse und Bewertung verschiedener Umweltkompartimente herausgegeben. Erstmals wurde hier über die Möglichkeiten diskutiert, andere Verbindungen mit vielleicht größerer Aussagekraft auszuwählen.

Wesentliche Kritikpunkte sind besonders bisher völlig unberücksichtigte alkylierte PAK-Derivate und NSO-Heterozyklen, beides Stoffgruppen mit Vertretern, die eine dem Benzo[a]pyren ebenbürtige Toxizität aufweisen können und in vielen Umweltproben zahlreich vorliegen. Schließlich fehlen naturgemäß all die PAK, die in den Jahren seit 1976 als hochtoxisch eingestuft und in der Umwelt gefunden wurden; häufig größere Verbindungen. Als Beispiel dafür können einige Dibenzopyrene gelten, die ein zehnfaches toxisches Potential gegenüber Benzo[a]pyren besitzen (2).

In gewissen Fällen ist schon ein Abgehen von der EPA-PAK Liste zu verzeichnen. Im Jahr 2005 führte die Europäische Kommission eine modifizierte Liste von 15 + 1 PAK für die Lebensmitteluntersuchung ein, davon stehen acht auch auf der EPA Liste. Die zusätzlichen Verbindungen besitzen vier bis sechs aromatische Ringe und sind als Karzinogene bekannt. Mit Hilfe von dieser Aufstellung kann eine bessere Abschätzung des mutagenen und karzinogenen Potentials eines Lebensmittels erreicht werden als mit der EPA-PAK Liste.

Auch die EPA hat für spezielle Fälle andere Zusammenstellungen von Verbindungen eingeführt. Das Narkosemodell



**Abbildung 2:** Beispiele für karzinogene/mutagene polyzyklische Heterozyklen: Dibenzofuran, Dibenzoc[6,7]carbazol, Phenanthro[3,4-b]thiophene.

Bei der Erstellung einer alternativen Liste von zu analysierenden PAK wird schließlich auch die wesentliche Frage nach der Analysierbarkeit ein limitierender Faktor. Für die Quantifizierung einer Substanz ist es zwingend erforderlich, dass sie chromatographisch von allen Störsubstanzen abgetrennt vorliegt. Dies ist heute für die 16 EPA-PAK leicht zu erreichen, aber sobald auch nur die methylierten Derivate Ziel der Analytik sind, treten beachtliche analytische Schwierigkeiten auf. Betrachten wir als Beispiel die Methylbenzo[a]-

für benthische (am Boden lebende) Organismen verlangt die Bestimmung von 18 PAK (16 EPA-PAK plus zwei zusätzliche Verbindungen) und 16 Gruppen von besonders zahlreich vorkommenden C<sub>1</sub>- bis C<sub>4</sub>-alkylsubstituierten PAK (EPA-34). Diese Alkylderivate sind besonders dann von größter Bedeutung, wenn es sich um eine Mineralöl-beeinflusste Probe handelt. Inzwischen liegt eine Vielzahl von Untersuchungen vor, die dieser Stoffgruppe eine beachtliche toxische Wirkung zuschreiben.

Die Zusammenstellung einer einzigen Liste, die für alle Zwecke brauchbar wäre, bereitet erhebliche Schwierigkeiten, da die PAK-Zusammensetzung stark von der Emissionsquelle abhängt. Eine Verbrennung erzeugt hauptsächlich die unsubstituierten Grundkörper oder solche mit wenigen Alkylgruppen (pyrogenes Muster), ein Material jedoch, das bei moderaten Temperaturen entstanden ist, wie Erdöl, weist ein äußerst komplexes Muster aus alkylierten PAK auf (petrogenes Muster). Sollen die Verbindungen auf einer Liste auch noch die gesundheitlich relevantesten PAK umfassen, setzt dies voraus, dass umfangreiche Toxizitätstests unternommen wurden, sodass die entsprechenden Daten überhaupt vorliegen. Dies ist für zahlreiche unsubstituierte PAK inzwischen der Fall, jedoch nicht bzw. viel weniger für alkylierte oder heterozyklische Aromaten. Zusätzlich kommt der synthetische Aufwand dazu, da die Synthese vieler dieser Verbindungen noch nicht beschrieben ist.

Ähnliches gilt für die Heterozyklen, überwiegend für solche mit Stickstoff oder Schwefel als Heteroatom. Sie sind selten in Verbrennungsproben zu finden, jedoch zahlreich in petrogenen Materialien. Darüber hinaus können in Realproben viele mit Heteroatomen substituierte Aromaten, z.B. Nitroaromaten, Aminoaromaten, Chinone, etc., gefunden werden. Viele Vertreter dieser Stoffgruppen besitzen eine nachgewiesene Toxizität (3).

pyrene, wovon zwölf Isomere existieren. Zusätzlich kommen allerdings die Methylisomere aller anderen 15 Isomere von Grundkörpern, die mit Benzo[α]pyren isomer sind, z.B. Perylen oder Benzofluoranthene dazu. Insgesamt handelt es sich um 192 isomere Methylderivate, die die Bestimmung des ausgesuchten Methylbenzo[α]pyrens nicht stören dürfen. Auch wenn man davon ausgehen kann, dass nicht in jeder Probe alle diese Isomere vorliegen, bleibt es eine fast unlösbare analytische Aufgabe, selbst unter Nutzung der heute immer weiter

verbreiteten zweidimensionalen Gaschromatographie. Das Beispiel zeigt, wie wichtig es bei der Auswahl von Substanzen für jede Referenzliste ist, zuerst die Analysierbarkeit zu betrachten.

Trotz aller Einwände gegen die 16 EPA-PAK und gegen festgelegte Listen irgendeiner Art wäre es naiv zu glauben, dass wir ohne eine - wie auch immer - standardisierte Gruppe von Analyten auskämen. Die Frage bleibt jetzt, ob eine einzige Liste für alle Zwecke geeignet ist oder ob verschiedene Probenarten oder Untersuchungsziele verschieden zusammengestellte Standardsubstanzen verlangen, die dann auch die oben genannten – von der EPA Liste ausgeschlossenen Verbindungsgruppen – berücksichtigen.

Die Diskussion dieser Frage sollte nicht nur ein Anliegen für Wissenschaftler auf rein akademischer Ebene sein, sondern ganz besonders auch eines für Vertreter der Behörden und der Wirtschaft, die im Alltag mit Analysendaten und Risikobewertungen zu tun haben, die auf der EPA-PAK Liste beruhen und Entscheidungen zu treffen haben, die, wie wir heute wissen, nicht auf einer soliden wissenschaftlichen Grundlage fußen.

## Referenzen:

- (1) L. H. Keith, The Source of U.S. EPA's Sixteen PAH Priority Pollutants. *Polycyclic Aromatic Compounds*, 35 (2015) 147-160.
- (2) J. T. Andersson, C. Achten, Time to Say Goodbye to the 16 EPA PAHs? Toward an Up-to-Date Use of PACs for Environmental Purposes. *Polycyclic Aromatic Compounds*, 35 (2015) 330-354.
- (3) C. Achten, J. T. Andersson, Overview of Polycyclic Aromatic Compounds (PAC), *Polycyclic Aromatic Compounds*, 35 (2015) 177-186.

Sonderpublikation zum 11. Langenauer Wasserforum, 11/2015, Zweckverband Landeswasserversorgung, S. 26-27 (Abdruck mit Genehmigung der Herausgeber)

## Korrespondenzadresse:

Prof. Dr. Jan T. Andersson  
Institut für Anorganische und Analytische Chemie  
Universität Münster  
Corrensstraße 30  
48149 Münster

## Aktuelles aus dem Arbeitskreis Chemikalienbewertung der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie

Adolf Eisenträger ([Adolf.Eisentraeger@uba.de](mailto:Adolf.Eisentraeger@uba.de)), Dessau,  
Stefan Hahn ([stefan.hahn@item.fraunhofer.de](mailto:stefan.hahn@item.fraunhofer.de)), Hannover,  
Monika Nendza ([nendza@al-luhnstedt.de](mailto:nendza@al-luhnstedt.de)), Luhnstedt

Der Arbeitskreis behandelt Themen aus dem gesamten Spektrum der Chemikalienbewertung. Dieses umfasst Ergebnisse der Grundlagenforschung zu Expositions- und Effektanalyse bis zu den Fragen der praktischen Umsetzung innerhalb der Regulierung von Substanzen (REACH, BPD/BPR, etc.). Auf der Grundlage von Präsentationen und Vorträgen zu ausgewählten Themen werden neu entwickelte Methoden, Konzepte und Expertensysteme, Fallbeispiele einzelner Stoffgruppen sowie Erfahrungsberichte aus der Praxis der Stoffbewertung in Behörden und Industrie diskutiert.

Der Arbeitskreis bietet allen interessierten Wissenschaftlern und Wissenschaftlerinnen sowie Praktikern aus Industrie, Behörde und Universitäten ein Forum, um Erfahrungen und Ideen auszutauschen. Wir treffen uns zweimal jährlich. Der Schwerpunkt der Arbeiten liegt im Austausch über die Umsetzung der REACH-Verordnung und anderer Regularien, insbesondere auf den Themen Exposition, Persistenz, Bioakkumulation, Ökotoxikologie, Toxikologie und Risikobewertung. Neue Teilnehmer, die an aktuellem Wissen, sowohl von Arbeitskreismitgliedern als auch externen Experten, interessiert sind und gerne an unseren Diskussionen teilnehmen wollen, sind herzlich willkommen. Bei Interesse melden Sie sich bitte bei den Arbeitskreisleitern (s.o.), um zur nächsten Sitzung eingeladen zu werden.

*Im Verlauf des letzten Jahres gab es zwei Treffen am 16.03.2016 und am 05.10.2016 in der GDCh-Geschäftsstelle in Frankfurt.*

Zentrales Thema der März-Sitzung war die Bestimmung der Abbaubarkeit von Substanzen. Herr Dr. Gartiser berichtete von einer Literaturstudie im Auftrag des UBA. Herr Junker stellte ein Wasser-Sediment-Screening Testverfahren und Boden-Screening-Testverfahren vor. Zum Abschluss präsentierte Herr Dr. Hennecke Ergebnisse aus einem CEFIC LRI Vorhaben (ECO18) zu Wasser-Sediment-Simulationsstudien nach OECD 308 und 309 sowie modifizierte Versionen.

Der Schwerpunkt des zweiten Treffens war die sozio-ökonomische Analyse in der Chemikalienbewertung. Herr Helmedach führte in die Thematik ein und stellte die unterschiedlichen Methoden (cost-benefit analysis, cost-effectiveness analysis, multi-criteria analysis, break-even analysis) vor. Frau Dr. Gabbert diskutierte die sozio-ökonomische Bewertung von PBT/vPvB Substanzen unter Berücksichtigung des Zeitverlaufs von Umweltbelastungen

durch (pseudo-)persistente Stoffe. Herr Dr. Hahn stellte das ‚Methodology Manual‘ des österreichischen Umweltbundesamtes zur Bewertung gefährlicher Stoffe in Elektrogeräten und elektronischen Bauelementen unter der RoHS2 Richtlinie vor.

Des Weiteren beteiligte sich der Arbeitskreis an der DGPT Tagung 2016 in Berlin mit einer PosterCorner, und wird zur DGPT Tagung 2017 in Heidelberg eine Session zu „Zebrafischen als Modellorganismen in der Ökotoxikologie“ beitragen.

Für 2017 sind wieder zwei Treffen geplant. Auf der ersten Sitzung, die am 22. März in Frankfurt stattfinden wird, werden die anwesenden Mitglieder des Arbeitskreises im Rahmen einer Mitgliederversammlung den Vorstand für die nächste Amtsperiode wählen. Einladungen mit den Themen der Vorträge werden den Mitgliedern zugesendet werden.

---

## Ausschreibung des Paul-Crutzen-Preises 2017

Die GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie verleiht einen Preis für eine herausragende wissenschaftliche Arbeit auf dem Gebiet der Umweltchemie und Ökotoxikologie.

Eingereicht werden kann – vom Autor selbst oder von Dritten – eine wissenschaftliche Veröffentlichung (aus den zurückliegenden zwei Jahren, peer-review Journal). Der Erst- bzw. Hauptautor darf bei Erscheinen nicht mehr als zwei Jahre nach der Promotion stehen.

Mit der Auszeichnung verbunden sind eine Verleihungsurkunde sowie ein von der GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie gestiftetes Preisgeld in Höhe von 1.000 €, über das der Preisträger frei verfügen kann. Ein vom Vorstand der Fachgruppe benanntes Gutachtergremium entscheidet über die Preisvergabe. Die Preisverleihung soll im Rahmen der Fachgruppentagung 2017 stattfinden.

Dem formlosen Vorschlag, der eine kurze Begründung enthalten soll, sind ein Lebenslauf, eine Publikationsliste sowie die Veröffentlichung selbst in elektronischer Form (pdf-Dokument) beizufügen. Vorschläge können bis zum 30. April 2017 bei der GDCh-Geschäftsstelle, Dr. Susanne Kühner, Varrentrappstr. 40-42, 60486 Frankfurt am Main, [s.kuehner@gdch.de](mailto:s.kuehner@gdch.de), eingereicht werden.

### **Forum Junger Umweltwissenschaftler, 19. - 21.06.2017, Münster, unter Mitwirkung des JungChemikerForums in Münster**



Die Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) lädt herzlich zum Forum Junger Umweltwissenschaftler vom 19. - 21. Juni 2017 ein. Nachdem das erste und zweite Forum in Blomberg stattfanden, wird der Treffpunkt in diesem Jahr die beliebte Studentenstadt Münster sein.

Die Veranstaltung soll Nachwuchswissenschaftlern und jüngeren Berufstätigen aus den Bereichen Umweltchemie und Ökotoxikologie die Möglichkeit eines ungezwungenen aber intensiven fachlichen Austausches und des Kennenlernens bieten. Probleme und mögliche Lösungen sollen aus unterschiedlichen fachlichen Perspektiven diskutiert werden. Wir freuen uns, das Forum Junger Umweltwissenschaftler in diesem Jahr erstmals gemeinsam mit dem JungChemiker-Forum Münster zu organisieren.

Vorträge/ Poster zu allen Themen aus dem Bereich Umweltchemie und Ökotoxikologie sind willkommen, von der Analytik bis zur Wirkung, von Boden über Wasser bis zur Luft, vom Messen bis zum Modellieren, von der Bewertung bis zur Regulationen.

Aktuelle Informationen finden Sie unter <https://www.gdch.de/netzwerk-strukturen/fachstrukturen/umweltchemie-und-oeekotoxikologie.html>.

Bitte senden Sie Ihren Abstract unter Verwendung der dort zur Verfügung gestellten Formatvorlage zu den oben genannten Themen bis spätestens **31. März 2017** an [achten@uni-muenster.de](mailto:achten@uni-muenster.de). Die Teilnehmergebühr (150,- Euro) und die Fahrtkosten müssen von den Teilnehmern übernommen werden. Alle übrigen Vor-Ort-Kosten werden durch die Fachgruppe getragen.





## Professur für Instrumentelle Analytik, Fakultät Biotechnologie, Hochschule Mannheim

([p.weller@hs-mannheim.de](mailto:p.weller@hs-mannheim.de))

Prof. Dr. Philipp Weller

### Ausrichtung und Forschungsschwerpunkte

Nach 8 Jahren Industrietätigkeit im Bereich der Rückstandsanalytik und der Strukturaufklärung von Pflanzenschutzmitteln und deren Metaboliten bei den Firmen Nestlé AG und BASF SE übernahm Prof. Weller 2011 den Fachbereich Instrumentelle Analytik in der Fakultät Biotechnologie der Hochschule Mannheim. Er forscht dort mit Schwerpunkt auf den Gebieten Authentizitäts- und Herkunftsbestimmung mittels spektroskopischer und spektrometrischer Profiling-Techniken in Verbindung mit chemometrischer Datenverarbeitung, sowie der Phytosanierung von mit Organochlorpestizidrückständen belasteten Agrarflächen und deren Mobilisierung durch moderne Pflanzenschutzmittelbehandlung. Er führt kooperative Promotionen mit Partner-Universitäten, wie Hohenheim oder Hamburg durch und ist beteiligt an mehreren Großprojekten, die im Wesentlichen von öffentlichen Projektträgern, wie BMBF, AIF und BMWI, sowie der Industrie finanziert werden, unter anderem am Verbundprojekt „FH-Impuls“.

### Ausstattung Analytik

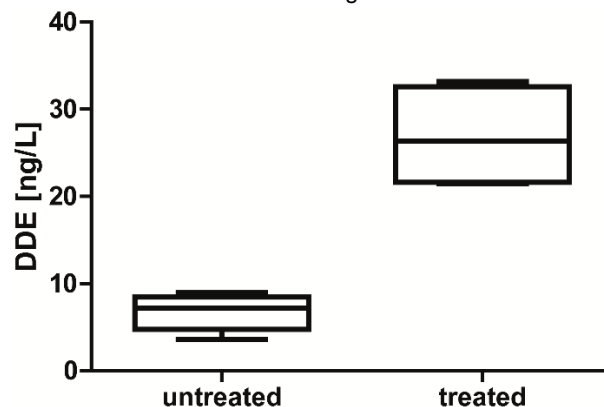
Die instrumentelle Ausstattung deckt einen breiten Bereich moderner Kopplungstechniken ab. So stehen mehrere GC-MS-Systeme mit den gängigsten Einlasstechniken zur Verfügung, ebenso wie drei LC-MS/MS-Systeme für den Spuren- und Ultraspurenbereich, sowie ein ICP-OES-System. Daneben stehen GC-gekoppelte Ionenmobilität (GC-IMS), ein HPTLC-Arbeitsplatz, sowie diverse spektroskopische Systeme, wie MIR, NIR und ein 300 MHz FT-NMR zur Verfügung. Hierbei werden darüber hinaus in Kooperation mit Industriepartnern Prototypen von Messgeräten entwickelt und getestet. Weiterhin stehen eine Belegungsapparatur für GC-Säulen zur Verfügung und ein Synthesearbeitsplatz für die Herstellung von Phasenmaterialien, insbesondere von chiralen Phasen. Im Institut angesiedelt ist außerdem das Bruker-Referenzzentrum Rhein-Neckar für Bioimaging, wodurch auch hoch- und höchstauflösende Massenspektrometrie verfügbar sind.

### Mobilisierung von DDT-Metaboliten durch Pflanzenschutzmittelformulierungen

Im Fokus stehen hier intensiv genutzte landwirtschaftliche Flächen im Südwesten Deutschlands, die auch 40 Jahre nach dem Verwendungsverbot von DDT vor über 40 Jahren auch heute noch Rückstände im Spurenbereich enthalten. In Feldversuchen zeigte sich, dass sich durch die Anwendung moderner Pestizidformulierungen beim Gemüseanbau signifikante Unterschiede in der Mobilisierung und auch der Aufnahme von DDT und seinen Metaboliten in die Nutzpflanzen

ergeben, was in zahlreichen Fällen zu überhöhten Rückständen führt – und damit das Erntegut nicht mehr verkehrsfähig ist oder zumindest von Supermarktketten nicht mehr akzeptiert wird. Der Grund hierfür liegt in bestimmten Tensidarten, die die Metabolite stärker mobilisieren und somit zu einer erhöhten Bioverfügbarkeit in Nutzpflanzen führen.

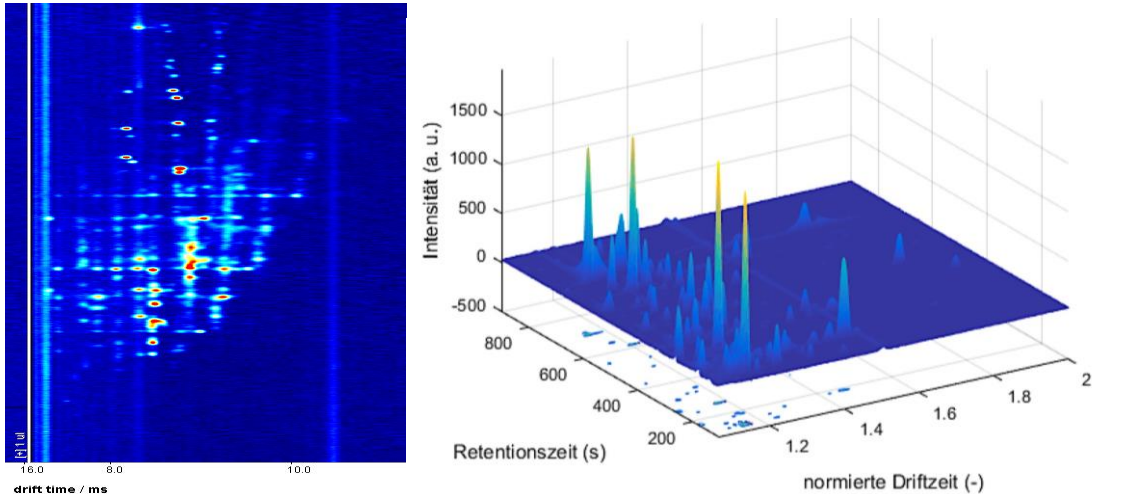
Dies könnte wiederum ausgenutzt werden um bei Phytosanierungsstrategien die Bioakkumulation in geeigneten Pflanzen (vor allem Cucurbitaceae) zu verbessern und somit die Effizienz einer Remediation zu steigern.



**Abbildung 1:** Gehalt an DDE (Hauptmetabolit von DDT) im Bodensickerwasser: Kontrolle und nach Behandlung des Bodens mit Pflanzenschutzmittelformulierung (Neitsch et al., JAF 2016).

### Anwendung der GC-Ionenmobilitätsspektrometrie als Profiling-Werkzeug für die Analytik komplexer Gemische

Die Kopplung von IMS-Systemen an die Gaschromatographie zeichnet sich durch die Orthogonalität der Trennung aus: Es erfolgt eine Trennung nach Retentionszeit x Driftzeit in einer nachgelagerten Driftzelle und damit durch einen Zugewinn an Selektivität, was gerade in komplexen Matrices, wie z.B. Fermentationsbrühen oder Abwässern, als eine sehr sensitive und vor allem schnelle Technik für das Screening auf Verunreinigungen genutzt werden kann. In Kombination mit chemometrischen Werkzeugen können hier sehr schnell nicht nur der Kontaminationsgrad, sondern auch der Fingerprint der Kontamination erfasst und ggf. die Herkunft bestimmt werden. Mit eigens entwickelten Datenanalyse-Tools können diese komplexen Datensätze sehr flexibel und schnell interpretiert werden.



**Abbildung 2:** Non-target-Screening einer mit Schmieröl verunreinigten (< 10 ppb) Wasserprobe mittels Headspace-GC-Ionenmobilitätsspektrometrie (Ausschnitt). Y-Achse: Retentionszeit [sek], X-Achse: Driftzeit [msec]. Im Bild rechts: beispielhafte 3D-Ansicht der resultierenden Daten (N. Gerhardt, A. Roth)

## Lehre

Die Professur ist im Hauptteil im Bachelor „Biologische Chemie“ verankert, sowie in den internationalen, englischsprachigen Masterstudiengängen „Biomedical Sciences“ und „Bioprocess Development“. Dort werden vor allem Grundlagen der instrumentellen Analytik, der Spektroskopie und der Anwendung chemometrischer Verfahren in der modernen Analytik praxisnahe gelehrt. Der Bachelorstudiengang vermittelt breite Kenntnisse biochemischer Prozesse in medizinischen, biotechnologischen und umweltrelevanten Vorgängen und legt einen deutlichen Schwerpunkt auf die Analytik komplexer Vorgänge, was sich auch in den Vorlesungsinhalten widerspiegelt. Neben vertieften Kenntnissen moderner Labor- und Prozessanalytik wird hier vor allem Wert auf die Anwendung aktueller Techniken, wie massenspektrometrischer Kopplungstechniken, Spektroskopie, biochemischer Assays und der Verarbeitung der resultierenden Daten gelegt, sowie auf die Einbindung der Studierenden in Forschungs- und Industrieprojekte.

Die beiden Masterprogramme sind ebenfalls sehr forschungs- und anwendungsorientiert. Hierbei haben die Studierenden die Möglichkeit, sich zwischen einem prozessorientierten und einem biomedizinischen Schwerpunkt zu entscheiden. Zu deren Inhalten zählen unter anderem Up- und Downstream-Processing und biotechnologische Nutzung von Fermentationsprozessen, sowie im biomedizinischen Strang moderne Omics-Ansätze, Drug Design und modernste Profiling-Techniken, wie hochauflösende Massenspektrometrie, Imaging, Spektroskopie und Data Mining. In beiden Ausrichtungen findet auch die Umweltanalytik entsprechende Anwendung.

## Arbeit in Gremien

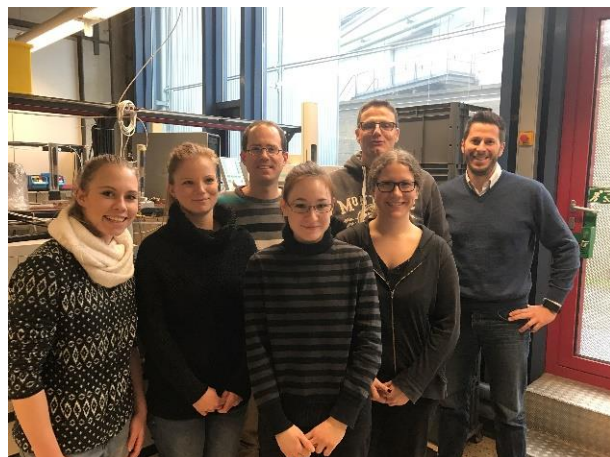
Prof. Weller ist Obmann der Arbeitsgruppe „Chemometrie und multivariate Datenauswertung“ der Fachgruppe Lebensmittelchemie der GDCh und Mitglied im Expertennetzwerk „Authentizität“ des Bundesinstituts für Risikobewertung (BfR).

## Weitere Informationen:

<http://www.ia.hs-mannheim.de/institut/aktuelles.html>

## Kontaktadresse

Institut für Instrumentelle Analytik und Bioanalytik  
Prof. Dr. Philipp Weller  
Hochschule Mannheim, Fakultät für Biotechnologie  
Paul-Wittsack-Strasse 10  
68163 Mannheim  
Tel: +49-621-292-6484  
Fax: +49-621-292-6420  
Email: [p.weller@hs-mannheim.de](mailto:p.weller@hs-mannheim.de)



AK Weller an der Hochschule Mannheim

## Abteilung „Nachhaltigkeit in der Chemie“ der Universität Bremen

Die Abteilung "Nachhaltigkeit in der Chemie" gehört zum Fachgebiet "Verfahrenstechnik der Werkstoffrückgewinnung" (Prof. Jorg Thöming) und ist Teil der zentralen wissenschaftlichen Einheit "Zentrum für Umweltforschung und nachhaltige Technologien (UFT)" der Universität Bremen. Geleitet wird die Abteilung von Dr. habil. Stefan Stolte.



Der (vorsorgende) Umwelt- und Gewässerschutz ist das übergeordnete Ziel der Forschungs- und Lehrtätigkeit in der Abteilung. In der interdisziplinär vernetzten Gruppe wird chemikalienbezogene Umweltforschung mit dem Schwerpunkt auf „Entwicklung von Chemikalien und Prozessen höherer Eigensicherheit und Nachhaltigkeit“ betrieben. Dabei werden prospektiv und retrospektiv Gefahren- und Risikopotenziale von Chemikalien erhoben und bewertet. Auch ein Großteil der Grundlagenforschung erfolgt in enger Zusammenarbeit mit Anwendern oder Vertreibern von Chemikalien - mit dem Ziel, die genutzten chemischen Produkte und Verfahren so zu optimieren, dass von ihnen ein möglichst geringes Gefahrenpotenzial für Mensch und Umwelt ausgeht.

Zentrale Bestandteile dieser Forschung sind die

- vergleichende Gefahrenpotenzialanalyse der verwendeten Chemikalien (experimentelle Ermittlung der Persistenz, Bioakkumulation, (Öko-)Toxizität und Mobilität in der Umwelt)
- Ableitung von qualitativen und quantitativen Struktur-Eigenschafts-Beziehungen
- Entwicklung von Designvorschlägen zur Verwendung von Chemikalien mit reduziertem Gefahrenpotenzial (höherer Eigensicherheit) für Mensch und Umwelt - im Dialog mit Herstellern und Anwendern
- Unterstützung bei der Entwicklung von (Abwasser-)Konzepten zur Reduzierung/Vermeidung einer Umweltexposition, falls unüberwindbare Zielkonflikte zwischen technologischem Anforderungsprofil und Umweltgefährlichkeit bestehen

- differenzierte Darstellung und Kommunikation von möglichen Risiken für Mensch und Umwelt in etwaigen „research communities“ und Aufarbeitung der Ergebnisse für fachfremde Wissenschaftler und die interessierte Bevölkerung

Dieses Vorgehen hat sich für unterschiedliche Substanzklassen – u. a. ionische Flüssigkeiten,<sup>1,2</sup> flüssige Wasserstoffträger<sup>3</sup> und Übergangsmetallkatalysatoren<sup>4,5</sup> – bewährt.

In der nachsorgenden Gefahren- und Risikopotenzialanalyse steht seit einigen Jahren die Erforschung von unterschiedlichen Arzneimitteln im Fokus. Hierbei gilt es neue analytische Methoden zu entwickeln,<sup>6</sup> Umweltkonzentrationen zu bestimmen,<sup>7</sup> biologische Effekte von Reinstoffen, Transformationsprodukten und Mischungen<sup>8,9</sup> sowie deren Stabilität<sup>10,11</sup> in der Umwelt zu untersuchen.

### Ausgewählte laufende Projekte kurz vorgestellt:

#### „Entwicklung nachhaltiger Outdoor-Textilien“ (Deutsche Bundesstiftung Umwelt)

DWR (durable water repellent)-Beschichtungen werden in der Textilindustrie angewendet, um Produkte mit wasser-, öl- und schmutzabweisenden Eigenschaften zu erhalten. Dabei werden häufig langkettige per- und polyfluorierte Chemikalien (PFC) verwendet, deren breite Anwendung in verschiedenen Produkten dazu führt, dass ihr Eintrag in die Umwelt stark zunimmt. Generell gelten PFC als sehr persistent, und einige Vertreter dieser Stoffgruppe sind (reproduktions-)toxisch, was demnach zu einer Vielzahl von Umweltproblemen führen kann - mit weitreichenden Konsequenzen für die Gesundheit des Menschen. Unter dem Motto »Wasserdicht, atmungsaktiv und grün« werden am UFT und in Zusammenarbeit mit dem »Bundesverband der Deutschen Sportartikel-Industrie e.V. (BSI)« und dem »Umweltbundesamt (begleitend)« nachhaltigere Alternativen zu etablierten fluorhaltigen Textilappreturen erforscht, die sowohl optimale wasser- und schmutzabweisende Eigenschaften als auch nachhaltiges Umweltsverhalten in sich vereinen.

Im Rahmen dieses Projektes werden zurzeit etwa 25 DWR (durable water repellent)-Formulierungen unterschiedlicher Klassen (basierend auf Fluorchemikalien, Siloxanen und Kohlenstoffpolymeren) auf ihre Umweltverträglichkeit untersucht. Ziel ist es, den Textilienherstellern ein differenziertes Bild zu Nutzen und Risiken der verwendeten Chemikalien zu liefern und Umweltaspekte in der Textilausrüstung stärker in den Vordergrund zu rücken.

## „Designkriterien für nachhaltige Nanomaterialien (DENANA)“ (BMBF)

Ziel von DENANA (Sprecherin des Verbunds: Prof. Dr. Juliane Filser, UFT) ist die Entwicklung von Kriterien für die Herstellung nachhaltiger Nanomaterialien. Im Fokus stehen Nanopartikel aus Siliziumdioxid, Cerdioxid und Silber, die u. a. in Schmierstoffen, Abgaskatalysatoren, Medizinprodukten und Poliermitteln eingesetzt werden. In dem Projekt werden Nanopartikel bei der Herstellung variiert und auf ihr Gefährdungspotenzial geprüft. Das Teilprojekt der Abteilung „Nachhaltigkeit in der Chemie“ beschäftigt sich mit der Erforschung des Sorptionsverhaltens von Biomolekülen an Nanomaterialien und der Ausbildung einer „Biomolekül-Corona“. Es ist bekannt, dass sich in die Umwelt eingebrachte Nanomaterialien in Abhängigkeit der Zusammensetzung des Umweltmediums schlagartig verändern. Somit sind die bei der industriellen Herstellung oftmals gut charakterisierten Nanomaterialien nur bedingt mit den in der Umwelt vorkommenden Nanopartikeln zu vergleichen. Neben Faktoren wie pH-Wert und Ionenstärke hat insbesondere die Gegenwart von Biomolekülen einen wesentlichen Einfluss auf Partikeleigenschaften. Umweltmatrices sind hochkomplexe Mischungen aus u. a. organischen Säuren, Mono-, Di- und Polysacchariden, Lipiden, Aminosäuren und Proteinen. Neben den physikalisch-chemischen Eigenschaften von Nanomaterialien, welche bisher für deren Biokompatibilitäts- und Risiko-Bewertung herangezogen wurden, ist zu erwarten, dass die Bestimmung der Biomolekül-Corona zusätzliche wichtige Kriterien zur Bewertung von Nano-Materialien liefert.<sup>12</sup> In unseren Studien leiten wir qualitativ und quantitativ die Stärke von Wechselwirkungen für eine Reihe ausgewählter Partikel und Biomoleküle ab. Hierbei bestimmen wir Sorptionsisothermen über die instrumentelle Analytik, ermitteln zusätzlich thermodynamische Parameter über die Isotherme Titrationskalorimetrie und nutzen computerbasierte Modelle zur Vorhersage des Sorptionsverhaltens in Abhängigkeit der Partikel-/Molekül-Charakteristika.

### Zur Person:



Seit 2010 leitet Stefan Stolte (habilitierter Chemiker) die Arbeitsgruppe „Nachhaltigkeit in der Chemie“ am Zentrum für Umweltforschung und nachhaltige Technologien (UFT) der Universität Bremen.

Im Institut stellt die Abteilung die Schnittstelle zwischen den Fachbereichen der Biologie/Chemie und der Produktionstechnik dar und beherbergt die „Zentrale Analytik“ am UFT. In beiden Fachbereichen ist Stefan Stolte in Lehre und der Bachelor-, Masteranden- und Promovendenausbildung beteiligt. Diese Interdisziplinarität stellt sich auch in der Zusammensetzung seiner 10 Mitarbeiter dar (Chemiker, Biologen und Ingenieure), die alle über nationale und internationale Drittmittelprojekte finanziert werden. Darüber hinaus besteht ein reger Austausch mit Gastwissenschaftlern und Studenten aus z. B.

Polen, Spanien und Portugal, die wissenschaftliche Arbeiten in der Arbeitsgruppe durchführen.

Seit 2012 ist Stefan Stolte Gastprofessor an der Universität Gdańsk und wurde für sein Engagement in der Lehre und Forschung im Rahmen dieser polnisch-deutschen Kooperation 2012 mit dem „Alexander von Humboldt Honorary Research Scholarship“ ausgezeichnet.

### Kontaktadresse

Stefan Stolte ([stefan.stolte@uni-bremen.de](mailto:stefan.stolte@uni-bremen.de))

Zentrum für Umweltforschung und nachhaltige Technologien (UFT)

Universität Bremen

Leobener Str. 6

28359 Bremen

Telefon: 0421 21863370

Web: <http://www.uni-bremen.de/vdw/httpwwwnachhaltige-chemieun.html>

### Literatur

- (1) Stolte, S.; Steudte, S.; Areitioaurtena, O.; Pagano, F.; Thöming, J.; Stepnowski, P.; Igartua, A.; Thoeming, J. Ionic liquids as lubricants or lubrication additives: An ecotoxicity and biodegradability assessment. *Chemosphere* 2012, 89, 1135–1141.
- (2) Ranke, J.; Stolte, S.; Störmann, R.; Arning, J.; Jastorff, B. Design of sustainable chemical products—the example of ionic liquids. *Chem. Rev.* 2007, 107, 2183–2206.
- (3) Markiewicz, M.; Zhang, Y.; Andreas, B.; Nicole, B.; Thöming, J.; Peter, W.; Stolte, S. Environmental and Health Impact Assessment of Liquid Organic Hydrogen Carrier (LOHC) systems - Challenges and Preliminary Results. *Energy Environ. Sci.* 2015.
- (4) Stolte, S.; Bui, H. T. T.; Steudte, S.; Korinth, V.; Arning, J.; Białk-Bielińska, A.; Bottin-Weber, U.; Cokoja, M.; Hahlbrock, A.; Fetz, V.; et al. Preliminary toxicity and ecotoxicity assessment of methyltrioxorhenium and its derivatives. *Green Chem.* 2015, 17, 1136–1144.
- (5) Thu, H. B. T.; Markiewicz, M.; Thöming, J.; Reich, R. M.; Korinth, V.; Cokoja, M.; Kühn, F. E.; Stolte, S. Catalytically active perchlorate based ionic liquids: a preliminary ecotoxicity and biodegradability assessment. *New J. Chem.* 2015, 39, 5431–5436.
- (6) Kumirska, J.; Wagil, M.; Stolte, S.; Maksymiuk, M.; Puckowski, A.; Maszkowska, J.; Białk-Bielińska, A.; Caban, M.; Stepnowski, P. Anthelmintics in the Aquatic Environment: A New Analytical Approach. *Curr. Anal. Chem.* 2016, 12, 227–236.
- (7) Wagil, M.; Kumirska, J.; Stolte, S.; Puckowski, A.; Maszkowska, J.; Stepnowski, P.; Białk-Bielińska, A. Development of sensitive and reliable LC-MS/MS methods for the determination of three fluoroquinolones in water and fish tissue samples and preliminary environmental risk assessment of their presence in two rivers in northern Poland. *Sci. Total Environ.* 2014, 493, 1006–1013.
- (8) Białk-Bielińska, A.; Caban, M.; Pieczyńska, A.; Stepnowski, P.; Stolte, S. Mixture toxicity of six sulfonamides and their two transformation products to green algae *Scenedesmus vacuolatus* and duckweed *Lemna minor*. *Chemosphere* 2017, 173, 542–550.
- (9) Wagil, M.; Białk-Bielińska, A.; Puckowski, A.; Wychodnik, K.; Maszkowska, J.; Mulkiwicz, E.; Kumirska, J.; Stepnowski, P.; Stolte, S. Toxicity of anthelmintic drugs (fenbendazole and flubendazole) to aquatic organisms. *Environ. Sci. Pollut. Res.* 2015, 22, 2566–2573.
- (10) Maszkowska, J.; Stolte, S.; Kumirska, J.; Łukaszewicz, P.; Mioduszevska, K.; Puckowski, A.; Caban, M.; Wagil, M.; Stepnowski, P.; Białk-Bielińska, A. Beta-blockers in the environment: Part I. Mobility and hydrolysis study. *Sci. Total Environ.* 2014, 493, 1112–1121.
- (11) Markiewicz, M.; Jungnickel, C.; Stolte, S.; Białk-Bielińska, A.; Kumirska, J.; Mroziak, W. Primary degradation of antidiabetic drugs. *J. Hazard. Mater.* 2017, 324, 428–435.
- (12) Docter, D.; Westmeier, D.; Markiewicz, M.; Stolte, S.; Knauer, S. K.; Stauber, R. H. The nanoparticle biomolecule corona: lessons learned - challenge accepted? *Chem. Soc. Rev.* 2015, 44, 6094–6121.

## Der NABU Bundesfachausschuss Umweltchemie und Ökotoxikologie stellt sich vor

Der im Jahr 2015 von der NABU (Naturschutzbund Deutschland) Bundesvertreterversammlung in Dresden beschlossene Bundesfachausschuss hat unter der Leitung von PD Dr. Werner Kratz im März 2016 seine Arbeit aufgenommen. Neben vielfältigen Anfragen aus dem Kreis des NABU Bundesverbandes (derzeit > 600.000 Mitglieder) und den Landesverbänden zur naturschutzfachlichen Bewertung von Schwermetallen, Tierarzneimitteln, PCBs, PAKs, MKWs, Dioxinen, Furanen, endokrinen Stoffen, GVO u.v.a.m. stehen die Pestizide im Focus der derzeitigen Arbeit.

### **Pestizide aus Sicht der naturschutzfachlichen Praxis**

Die Zulassung von Pestizide (Insektizide, Herbizide, Fungizide u.a.) wird in Europa von nationalen und EU-Gesetzen geregelt.

Die Ausbringung von Pestiziden in der konventionellen Landwirtschaft hat sich u.a. in den letzten Jahren durch die Intensivierung der Produktion weiterhin erhöht. Im Mittel kommen auf jeden Hektar deutschen Acker z.Z. ca. 3,6 kg Wirkstoff. Da die Wirkstoffe wie z.B. Glyphosat aber immer als Präparat (Wirkstoff plus Formulierungshilfsstoff) auf den Markt kommen wie z.B. Roundup, waren es im Jahr 2015 mehr als 140.000 Tonnen Präparate in Deutschland (BVL 2016).

Die regelmäßigen Funde von Pestizid-Rückständen in Oberflächengewässern und im Grundwasser (z. B. Bentazon, Isoproturon, Chloridazon) machen deutlich, dass inzwischen auch schon andere Umweltmatrizes kontaminiert sind und gesetzliche Anforderungen z.B. durch die EU-Wasserrahmenrichtlinie (UQN = Umweltqualitätsnormen) nur noch schwer erfüllbar sind (UBA 2016).

Damit einher geht ein dramatischer Rückgang der Artenbiodiversität u.a. bei den Agrarvögeln und den Insekten (Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB) und Bundesamt für Naturschutz – Artenschutzreport 2015).

Im Artenschutzreport (BfN 2015) zeigt die statistische Analyse der relativen Bedeutung der Gefährdungsursachenkomplexe für alle Tier- und Pflanzengruppen, dass die Landwirtschaft den höchsten Einfluss auf den Verlust der Biodiversität hat.

Bespiele sind die Auswirkungen weiträumiger Anwendung von Insektiziden aus der Gruppe der Neonikotinoide auf Honigbienen und Wildbestäuber (z. B. Wildbienen, Schwebfliegen und Hummeln) und die fortschreitende Verarmung der Pflanzenwelt in der Agrarlandschaft infolge des flächendeckenden Einsatzes von Herbiziden (z. B. Roundup mit dem Wirkstoff Glyphosat), womit anderen Wildtieren u.a. die Nahrungsgrundlage entzogen wird.

Auch im Indikatorenbericht 2014 zur Nationalen Strategie zur biologischen Vielfalt des BMUB ist nachzulesen, dass bei den Komponenten der biologischen Vielfalt (sieben Indikatoren, u.a. Artenvielfalt) der anzustrebende Zielerreichungsgrad von 100 % für z. B. Agrarvögel seit Jahren erst um 60% schwankt. Zu diesem Problemkreis der erheblichen Reduktion der Artenbiodiversität fanden 2016 zwei Anhörungen im Bundestag statt und auch der Bundesbauernverband und die CDU/CSU Fraktion haben hierzu jeweils ein Fachgespräch unter unserer Mitwirkung durchgeführt.

Im Zusammenhang mit dem Verlust der Insekten-Artenbiodiversität wird immer wieder das Beispiel der nicht mehr vorhandenen Insekten an den Windschutzscheiben der Fahrzeuge erwähnt. Die große Frage ist: Wo sind sie geblieben? Hatte Rachel Carson vor mehr als 50 Jahren in ihrem Buch „Der stumme Frühling“ doch recht?

Für die naturschutzfachliche Bewertung von Pestiziden und deren Zulassungsverfahren vom Bundesamt für Verbraucherschutz und Landwirtschaft durch den NABU Bundesfachausschuss Umweltchemie und Ökotoxikologie stellen sich u.a. folgende Fragen:

*Erfüllen die heute auf dem Markt befindlichen Pflanzenschutzmittel wirklich den Anspruch der nationalen und EU Gesetze, dass keine negativen Effekte oder Auswirkungen auf Mensch, Tier und Umwelt entstehen?*

*Inwieweit wird das durch eine EU Richtlinie geregelte Vorsorgeprinzip beachtet, wenn nicht genügend Daten vorliegen?*

Die aktuellen Aktivitäten der EU-Kommission betreffend die Kriterien zur Identifikation und Untersuchung von hormonell wirksamen Substanzen auf wildlebende Tiere sprechen hier eine deutliche Sprache.

Aus Sicht des NABU BFA Umweltchemie und Ökotoxikologie müsste demnach die Beurteilung der hormonellen Wirkung von Pestiziden auf die Summation und auf die Gesamtlebenszeit von Tieren, die oft gegenüber Pflanzenschutzmitteln exponiert sind, stärker bei der Zulassung berücksichtigt werden.

Grundsätzlich ist aus Sicht des Naturschutzes die Strategie einer Risikoanalyse zur Ableitung von Schwellenwerte für Einzelstoffe, unterhalb derer keine toxische Wirkung beobachtet wird, nicht zielführend. Denn dabei wird die kumulative Toxizität ungenügend berücksichtigt. Die landwirtschaftliche Praxis ist von Tankmischungen, also von Cocktails von verschiedenen Wirkstoffen und ihren Formulierungshilfen sowie einer oftmals engen zeitlichen Aufeinanderfolge der Anwendungen geprägt.

*Welche Rolle spielt die Auswirkung von Pestizide auf sogenannte Nichtzielorganismen, die wie z.B. die Wildbienen, die wichtige Ökosystemdienstleistungen im Bereich der Bestäubung erfüllen?*

Weitere Fragen, die regelmäßig von VerbraucherInnen an die Naturschutzverbände gestellt werden sind:

*Warum findet auf EU Ebene nur eine Wirkstoffprüfung statt und warum wird nicht das formulierte, in der Praxis Verwendung findende Produkt (mit teilweise mehreren Wirkstoffen und seinen diversen Formulierungshilfsstoffen), geprüft?*

Die derzeitige Prüfhierarchie ist wie aktuell an der Diskussion über Glyphosat und dessen Anwendungsformulierungen wie Roundup u.ä. ablesbar den VerbraucherInnen nicht zu vermitteln!

*Sind die Arten (z.B. eine Regenwurmart, die in der Natur nur in Baumstubben vorkommt), die in der Risikoabschätzung sowohl für den Wirkstoff als auch für das kommerzielle Produkt eingesetzt werden, repräsentativ für Arten, die in natürlichen terrestrischen und aquatischen Ökosystemen vorkommen und erfüllen sie die gleichen ökosystemaren Dienstleistungen?*

*Wurden die Arten für die OECD Testverfahren im Risk Assessment nicht letztendlich nach den Kriterien „leicht züchtbar“ und „verfügbar“ ausgewählt?*

*Warum werden in Finnland bei der zonalen Zulassung von Pestiziden andere Bodentiefenexpositionsszenarien festgelegt als z.B. in Deutschland?*

Die Vorschläge des Umweltbundesamtes (2016) in dem sogenannten 5-Punkte Programm zur Pestizidreduktion

1. Einsatz minimieren
2. Risiken identifizieren, quantifizieren und kommunizieren
3. Risikomanagement optimieren
4. Unvermeidbare Auswirkungen kompensieren
5. Externe Kosten internalisieren

bewertet der NABU BFA Umweltchemie und Ökotoxikologie bei dem gegebenen System der konventionellen und industriellen Landwirtschaft als wichtige Optimierungsschritte.

Gerade zu Punkt 5 hat kürzlich das French National Institute for Agricultural Research (INRA), vergleichbar mit dem Julius-Kühn-Institut in Deutschland, eine Studie mit dem Titel „The Hidden and External Costs of Pesticide Use“ vorgelegt, in der festgestellt wird, dass die volkswirtschaftlichen Kosten des Pestizideinsatzes beträchtlich sind. Wenn für jeden Euro, der für Pestizide ausgegeben wird, mindestens weitere 40 bis 80 Cent an Folgekosten für Schäden an Umwelt und Gesundheit sowie für die Regulierung dazu kommen, ist das inakzeptabel. Wer Pestizide herstellt oder anwendet, muss auch die gesellschaftlichen und ökologischen Folgekosten überneh-

men und diese seinen Kunden in Rechnung stellen. Die Politik muss mit allen verfügbaren Instrumenten für eine Internalisierung von externen Kosten in der Land- und Lebensmittelwirtschaft sorgen. Zum wirksamen Umsteuern beim Pflanzenschutz kann eine „Pestizidabgabe“ beitragen, die für einen Kostenausgleich sorgt und Innovationsanreize für den nicht-chemischen Pflanzenschutz setzt, ohne die Wahlmöglichkeiten der Anwender zu beschränken.

Grundsätzlich streben wir als Vertreter der Naturschutzverbände - wie auch im Indikatorenbericht 2014 zur Nationalen Strategie zur biologischen Vielfalt des BMUB gefordert - mehr Ökologischen Landbau in Deutschland an (z.Z. 6% der Landwirtschaftsfläche, Ziel in 2020: 20%) und damit auch den Verzicht auf synthetische Pestizide. Zwischenschritte können auch die immer wieder proklamierten Methoden des integrierten Pflanzenschutzes sein.

PD Dr. Werner Kratz

NABU Deutschland

Sprecher des Bundesfachausschusses Umweltchemie und Ökotoxikologie

[kratz@NABU-Brandenburg.de](mailto:kratz@NABU-Brandenburg.de)

## Veranstaltungsankündigungen

### **BfG-Workshop: Möglichkeiten und Perspektiven von Biotestverfahren in der Gewässerüberwachung und Bewertung, 30./ 31. März 2017, Koblenz**

Neben den klassischen organismischen Testverfahren haben sich in den vergangenen Jahren die suborganismischen In-vitro-Verfahren zur Bewertung toxischer Effekte von Umweltproben und Einzelsubstanzen in hohem Maße technologisch weiterentwickelt. Diese Methoden werden zunehmend für ein effektbasiertes Umweltmonitoring genutzt und erlauben die Erfassung spezifischer, sublethaler Effekte von Einzelsubstanzen sowie Mischungen unterschiedlicher Komplexität. Bislang werden in-vitro-basierte, bioanalytische Ansätze als Screeningmethoden z. B. zur Untersuchung von Oberflächen- und Abwasser sowie zur Charakterisierung von Sedimenten und Baggergut eingesetzt. Ihr Nutzen in der Ökotoxikologie beruht auf der Möglichkeit, mechanistische Ursachen toxischer Effekte zu untersuchen sowie auf ihrer Hochdurchsatzfähigkeit.

Eine große Herausforderung besteht hinsichtlich der Interpretation von In-vitro-Testergebnissen bei der Bewertung der Gewässerqualität. Die zentrale Frage ist, unter welchen Voraussetzungen und mit welchen Ansätzen biologische Verfahren mit einem Schwerpunkt auf In-vitro-Methoden für die Risikobewertung und Regulatorik anwendbar sind.

Im Rahmen des Workshops sollen aktuelle Ansätze zur Nutzung von Biotestverfahren mit einem Fokus auf In-vitro-Verfahren in der aquatischen Ökotoxikologie dargestellt sowie deren mögliche Anwendung und Interpretation vor einem regulatorischen Hintergrund diskutiert werden.

Anmeldung (die Teilnahme ist kostenlos):

Bundesanstalt für Gewässerkunde

z. Hd. Frau Strunck

Fax-Nr.: 0261-1306 5632

E-Mail: [Strunck@bafg.de](mailto:Strunck@bafg.de)

### **Annual Meeting of the Analytical Forum Water Contaminants (AFWC), 24. - 26.04.2017, Freising**

The agenda will include:

- Training on SCIEX software products and troubleshooting discussion with SCIEX technical service experts
- Contributions of participants presenting results of their analytical work
- Open discussions on suspect and non-target screening strategies
- Open discussions on targeted analysis and calibration
- An interactive, live demonstration of an analytical scenario for target and non-target analysis of water - including the

implementation of different workflows using SCIEX software products as well as third party software tools and/or data bases such as FOR-IDENT, enviMass, MassBank etc.

- A guided laboratory tour covering water treatment operation control and research (at the Chair of Urban Water Systems Engineering (TUM, Garching))
- A guided tour through the BayBioMS facilities (TUM Freising)

Homepage: [https://sciex.com/events/afwc\\_0405](https://sciex.com/events/afwc_0405)

### **Workshop: Glyphosate: Harmless Chemical or Silent Killer? 10.05.2017, Brussels**

Workshop to be organized at the European Parliament in Brussels. Further information will follow soon.

Homepage:

<http://www.euchems.eu/events/glyphosate-harmless-chemical-silent-killer/>

### **10<sup>th</sup> International SedNet Conference “Sediments on the move”, 14. - 17.06. 2017, Genoa, Italy**

SedNet is pleased to inform you that the 10<sup>th</sup> International SedNet Conference will be organized on 14-17 June 2017, in collaboration with DISTAV-University of Genoa and the Port Authority of Genoa.

The conference title “Sediments on the move” refers to the fact that sediment moves from the mountains to the sea and from fresh water to marine environments thus passing cultural, political and geographical borders. But sediment is also on the move in terms of its evolving management that has been guarded, publicly discussed and jointly advanced by SedNet already for 15 years now.

Conference themes:

1. Sediments moving to land, and soil moving to water
2. Sediment Balance
3. Policy for sediment management: Finding the balance; “everything is contaminated”
4. Using sediments as a resource – Sediments in a circular economy
5. Transboundary sediments
6. Innovative maintenance of river-delta-sea systems
7. Effects of remedial measures
8. Climate change; PIANC and SedNet Think Climate!
9. Sediment quality
10. Sediment quality criteria: derivation, implementation and enforcement
11. Disposal of sediments at sea

Homepage: <http://sednet.org/events/sednet-conference-2017/>

## RIVER BASINS - International Conference on Monitoring, Modelling and Management of River Basins, 19. - 20.06.2017, Wien

RIVER BASINS is a biannual conference which provides a platform for the exchange of recent progresses and research in the field of river basin management. This includes the quantification of water and mass fluxes, the investigation of processes in river systems and ecological research as well as the implementation of promising management strategies. The theme will be *Transboundary Management of Pollutants, with focus on Monitoring strategies, Data harmonization and Modelling*.

Homepage: <http://www.riverbasins.kit.edu/>



The role of sediment in aquatic systems has attracted increasing attention in the last few decades from both an applied and a research perspective. Sediments act as both a pollutant in natural habitats as well as a vector for the transfer of chemicals such as nutrients and contaminants. Recognition of the environmental influence of both sediment and sediment-associated chemical (nutrients and contaminants) transfers and storage on aquatic ecosystems has generated much concern within both research and regulatory agencies. Studies have been undertaken by a variety of individuals in a wide range of disciplines as the environmental problems are found in rivers, lakes, wetlands, estuaries and oceans and affect the biological, chemical, physical and social components of the system.

The International Association for Sediment Water Science (IASWS), bringing together a wide range of researchers from different disciplines, seeks to promote, encourage and recognize excellence in scientific research related to sediments and their interactions with water and biota in fluvial, lacustrine and marine systems and with particular reference to problems of environmental concern.

### Key Themes:

- Theme A: Assessing and/or Restoring Disturbed Watersheds
- Theme B: Sediment-Water Linkages in Terrestrial and Aquatic Environments
- Theme C: Evaluating Change in Saline and/or Freshwater Habitats

Theme D: Developments in monitoring and measuring sediment-water interactions and dynamics

Theme E: The role of sediment within catchment, river basin and coastal management

Homepage: <http://www.iasws2017.altervista.org/>



## 16<sup>th</sup> Int. Conference on Chemistry and the Environment ICCE, 18. - 22.06.2017, Oslo

Aktuelle Programminformation (<http://icce2017.org/>)

Sunday 18.06.2017			
10:00	<b>Satellite events</b>		
	1. <i>New contaminants, new risks: Analysis and environmental implications</i>		
	2. <i>Algae toxins (methods and implications)</i>		
	3. <i>New emerging PFAS: Regulations strategies</i>		
	4. <i>Isotopic techniques and their applications in environmental research</i>		
16:30			
17:00	Opening Ceremony		
	<b>Plenary lecture 1:</b> Leiv K. Sydnes (UiB) <i>Chemistry in the Service of Society</i>		
Monday 19.06.2017			
09:00	Introduction		
09:15	<b>Plenary lecture 2</b> Åke Bergman <i>Persistent organic pollutants: History, lessons learned and the way ahead</i>		
11:00	Coffee, Posters and Exhibition		
10:00	<b>Session 1</b> Perfluorinated surfactants 1	<b>Session 2</b> Atmospheric Aerosols 1	<b>Session 3</b> Bioactive compounds 1
12:00			
13:00	Lunch break		
14:00	<b>Session 4</b> Perfluorinated surfactants 2	<b>Session 5</b> Atmospheric Aerosols 2	<b>Session 6</b> Bioactive compounds 2
15:00			
16:30	Reception at Oslo City Hall		
18:00	Conference Dinner at Sjømagasinet		
Tuesday 20.06.2017			
09:00	Introduction		
09:15	<b>Plenary Lecture 3</b> Lars-Otto Reiersen (AMAP Executive Secretary): <i>Arctic Pollution issues</i>		
10:00	Coffee, Posters, Exhibition		
10:30	<b>Session 7</b> Arctic pollution 1	<b>Session 8</b> Water Treatment	<b>Session 9</b> Passive sampling in environmental chemistry
12:00			
12:30	Lunch Break		
	<b>Session 10</b> Arctic pollution 2	<b>Session 11</b> Advancements in modern analytical environmental chemistry	<b>Session 12</b> Radio-Ecology
16:00	Health Break: Coffee, Tea & Posters and Exhibition		
16:20	<b>Session 13</b> Soil Pollution	<b>Session 14</b> University education in environmental chemistry	<b>Session 15</b> Sustainable concepts in environmental Chemistry
18:00	Posters Session		
Wednesday 21.06.2017			
09:00	Introduction		
09:15	<b>Plenary Lecture 4</b> Simon Rupert (ECHA Helsinki): <i>REACH(ing) sustainable development</i>		
09:45	Coffee, Posters, Exhibition		
10:15	<b>Session 13</b> Humic and Fulvic Substances	<b>Session 14</b> Metabolomics and environmental Stressors	<b>Session 15</b> Mass Spectrometry in Food and environmental analysis
11:30			
12:00			



12:30	Lunch Break		
13:30	<b>Session 16</b> Water Reuse technologies	<b>Session 17</b> Nano-size materials in the environment	<b>Session 18</b> Challenges in analytical chemistry: identification of new pollutants, metabolites and transformation products
15:30			
16:00	Coffee, Posters, Exhibition		
	<b>Session 19</b> e-waste as pollution source	<b>Session 20</b> Bioactive compounds	<b>Session 21</b> Marine Toxicology and Chemistry
<b>Thursday 22.06.2017</b>			
<i>Satellite events</i>			
1. <i>NORMAN: Suspect and non-target screening with high resolution mass spectrometry – current status and new developments</i>			
2. <i>Mercury: regulations and consequences</i>			
3. <i>Scientific writing and publishing (course)</i>			

## 4<sup>th</sup> International Symposium on the Environmental Dimension of Antibiotic Resistance (EDAR), 13. - 17. 08. 2017, East Lansing, Michigan/USA

The threat of antibiotic resistant pathogens has long been recognized, at least by scientists, but only recently has the threat of multidrug resistant strains become broadly recognized to motivate action by leaders in governments as well as by the public. Necessary action includes research to define the scope of the problem including its various sources, the impacts of current practices in the different use sectors, assessment of the global nature of the problem, and identifying mitigation and stewardship practices.

### Topics:

#### *Basic science underpinning AMR*

1. Natural resistome, selection and evolution
2. ARG genetic linkages, gene/plasmid mobility, HGT
3. Environmental antibiotic chemistry, bioavailability, metabolism

#### *Advances in characterizing environmental sources, consequences, stewardship and/or mitigation*

4. AMR/ARG sources, mitigation: terrestrial and agriculture
5. ARG/ARG sources, mitigation: water environments
6. AMR/ARG sources, mitigation: aquaculture, production, hospitals, other

#### *Larger scale studies, human impact, risk, consumer engagement*

7. Assessment, mitigation, stewardship, human impact
8. Risk scenarios, assessment, modeling
9. Consumer trends, public communication, engagement

#### *Program/policy directions*

10. National program, sector outcomes, policy, initiatives

Homepage: <http://www.antibiotic-resistance.de/>



## 6<sup>th</sup> International Symposium on Soil Organic Matter “Healthy soils for sustainable agriculture: the role of SOM”, 3–7 September 2017,

Rothamsted Research, Harpenden (United Kingdom)

You are invited to the 6<sup>th</sup> International Symposium on Soil Organic Matter in 2017 at Rothamsted Research, which is run jointly with the British Society of Soil Science.

Rothamsted is the oldest agricultural research station in the world. Therefore, as well as the major themes that apply to all areas of SOM science, the theme of this Symposium particularly focusses on the management of agricultural soils to deliver environmentally and economically sustainable supplies of sufficient, nutritious food for all, in the context of global population increase, climate change and unequal resource distribution.

The theoretical and applied study of SOM has never been more important. In 2016 it became likely that the mean monthly atmospheric CO<sub>2</sub> concentration will not return to below 400 ppm for the indefinite future. The recent focus on the role of Soil Health to help bridge the Yield Gap has confirmed the important role of SOM as Natural Capital. Therefore, optimizing SOM management offers the potential to both mitigate greenhouse gas emissions and increase food production and quality.

Rothamsted is the home of the world-famous Long Term and Classical Experiments established by Sir John Lawes and Sir Henry Gilbert more than 170 years ago. The pioneering work of Prof David Jenkinson on the mathematical modelling of SOM transformations exploited this unique resource, and led to the development of the globally-renowned RothC model; we dedicate this symposium to his memory.

### Main topics

- SOM and Soil Security
- Modelling SOM: from soil pore to climate change
- Methods 1: Visualising SOM
- Methods 2: Quantifying pools and fluxes of SOM
- Soil Health 1: Biological Interactions
- Soil Health 2: The Role of Decomposition
- SOM as Natural Capital

Homepage: <http://www.som2017.org/>



The International Society for Environmental Biogeochemistry (ISEB) has the pleasure of inviting you to the

## 23<sup>rd</sup> International Symposium on Environmental Biochemistry

Palm Cove, Tropical North Queensland, Australia. 24-29 September, 2017

The Symposium brings together environmental scientists with a diverse range of interests in an intimate setting which encourages close interactions and exchange of information. A major attraction of the ISEB Symposia are their broad, cross-disciplinary coverage and single theme format. Attendance is typically 150 people.

The 2017 Symposium theme is: "From cells to Earth scale processes: traversing the breadth of temporal and spatial scales in biogeochemistry". The meeting will consist of several thematic sessions led by keynote speakers who are experts in their field. The topics covered in the 23rd ISEB Symposium are:

- Biogeochemistry of mined/industrial environments and impacts of resource extraction
- Frontier techniques in environmental biogeochemistry and microbiology (e.g. -omics)
- Aquatic and terrestrial microbiology including studies on extreme environments
- Impacts of pollutants on ecosystems and their remediation
- Biological interactions and transformations of metallic and organic contaminants in the environment
- Soil, water and landscape processes (including atmospheric -fluxes/interactions)
- Microbe-mineral-organic matter interactions
- Marine and coastal biogeochemistry (special focus on tropical coastal systems e.g. reefs).
- Biogeochemical cycling of major (C, N, P, S) & minor elements - methods, applications, fundamental & applied studies.

The middle day of the Symposium is traditionally set aside for field trips which this year, will also include an opportunity to visit the Great Barrier Reef.



## 12. Langenauer Wasserforum „Spurenstoffe im Trinkwasser überwachen und vermeiden“, 13. - 14.11.2017

Das Langenauer Wasserforum (LWF) widmet sich aktuellen Entwicklungen im Bereich der Wasser- und Umweltanalytik und deren Bedeutung für die Wasserwirtschaft. Es soll eine Diskussionsplattform für Anwender, Wissenschaftler und Hersteller bieten und den Erfahrungsaustausch fördern. Das LWF wird von der Landeswasserversorgung (LW) alle zwei Jahre veranstaltet.

Den Kern des 12. LWF bildet ein Vortrags- und Diskussionsprogramm mit Postern und Kurzvorträgen zu den Themenschwerpunkten:

- *Neue Anwendungen der Chromatographie und Massenspektrometrie*
- *Bewertung organischer Spurenstoffe*
- *Neue Konzepte zur Überwachung der Roh- und Trinkwasserqualität*
- *Charakterisierung von Aufbereitungsprozessen zur Spurenstoffentfernung*

Informationen, Reservierung von Ausstellungsständen und Anmeldung von Postern:

Dr. Wolfram Seitz  
Telefon: 07345 9638 – 2266  
E-Mail: [seitz.w@lw-online.de](mailto:seitz.w@lw-online.de)  
[www.lw-online.de](http://www.lw-online.de)

## Kurznachrichten



### European Commission: The Environmental Implementation Review (EIR)

Poor implementation of environmental law and policies has many negative effects, such as the environmental, economic and social costs, unequal playing level field for economic operators, and the loss of credibility of both national authorities and the EU.

The Environmental Implementation Review (EIR) is a tool to help deliver the benefits of EU environmental law and policies for businesses and citizens through better implementation. It aims to address the causes of implementation gaps and find solutions before problems become urgent and reach the stage of infringements.

The European Commission published the first ever comprehensive overview of how EU environmental policies and laws are applied on the ground. The EIR package (adopted the 3rd February 2017) includes 28 country reports which map national strengths, opportunities and weaknesses; a Communication identifying common challenges across countries, and suggested actions for improvement for all EU Member States presented in an Annex.

Full implementation of EU environmental legislation could save the EU economy €50 billion every year in health costs and direct costs to the environment. The EU waste policy alone could create an additional 400,000 jobs by 2020, and full implementation of water legislation could bring annual benefits of nearly €2.8 billion.

The EIR initiative is in line with the Commission's Better Regulation policy, which includes improving implementation of existing legislation and policies and it's linked to the process of Greening the European Semester.

Homepage: [http://ec.europa.eu/environment/eir/index\\_en.htm](http://ec.europa.eu/environment/eir/index_en.htm)



### European Commission registers 'Ban Glyphosate' European Citizens' Initiative

The European Commission has decided today (10.01.2017) to register a European Citizens Initiative (ECI) inviting the Commission "to propose to Member States a ban on glyphosate, to reform the pesticide approval procedure, and to set EU-wide mandatory reduction targets for pesticide use".

The initiative will be formally registered on 25 January. This registration will start a one-year process of collection of signatures in support of the proposed ECI by its organisers. The Commission's decision to register the Initiative concerns only the legal admissibility of the proposal. The conditions for admissibility, as foreseen by the ECI Regulation, are that the proposed action does not manifestly fall outside the framework of the Commission's powers to submit a proposal for a legal act, that it is not manifestly abusive, frivolous or vexatious and that it is not manifestly contrary to the values of the Union. The College of Commissioners discussed the legal admissibility of the proposed ECI today and concluded that the legal conditions for the registration of the ECI were fulfilled. The College has not analysed the substance of the initiative at this stage.

Should the ECI receive one million statements of support within one year, from at least seven different Member States, the Commission will have to react within three months. The Commission can decide either to follow the request or not follow the request and in both instances would be required to explain its reasoning.

#### Background

ECIs were introduced with the Lisbon Treaty and launched as an agenda-setting tool in the hands of citizens in April 2012, upon the entry into force of the ECI Regulation which implements the Treaty provisions.

Once formally registered, an ECI allows one million citizens from at least one quarter of EU Member States to invite the European Commission to propose a legal act in areas where the Commission has the power to do so.

If – and only if – a registered ECI receives the signatures of one million validated statements of support from at least seven Member States, the Commission must decide whether or not it would act, and explain the reasons for that choice.

*European Commission - Press release, Brussels, 10 January 2017*

#### For more information

[Full text of the proposed "Ban Glyphosate" ECI](#) (available from 25 January)

[ECI Organisers' Website](#)

[ECI website](#)

[ECI Regulation](#)

#### Homepage:

[http://europa.eu/rapid/press-release\\_IP-17-28\\_en.htm](http://europa.eu/rapid/press-release_IP-17-28_en.htm)

## European Commission: Reduction of national emissions of atmospheric pollutants

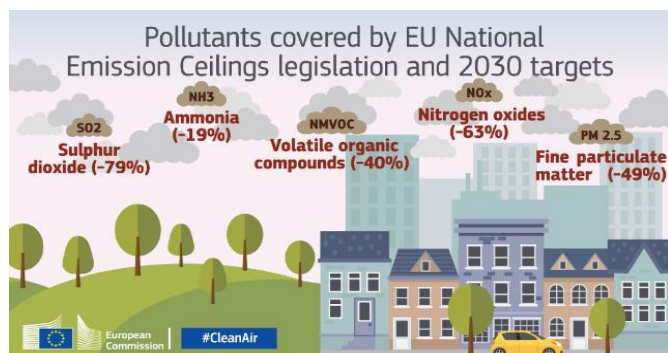
Air pollution travels over long distances and over national boundaries having a negative impact on human health. In order to limit air pollution which is also responsible for acidification, eutrophication and ground-level ozone pollution, the EU has policies in place limiting individual sources but also national totals of atmospheric emissions of the key pollutants. Together with the Ambient [Air Quality Directives](#) the National Emission Ceilings Directives and the source legislation underpinning them provide the legal framework for the EU's air policy.

### EU legislation

In 2011-2013 the Commission conducted a review of the EU air policy which resulted in the adoption of the [Clean Air Policy Package](#). As part of the package, the Commission proposed a Clean Air Programme for Europe, updating the 2005 Thematic Strategy on Air Pollution in order to set new objectives for EU air policy for 2020 and 2030.

The main legislative instrument to achieve the 2030 objectives of the Clean Air Programme is [Directive 2016/2284/EU](#) on the reduction of national emissions of certain atmospheric pollutants which entered into force on 31 December 2016. This Directive sets national reduction commitments for the five pollutants (sulphur dioxide, nitrogen oxides, volatile organic compounds, ammonia and fine particulate matter) responsible for acidification, eutrophication and ground-level ozone pollution which leads to significant negative impacts on human health and the environment. More information is available [here](#).

The new Directive repeals and replaces [Directive 2001/81/EC](#), the National Emission Ceilings Directive (NEC Directive) from the date of its transposition (30 June 2018) ensuring that the emission ceilings for 2010 set in that Directive shall apply until 2020. Directive 2016/2284 also transposes the reduction commitments for 2020 taken by the EU and its Member States under the revised Gothenburg Protocol (see below) and sets more ambitious reduction commitments for 2030 so as to cut the health impacts of air pollution by half compared with 2005.



Convention on Long Range Transboundary Air Pollution

In the international context, the EU Member States engaged together with Central and Eastern European countries, the United States and Canada to control international air pollution under the [Gothenburg Protocol](#) to the Convention on Long-Range Transboundary Air Pollution. The original protocol was agreed in November 1999 and formed the basis for the original NEC Directive 2001/81/EC. The protocol was revised in 2012 and the reduction commitments established for 2020 for the EU and its Member States have been transposed into EU law by the new NEC Directive. The Clean Air Policy Package included a proposal for Council ratification of the amended protocol which should proceed for adoption now that the revised NEC Directive is agreed.

The EU continues to work closely with the Convention to encourage ratification and implementation of the revised Protocol by the broadest range of parties, and to pursue further work on key areas such as Black Carbon and intercontinental transport of air pollution. In order to obtain a better understanding of the role of intercontinental transport of air pollution the convention has established a [Task Force on Hemispheric Transport of Air Pollution \(HTAP\)](#), jointly led by the US and the EU, which has developed detailed findings for ozone, particulate matter, mercury and persistent organic pollutants.

### Homepage:

<http://ec.europa.eu/environment/air/pollutants/ceilings.htm>

## EFSA-OpenFoodTox: Open Access to Scientific Output



OpenFoodTox is the new European Food Safety Authority (EFSA) database that provides instant access to a wealth of information from over 1,650

EFSA scientific outputs about the toxicity of chemicals found in the food and feed chain. Since its inception in 2002, has produced risk assessments for more than 4,400 substances in over 1,650 Scientific Opinions, Statements and Conclusions through the work of its Scientific Panels, Units and Scientific Committee. For each individual substance, a summary of human health, animal health and ecological hazard assessments has been collected and structured into OpenFoodTox. This database provides open source data for substance characterisation, links to the relevant EFSA output, background regulations and summaries of critical toxicological endpoints.

Source: <http://www.efsa.europa.eu/>

## Endocrine disruptors: EFSA and ECHA outline Guidance plans

EFSA and the European Chemicals Agency (ECHA) have published an outline of the Guidance they are developing on how to identify substances with endocrine disrupting properties in pesticides and biocides.

The outline includes a projected table of contents, as well as a plan of the drafting process, including timelines, responsibilities, consultations with relevant parties and an explanation of how the document will be endorsed.

The Guidance will enable applicants and regulatory authorities to identify endocrine disruptors among chemical substances proposed as pesticides and biocides using hazard-based scientific criteria currently being finalised by EU Member States and the European Commission.

The Guidance is to be drafted by a joint team of scientific staff from ECHA and EFSA, supported by the European Commission's Joint Research Centre. Minutes of meetings of this drafting group will be published.

Additional support to the group will be provided by a specially constituted Consultation Group, which will include members of ECHA's Endocrine Disruptors Expert Group, and pesticide experts from EU Member States and other stakeholder groups. The drafting group may also consult other scientific bodies, such as EFSA's Scientific Committee or its Panel on Plant Protection Products and their Residues (PPR) and this panel's working groups.

A public consultation on the draft Guidance is scheduled for the summer of 2017.

- [Outline of draft Guidance for the implementation of hazard-based criteria to identify endocrine disruptors](#)
- [Request from the European Commission](#)
- [Minutes of joint EFSA/ECHA/JRC kick-off meeting on endocrine disruptors guidance](#)
- [European Commission's proposed criteria for endocrine disruptors](#)

### Homepage:

<http://www.efsa.europa.eu/en/press/news/161220-0>



## European Environment Agency (EEA): More action is needed to protect the natural environment and people's health

Substantial progress in cutting greenhouse gas emissions, air and other pollutants, and improving energy and material efficiency, needs to be complemented by more actions by EU Member States to fully apply agreed-to policies to better protect biodiversity, natural resources, and people's health. These are the key findings of a new European Environment Agency (EEA) report which reviews key trends and outlook towards achieving EU 2020 environmental objectives.

EU environmental policies have delivered substantial improvements - Europeans enjoy cleaner air and water and more waste is being recycled. But more must be done to improve our air quality, protect our wildlife and natural resources if we are to meet our 2020 targets. It is becoming clear that we will need more integrated policies and knowledge to achieve our aim of living well within the limits of our planet.

The EEA '[Environmental indicator report 2016](#)' gives a snapshot of progress made so far by the 28 EU Member States in meeting a selected number of EU policy objectives. These are relevant to achieving the three key priority objectives of the EU's 7th Environment Action Programme: natural capital; resource-efficient, low-carbon economy, and people's health and well-being. The report complements the [European environment –state and outlook 2015](#)' (SOER) report.

The [7th Environment Action Programme](#) provides an overarching framework for EU environment policy planning and implementation to 2020. It also has a long-term objective of 'living well within the limits of the planet' by 2050.

Progress on 29 policy objectives were assessed on whether they can be met by 2020. [Individual briefings](#) provide further information on these assessments, including country level information.

### Scoreboard – progress and 2020 outlook

Only about a third of the objectives are expected to be achieved while it is likely that another third will not be attained and it is uncertain whether or not the remaining third will be met by 2020. The report shows that EU environmental policies have been more successful on reducing pressures on the environment, improving efficiency and meeting 2020 climate and energy targets than on reducing overall impacts on people's health and well-being or on ensuring the resilience of natural systems.

EEA-Press release from December 9<sup>th</sup>, 2016

## EEA Report No 32/2016: European water policies and human health — Combining reported environmental information



Society depends on the satisfactory and sustainable management of water. This report considers three pieces of EU water legislation targeted at particular sectors: the Bathing Water Directive, the Drinking Water Directive and the Urban Waste Water Treatment Directive, and looks at common issues in the context of the Water Framework Directive. A review of the implementation of each of the sectoral

directives is provided.

[European water policies and human health THAL16032ENN.pdf](#)



## Neuer DFG-Sonderforschungsbereich (CRC) 1253 “CAMPOS - Catchment as Reactors: Metabolism of Pollutants on the Catchment Scale”

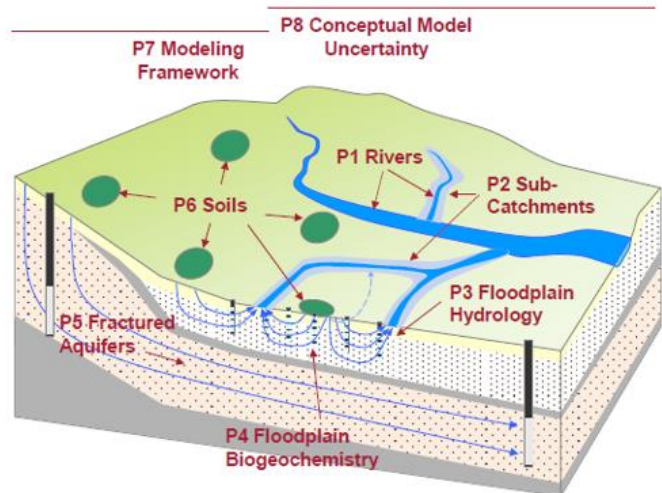
CAMPOS is a new Collaborative Research Center (CRC) for long-term multidisciplinary research starting in January 2017.

Diffuse pollution of soils, surface waters, and ground-water by a multitude of anthropogenic organic and inorganic compounds is a growing global concern. Despite decades of pollutant research, serious knowledge gaps exist concerning the fate and behavior of these pollutants on the landscape scale and their impact on water quality, ecology, and human health.

The overall aims of the CRC are:

1. to identify landscape elements controlling storage, biogeochemical transformation, or elimination of pollutants,
2. to identify the respective processes and their dynamics responsible for relevant pollutant transformations in environmental compartments,
3. to develop a new modeling framework to simulate and predict reactive transport and pollutant behavior on the landscape scale.

## Research Focus & Structure



In eight collaborative projects we intend to close the gap between relevant processes identified in the laboratory and mechanisms of mass transfer and metabolic transformations on the landscape scale.

### Coordination:

Dr. Hermann Rügner  
 University of Tübingen  
 Center for Applied Geoscience  
 Hölderlinstr. 12  
 D-72074 Tübingen  
 +49 (7071)-29 75041  
 Email: [h.ruegner@uni-tuebingen.de](mailto:h.ruegner@uni-tuebingen.de)  
 SFB-Homepage: <http://www.geo.uni-tuebingen.de/forschung/campos.html>

## Veraltete 16 EPA-PAK?

Wenige Umweltchemikalien dürften so bekannt sein, wie die 16 polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffe (PAK), die 1976 von der U.S. amerikanischen Umweltbehörde EPA aufgelistet wurden, die sogenannten 16 EPA-PAK. Unzählige Forschungsvorhaben, Veröffentlichungen und Verordnungen beschreiben Untersuchungen zu verschiedenen Aspekten dieser Verbindungen. Ganz besonders stehen dabei gesundheitliche Fragestellungen im Zentrum, da bekannter Weise einige Vertreter der PAK krebserregend oder mutagen wirken. Das berüchtigte Benzo[*a*]pyren (BaP) ist ein klassisches Beispiel dafür, da es ursächlich mit dem Entstehen von Lungenkrebs bei Rauchern in Verbindung steht.

Jedoch wissen die wenigsten, dass die Liste ins Leben gerufen wurde, um die Belastung von Gewässern mit Industriechemikalien zu charakterisieren (Keith, 2015); gesundheitliche Hintergründe gab es dabei keine. Diese Anwendung der Liste scheint allerdings mit der Zeit schleichend der Hauptgrund für die breite Nutzung zu sein, die wir heute feststellen können. Dies ist nicht plausibel, da mehrere Verbindungen auf der Liste eine vergleichsweise geringe Toxizität besitzen, andere in der

Umwelt vorkommende PAK dagegen wesentlich toxischer als sogar das BaP sind und dennoch nicht auf der Liste wiedergefunden werden.

Aus diesem Grund sind bereits Bestrebungen erkennbar, andere Zusammenstellungen von zu analysierenden PAK zu konzipieren. Beispielsweise hat die EU eine teilweise andersartig ausgewählte Liste von PAK, die sogenannten 15+1 PAK, für Lebensmittel vorgeschrieben. Im Umweltbereich gibt es inzwischen viele Beobachtungen, die auf die Unzulänglichkeiten der 16 EPA-PAK hinweisen. Kommentare, wie „a major part of the activity is due to non-monitored alkylated and heterocyclic PAHs“ (Kaisarevic et al., 2009) und „the EPA PAHs play only a minor role in causing acute toxicity to *Vibrio fischeri*“ (Loibner et al., 2004) weisen auf die Probleme hin: Alkylierte PAK, Heterozyklen und höhermolekulare PAK sind in der EPA-PAK-Liste nicht vertreten.

Aus einem Minisymposium zu diesem Thema auf der Tagung *23<sup>rd</sup> International Symposium on Polycyclic Aromatic Compounds (ISPAC)* in Münster im Jahr 2011 ging ein Sonderheft der Zeitschrift *Polycyclic Aromatic Compounds* (Band 35, Ausgaben 2-4, 2015) hervor. In mehreren Beiträgen wurde die Problematik der begrenzten Aussagekraft der 16 EPA-PAK aufgeworfen und die Frage gestellt, ob es nicht an der Zeit wäre, sie durch eine andere Auswahl an umweltrelevanteren PAK zu ersetzen (Andersson & Achten, 2015).

Um über diese lange überfällig erscheinende Problematik zu informieren und diskutieren, waren die Professoren Christine Achten und Jan Andersson von der Universität Münster am Ende des Jahres 2016 an das Umweltbundesamt in Dessau eingeladen. Nach Vorträgen und Diskussionen mit den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des UBA zeigte sich, dass es hierzu weiteren Forschungsbedarf gibt.

## Literatur

- Andersson, J.T., Achten, C. Time to Say Goodbye to the 16 EPA PAHs? Toward an Up-to-Date Use of PACs for Environmental Purposes, *Polycyclic Aromatic Compounds*, 35 (2015), 330-354, DOI: 10.1080/10406638.2014.991042 (open access)
- Kaisarevic, S., Lübcke-von Varel, U., Orcic, D., Streck, G., Schulze, T., Pogrmic, K., Teodorovic, I., Brack, W. und Kovacevic, R. "Effect-directed analysis of contaminated sediment from the wastewater canal in Pancevo industrial area, Serbie", *Chemosphere* 77 (2009) 907-913. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2009.08.042
- Keith, L. "The Source of U.S. EPA's Sixteen PAH Priority Pollutants". *Polycyclic Aromatic Compounds*, 35 (2015) 147-160.
- Loibner, A., Szolar, O.H., Braun, R., und Hirmann, D. Toxicity testing of 16 priority polycyclic aromatic hydrocarbons using Lumistox, *Environmental Toxicology and Chemistry* 23 (2004) 557 DOI: 10.1897/03-59

## Blei und Cadmium in Modeschmuck



BVL stellt Ergebnisse der bundesweiten Überwachung von Lebensmitteln und Bedarfsgegenständen in 2015 vor. Erneut gerieten preiswerte

Modeschmuckartikel ins Visier der Überwachungsbehörden. Nachdem das Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit (BVL) im vergangenen Jahr auf die erhöhten Nickelgehalte in den untersuchten Proben hingewiesen hatte, kritisierte das Bundesamt auf seiner Pressekonferenz am 30.11.2016 in Berlin die Funde von Blei und Cadmium oberhalb der geltenden Grenzwerte. [...].

Nach mehreren Einzelfunden von preiswertem Modeschmuck mit erhöhten Blei- und Cadmiumgehalten ist die Produktgruppe im Jahr 2015 verstärkt durch die amtliche Überwachung kontrolliert worden. Von den 262 durch die Kontrolleure genommenen Proben wiesen 32 Proben (12 Prozent) Bleiwerte oberhalb des geltenden Höchstgehalts von 500 mg/kg auf. Bei einer untersuchten Kette waren die beiden Karabinerhaken sogar vollständig aus Blei gefertigt. Bei 26 Proben (10 Prozent) überschritt der Cadmiumgehalt den Grenzwert von 100 mg/kg.

Gekürzte Pressemitteilung des BVL vom 30.11.2016

## TFA in Gewässern und im Trinkwasser in NRW

Ministerium für Klimaschutz, Umwelt, Landwirtschaft, Natur- und Verbraucherschutz des Landes Nordrhein-Westfalen



Das Umweltministerium meldet Nachweise von Trifluoracetat auch in Gewässern und im Trinkwasser in NRW. Das Landesumweltamt erweitert für Gewässer, Grundwasser und Abwässer die Untersuchungen. Die Datenlage ist hinsichtlich der gesundheitsbeeinträchtigenden Bewertung nicht vollständig, eine Gesundheitsgefährdung bislang nicht festgestellt.

Auch in Nordrhein-Westfalen wurde die chemische Substanz Trifluoracetat (TFA) in Gewässern und im Trinkwasser in geringer Konzentration - oberhalb des Gesundheitlichen Orientierungswerts (GOW) und unterhalb des Vorsorgemaßnahmenwert (VMW) - nachgewiesen. Noch steht nicht fest, wie es zu den TFA-Einträgen gekommen ist. Neben industriellen Einleitungen kommt auch die Anwendung von Pflanzenschutzmitteln und die dabei entstehenden Abbauprodukte als Eintragsquelle in Betracht. Die dem Umweltministerium vorliegende Datenlage ist zurzeit noch begrenzt, so dass eine landesweite Einschätzung der Situation aktuell schwierig ist. Das Umweltministerium hat aber bereits das Landesumweltamt (LANUV) beauftragt, Untersuchungen in Gewässern, Grundwasser und Abwässern durchzuführen. Zudem hat das

Umweltministerium eine Abfrage bei den Wasserversorgungsunternehmen gestartet und diese gebeten, dem Ministerium vorhandene Untersuchungsdaten zum Trinkwasser zur Verfügung zu stellen. [...].

Erste Meldungen von TFA in Gewässern und Trinkwasser kamen Anfang Oktober aus Baden-Württemberg. Dort ist TFA über industrielle Einleitungen in den Neckar gelangt. Inzwischen wurde TFA auch im nordrhein-westfälischen Rheinabschnitt sowie in Gewässern in NRW und im Trinkwasser nachgewiesen - allerdings in geringerer Konzentration - oberhalb des GOW und unterhalb des VMW. "Aktuell fehlen Untersuchungen zur Einschätzung der Wirkung von TFA auf den Menschen und die Umwelt, daher werden wir jetzt weitere Untersuchungen für eine abgesicherte Risikoeinschätzung durchführen sowie das Umweltbundesamt bitten, uns dabei zu unterstützen", kündigte Minister Remmel an. Für TFA gibt es in der Trinkwasserverordnung keinen Grenzwert. Das Umweltbundesamt (UBA) empfiehlt allerdings für TFA derzeit einen Gesundheitlichen Orientierungswert (GOW) von 1,0 Mikrogramm/Liter ( $\mu\text{g/L}$ ) und einen Vorsorgemaßnahmenwert (VMW) von 10  $\mu\text{g/L}$  für Trinkwasser. Das UBA soll - unter anderem auf Wunsch des NRW-Umweltministeriums - auch hinsichtlich des GOW mögliche gesundheitliche Auswirkungen von TFA und deren Einordnung untersuchen.

Gekürzte Pressemitteilung vom 9.12.2016 des Ministeriums für Klimaschutz, Umwelt, Landwirtschaft, Natur- und Verbraucherschutz des Landes Nordrhein-Westfalen

Quelle: <https://www.umwelt.nrw.de/presse/detail/news/2016-12-09-nachweise-von-trifluoracetat-auch-in-gewaessern-und-im-trinkwasser-in-nrw/>

## UBA-Texte 74/2016: Empfehlungen für eine Testbatterie zur ökotoxikologischen Bewertung der Umweltverträglichkeit von Bauprodukten

Ziel des Projektes war es, Empfehlungen für eine Testbatterie zur ökotoxikologischen Bewertung der Umweltverträglichkeit von Bauprodukten zu erarbeiten, die zur europäischen Harmonisierung von Prüfmethoden beitragen. 20 durch Screening-Tests ausgewählte Bauprodukte wurden ökotoxikologisch untersucht. Zudem wurde ein europäischer Ringversuch mit 17 Teilnehmern aus fünf Ländern und zwei Bauprodukten vorbereitet, durchgeführt und ausgewertet. Es wurden Empfehlungen zur Planung und Durchführung von Ökotoxizitätstests zur Bewertung von Bauprodukten erarbeitet und bei der für die europäische Harmonisierung von Auslaugtests für Bauprodukte zuständigen CEN-Arbeitsgruppe eingereicht.

Download: <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/empfehlungen-fur-eine-testbatterie-zur>



## UBA-Texte 82/21016: Aggregated Environmental Exposure Assessment and Risk Characterisation of Biocidal Products

Artikel 19(2) der neuen Biozidproduktverordnung (BiozidVO, 528/2012) führt aus, dass „die Bewertung [...] die folgenden Faktoren berücksichtigen soll: [...] (d) kumulative Wirkungen, (e) synergistische Wirkungen“. Biozide Wirkstoffe sind häufig in vielen unterschiedlichen Produkten enthalten. Oft werden sie in unterschiedlichen Anwendungen eingesetzt. Dennoch werden in der Regel bei der Expositionsbeurteilung nur einzelne Verwendungen bewertet. Dies kann die tatsächlichen Konzentrationen der Wirkstoffe in der Umwelt unterschätzen.

Wie können kumulative und synergistische Wirkungen bei der Biozidzulassung berücksichtigt werden? Derzeit gibt es nur wenige Hinweise zu dieser Aufgabenstellung in den „Technical Notes for Guidance on Product Evaluation“ (TNsG on product evaluation, EU, 2002). Hinzu kommt, dass auch keine Anleitung verfügbar ist, wie bei der umweltbezogenen Risikobewertung von Biozidprodukten gleichzeitige Expositionen der Umwelt durch einen Wirkstoff zu berücksichtigen sind, die aus der Verwendung in verschiedenen Anwendungen und/oder in verschiedenen Produkten entstehen.

Mit der Risikobewertung multipler simultaner Umweltexpositionen sind verschiedene rechtliche Fragen verbunden. Sie sind im Rahmen der vorliegenden rechtlichen Analyse angesprochen worden. Die Ergebnisse dieser Analyse sind anhand von Fallstudien im zweiten Teil des Berichts anschaulich diskutiert.

Download:

<https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/aggregated-environmental-exposure-assessment-risk>



## Unsere neuen Mitglieder

Neuaufnahmen in die Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie vom 22.11.2016 - 06.02.2017

Böhler, Hendrik  
FG-Eintritt: 30.01.2017

Deggelmann, Manuel  
FG-Eintritt: 25.11.2016

Hoffmann, Thomas (Dipl. Chem.)  
FG-Eintritt: 04.01.2017

Dr. Hüffer, Thorsten  
FG-Eintritt: 01.02.2017

Jacobs, Jan  
FG-Eintritt: 15.12.2016

Jäger, Franz  
FG-Eintritt: 19.12.2016

Nasufovska, Atida  
FG-Eintritt: 30.11.2016

Nowotny, Manuel  
FG-Eintritt: 30.11.2016

Polat, Saide  
FG-Eintritt: 24.11.2016

Raufeisen, Sascha  
FG-Eintritt: 30.11.2016

Relling, Alexander  
FG-Eintritt: 16.01.2017

Dr. Rhiem, Stefan  
FG-Eintritt: 04.01.2017

## Geburtstage

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

### Geburtstagsliste April bis Juni 2017

#### 60 Jährige

Prof. Dr. Peter Wiesen, Geburtstag: 17.04.1957

Ralf Babatz, Geburtstag: 25.04.1957

Dr. Hans Peter Ewinger, Geburtstag: 16.05.1957

Dr. Imke Jensen, Geburtstag: 17.05.1957

Dr. Roland Wittmann, Geburtstag: 17.05.1957

Dr. Frank Beise, Geburtstag: 22.05.1957

Dr. Michael Schell, Geburtstag: 11.06.1957

#### 65 Jährige

Dr. Burkhard Schulz, Geburtstag: 18.05.1952

Dr. Udo Noack, Geburtstag: 29.05.1952

Dr. Wolfgang Schwack, Geburtstag: 05.06.1952

#### 70 Jährige

Prof. Dr. Ing. Heinz Köser, Geburtstag: 19.04.1947

Dr. Johann Vasgyura, Geburtstag: 28.04.1947

Prof. Dr.med. Albert Rettenmeier, Geburtstag: 19.06.1947

#### 80 Jährige

Prof. Dr. Karlheinz Ballschmiter, Geburtstag: 20.05.1937