

Fahrensohn (2018): Schwierigkeiten der Anwendung computergestützter Modelle zur toxikologischen Evaluierung von komplexen Stoffen unter der REACH-Verordnung. Betreuer: Fischer, Kirf (Masterarbeit).

ZUSAMMENFASSUNG

Computergestützte Modelle wie Read-Across-Analysen zur Vorhersage der Toxizität stellen unter der REACH (Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals) -Verordnung Alternativmethoden zu Tierstudien dar. Die Anwendung der bisher etablierten Methoden ist jedoch für komplexe Stoffe derzeit kaum möglich.

Die vorliegende Arbeit verdeutlicht, wo die Schwierigkeiten der Anwendung der bisher etablierten Modelle liegen und zeigt Möglichkeiten auf, wie Vorhersagen zur Toxizität auf anderem Wege für komplexe mehrkomponentige Stoffe mit variabler Zusammensetzung getroffen werden können.

Ein möglicher Ansatz ist die Berechnung beziehungsweise Ableitung der Gesamtoxizität aus der Toxizität der einzelnen Komponenten. Dieser komponentenbasierte Ansatz liefert robuste Ergebnisse, sofern ausreichend Daten für die Komponenten vorhanden sind.

Insbesondere für quantitative Vorhersagen bei denen ein numerischer Wert berechnet wird, wird die Verfügbarkeit der Daten häufig dadurch limitiert, dass aufgrund der spezies-spezifischen Toxizität nur Daten zu einer einzelnen Spezies verwendet werden können. Um in solchen Fällen unterstützende Informationen zu generieren, könnte gemäß den Vorgaben der CLP (Classification, Labelling and Packaging of Substances and Mixtures) -Verordnung eine Einstufung des Stoffes auf Basis der Daten zu verschiedenen Spezies abgeleitet werden. Dabei werden die quantitativen Werte jeder Komponente in Einstufungen abgewandelt, woraus sich nach bestimmten Übernahmeregeln die Gesamteinstufung ergibt.

Sowohl der komponentenbasierte Ansatz als auch der Einstufungsansatz sind bisher nicht für komplexe mehrkomponentige Stoffe etabliert. Sie könnten jedoch aufgrund ihrer Plausibilität in Zukunft Alternativmethoden zu Tierstudien darstellen.