

Corner: GDCh-FG Umweltchemie und Ökotoxikologie

Erfassung von Umwandlungsprodukten in der Chemikalienbewertung

Diskussionsbeitrag

Martin Scheringer*, Zürich (scheringer@chem.ethz.ch), Andreas Schäffer, Aachen (andreas.schaeffer@bio5.rwth-aachen.de), Beatrice Schwarz-Schulz, Dessau (beatrice.schwarz-schulz@uba.de)



* **Korrespondenzadresse:** PD Dr. Martin Scheringer, Institut für Chemie- und Bioingenieurwissenschaften, ETH Zürich, HCI G 127, Wolfgang-Pauli-Str. 10, CH-8093 Zürich; Tel.: +41 1 6323062, FAX: +41 1 6321189

DOI: <http://dx.doi.org/10.1065/uwsf2007.10.214>

Viele organische Substanzen werden in der Umwelt zu Umwandlungsprodukten abgebaut, von denen manche in relevanten Konzentrationen auftreten, bevor weiterer Abbau zur Mineralisierung führt (Boxall et al. 2004). Beispiele dafür sind Nonylphenol aus Nonylphenolpolyethoxylaten oder Perfluoroktansäure aus 8:2-Fluortelomer-Alkohol. Einige dieser Umwandlungsprodukte sind ähnlich oder sogar stärker toxisch und/oder persistenter als die Ausgangsverbindung. So akkumuliert das mikrobiell gebildete, methylierte Derivat von Triclosan in Organismen, während die Ausgangsverbindung rasch abgebaut wird. Das derzeitige *Technical Guidance Document* der EU empfiehlt zwar, dass Umwandlungsprodukte erfasst und ggf. in die Risikobewertung einbezogen werden (EU 2003, S. 13); in der Praxis der Risikobewertung war dies bisher jedoch nur in Ausnahmefällen möglich, da Daten zu Umwandlungsprodukten kaum verfügbar sind. (Dies bezieht sich auf Industriechemikalien; bei Pestiziden ist die Lage anders, denn es müssen für die Zulassung auch alle relevanten Umwandlungsprodukte erfasst und getestet werden.)

Diese Situation hat sich in letzter Zeit geändert, da zunehmend Methoden zur Erfassung und Bewertung von Umwandlungsprodukten entwickelt werden. Der Einfluss von Umwandlungsprodukten kann bestimmt werden für Persistenz (Fenner et al. 2000), Ferntransportpotential (Quartier u. Müller-Herold 2001, Schenker et al. 2007), Eintrag in Oberflächengewässer (Gasser et al. 2007) und Beitrag zur toxischen Wirkung (Fenner et al. 2002). Auch die mit der Erfassung von Umwandlungsprodukten verbundenen Unsicherheiten sind charakterisiert worden (Fenner et al. 2003, Gasser et al. 2007). Die Identität möglicher Umwandlungsprodukte kann zunehmend besser mit Hilfe von Expertensystemen wie Catabol (Jaworska et al. 2002), Metabol, Multicase, Derek oder der *University of Minnesota Biocatalysis/Biodegradation Database* (Hou et al. 2004) bestimmt werden. Schließlich wird unter REACH für Substanzen mit einer Produktionsmenge von über 100 t/a verlangt, dass relevante Umwandlungsprodukte identifiziert werden. Die Entwicklung von Leitfäden zur Identifizierung und Bewertung von Umwandlungsprodukten ist Bestandteil der *REACH Implementation Projects* (RIPs), insbesondere für die Bewertung von potentiellen PBT- und vPvB-Stoffen (RIP 2007).

Aufgrund dieser Fortschritte auf methodischer Seite lässt sich nun im Rahmen der Stoffbewertung ein Arbeitsprogramm formulieren, das die systematische Erfassung und Bewertung von Umwandlungsprodukten von Industriechemikalien zum Ziel hat. Damit würde eine wesentliche Lücke zumindest im Ansatz gefüllt, die Risikobewertung würde vollständiger und aussagekräftiger, und es würden umweltchemisch interessante Erkenntnisse über die Natur und das Verhalten von Umwandlungsprodukten gewonnen.

Konkret würde dieses Arbeitsprogramm die folgenden Schritte umfassen:

- Identifizierung möglicher Umwandlungsprodukte mit Hilfe von Expertensystemen
- Charakterisierung der Umwandlungsprodukte hinsichtlich physikalisch-chemischer Eigenschaften, weiterer Abbaureaktionen (Halbwertszeiten) und Basistoxizität, zum großen Teil mit Hilfe von QSAR-Methoden
- Bestimmung der in der Umwelt zu erwartenden Mengen und Konzentrationen mit Hilfe von Multikompartiment-Modellen
- Bestimmung des Beitrags der Umwandlungsprodukte zu Persistenz und Ferntransport-Potential, zur Basistoxizität sowie Identifizierung spezifischer Wirkmechanismen

Wenn dieses Programm systematisch verfolgt wird, ließe sich mittelfristig feststellen, für welche und wie viele Ausgangsverbindungen die Umwandlungsprodukte einen relevanten Beitrag zur Umweltbelastung ausmachen.

Literatur

- Boxall ABA, Sinclair CJ, Fenner K, Kolpin D, Maud SJ (2004): When synthetic chemicals degrade in the environment. *Environ Sci Technol* 38, 368A–375A
- EU (2003): Technical Guidance Document on Risk Assessment in Support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for New Notified Substances, Commission Regulation (EC) No. 1488/94 on Risk Assessment for Existing Substances, Directive 98/8/EC of the European Parliament and the Council concerning the Placing of Biocidal Products on the Market. Joint Research Institute, Ispra
- Fenner K, Scheringer M, Hungerbühler K (2000): Persistence of parent compounds and transformation products in a level IV multimedia model. *Environ Sci Technol* 34, 3809–3817
- Fenner K, Kooijman C, Scheringer M, Hungerbühler K (2002): Including transformation products into the risk assessment for chemicals: The case of nonylphenol ethoxylate usage in Switzerland. *Environ Sci Technol* 36, 1147–1154
- Fenner K, Scheringer M, Hungerbühler K (2003): Joint persistence of transformation products in chemicals assessment: Case studies and uncertainty analysis. *Risk Analysis* 23, 35–53
- Gasser L, Fenner K, Scheringer M (2007): Indicators for the exposure assessment of transformation products of organic micropollutants. *Environ Sci Technol* 40, 2445–2451
- Hou BK, Ellis LBM, Wackett LP (2004): Encoding microbial metabolic logic: Predicting biodegradation. *J Ind Microbiol Biotechnol* 31, 261–272
- Jaworska J, Dimitrov S, Nikolova N, Mekenyan O (2002): Probabilistic assessment of biodegradability based on metabolic pathways: Catabol system. *SAR QSAR Environ Res* 13, 307–323
- Quartier R, Müller-Herold U (2001): On secondary spatial ranges of transformation products in the environment. *Ecol Modell* 135, 187–198
- RIP (2007): Reference preliminary Technical Guidance Document – REACH Implementation Projects 3.2 & 3.3
- Schenker U, Scheringer M, Hungerbühler K (2007): Including degradation products of persistent organic pollutants in a global multi-media box model. *Env Sci Pollut Res* 14, 145–152