

# Effiziente und transparente ökotoxikologische Risikoanalyse chemischer Stoffe

Jahrestagung 2007

GDCh Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie

Osnabrück, 26.-28. September 2007

Johannes Ranke

UFT Zentrum für Umweltforschung und Umwelttechnologie, Universität Bremen/D

# Hintergrund

Projekte zur Verwirklichung von nachhaltiger Chemie

- Vergleichende Risikoanalyse von Antifouling-Bioziden

# Hintergrund

## Projekte zur Verwirklichung von nachhaltiger Chemie

- Vergleichende Risikoanalyse von Antifouling-Bioziden
- Entwicklung eines neuen und nachhaltigeren organisch-chemischen Grundpraktikums

# Hintergrund

## Projekte zur Verwirklichung von nachhaltiger Chemie

- Vergleichende Risikoanalyse von Antifouling-Bioziden
- Entwicklung eines neuen und nachhaltigeren organisch-chemischen Grundpraktikums
- Molekulares Design von ionischen Flüssigkeiten als nachhaltige alternative Lösemitteln

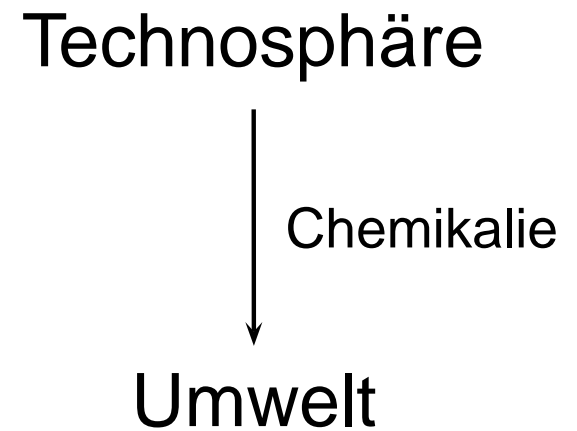
# Fünf Risikoindikatoren

Technosphäre

Umwelt

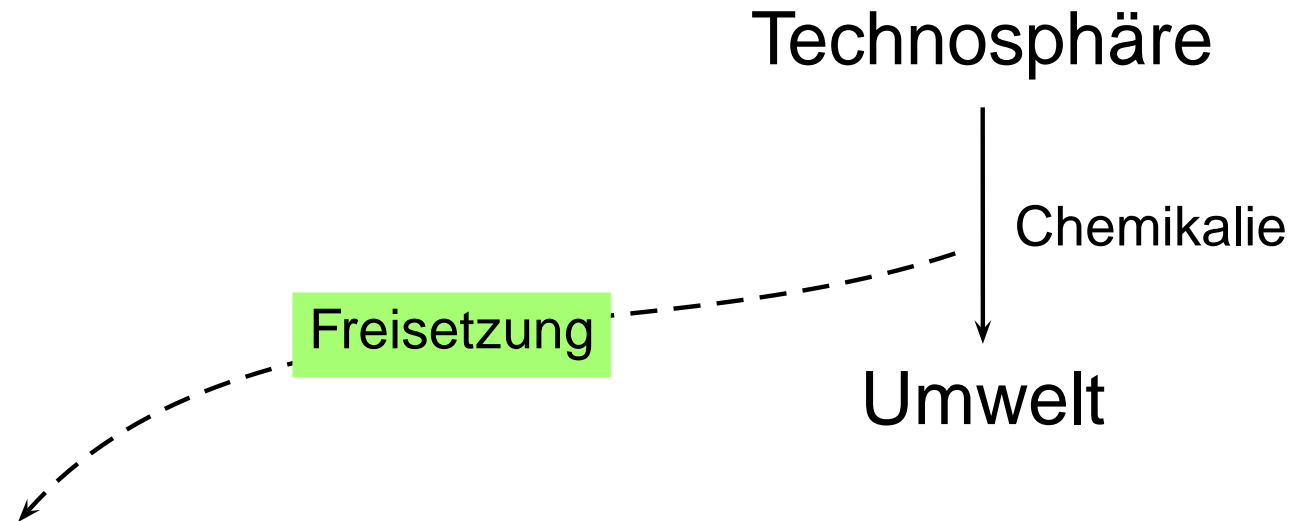
Ranke J (2001) PhD Dissertation  
Ranke et al. (2007) *Chem Rev* **107**, 2183-2206

# Fünf Risikoindikatoren



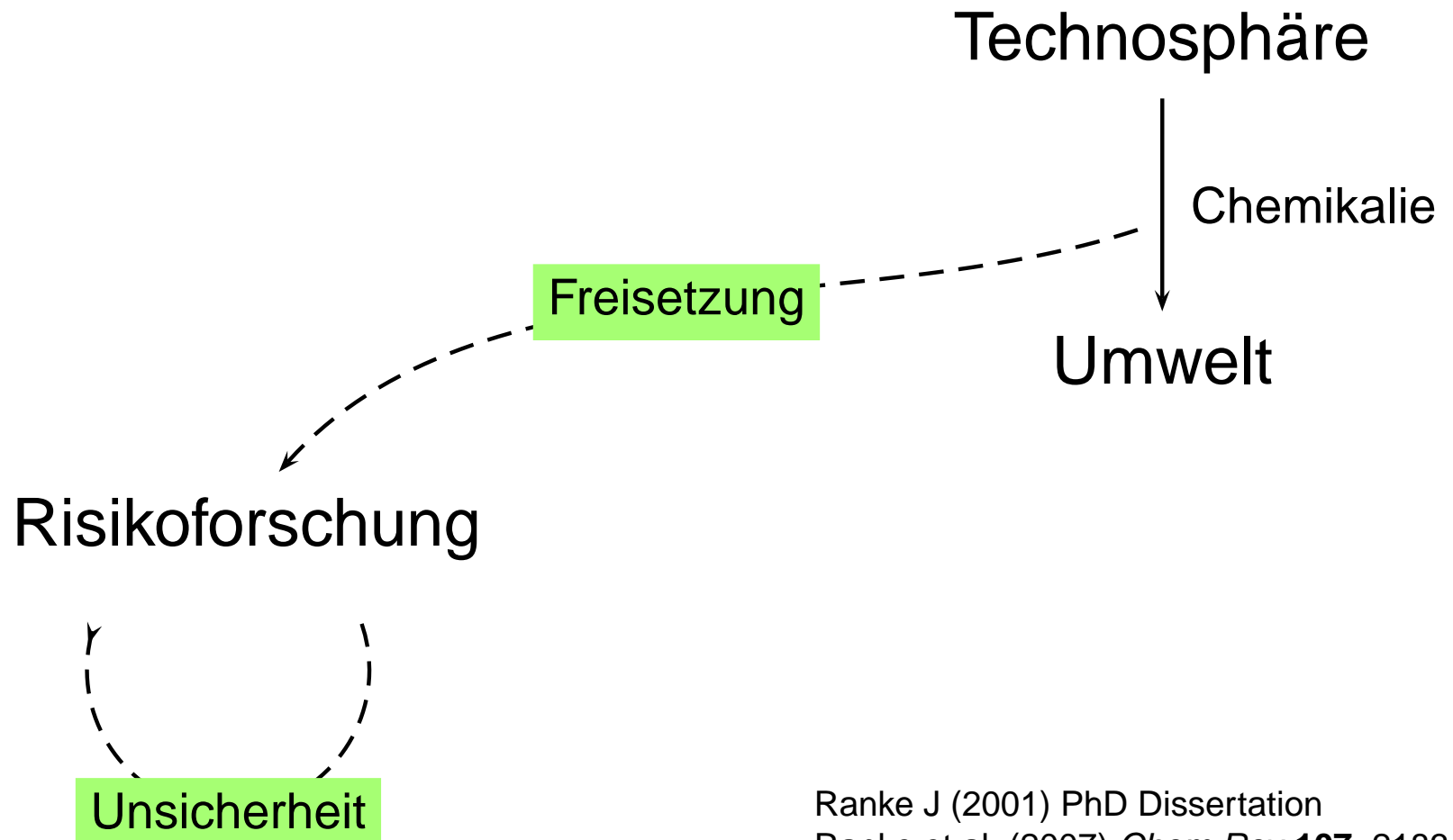
Ranke J (2001) PhD Dissertation  
Ranke et al. (2007) *Chem Rev* **107**, 2183-2206

# Fünf Risikoindikatoren



Ranke J (2001) PhD Dissertation  
Ranke et al. (2007) *Chem Rev* **107**, 2183-2206

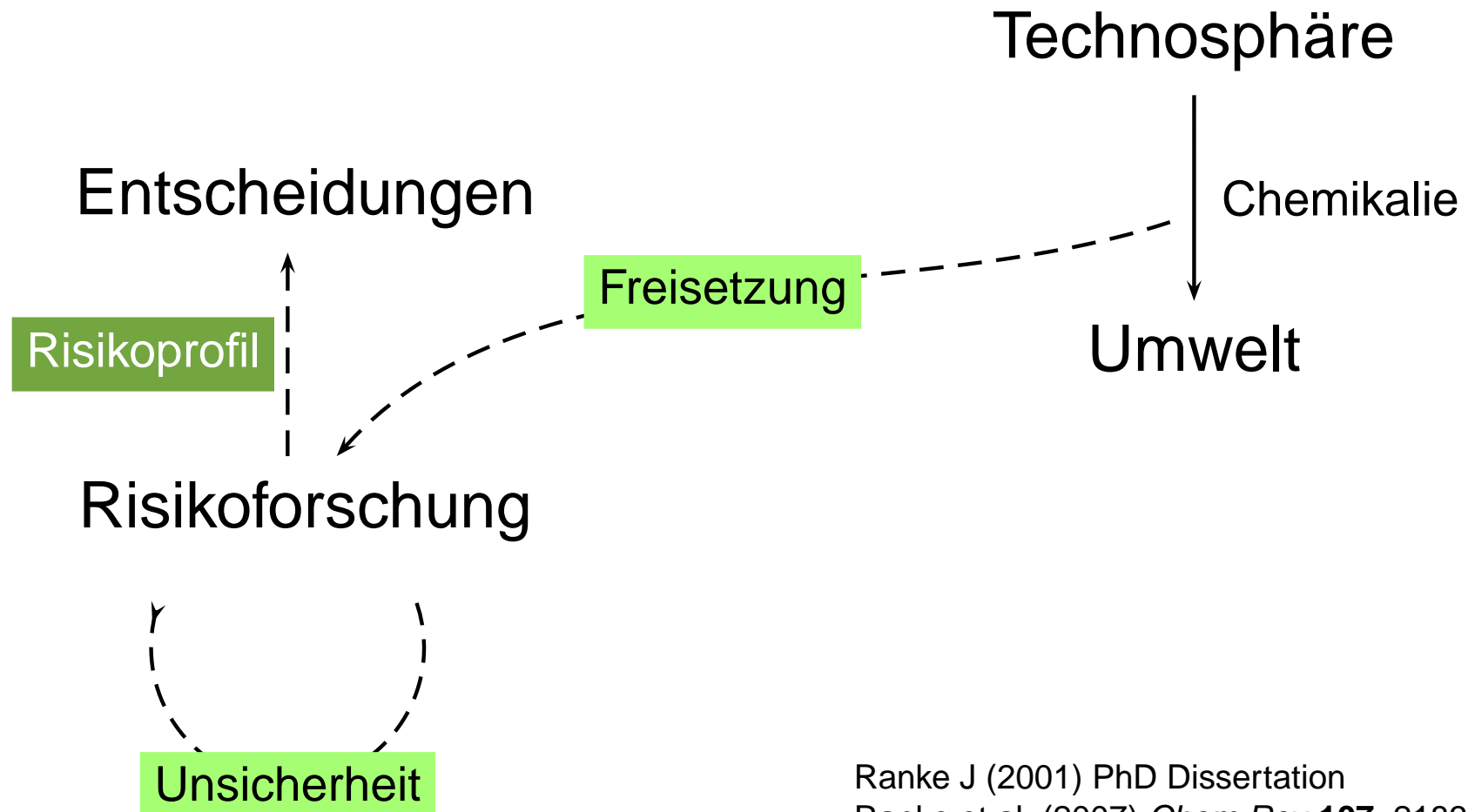
# Fünf Risikoindikatoren



Ranke J (2001) PhD Dissertation  
Ranke et al. (2007) *Chem Rev* **107**, 2183-2206

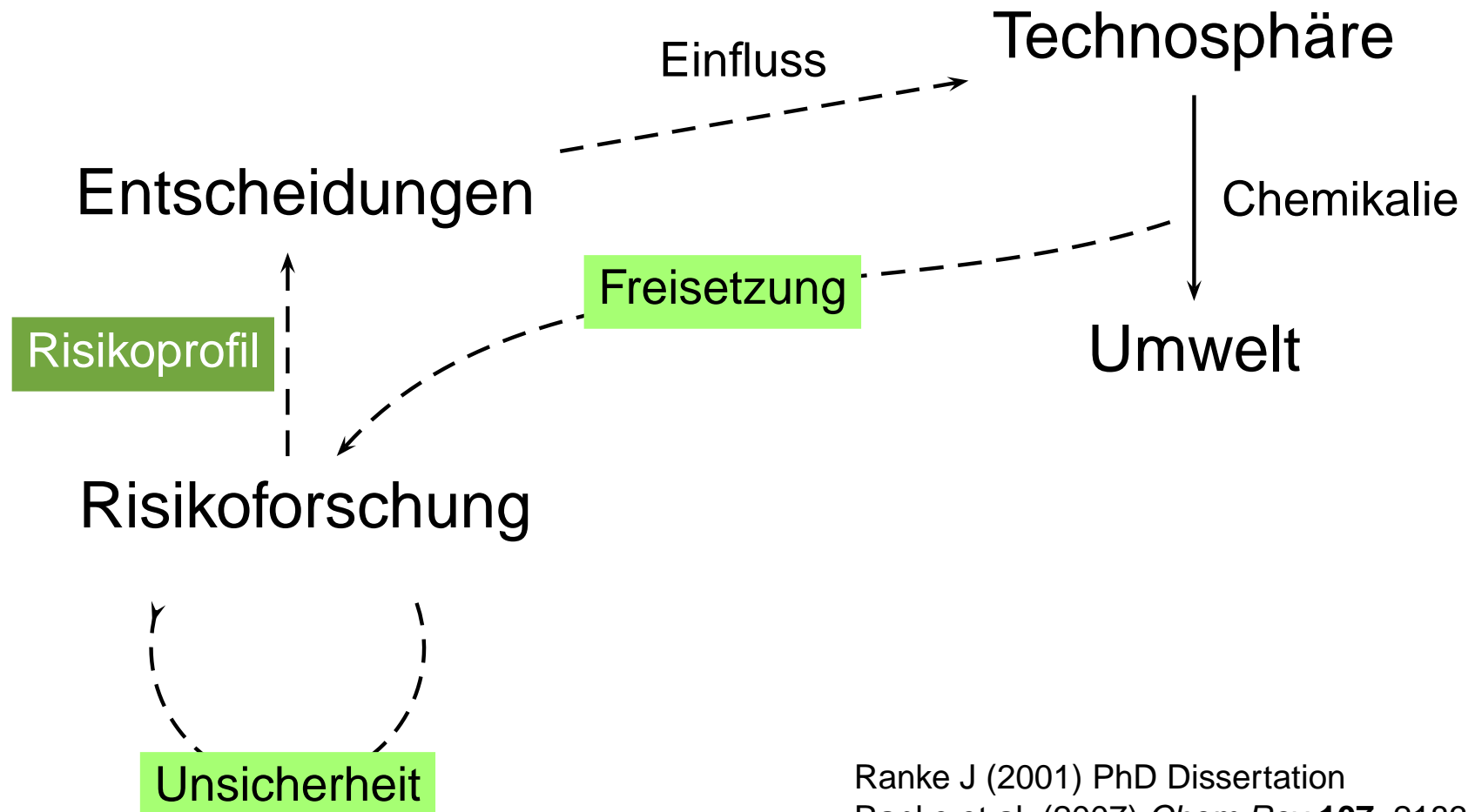


# Fünf Risikoindikatoren



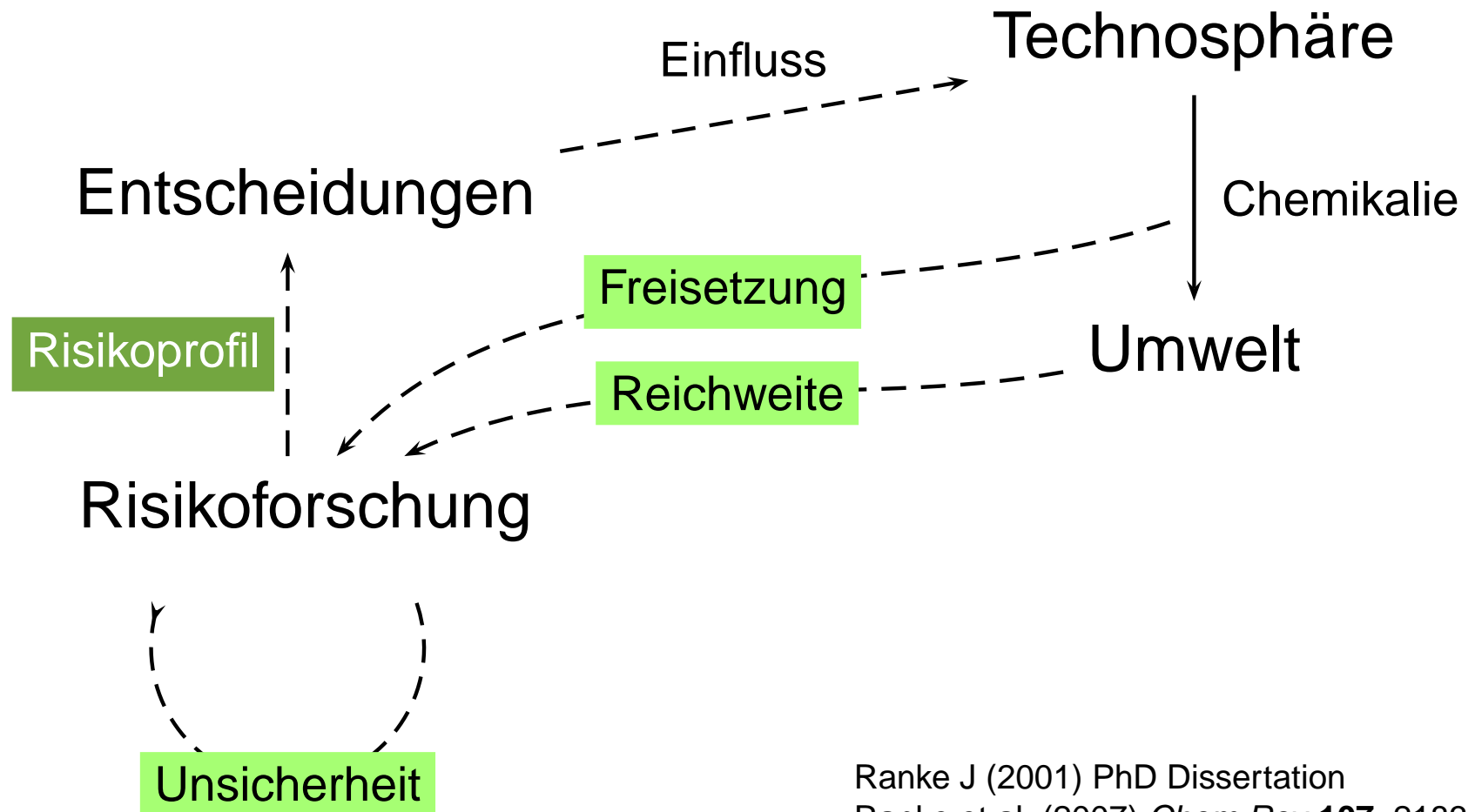
Ranke J (2001) PhD Dissertation  
Ranke et al. (2007) *Chem Rev* **107**, 2183-2206

# Fünf Risikoindikatoren



Ranke J (2001) PhD Dissertation  
Ranke et al. (2007) *Chem Rev* **107**, 2183-2206

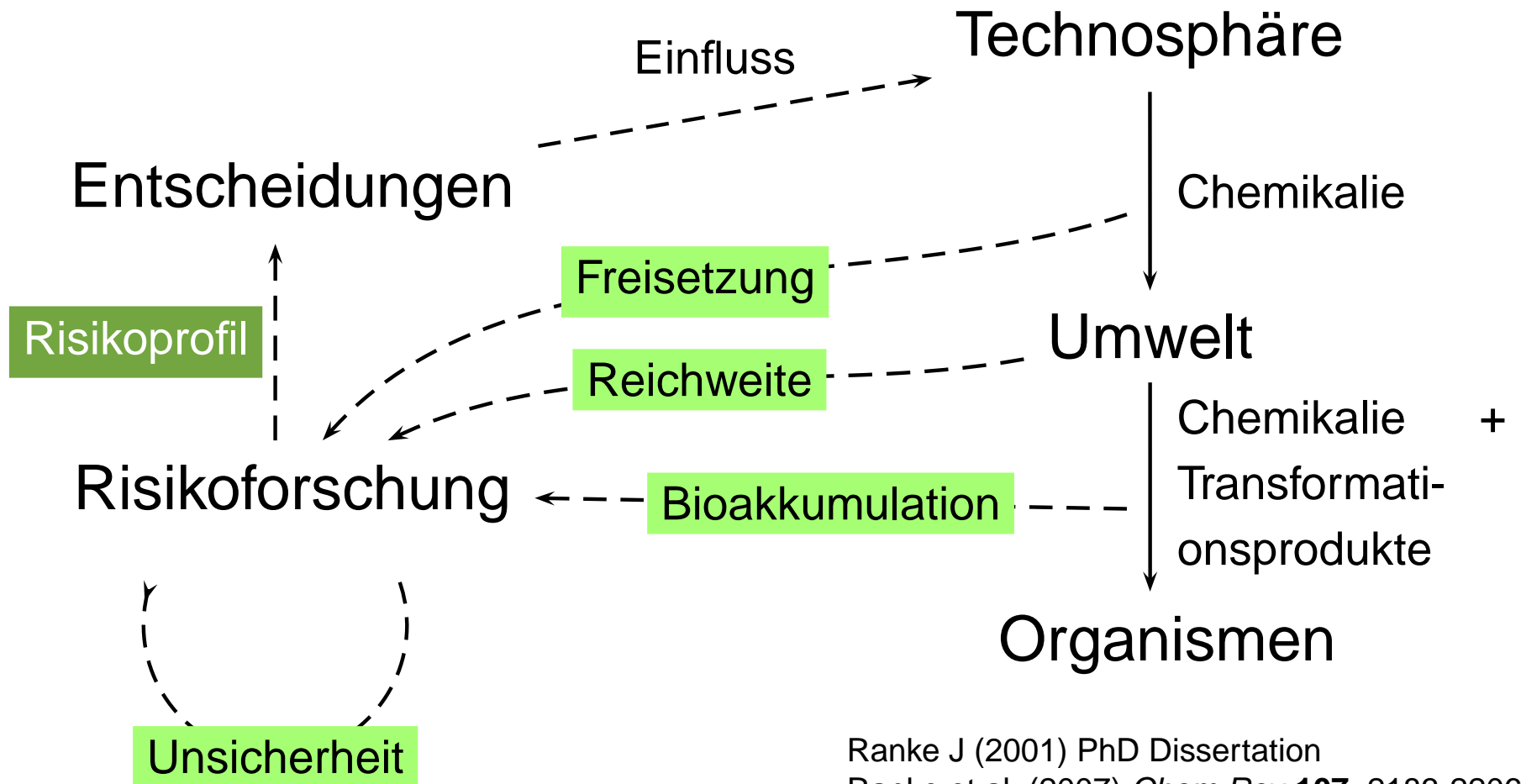
# Fünf Risikoindikatoren



Ranke J (2001) PhD Dissertation  
Ranke et al. (2007) *Chem Rev* **107**, 2183-2206

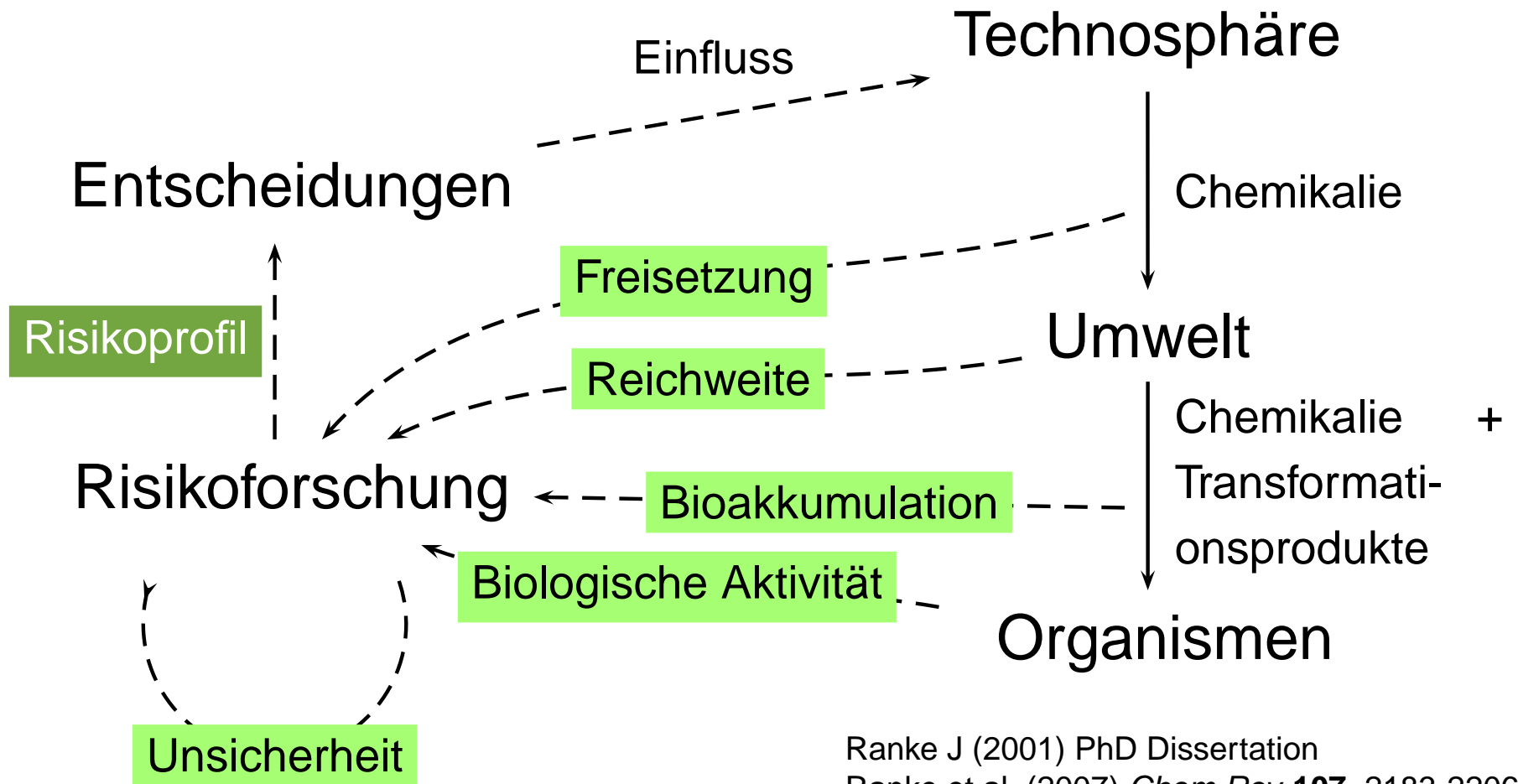


# Fünf Risikoindikatoren



Ranke J (2001) PhD Dissertation  
 Ranke et al. (2007) *Chem Rev* **107**, 2183-2206

# Fünf Risikoindikatoren




Ranke J (2001) PhD Dissertation  
Ranke et al. (2007) *Chem Rev* **107**, 2183-2206

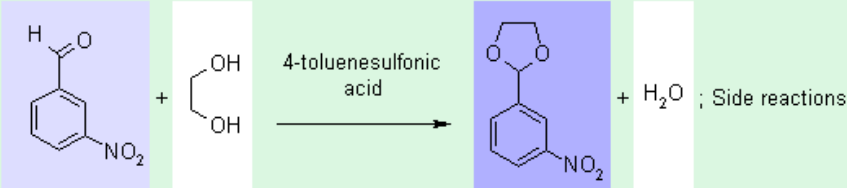
# Evaluation

Wert	Ausdruck
1	Sehr niedrig
2	Niedrig
3	Eher niedrig
4	Eher hoch
5	Hoch
6	Sehr hoch

# NOP: Datenlage

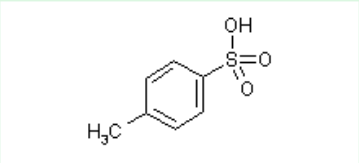

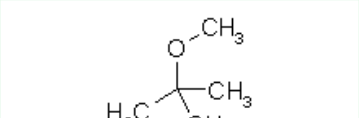


NOP-Nr:   
Alternative: 5004




**Data availability**

Toxicity and Ecotoxicity data
Only toxicity data
Neither toxicity nor ecotoxicity data
Not even a CAS Nr

	Catalyst		Others
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Substances required</li> <li>- Substances produced</li> <li>- Data availability</li> <li>- Effect factors TRGS 440</li> <li>- Stoichiometry</li> </ul>	<p>4-Toluenesulfonic acid monohydrate</p>		<p>Sodium disulfite</p> <div style="background-color: #e0e0ff; padding: 5px; text-align: center; margin-top: 5px;">NaHSO<sub>3</sub></div>
<p>Equipment</p>	<p>Solvents</p>		<p>Sodium sulfate</p> <div style="background-color: #e0e0ff; padding: 5px; text-align: center; margin-top: 5px;">Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub></div>
<p>Analytics</p> <p>User comments</p>	<p>tert-Butyl methyl ether</p>		<p>Molecular sieve 4A</p> <div style="background-color: #e0e0ff; padding: 5px; text-align: center; margin-top: 5px;">Na<sub>x</sub>Al<sub>y</sub>Si<sub>z</sub>O<sub>n</sub></div>

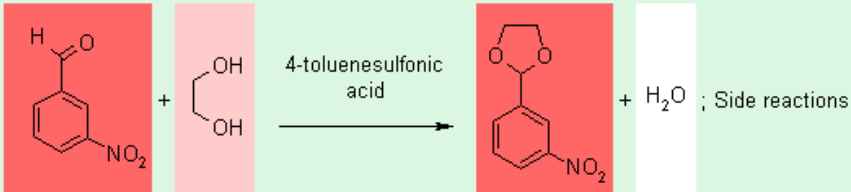


# NOP: Wirkfaktoren



NOP-Nr:

Alternative: 5004



**Effect factors TRGS 440**

Effect factor 0    Effect factor >0 to 10    Effect factor >10 to 100    Effect factor >100 to 1000    Effect factor >1000 to 50000

	Catalyst	Others	
<p><b>Overview</b></p> <p><b>Instructions</b></p> <p><b>Operating scheme</b></p> <p><b>Substances</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Substances required</li> <li>- Substances produced</li> <li>- Data availability</li> <li>- Effect factors TRGS 440</li> <li>- Stoichiometry</li> </ul> <p><b>Equipment</b></p> <p><b>Evaluation</b></p> <p><b>Analytics</b></p> <p><b>User comments</b></p>	<p>4-Toluenesulfonic acid monohydrate Effect factor: 5</p>	<p>Sodium disulfite Effect factor: 100</p>	NaHSO <sub>3</sub>
	<p><b>Solvents</b></p> <p>Cyclohexane Effect factor: 5</p>	<p>Sodium sulfate Effect factor: 5</p>	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
	<p>tert-Butyl methyl ether Effect factor: 5</p>	<p>Molecular sieve 4A Effect factor: 5</p>	Na <sub>x</sub> Al <sub>y</sub> Si <sub>z</sub> O <sub>n</sub>

# Stand der Technik

- Große, nicht interoperable Datenbanken mit Stoffdaten

# Stand der Technik

- Große, nicht interoperable Datenbanken mit Stoffdaten
- Vergleichende Stoffbewertungen sind extrem aufwändig

# Stand der Technik

- Große, nicht interoperable Datenbanken mit Stoffdaten
- Vergleichende Stoffbewertungen sind extrem aufwändig
- Stoffrisiken werden sehr unterschiedlich eingeschätzt

# Vorgehen

Kopieren aus Datenbanken in eigene Datenhaltung  
wie

- Einfache Textdateien

# Vorgehen

Kopieren aus Datenbanken in eigene Datenhaltung  
wie

- Einfache Textdateien
- Tabellenkalkulation

# Vorgehen

Kopieren aus Datenbanken in eigene Datenhaltung  
wie

- Einfache Textdateien
- Tabellenkalkulation
- Datenbanken

# Vorgehen

Kopieren aus Datenbanken in eigene Datenhaltung  
wie

- Einfache Textdateien
- Tabellenkalkulation
- Datenbanken

Umformatieren, Quelle prüfen, Quellenangabe



# Vision

Konvergenz der Stoffbewertungen durch

- standardisierte Datenformate (Open Standards)

# Vision

Konvergenz der Stoffbewertungen durch

- standardisierte Datenformate (Open Standards)
- signierte und kontextreiche Stoffdaten

# Vision

Konvergenz der Stoffbewertungen durch

- standardisierte Datenformate (Open Standards)
- signierte und kontextreiche Stoffdaten
- ein dezentrales Netzwerk von Datenquellen (Open Data)

# Vision

Konvergenz der Stoffbewertungen durch

- standardisierte Datenformate (Open Standards)
- signierte und kontextreiche Stoffdaten
- ein dezentrales Netzwerk von Datenquellen (Open Data)
- transparente Stoffinformationssysteme (Open Source)

# Praxisbeispiele

- Semantic Web

# Praxisbeispiele

- Semantic Web
- Extensible Markup Language XML

# Praxisbeispiele

- Semantic Web
- Extensible Markup Language XML
- Formalisierung von Metadaten (Dublin Core)

# Praxisbeispiele

- Semantic Web
- Extensible Markup Language XML
- Formalisierung von Metadaten (Dublin Core)
- Peer to Peer Netzwerke



# Praxisbeispiele

- Semantic Web
- Extensible Markup Language XML
- Formalisierung von Metadaten (Dublin Core)
- Peer to Peer Netzwerke
- Open Source Software (Datenbanken, Verarbeitung von XML)

# Chemical Semantic Web

Umsetzung für die Chemie durch den "Blue Obelisk"

- Chemical Markup Language CML

# Chemical Semantic Web

Umsetzung für die Chemie durch den "Blue Obelisk"

- Chemical Markup Language CML
- Internetbasierte Stoffdatenbank NMRShiftDB

# Chemical Semantic Web

Umsetzung für die Chemie durch den "Blue Obelisk"

- Chemical Markup Language CML
- Internetbasierte Stoffdatenbank NMRShiftDB
- Chemical Development Kit CDK

# Chemical Markup Language CML

```
<?xml version="1.0"?>
<molecule id="methanol" xmlns="http://www.xml-cml.org/schema">
  <atomArray>
    <atom id="a1" elementType="C" />
    <atom id="a2" elementType="O" />
  </atomArray>
  <bondArray>
    <bond atomRefs2="a1 a2" order="1"/>
  </bondArray>
</molecule>
...
```

# Skizze CMLTox

```
<?xml version="1.0"?>
<molecule id="methanol" />
<experiment type="dose-response relationship" guideline="ISO XXX">
  <organism species="Scenedesmus vacuolatus" habitat="freshwater">
    Strain 211-15, SAG, Universitaet Goettingen
  </organism>
  <exposure type="single application" duration="24 h" />
  <endpoint type="growth inhibition" parameter="cell count" />
  <drArray unit="mg per L">
0 1.02
0 0.97
5 0.76
...
  </drArray>
  <drResult generator="drfit">
    <ED level="50" value="12.3" unit="mg per L">
  </dRresult>
</experiment>
```

# Skizze CMLTrans

```
<?xml version="1.0"?>
<molecule id="methanol" />
<experiment type="ready biodegradability" guideline="OECD 301 D">
  <inoculum type="STP runoff" preconditioning="7 d" location="Seehausen">
    <degArray>
      0 0
      7 4.4
      14 7.8
      ...
    </degArray>
    <degResult readilyBiodegradable="no" />
  </experiment>
```

# Weitere Bausteine

- Quellenangaben (BibTexML)



# Weitere Bausteine

- Quellenangaben (BibTexML)
- Signierung der Daten (gnupg)

# Weitere Bausteine

- Quellenangaben (BibTexML)
- Signierung der Daten (gnupg)
- Verschlüsselung (gnupg)

# Weitere Bausteine

- Quellenangaben (BibTexML)
- Signierung der Daten (gnupg)
- Verschlüsselung (gnupg)
- Automatisierter Datenaustausch (SOAP)

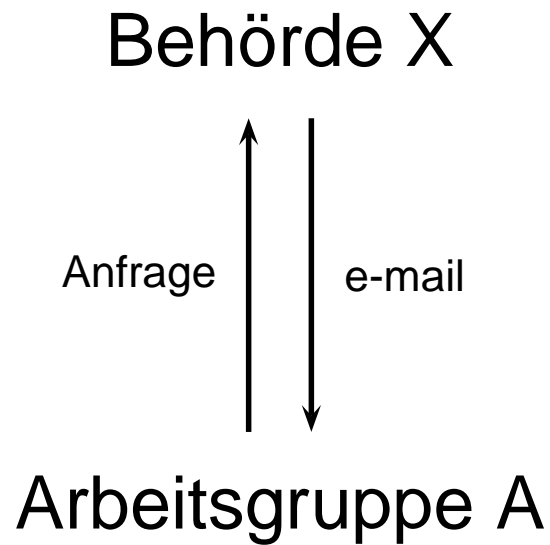
# Weitere Bausteine

- Quellenangaben (BibTexML)
- Signierung der Daten (gnupg)
- Verschlüsselung (gnupg)
- Automatisierter Datenaustausch (SOAP)
- Abonnements für spezielle Abfragen (RSS)

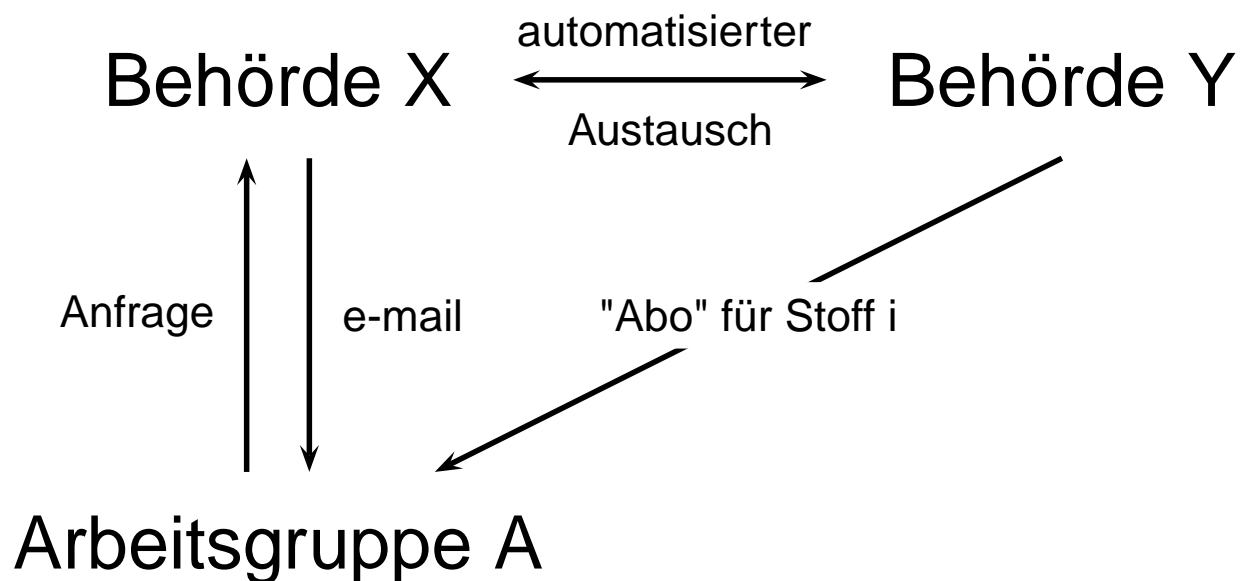
# Weitere Bausteine

- Quellenangaben (BibTexML)
- Signierung der Daten (gnupg)
- Verschlüsselung (gnupg)
- Automatisierter Datenaustausch (SOAP)
- Abonnements für spezielle Abfragen (RSS)

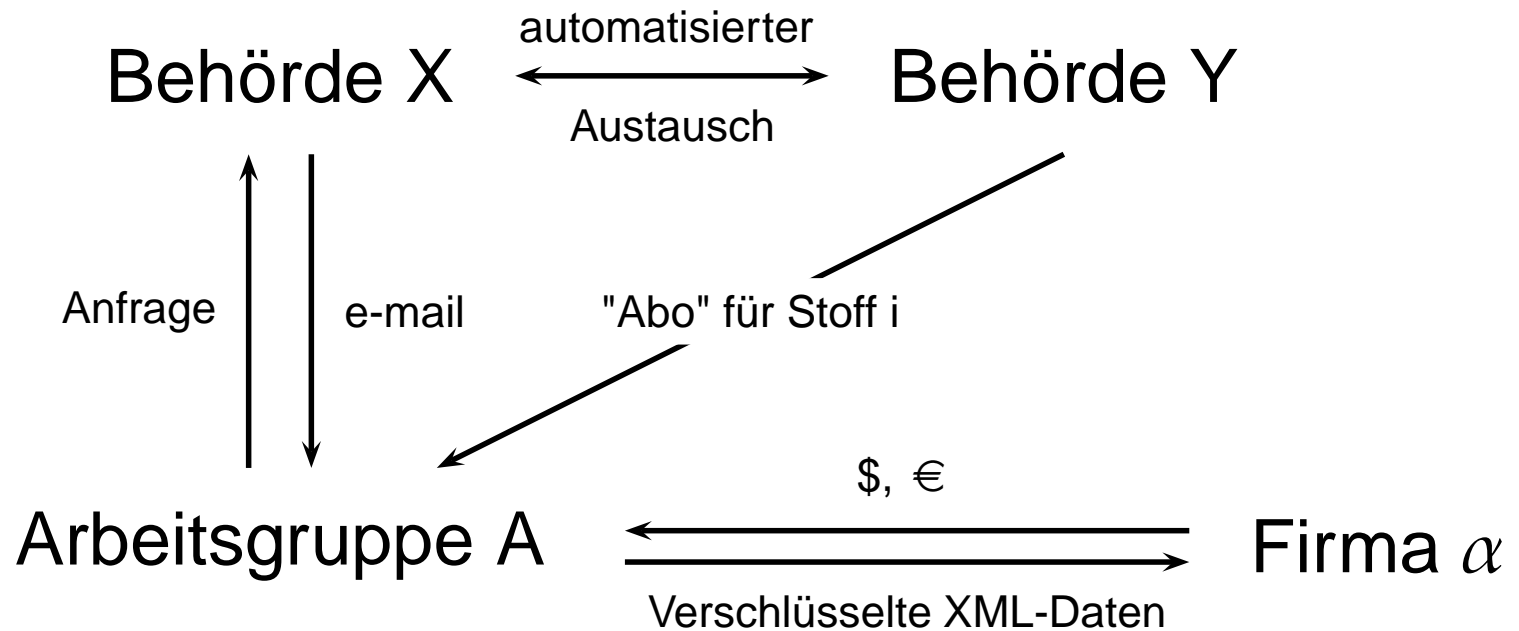
# Anwendungsszenario



# Anwendungsszenario

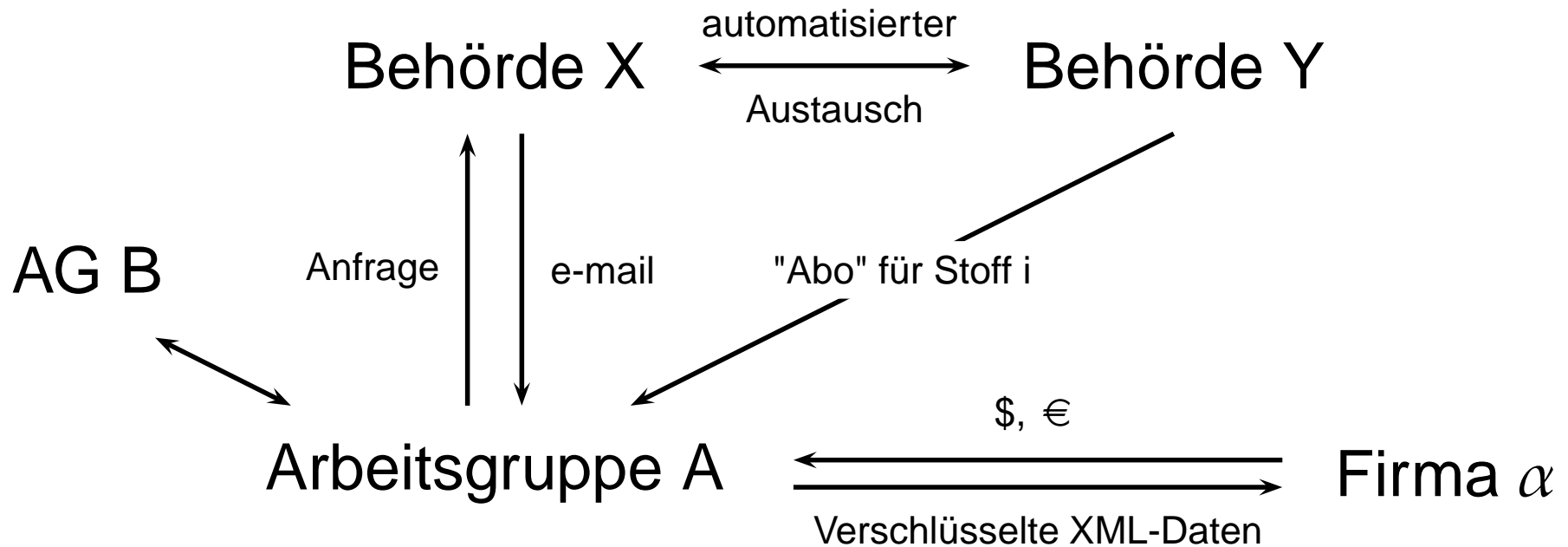


# Anwendungsszenario

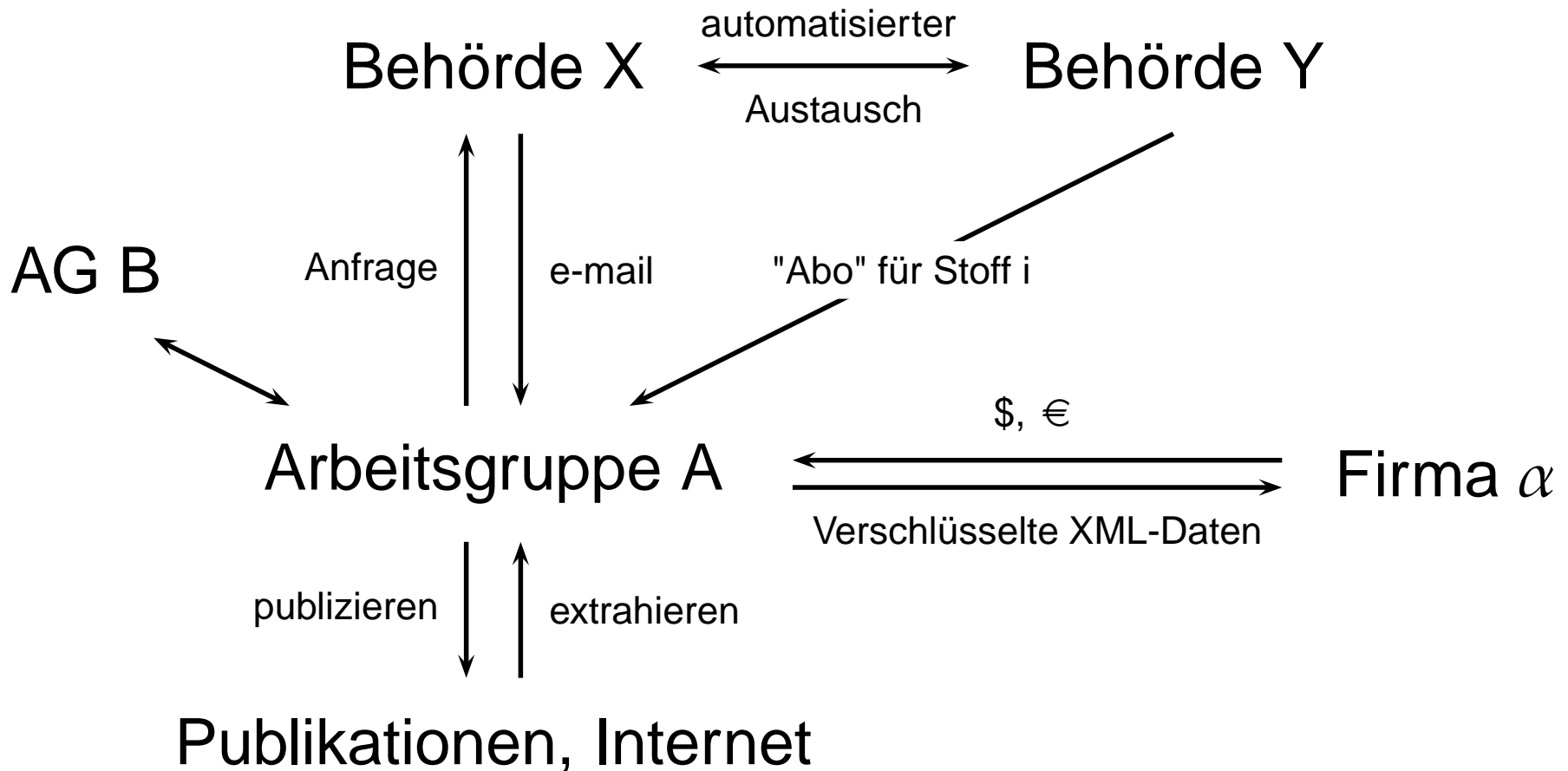




# Anwendungsszenario



# Anwendungsszenario



# Zusammenfassung

Ziel ist die Umsetzung des Vorsorgeprinzips im Sinne einer nachhaltigen Entwicklung

- Bewertung von chemischen Stoffen ist sehr komplex

# Zusammenfassung

Ziel ist die Umsetzung des Vorsorgeprinzips im Sinne einer nachhaltigen Entwicklung

- Bewertung von chemischen Stoffen ist sehr komplex
- Konkurrierende Bewertungsmethoden und -akteure sind nötig

# Zusammenfassung

Ziel ist die Umsetzung des Vorsorgeprinzips im Sinne einer nachhaltigen Entwicklung

- Bewertung von chemischen Stoffen ist sehr komplex
- Konkurrierende Bewertungsmethoden und -akteure sind nötig
- Konvergenz durch gemeinsame, verlässliche Datenbasis

# Zusammenfassung

Ziel ist die Umsetzung des Vorsorgeprinzips im Sinne einer nachhaltigen Entwicklung

- Bewertung von chemischen Stoffen ist sehr komplex
- Konkurrierende Bewertungsmethoden und -akteure sind nötig
- Konvergenz durch gemeinsame, verlässliche Datenbasis

⇒ Optimierung der Verfügbarkeit von Informationen