

ESCAPE: Berechnung von Bodenkonzentrationen unter Berücksichtigung verschiedener Abbaukinetiken wie von FOCUS empfohlen

Hintergrund

Im Rahmen der Zulassung von Pflanzenschutzmitteln müssen für alle Wirkstoffe und seine Hauptmetabolite zeitabhängige Konzentrationen im Boden berechnet werden. Die so berechneten Konzentrationen sind die Basis für die anschließende Risikoabschätzung dieser Substanzen im Boden. Traditionell wurden diese Simulationen auf der Basis einer Reaktionskinetik erster Ordnung durchgeführt. Allerdings wurden im aktuellen FOCUS-Abschlussbericht „Guidance Document on Estimating Persistence and Degradation Kinetics from Environmental Fate Studies on Pesticides in EU Registration“ (Document Reference Sanco/10058/2005 v. 2.0) weitere Abbaukinetiken (wie HS: *hockey stick*, DFOP: *double first order in parallel* oder FOMC: *first order multi compartment*) empfohlen, weil sie das Verhalten dieser Stoffe besser beschreiben können, als die traditionell verwendete Methode (SFO: *single first order*).

Ziel

Ziel dieses Projekts war es, eine neue Software zu entwickeln, die zur Berechnung von Bodenkonzentrationen unter Berücksichtigung der empfohlenen Kinetiken geeignet ist.

Ergebnisse

Im Rahmen des Projekts wurde das Computerprogramm ESCAPE (Estimation of Soil Concentrations After Pesticide Applications) erstellt, das Bodenkonzentrationen für einen Wirkstoff und zwei Metabolite berechnen kann. Dabei berechnet ESCAPE stets Initialkonzentrationen sowie zeitabhängige und zeitlich gemittelte Konzentrationen.

onen. Falls erforderlich, kann ESCAPE auch Plateaukonzentrationen (Hintergrundkonzentrationen nach vielen Jahren mit Pflanzenschutzmittelanwendungen) ermitteln. Da die Bodenszenarien in den verschiedenen EU-Mitgliedsländern unterschiedlich definiert sind, kann der Anwender Bodentiefen oder -dichten entsprechend einstellen. In Fig. 1 ist das unterschiedliche Verhalten eines Wirkstoffs in vier verschiedenen Böden, jeweils mit einer eigenen Abbaukinetik, dargestellt. Table 1 zeigt die Werte einiger konkreter Endpunkte zu dieser Abbildung. Da eine einmalige Anwendung simuliert wurde, werden zwar gleiche Maximalkonzentrationen in allen Böden berechnet (1.333 mg/kg), jedoch wird deutlich, dass die zeitlich gemittelten Konzentrationen (TWA) über einen Tag und 42 Tage stark von der jeweiligen Kinetik im Boden abhängen. Dies liegt daran, dass der Abbau bei einigen Böden im Laufe der Zeit stark nachlässt (siehe Fig. 1). Noch deutlicher werden die Unterschiede, wenn auch Abbauprodukte gebildet werden: Selbst wenn man annimmt, dass der Metabolit in allen Böden völlig gleich abgebaut wird (Beispiel: Abbau nach 1. Ordnung, Halbwertszeit: 40 d), werden zu unterschiedlichen Zeiten sehr unterschiedliche Maxima im Boden berechnet (kleinstes Maximum: 0.0916 mg/kg, größtes Maximum: 0.5091 mg/kg, siehe Fig. 2 und Table 1).

Fazit

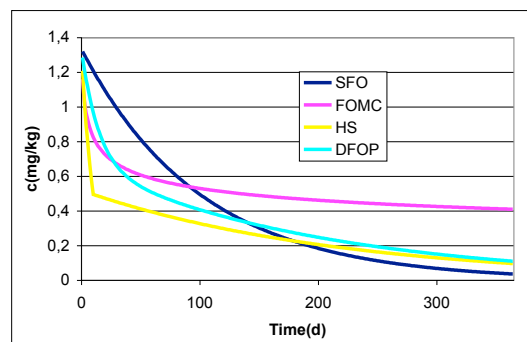
Das neue Computerprogramm ESCAPE ist in der Lage, Pflanzenschutzmittelkonzentrationen in Böden in einer benutzerfreundlichen Weise zu berechnen, selbst wenn komplizierte Anwendungsmuster oder Abbauschemata berücksichtigt werden müssen. Es konnte gezeigt werden, dass die Berücksichtigung fortgeschrittener Abbaukinetiken wie HS oder DFOP anstelle des traditionellen SFO Verfahrens die resultierenden zeitlich gemittelten Konzentrationen für den Wirkstoff, aber noch stärker für Abbauprodukte, maßgeblich beeinflussen. Da ESCAPE alle erforderlichen Eigenschaften aufweist, die für die Berechnung von Bodenkonzentrationen im regulativen Hintergrund notwendig sind, ist geplant, das Programm 2008 offiziell im Rahmen der deutschen Pflanzenschutzmittelzulassung einzusetzen.

Die Entwicklung von ESCAPE wurde vom Umweltbundesamt unterstützt. Kopien des Berichts (englisch) und das Programm sind beim Autor erhältlich.

Ansprechpartner/Contact

Dr. Michael Klein
Tel: +49 2972 302-317
michael.klein@ime.fraunhofer.de

Figure 1: Soil concentrations of a pesticide simulated by ESCAPE



ESCAPE: Calculation of PECsoil Considering Different Degradation Kinetics as Suggested by FOCUS

Background

For the registration of pesticides, time dependent concentrations in soil have to be calculated for active ingredients and their main metabolites. The calculated concentrations form the basis for the risk assessment of these substances in the soil. Traditionally these estimations were carried out taking first order degradation kinetics into account. However, in the final report of the FOCUS working group "Guidance Document on Estimating Persistence and Degradation Kinetics from Environmental Fate Studies on Pesticides in EU Registration" (EC Document Reference Sanco/10058/2005 version 2.0) which was published recently, additional degradation kinetics such as HS: *hockey stick*, DFOP: *double first order in parallel*, or FOMC: *first order multi compartment* were proposed which are often more suitable for describing the fate of pesticides in soil than the traditional methodology based on single first order degradation (SFO: *Single First Order*).

Aims

The objective of the project was to develop new software suitable for calculating soil concentrations based on all recommended kinetic models.

Results

During the project, the new software ESCAPE (Estimation of Soil Concentrations After Pesticide Applications) was developed. It is able to calculate the fate of the parent compound and up to two metabolites.

ESCAPE always calculates initial, time-related and time weighted average concentrations (TWA) in the soil. If necessary, ESCAPE also estimates so called plateau concentrations (background concentrations after many years of pesticide application).

As the soil environment is defined differently in the different EU-member states, the user can specify soil depths or densities according to his specific needs.

Fig. 1 (ESCAPE screen dump) shows the different behaviour of a pesticide in four different soil studies, each characterized by its own special degradation kinetics. Table 1 shows some results for simulated soil concentrations. Whereas for a single application the maximum concentration in soil (1.333 mg/kg) does not depend on the kinetic model, the TWA (e.g. > 1 d and 42 d) are strongly influenced by the different kinetics in the soils. This is caused by a decrease in the rate of degradation in some of the soils (see Fig. 1). The differences become even more pronounced if additional metabolites are

formed. Even if the metabolite degradation model is assumed to be the same in all four soil studies (in this example: first order kinetics, constant half life 40 days) the maximum concentrations and their days of occurrence are very different (minimum: 0.0916 mg/kg, maximum: 0.5091 mg/kg, see Fig. 2 and Table 1).

Conclusions

The new computer program ESCAPE is able to calculate pesticide concentrations in soils in a user friendly way, even where complicated application patterns or metabolism schemes have to be considered.

It was demonstrated that considering advanced degradation kinetics such as HS or DFOP instead of using the traditional SFO approach, significantly influences the time-weighted average concentrations for parent compounds and, even more strongly, for their degradation compounds.

As ESCAPE includes all the features needed for the adequate calculation of pesticide concentrations in the regulatory context, it is planned to establish the software officially in German authorities in the year 2008.

Copies of the report and the program are available from the author.

Table 1: Soil concentrations for active compound and metabolite

Compound	Kinetics**	PEC(max)*	TWA(1 d)*	TWA (42 d)*
Pesticide	SFO	1.333	1.3268	1.0908
Pesticide	FOMC	1.333	1.2470	0.7650
Pesticide	HS	1.333	1.2705	0.5525
Pesticide	DFOP	1.333	1.3094	0.8185
Metabolite	SFO	0.2915	0.2915	0.2879
Metabolite	FOMC	0.3796	0.3796	0.3524
Metabolite	HS	0.6123	0.6079	0.4830
Metabolite	DFOP	0.3944	0.3944	0.3731

* concentrations in mg/kg ** of the parent compound

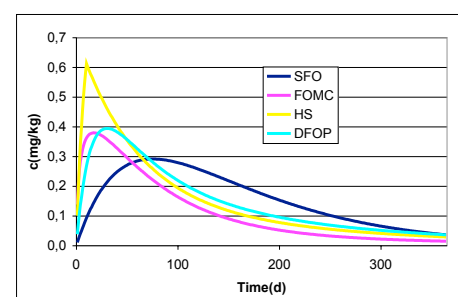


Figure 2:
Simulated soil concentrations for the metabolite