

Umwandlungsprozesse von Chemikalien – lindern oder erhöhen sie das Umweltrisiko?

Kristin Schirmer

Chemikalien – unsere täglichen Begleiter



Diclofenac, ein
Schmerzmittel



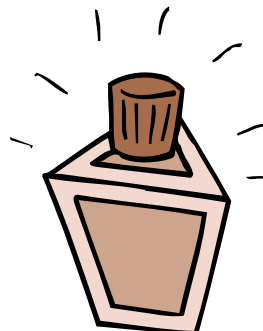
Das ist Urs.



Diuron,
ein Herbizid



Triclosan, ein
Bakterienhemmer



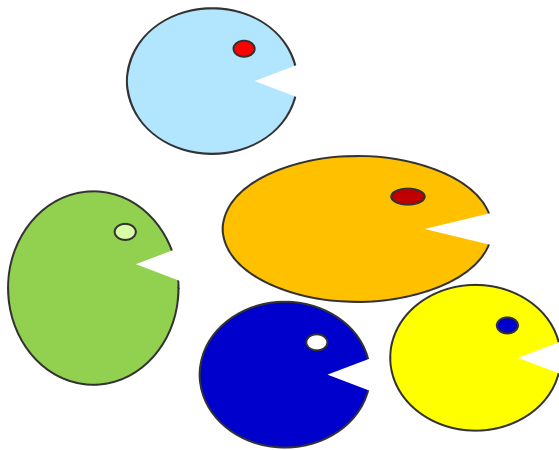
Galaxolid,
ein Duftstoff



Sucralose, ein Süsstoff

Umwandlungsprozesse

Biotische Umwandlung



Abiotische Umwandlung



Abiotische Umwandlungsprozesse im Alltag



Zeichnung von Friedrich Christoph Müller Bleicherei in Wuppertal



Transformationsprodukte sind ... wie Kinder

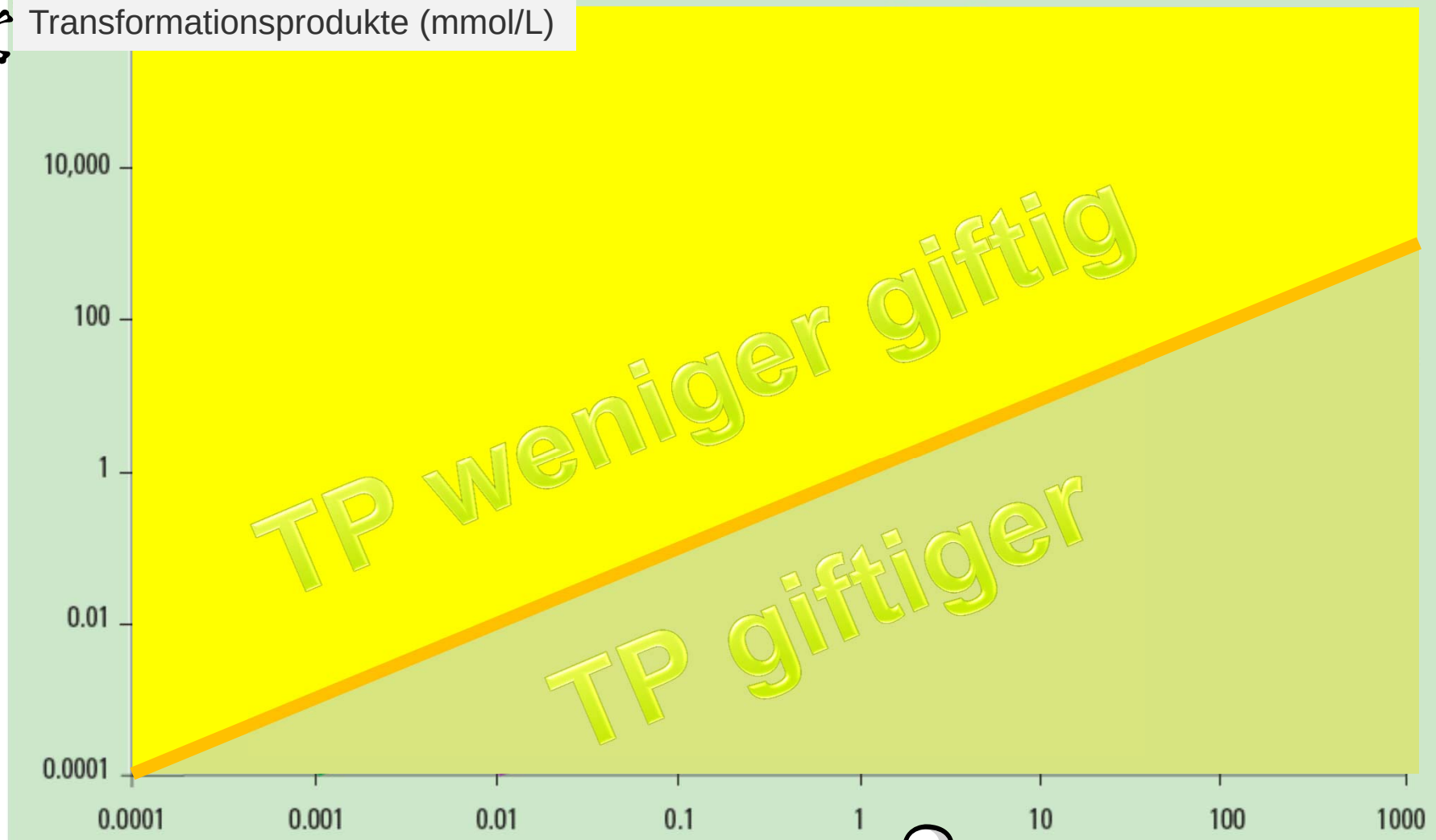
- ➡ Sie stammen von Ihren Eltern ab.
- ➡ Sie ähneln ihren Eltern oder auch nicht.
- ➡ Sie sind vielleicht langlebiger.
- ➡ Sie sind meist beweglicher.
- ➡ Sie sind oft weniger «giftig».



«Giftigkeit» am Beispiel von Pestiziden und Bioziden



Transformationsprodukte (mmol/L)

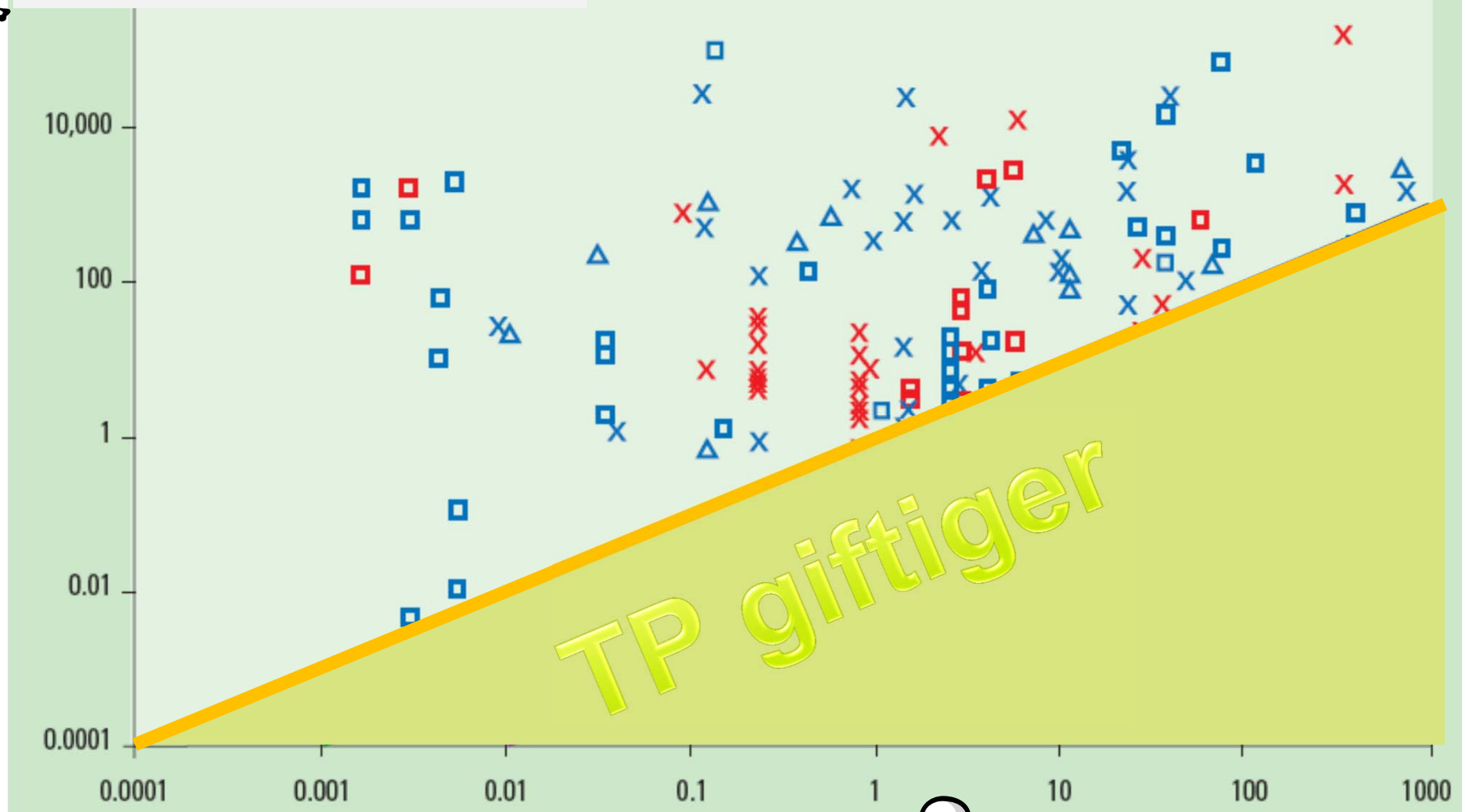


Ausgangssubstanz (mmol/L)

«Giftigkeit» am Beispiel von Pestiziden und Bioziden



Transformationsprodukte (mmol/L)

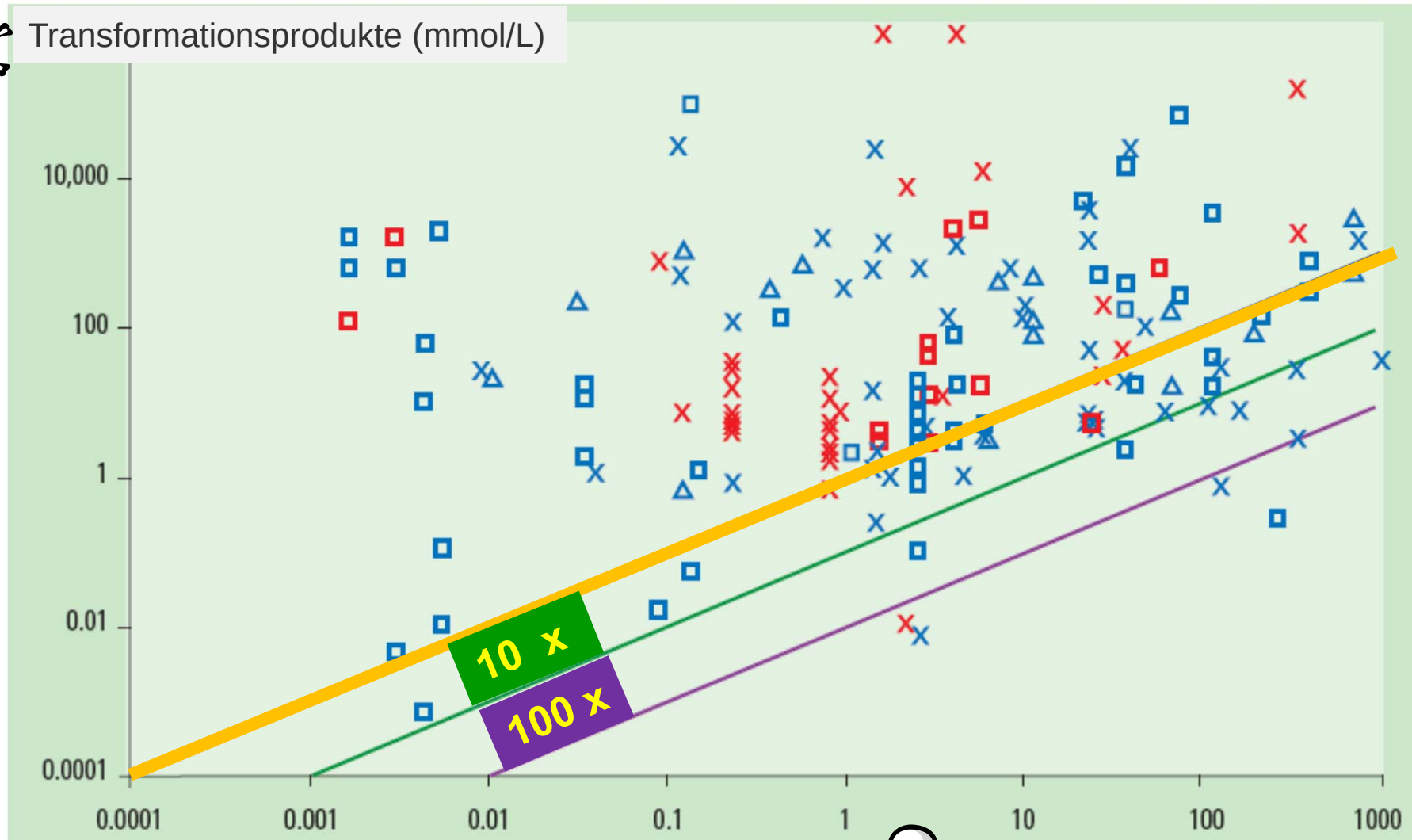


Ausgangssubstanz (mmol/L)

«Giftigkeit» am Beispiel von Pestiziden und Bioziden



Transformationsprodukte (mmol/L)



Ausgangssubstanz (mmol/L)

Wie können wir das Risiko bewerten?

Risiko =

Exposition

x

Effekt



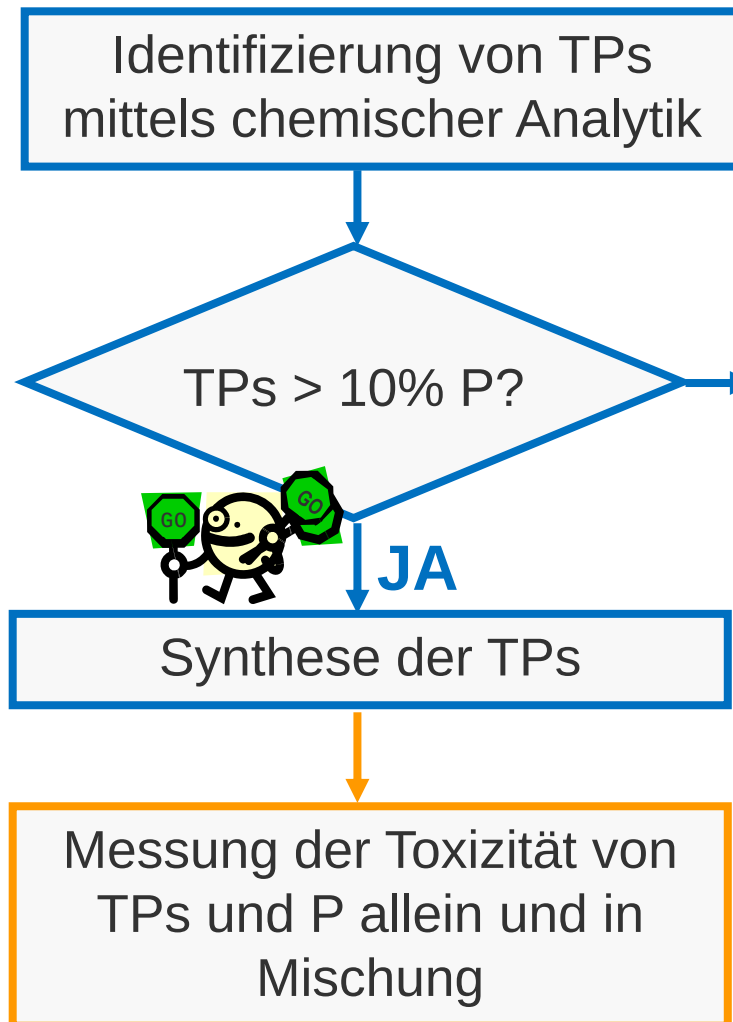
- ☞ Welche TP_s werden gebildet und sind sie in der Umwelt nachweisbar?



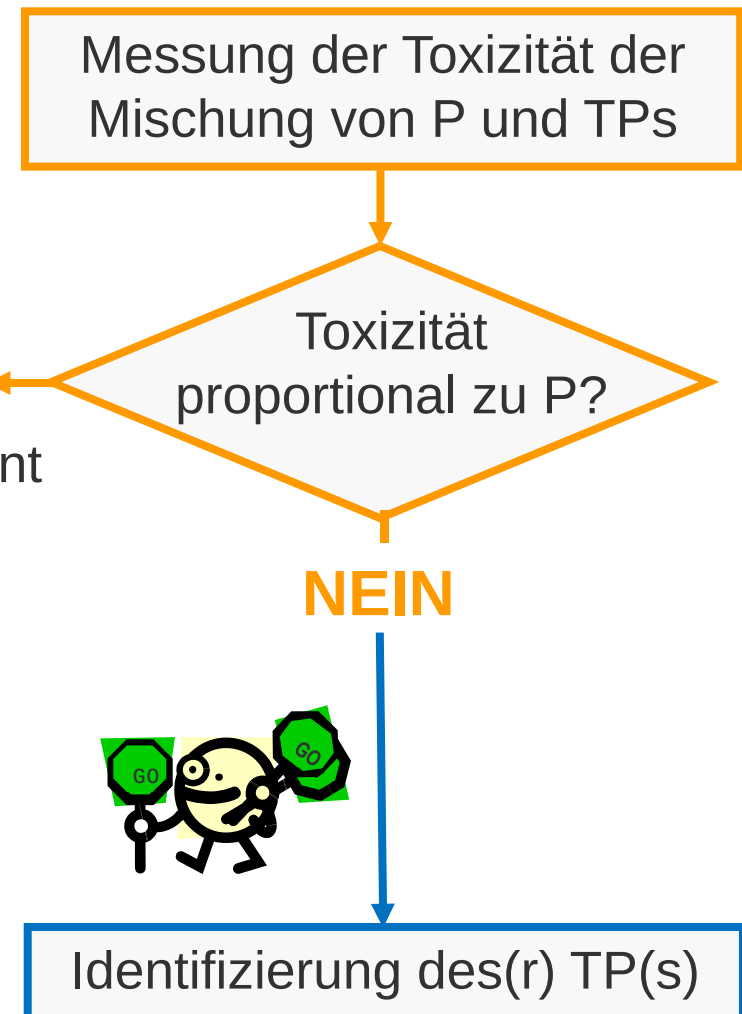
- ☞ Wie toxisch sind TP_s im Vergleich zur Ausgangssubstanz (P)?

Expositions- und Effektorientierter Ansatz

Exposition



Effekt

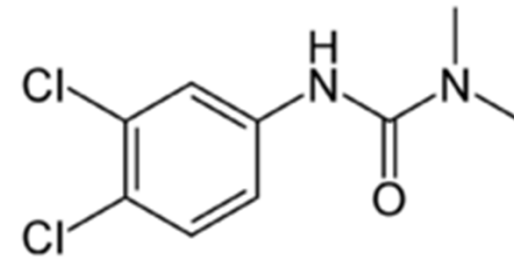


Effektorientierter Ansatz

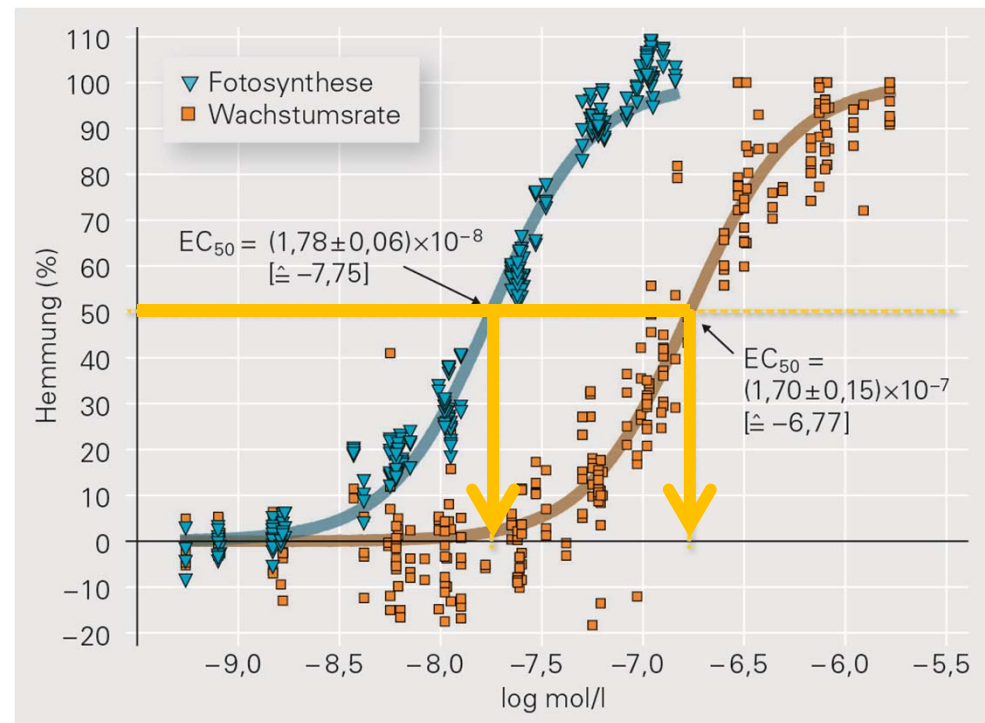
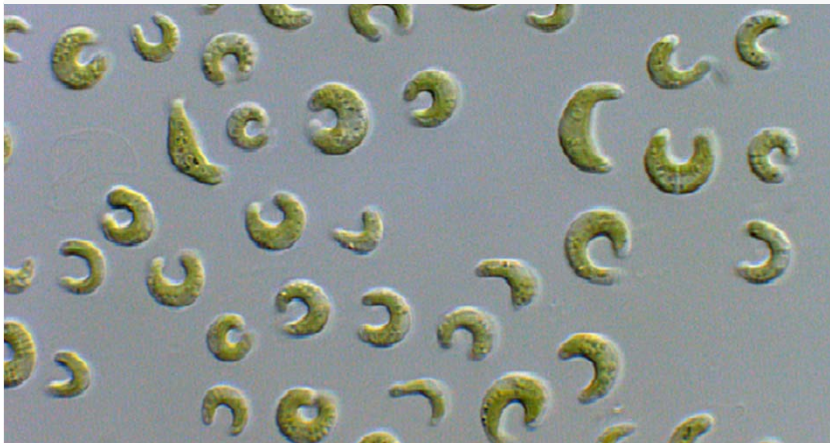
Beispiel: Transformation von Diuron

3-(3,4-Dichlorphenyl)-1,1-dimethylharnstoff

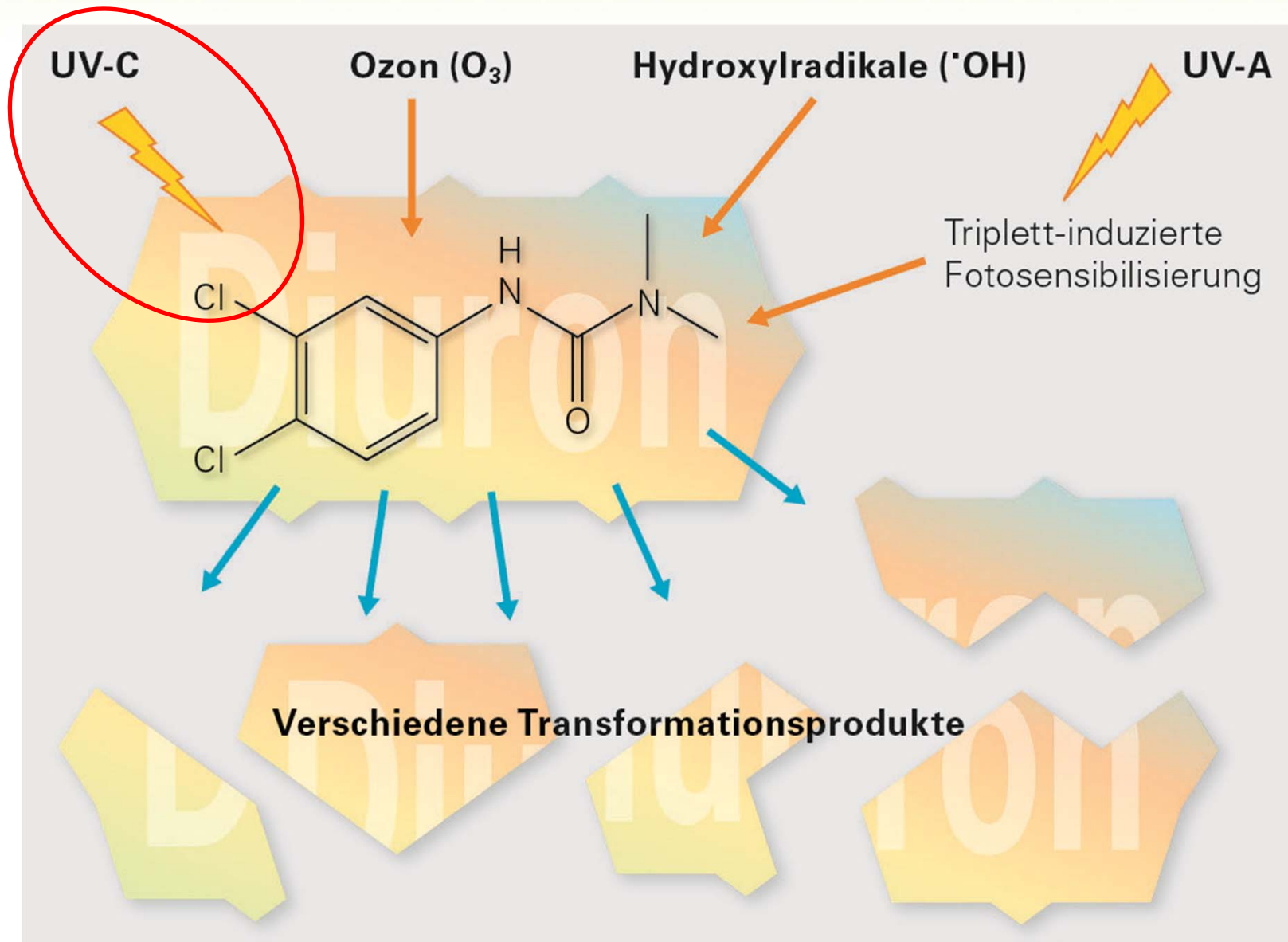
- ☞ Phenylharnstoff-Derivat
- ☞ als Herbizid verwendet
- ☞ hemmt Fotosynthese & Wachstum



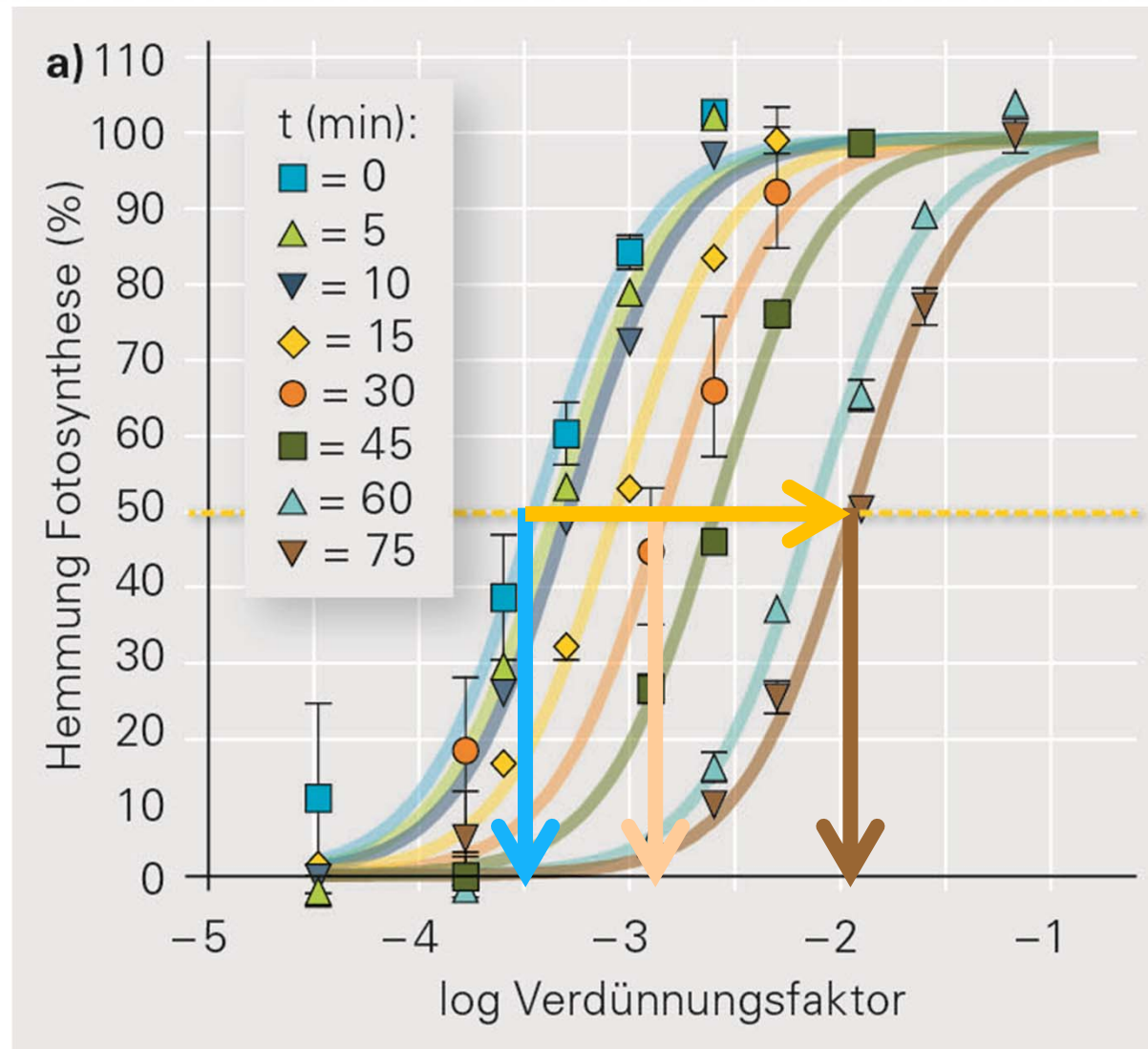
z.B. in der Alge *Pseudokirchneriella subcapitata*



Abiotische Transformation von Diuron



Konzentrations-Effektbeziehung während Transformation



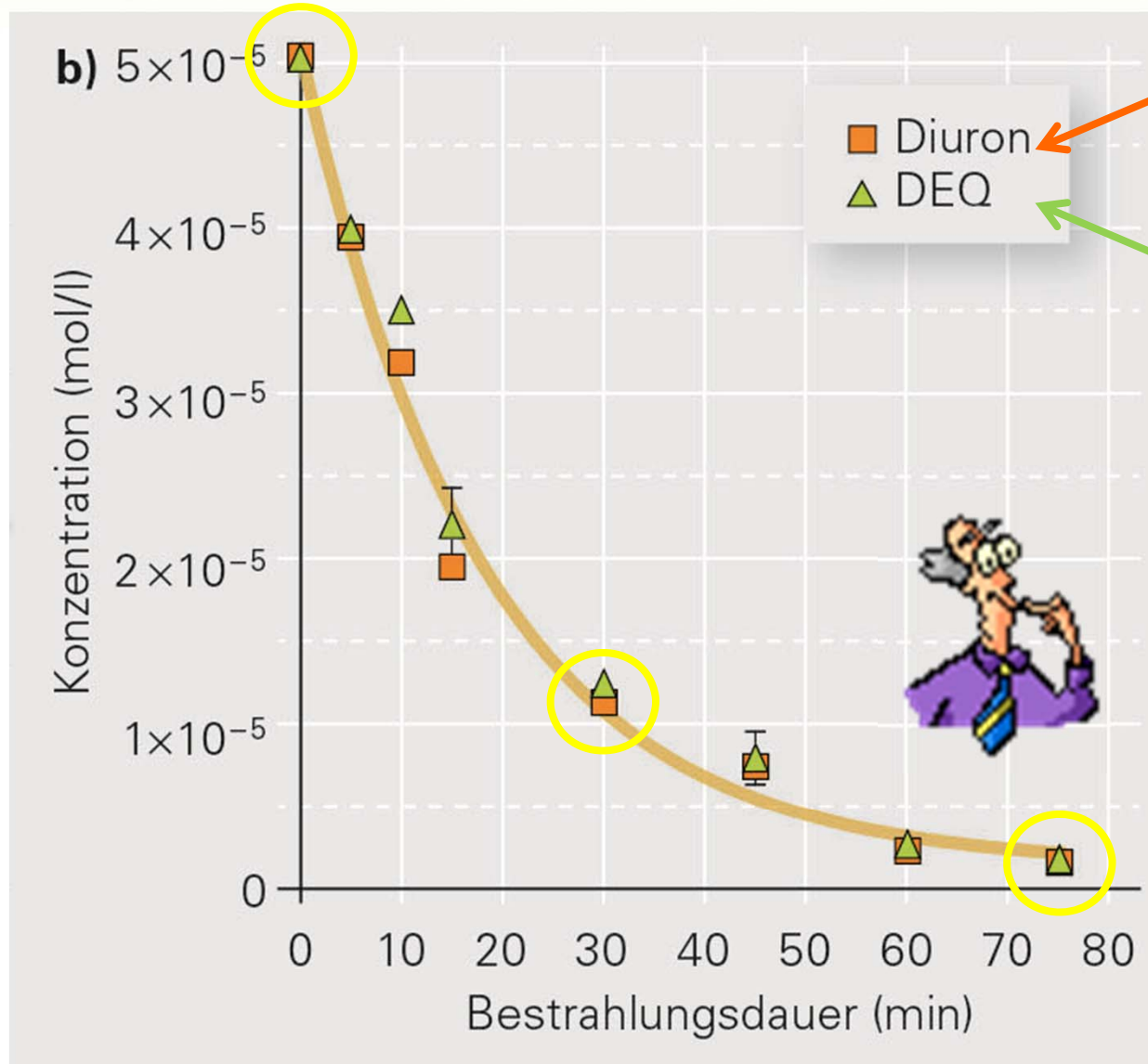
Was?	EC ₅₀ Wert	Einheit
TP (t=0)	3.5*10 ⁻⁴	---
TP (t=30)	1.6*10 ⁻³	---
TP (t=75)	1.1*10 ⁻²	---

Welcher
Diuronkonzentration
entspricht dieser Effekt?

$$DEQ = EC_{50(\text{Diuron})} / EC_{50(t)}$$

Was?	DEQ (Diuron Äquivalent)	Einheit
TP (t=0)	5.0*10 ⁻⁵	mol/l
TP (t=30)	1.1*10 ⁻⁵	mol/l
TP (t=75)	0.2*10 ⁻⁵	mol/l

Diuron-Äquivalente während Transformation

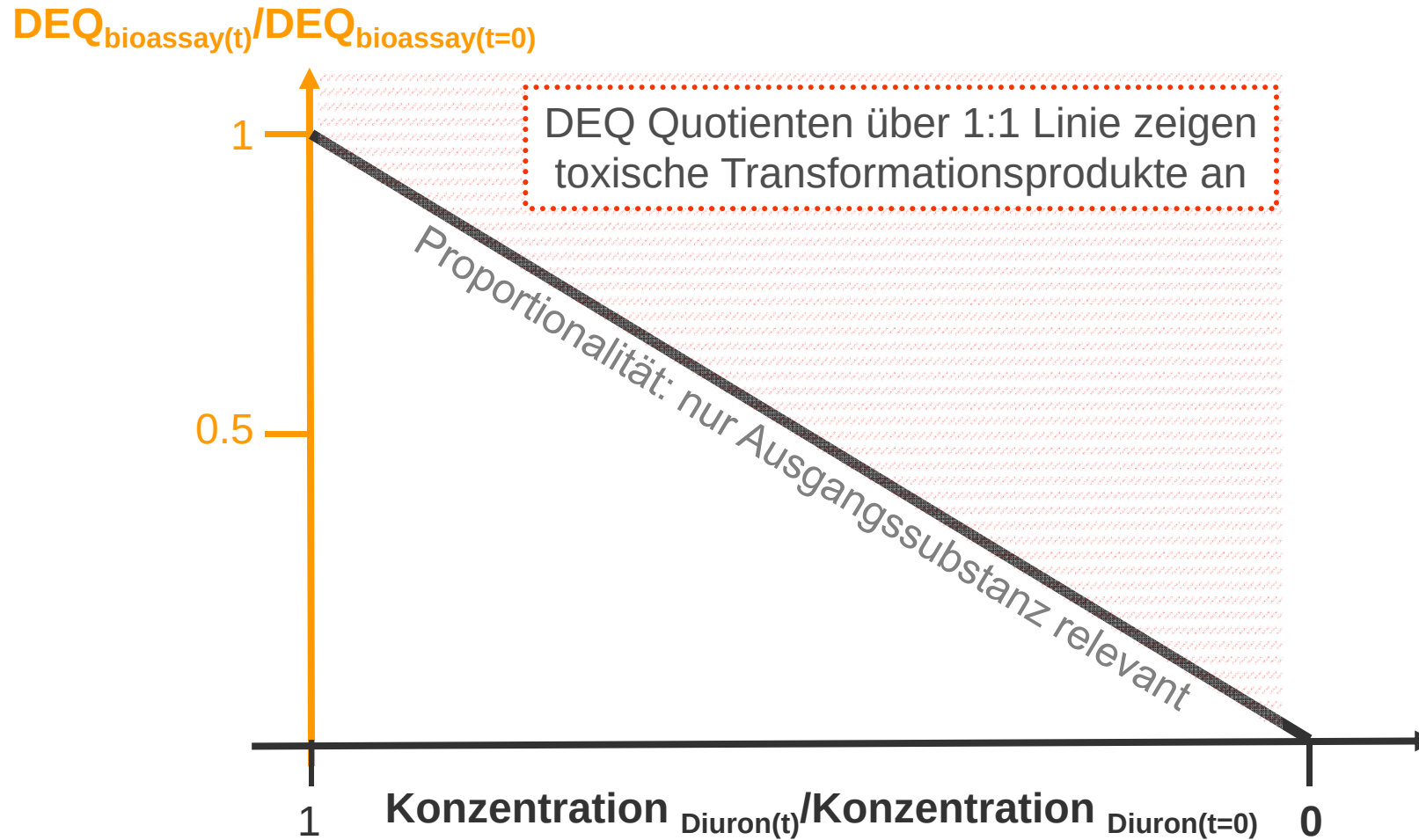


Wieviel Diuron ist noch vorhanden?

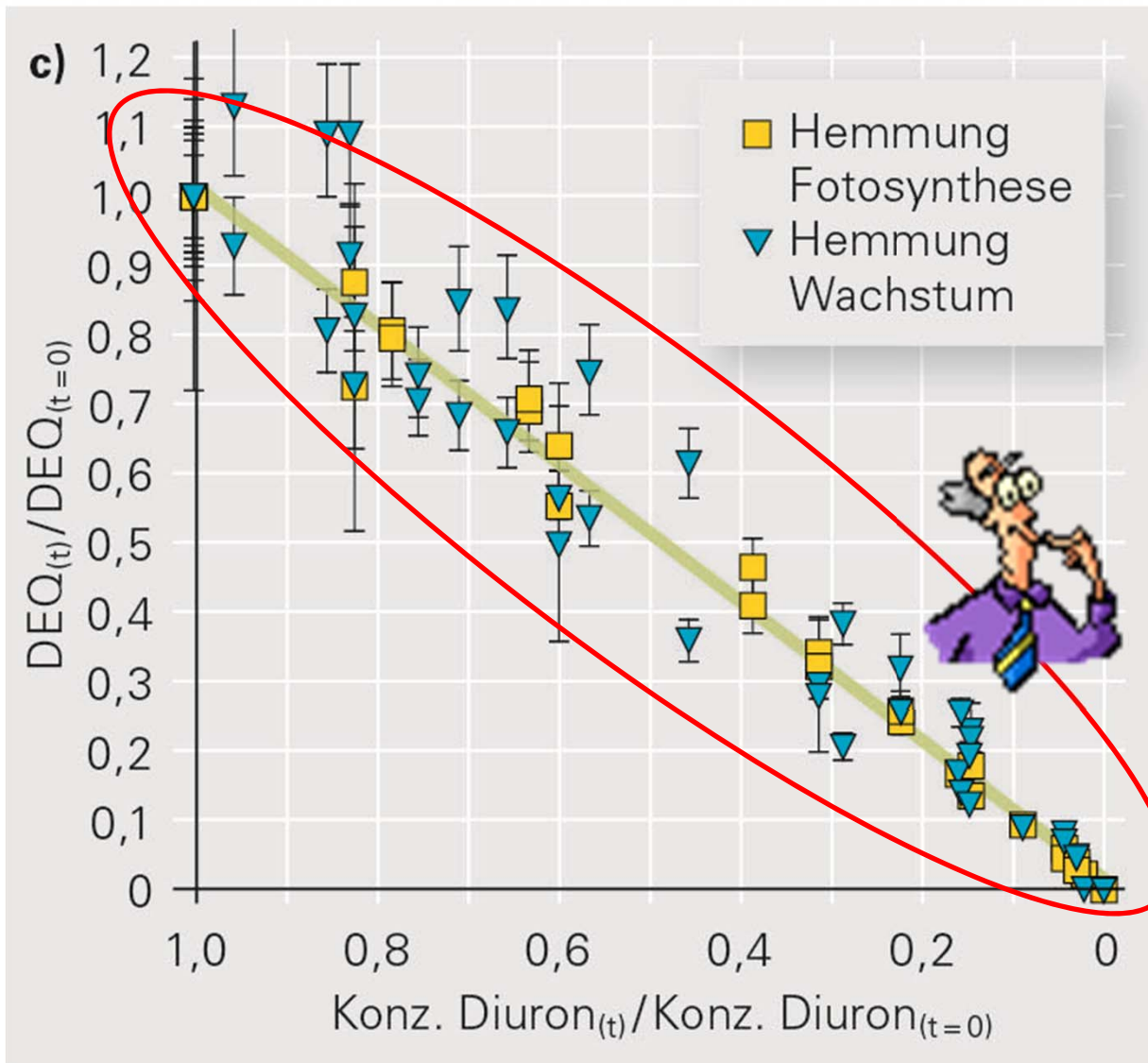
Welcher Diuronkonzentration entspricht der biologische Effekt?

Dominanz der Ausgangssubstanz

Toxizität proportional zur Ausgangssubstanz?

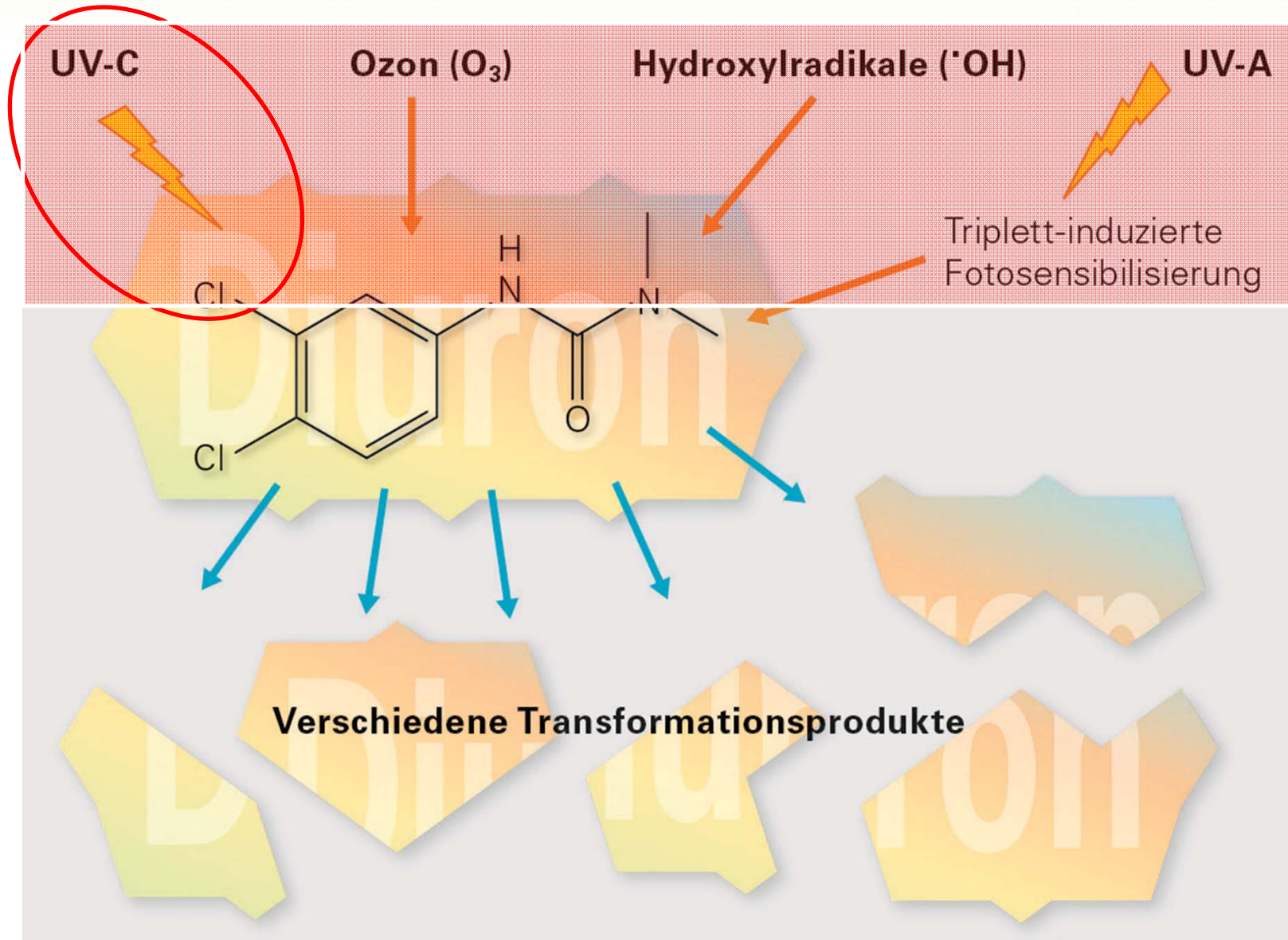


Toxizität proportional zur Ausgangssubstanz?

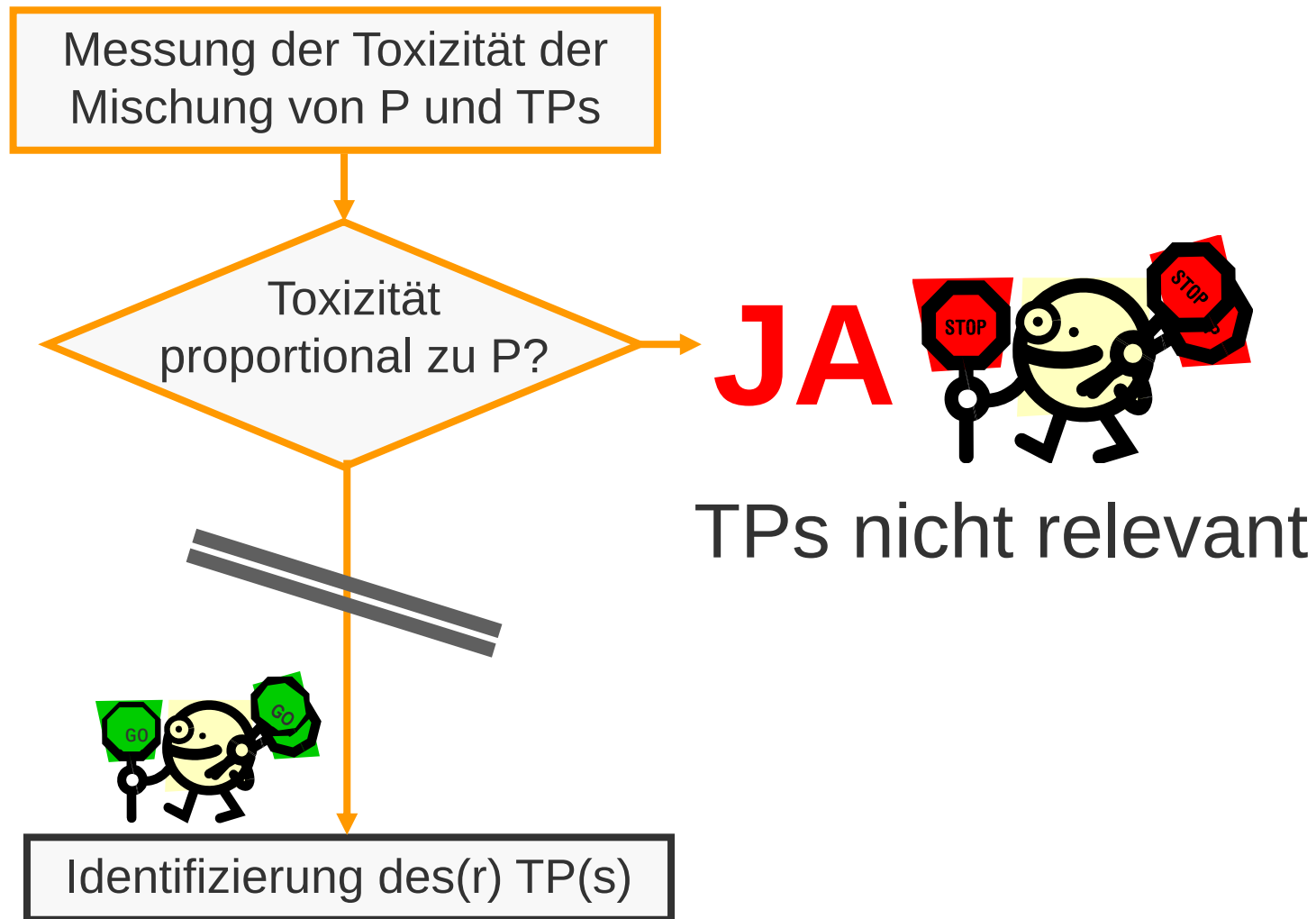


Dominanz der Ausgangssubstanz

Abiotische Transformation von Diuron

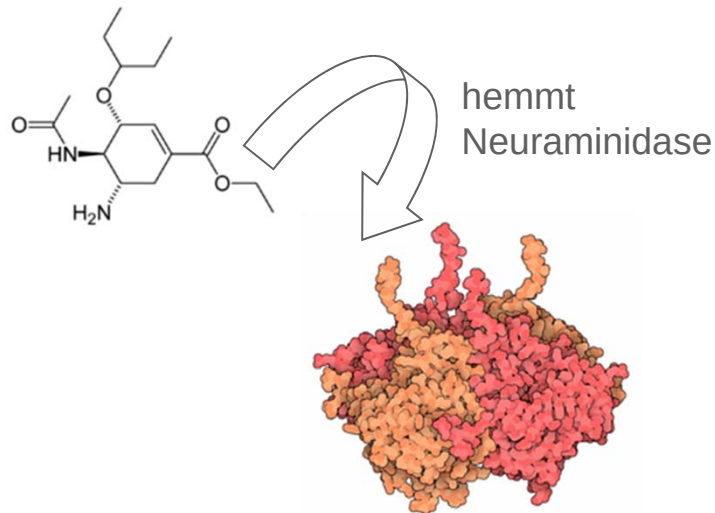


Effektorientierter Ansatz für Diuron



Laufende Arbeiten: (photo)oxidative Transformation

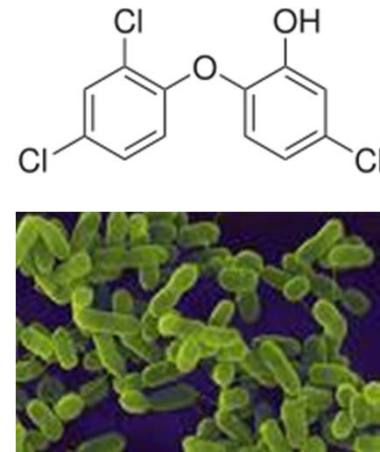
Oseltamivir (Anti-viral)



- transiente Bildung von Produkt(en), welche(s) stärker enzymhemmend wirken als Oseltamivir

Mestankova H, et al. eingereicht.

Triclosan (Bakterizid)



- Triclosan entscheidend für bakterizide Wirkung
- Aber: neue spezifische Wirkung durch direkte Phototransformation und Ozonung (Dioxin-ähnlich)

Mestankova H, et al. In Arbeit.

Schlussfolgerungen

➡ TPs können zum Risiko der Ausgangsstoffe beitragen.

- Wenn sie zu einem hohen Anteil vorkommen
- Wenn sie ein hohes toxisches Potenzial haben

➡ Stufenweise Analyse des Risikos erscheint sinnvoll.

- Selektionsverfahren für Fokussierung und Priorisierung
- Enge Verknüpfung von biologischer und chemischer Analytik

