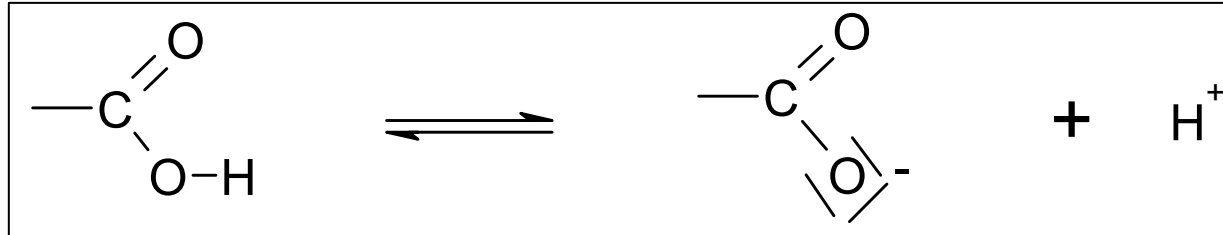


Pestizide – Umweltbezogene Struktur- Wirkungsbeziehungen

von Dr. Andreas Sonnenberg
und Prof. Dr. Manfred Sietz

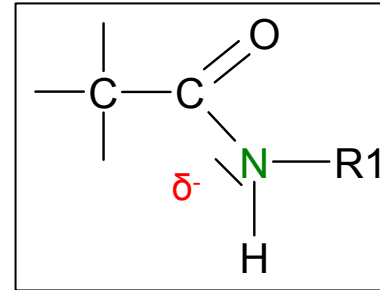
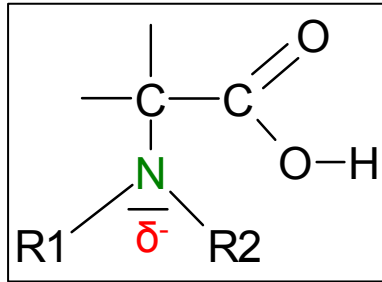
Hochschule Ostwestfalen Lippe
University of Applied Science

Carboxylgruppen

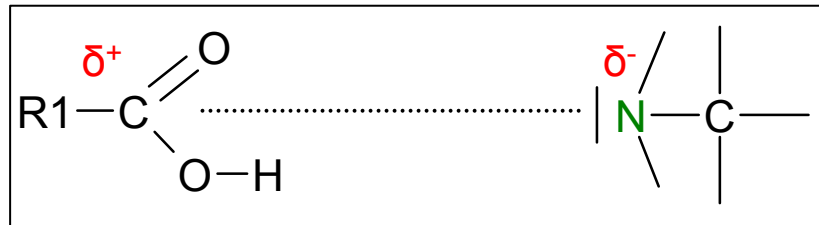


- ionische Struktur → gut wasserlöslich
- wird leicht(er) aus dem Boden ausgewaschen
- gerät dadurch leicht(er) ins Grundwasser
- Halbwertszeit im Boden gering
- geringe Lipophilie

Aminosäuren, Säureamide

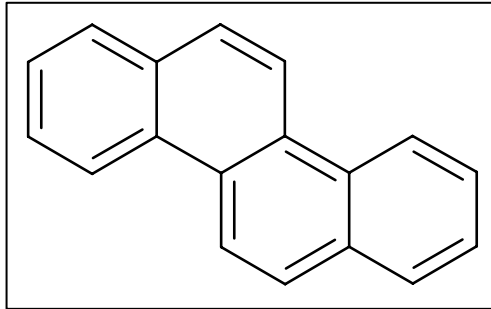


- biogene Strukturen → Moleküle können leicht verstoffwechselt werden
- polare Strukturen → gute Wasserlöslichkeit
→ werden gut an Huminsäuren adsorbiert:



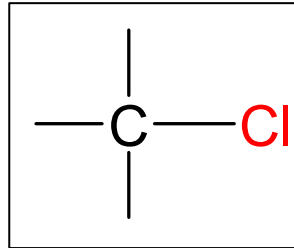
- durch Adsorption an Huminsäuren sind höhere Halbwertszeiten im Boden zu erwarten
- über Hydrolysemechanismen sind diese Stoffe gut abbaubar
- molekulare N-Quellen sind für Pflanzen Voraussetzung zur Biomasseproduktion (N-Düngung)

Aromatische Strukturen

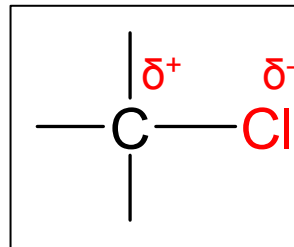


- Aromatische Strukturen erhöhen die Lipophilie von Molekülen:
 - Bioakkumulation, d.h. Speicherung der Stoffe im Fettgewebe
 - Persistenz

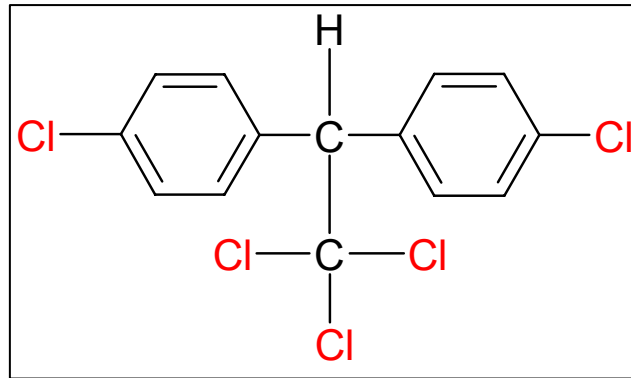
Chlororganische Strukturen



- erhöhen die Lipophilie
- erhöhen die Bioakkumulation
- senken die biologische Abbaubarkeit
- Gefahr der Persistenz ist gegeben!
- hohe Fischgiftigkeit
- durch Dipolcharakter der C-Cl-Bindung kann die Halbwertszeit im Boden erhöht werden:



Beispiel: DDT

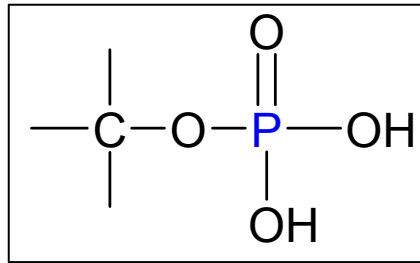


- giftiger Feststoff
- Wasserlöslichkeit: 0,0055 mg/L bei 20°C
- $\log p_{OW} = 6,1$
- Siedepunkt = 186°C
- Wassergefährdungsklasse WGK 3 (stark wassergefährdend)
- Dampfdruck $p = 23 \cdot 10^{-6}$ mPa (25°C)
- Halbwertszeit: 10 – 20 Jahre
- Toxizität: LD₅₀ ca. 100 mg/kg (Ratte, oral)

Molekülgröße und Symmetrie

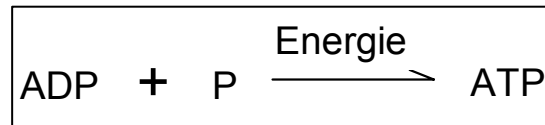
- kleine Moleküle ($< C_5 - C_6$) $\rightarrow$ hoher Dampfdruck
- große Moleküle ($> C_5 - C_6$) $\rightarrow$ geringer Dampfdruck
- Moleküle mit hoher Symmetrie sind sehr stabil, nicht leicht zu zersetzen und neigen zur Persistenz

Beispiel: Phosphorsäureester

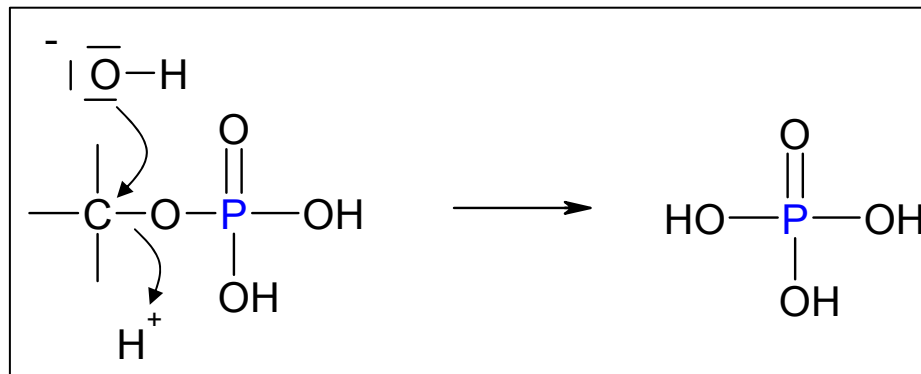


biogene Strukturen,
entsprechende Moleküle
werden leicht verstoffwechselt

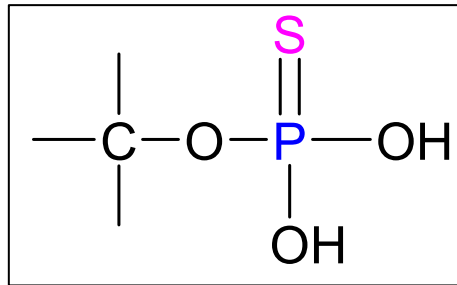
- wirken nach Hydrolyse mit am Energiestoffwechsel der Pflanzen:



- sind als Phosphorquellen essenziell für Pflanzen:

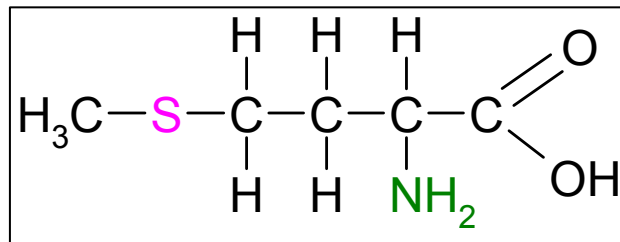


Beispiel: Thiophosphorsäureester



enthalten Schwefel

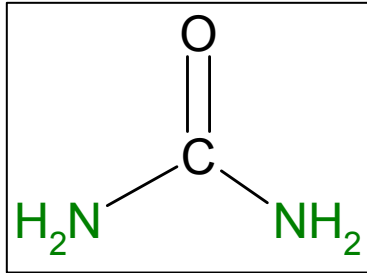
- biogene Struktur, ähnlich der essenziellen schwefelhaltigen Aminosäure Methionin:



Modifikationen

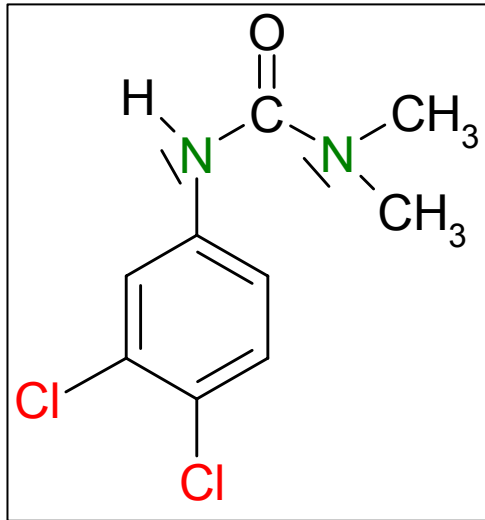
- Moleküle mit langen C-Seitenketten sind wahrscheinlich gut biologisch abbaubar
- Verzweigte Seitenketten sind schlechter biologisch abbaubar

Beispiel: Harnstoffderivate



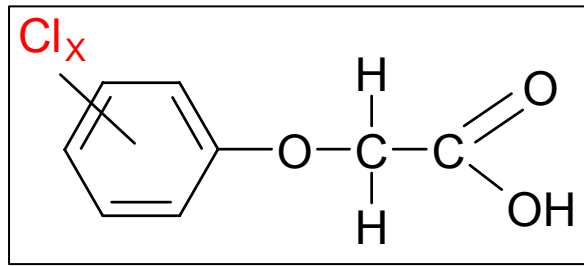
Harnstoff: biogenes Molekül,
da Ausscheidemetabolit

Diuron



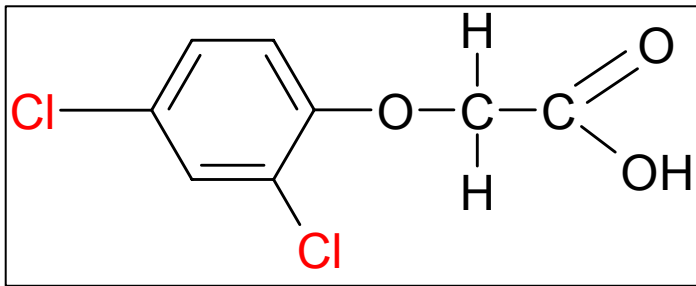
- kristalliner Feststoff
- Wasserlöslichkeit: 42 mg/L (20°C)
- $\log p_{OW} = 2,68$
- Siedepunkt: 180°C
- Dampfdruck $p = 1,1 \cdot 10^{-3}$ mPa (25°C)
- $LD_{50} = 1000$ mg/kg (Ratte, oral)
- Halbwertszeit: 14 – 30 Tage (max. mehrere Monate)

Beispiel: Chlorphenoxycarbonsäuren



} allgemeine Form

2,4-D



- häufigstes Herbizid weltweit
- kristalliner Feststoff
- Siedepunkt: 160°C
- Wasserlöslichkeit: 900 mg/L (25°C)
- log pOW = 2,64
- LD50 = 400 – 600 mg/kg (Ratte, oral)
- Halbwertszeit etwa 1 Woche
- Dampfdruck p = 1,86 Pa (25°C)