

# Altstoffe

## – Online-Recherche toxikologischer Daten

Dr. Petra-Ann Rosen-Edwards, Dipl. Geoökol. Astrid Geschke

Bayer AG, Friedrich-Ebert-Str. 217, D-W-5600 Wuppertal 1

**Zusammenfassung.** Es wird ein praxisbewährtes Verfahren der Online-Literaturrecherche in toxikologisch relevanten Datenbanken vorgestellt.

Die vorgeschlagenen Suchstrategien bestehen je nach Datenbanktyp aus vorprozessierten Suchen, ergänzenden Freitextworten sowie deren Kombination und decken die Fragestellungen Toxikologie und Metabolismus ab.

### 1 Einleitung

Im Rahmen der umfangreichen Altstoffbearbeitung [1] sind systematische Literaturrecherchen unerlässlich.

Um schon aus Tierschutzgründen die Zahl der zur toxikologischen Bewertung von Altstoffen unabdingbaren Prüfungen so gering wie möglich zu halten, muß auf eine möglichst vollständige Erfassung der in der Literatur veröffentlichten Daten besonderes Augenmerk gelegt werden.

Im folgenden möchten wir einen Recherche-Leitfaden für diese Daten vorstellen.

### 2 Auswahl der Datenbank

Ausschlaggebend für die Auswahl der Datenbanken sind ein umfangreiches Quellenangebot, die Abfragemöglichkeit mittels CAS-Nr. (Chemical Abstract Registry-Nummer), Aktualität (regelmäßiges Update), aber auch zeitlich weit zurückreichende Daten. Bei der Auswahl der Datenbankanbieter (Hosts) wurde in erster Linie die Anzahl der abfragbaren Datenbanken berücksichtigt, um ein häufiges Wechseln von Host zu Host weitestgehend zu vermeiden.

Detaillierte Beschreibungen der wesentlichen Merkmale dieser Datenbanken finden sich in entsprechenden Informationen der Anbieter bzw. Hersteller [2–5, 10]. Grundkenntnisse der unterschiedlichen Retrievalsprachen verschiedener Hosts werden vorausgesetzt.

#### 2.1 Suchstrategie

Die Ermittlung der CAS-Nr. und/oder eventueller Synonyme einer Substanz wird in CHEMLINE (Host DIMDI) durchgeführt.

Die Information der ermittelten Datenfelder kann mit einem „Extract-Kommando“ in die Datenbank TOXLINE transferiert werden.

Die CAS-Nr. bzw. Synonyme werden mit vorprozessierten Suchen (preprocessed search, pps) des Hosts (DIMDI) verknüpft; diese sind

- Toxicology, evtl. Ecotoxicology,
- Occupational Toxicology,
- Adverse Effects.

Bei speziellen Fragestellungen können auch nur die PPS (= Cancer, Mutagenicity, Poisoning, Teratogenicity und Reproductive Toxicology), die unter dem PPS = Toxicology subsumiert sind, abgefragt werden.

Es bestehen auch andere Möglichkeiten, die CAS-Nr. zu ermitteln, z.B. beim Host STN. Jedoch können die so gewonnenen, z.T. umfangreichen, Informationen dann nicht mittels Extract-Kommando in die Datenbank TOXLINE eingegeben werden.

Hinzugefügte, nicht in den PPS enthaltene Freitextworte erhöhen die Trefferquote signifikant (→ Tabelle 1).

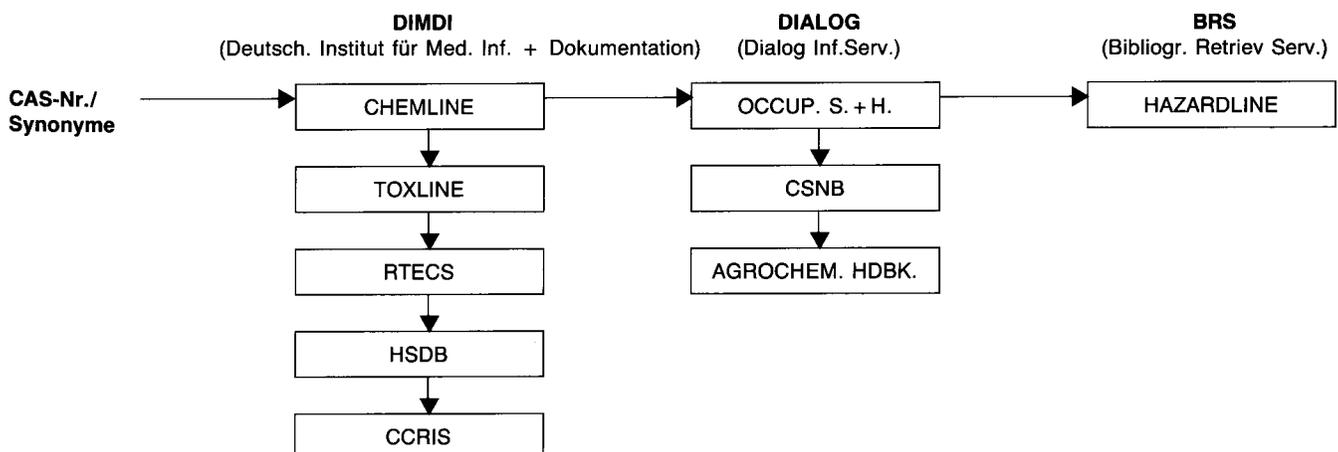


Abb. 1: Flußdiagramm der Vorgehensweise bei der Auswahl der Datenbanken

Tabelle 1: Ergänzende Freitextworte zu PPS = Toxicology

**Zur Hautverträglichkeit:**

Skin?; Derm?; Cutan?; Sensit?; Irrit?

**Zum Metabolismus und zur Toxikokinetik:**

Metabol?; Elimin?; Distribut?; Absorp?; Resorp?; Excret?; Transform?; Transfer?; Transp?; Turnover?; Bioavail?; Half Life?; Kinetic?; Storage?

Zur weiteren Erhöhung der Ausbeute an Zitaten sollte zusätzlich in den Faktendatenbanken HSDB, RTECS und CCRIS recherchiert werden.

Diese Faktendatenbanken enthalten zu jeder Substanz – falls vorhanden – nur ein Dokument.

Um in den bibliographischen Datenbanken OCCUP. SAFETY + HEALTH und CHEMICAL SAFETY NEWBASE (CSNB) zu recherchieren, ist ein Wechsel des Hosts, z.B. zum Host DIALOG, notwendig. Die Abfrage der CAS-Nr. und/oder Synonyme ist in der Regel ausreichend. Sollte die Zitatmenge jedoch einen bestimmten Umfang überschreiten, kann die Abfrage mit folgenden Freitextworten limitiert werden. (→ Tabelle 2).

Tabelle 2: Freitextworte für die Datenbanken OCCUP. S + H und CSNB

Tox? or Intox? or Pois? or Advers? or Hazard? or Expos? or Threshold? or MAC? or LD? or Lethal? or Letal? or Neurotox? or Hepatotox? or Hepatit? or Nephrotox? or Cytotox? or Genotox? or Muta? or Ames? or Terato? or Fetotox? or Embryotox? or Tumor? or Tumour? or Neoplas? or Cancer? or Carcino? or CoCarcino? or Mortal? or Malign? or Allerg? or Hypersen? or Immun? or Derm? or Skin? or Cutan? or Inhalat? or Respirat? or Metabol? or Elimin? or Distribut? or Absorp? or Excret? or Transfer? or Transp? or Turnover? or Bioavail? or Half(Life)? or Metast?

Je nach Substanzgruppe sollte eine Abfrage der Faktendatenbank AGROCHEMICALS-HANDBOOK beim Host DIALOG erfolgen.

Beim Host BRS kann noch zusätzlich die Faktendatenbank HAZARDLINE abgefragt werden.

Zur Abfrage von AGROCHEMICALS-HANDBOOK und HAZARDLINE genügt die Eingabe der CAS-Nr.

**3 Zusammenfassende Bewertung**

Die dargestellte Suchstrategie beschränkt sich auf Datenbanken, deren wesentliche Gemeinsamkeit die Abfragemöglichkeit über die CAS-Nr. ist. Ihre sinnvolle Verknüpfung ergibt Vollständigkeit der Zitate auf der einen sowie Einschränkungsmöglichkeiten der Literaturmenge auf der anderen Seite.

Es wird eine Kombination aus PPS (preprocessed search) und Freitextbegriffen vorgeschlagen, die innerhalb kürzester Zeit eine vollständige Recherche toxikologischer Daten in diesen Online-Datenbanken ermöglicht.

**4 Muster-Recherche am Beispiel Chlorbenzol (CAS-Nr.: 108-90-7)**

**4.1 Abfrage der Datenbank TOXLINE (Host: DIMDI)**

```

t hc
1.00 *1696 CR = 108-90-7
2.01 0 FIND FT = A13 07776
2.02 0 FIND FT = BENZENE CHLORIDE
2.03 14 FIND FT = BENZENE CHLORO
2.04 14 FIND FT = BENZENE CHLORO
2.05 0 FIND FT = CASWELL NO 183A
2.06 0 FT = CHLOORBENZEEN
2.07 *6 FT = CHLORBENZENE
2.08 *5 FT = CHLORBENZOL
2.09 *2 FT = CHLOROBENZEN
2.10 0 FT = CHLOROBENZENU
2.11 *2 FT = CHLOROBENZOL
2.12 0 FT = CLORBENZENO
2.13 0 FT = CLOROBENZENE
2.14 0 FIND FT = CP 27
2.15 0 FIND FT = EPA PESTICIDE CHEMICAL
CODE 056504
2.16 0 FIND FT = HSDB 55
2.17 0 FIND FT = I P CARRIER T 40
2.18 0 FT = MONOCHLOORBENZEEN
2.19 *1 FT = MONOCHLORBENZENE
2.20 0 FT = MONOCHLORBENZOL
2.21 *153 FT = MONOCHLOROBENZENE
2.22 0 FT = MONOCLOROBENZENE
2.23 0 FIND FT = NCI C54886
2.24 3 FIND FT = PHENYL CHLORIDE
2.25 0 FIND FT = TETROSIN SP
2.26 0 FIND FT = UN 1134
2.27 *76 FT = MCB
2.28 *869 FT = CHLOROBENZENE
3.01 0 CR = 50717-45-8
4.00 2208 FIND 1 TO 3
5.00 1479 FIND 4 AND PPS=(TOXS; OCCS; ADVS;
ECOS)
6.00 394 FIND 4 AND ALL
(METABOL?; ELIMIN?; DISTRIB?; AB-
SORP?; EXCRET?; TRANSFER?; TRANS-
FORM?; TURNOVER?)
7.00 141 FIND 4 AND ALL (KINETIC?; PHARMA-
COKIN?; HALF LIFE; BIOAVAIL?; RE-
SORP?; STORAG?; TRANSPOR?)
8.00 142 FIND 4 AND ALL (SKIN?; DERM?; CU-
TAN?; SENSIT?; IRRIT?)
9.00 1221 FIND 5 TO 8 AND (1; 3)
10.00 138 FIND 5 TO 8 Not ST = ?/CR
11.00 1359 FIND 9 TO 10
***END OF TAB***
?
    
```

**4.2 Abfrage der Datenbank OCCUPATIONAL SAFETY AND HEALTH (Host: DIALOG)**

Set	Items	Description
S1	204	108907
S2	160	RN = 108-90-7
S3	204	S1 OR S2
S4	137	S3 AND (TOXIC? OR LETHAL? OR LETAL? OR LD? OR POISON? OR INTOX? OR MOR-TAL? OR EXPOS? OR HAZARD? OR TRESHOLD?)

- S5 12 S3 AND (CANCER? OR CARCINO? OR SARCOM? OR NEOPLAS? OR MALIGN? OR TUMOR? OR TUMOUR? OR METAST?)
- S6 5 S3 AND (COCARCINO? OR TERAT? OR FETOTOX? OR EMBRYOTOX? OR GENOTOX? OR AMES OR MUTAT? OR CYTOTOX?)
- S7 13 S3 AND (NEUROTOX? OR NEPHROTOX? OR HEPATOTOX? OR HEPATIT?)
- S8 32 S3 AND (INHAL? OR PULMON? OR RESPIRA?)
- S9 14 S3 AND (ALLERG? OR HYPERSEN? OR IRRITAT? OR SKIN? OR DERM? OR CUTAN?)
- S10 77 S3 AND (METAB? OR ELIMIN? OR DISTRIB? OR ABSORP? OR EXCRET? OR TRANSPORT? OR TRANSFER? OR TURNOVER?)
- S11 5 S3 AND (BIOAVAIL? OR KINETIC? OR PHARMACOKIN? OR HALF LIFE?)
- S12 168 S4-S11

## 5 Literatur

- [1] Gesetz zum Schutz vor gefährlichen Stoffen (Chemikaliengesetz - ChemG) vom 16. Sept. 1980 (BGBl. I, S. 17/8, geändert durch Gesetz vom 15.9.1986, BGBl. I, S. 1505)
- [2] Dialog Inform. Retrieval Services, Inc., 3460 Hillview Av. Palo Alto, LA 94304
- [3] NLM (National Library of Medicine) Bethesda MD, Rockville Pike
- [4] DIMDI (Deutsches Institut für Medizinische Information, Dokumentation und Information), Weisshausstr. 27, 5000 Köln
- [5] Directory of online Databases, Cuadra Elsevier, 9 (3), 1988
- [6] Nachr. f. Dokum. 37 (3) 139-150 (1986)
- [7] Z. Umweltchem. Ökotox 1, 48-53 (1989)
- [8] J. Inform. Sci. 15, 269-276 (1989)
- [9] J. Inform. Sci. 12, 257-265 (1986)
- [10] BRS Information Technologies 1200 Route 7 Latham, NY 121100

## Kurznachrichten

### Technische Anleitung Siedlungsabfall

Ziel der vom Bundeskabinett am 27. August 1992 beschlossenen Technischen Anleitung (TA) Siedlungsabfall ist die Verringerung der Mengen der zur Deponierung gelangenden Siedlungsabfälle. Dabei soll die Entsorgungssicherheit im Rahmen von **integrierten Abfallwirtschaftssystemen** mit den Maßnahmen der *Verwertung* und *Schadstoffentfrachtung* verbunden werden.

Der Entwurf zur TA Siedlungsabfall enthält daher zunächst umfassende Empfehlungen für die Aufstellung eines integrierten Abfallwirtschaftskonzeptes. Dieses dient u.a. dem Vorrang der Verwertung vor der sonstigen umweltverträglichen Entsorgung sowie als Grundlage für die Planung der regionalen Entsorgungsstruktur.

1. Ein wesentliches Kriterium im Hinblick auf die Verwertung von Abfällen stellt die **Getrennhaltung** dar. Danach sind Schadstoffe und Wertstoffe grundsätzlich getrennt zu erfassen, um eine Nutzung von Wertstoffen zu ermöglichen bzw. die Behandlung nicht verwertbarer Restabfälle zu erleichtern.

2. Daneben sind Abfälle soweit wie möglich und sinnvoll **stofflich zu verwerten**.

3. Im Bereich des Hausmülls und der hausmüllähnlichen Abfälle fallen hierunter vor allem die **Bio- und Grünabfälle**. Diese Materialien, rund ein Drittel des Gewichtes des Hausmülls, sollen nach der TA Siedlungsabfall der **Eigenkompostierung** zugeführt werden.

*Die Redaktion*

Quelle: BMU, „Umwelt und Entwicklung“ vom August/September 1992, S. 18

### Ausstieg aus der FCKW-Produktion

– Weltweit, EG-weit, national

1. Basierend auf dem Wiener Übereinkommen der Vereinten Nationen zum Schutz der Ozonschicht (1985) und den folgenden Vertragsstaatenkonferenzen in Montreal (Montrealer Protokoll 1987) und London (Juni 1990), fand Ende November die **4. Vertragsstaatenkonferenz in Kopenhagen** statt. Ziel dieser Konferenz war ein vorzeitiges FCKW-Verbot für alle EG-Mitgliedsstaaten bis Ende 1994 und ein **weltweiter Ausstiegstermin** zum **31. 12. 1995** sowie die Fortführung des **Internationalen Fonds für die Finanzierung von Ersatzstoffen** für die Dritte Welt. Auf Initiative von Bundesumweltminister Klaus TÖPFER lag ein Vorschlag der EG über die zusätzliche Aufnahme von ozonschädigenden Stoffen in die Liste des Montrealer Protokolls vor.

2. Das Bundeskabinett hat am 19. 11. 1992 den zweiten Regierungsbericht über **Maßnahmen zum Schutz der Ozonschicht** verabschiedet und damit national die FCKW-Halon-Verbots-Verordnung auf **Ende 1993** vorgezogen.

Dem Vorschlag der EG, auch alle teilhalogenierten FCKW-Ersatzstoffe bis zum Jahr 2003 stufenweise abzubauen, hat sich Frankreich verweigert.

3. In der **Schweiz** wird die Herstellung, Einfuhr, Abgabe und Verwendung von ozonschichtabbauenden Lösungsmitteln **ab 01. 01. 1993** verboten (alle FCKW, alle Halone, 1, 1, 1-Trichlorethan und Tetrachlorkohlenstoff).

*Die Redaktion*

Quellen: BMU-Mitteilung vom 19. 11. 1992; GSF-Information Umwelt vom 23. 11. 1992; Chemische Rundschau vom 27. 11. 1992; BUWAL (Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft), Sektion Umweltgefährdende Produkte, Bern, in: CHIMIA 11/92, S. 452

### Rio-Konferenz

– Bundeskabinett legt Leitlinien vor

Das Bundeskabinett hat am 23. 09. 92 die Leitlinien zur Umsetzung der Ergebnisse der UN-Konferenz für Umwelt und Entwicklung (UNCED) in Rio de Janeiro (3. - 14. Juni 92) mit folgenden Handlungsschwerpunkten festgelegt:

- zügige Ratifizierung der **Konventionen Klimaschutz und Biologischer Vielfalt**,
- Maßnahmen zur Umsetzung der Konventionen bereits vor ihrem Inkrafttreten,
- Zusammenarbeit mit anderen Staaten zur Förderung der Umsetzung der **Walderklärung** und eines Dialoges über weiterführende, international abgestimmte Vereinbarungen mit dem Ziel einer internationalen **Waldkonvention** auf der Basis dieser Erklärung,
- nachdrückliches Eintreten für eine effektive Ausgestaltung der neuen **UN-Kommission für nachhaltige Entwicklung** deren Einrichtung durch die Generalversammlung der Vereinten Nationen erfolgt. (Die Bundesregierung setzt sich für eine Besetzung der Kommission auf Ministerienebene ein.),
- Neustrukturierung des **Globalen Umweltfonds (GEF)**, die von Industrie- und Entwicklungsländern gleichermaßen akzeptiert werden kann, und ihre angemessene finanzielle Ausstattung,
- finanzielle und technische Unterstützung der Entwicklungsländer bei der Umsetzung der **Agenda 21** und der **Waldklärung** im Rahmen der öffentlichen Entwicklungshilfe,
- Zusammenarbeit mit anderen Staaten zur Förderung der weltweiten Beachtung der **Rio-Deklaration**, die für den Bereich Umwelt und Entwicklung wesentliche Grundsätze für das Verhalten der Staaten untereinander und für das der Staaten zu ihren Bürgern enthält,
- Entwicklung einer **Konvention zur Bekämpfung der Wüstenbildung**.

*Die Redaktion*

Quelle: BMU-Mitteilung Nr. 87/92 vom 23. 09. 1992