

TEXTE

07/2026

**Abschlussbericht**

# **POP-Profiling – Kontaminationen auf der Spur**

**Nutzung von Methoden der künstlichen Intelligenz zur  
Profilanalyse von PCB-Belastungen mit Erarbeitung von  
Auswerteverfahren und Erstellung von IT-Werkzeugen**

**von:**

Alexander Blume  
Dornier Power and Heat GmbH, Berlin

Prof. Dr. Benny Selle  
Berliner Hochschule für Technik, Berlin

**Herausgeber:**

Umweltbundesamt



TEXTE 07/2026

REFOPLAN des Bundesministeriums Umwelt,  
Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz

Forschungskennzahl 3720 65 488 0

FB001861

Abschlussbericht

## **POP-Profiling – Kontaminationen auf der Spur**

Nutzung von Methoden der künstlichen Intelligenz zur  
Profilanalyse von PCB-Belastungen mit Erarbeitung von  
Auswerteverfahren und Erstellung von IT-Werkzeugen

von

Alexander Blume  
Dornier Power and Heat GmbH, Berlin

Prof. Dr. Benny Selle  
Berliner Hochschule für Technik, Berlin

Im Auftrag des Umweltbundesamtes

## Impressum

### Herausgeber

Umweltbundesamt  
Wörlitzer Platz 1  
06844 Dessau-Roßlau  
Tel: +49 340-2103-0  
Fax: +49 340-2103-2285  
[buergerservice@uba.de](mailto:buergerservice@uba.de)  
Internet: [www.umweltbundesamt.de](http://www.umweltbundesamt.de)

### Durchführung der Studie:

Dornier Power and Heat GmbH | Berliner Hochschule für Technik  
Motzstraße 9 | Luxemburger Straße 10  
10777 Berlin | 13353 Berlin

### Abschlussdatum:

September 2024

### Redaktion:

Fachgebiet IV 2.1 Informationssystem Chemikaliensicherheit  
Dr. Andreas Höllrigl-Rosta, Dr. Thomas Gräff

### DOI:

<https://doi.org/10.60810/openumwelt-8001>

ISSN 1862-4804

Dessau-Roßlau, Januar 2026

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autorinnen\*Autoren.

### **Kurzbeschreibung: POP-Profiling – Kontaminationen auf der Spur**

Persistente organische Stoffe (POP), wie Polychlorierte Biphenyle (PCB), Dioxine und Furane, stellen weltweit eine Belastung für die Umwelt dar und wirken oftmals toxisch, karzinogen, mutagen und teratogen auf Organismen. PCB wurden in Form verschiedener Kongenerengemische als Industriechemikalien über lange Jahre in geschlossenen und offenen Anwendungen eingesetzt und daraus in die Umwelt emittiert. Die Transportpfade von Quellen zu Senken sind vielfältig, und die Kongenerenprofile unterliegen Veränderungen durch Fraktionierungsprozesse. Das Forschungsvorhaben „POP-Profiling – Kontaminationen auf der Spur“ hat unter Einbindung von Verfahren des Maschinellen Lernens, eine geeignete Methode entwickelt, um PCB-Belastungsprofile von Fischen potenziellen Quellenprofilen zuzuordnen. Dazu wurden gealterte Verbrauchs- und fraktionierte Emissionsprofile für die Jahre 1980 bis 2020 als sogenannte Schattenprofile modelliert und verglichen. Aus den analysierten Belastungsprofilen konnten Rückschlüsse auf den Belastungspfad gezogen (atmosphärisch, partikelgebunden) und somit Verbindungen zu potenzielle Quellländer hergestellt werden. Im vorliegenden Bericht werden die erforderlichen Grundlagen für die Entwicklung des Systems aufbereitet, bevor die Trainingsdaten modelliert und das System entwickelt sowie angewandt wird.

### **Abstract: POP profiling – Tracking down contamination**

Persistent organic pollutants (POPs), such as polychlorinated biphenyls (PCBs), dioxins, and furans, represent a global environmental burden and are often toxic, carcinogenic, mutagenic, and teratogenic to organisms. PCBs were used for many years as industrial chemicals in various congener mixtures in both closed and open applications, from which they were emitted into the environment. The transport pathways from sources to sinks are diverse, and the congener profiles undergo changes due to fractionation processes. The research project “POP Profiling – Kontaminationen auf der Spur” has developed an effective method, incorporating machine learning techniques, to match PCB contamination profiles in fish to potential country source profiles. For this, aged consumer and fractionated emission profiles for the years 1980 to 2020 were modelled and compared as so-called shadow profiles. The analysed contamination profiles enabled inferences to be made about contamination pathways (atmospheric, particle-bound), thereby allowing links to potential source countries to be identified. This report compiles the essential foundations for developing the system before modelling the training data and proceeding with system development and application.

## Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis.....	8
Tabellenverzeichnis .....	9
Abkürzungsverzeichnis .....	10
Zusammenfassung.....	12
Summary .....	13
1 Einleitung.....	14
1.1 Ausgangssituation .....	14
1.2 Aufgabenstellung und Status .....	15
2 Hintergrundinformationen POP .....	16
2.1 Geschichtliche und rechtliche Einordnung .....	16
2.2 Chemisch-physikalische Eigenschaften.....	17
2.2.1 Chemischer Aufbau und Substitutionsstellung.....	18
2.2.2 Persistenz .....	19
2.2.3 (Bio-)Akkumulation .....	19
2.2.4 Ferntransportpotenzial .....	20
2.2.5 Toxizität.....	20
2.3 Erfassungsmethoden und Analyse.....	21
2.4 Kongenerenprofile .....	22
3 POP in der Umwelt .....	24
3.1 Quellen.....	24
3.2 Transportpfade .....	26
3.3 Senken.....	28
3.4 Profilverschiebung durch Transport, Abbau und Bioakkumulation.....	29
4 POP-Dioxin-Datenbank.....	31
4.1 Ziele und Aufbau .....	31
4.2 Datenbestand und -lücken.....	31
4.3 Bereits integrierte Datensätze bestehender Studien .....	32
4.4 Erweiterung des Datenbestandes.....	32
5 Modellierung Trainingsdatensätze.....	36
5.1 Grundlagen der Modellierung.....	36
5.2 Methodik.....	37
5.3 Modellierte Daten für PCB-Quellen (Schattenprofile).....	39
5.3.1 Schattenprofile aus Verbrauchsprofilen .....	39

5.3.2	Schattenprofile aus Emissionsprofilen.....	40
6	Identifikation von Quellen und Transportpfaden durch KI-Methoden.....	43
6.1	Grundlagen Künstliche Intelligenz .....	43
6.2	Grundlagen Mustererkennung in Datenbeständen.....	45
6.2.1	Überwachtes Lernen.....	45
6.2.2	Unüberwachtes Lernen.....	46
6.2.3	Verstärkendes Lernen .....	48
6.2.4	Neuronale Netze .....	49
6.3	Einsatz von Mustererkennung bei Schadstoffprofilen.....	49
7	Systementwicklung zum Erkennen von PCB-Belastungsmustern .....	51
8	Systemanwendung .....	59
8.1	Ergebnisse .....	59
8.2	Interpretation.....	62
8.2.1	Fische aus europäischen Binnengewässern.....	63
8.2.2	Meeresfische.....	63
9	Fazit .....	65
10	Ausblick und Handlungsempfehlungen.....	67
11	Quellenverzeichnis .....	69
A	Anhang .....	75
A.1	Quellenübersicht für recherchierte PCB-Datensätze.....	75
A.2	Abkürzungsverzeichnis für Behörden (zur Quellenübersicht, Teil c).....	119

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Chemische Struktur sowie Nummerierung der Substitutionsstellung der PCB .....	18
Abbildung 2:	Beispielhafte Darstellung von Kongenerenprofilen mit Einteilung nach Homologen .....	23
Abbildung 3:	Länderspezifische Verbrauchsprofile ausgewählter PCB von 1930 - 2000 .....	25
Abbildung 4:	Verteilungsverhalten von POP in der Umwelt.....	27
Abbildung 5:	Rechercheergebnisse nach Lagebezug.....	34
Abbildung 6:	Rechercheergebnisse nach Kompartiment .....	35
Abbildung 7:	Modellierte, gealterte PCB-Belastungen in Sedimenten (1930-2020) .....	40
Abbildung 8:	Modellierte, fraktionierte PCB-Belastungen in Fischen (1980-2020).....	42
Abbildung 9:	Übersicht unterschiedlicher Verfahren des maschinellen Lernens (Auswahl).....	44
Abbildung 10:	Ergebnis CART-Analyse für Fisch und Fischerzeugnisse (Beispiel) .....	46
Abbildung 11:	Ergebnis SOM für Fische (Beispiel) .....	47
Abbildung 12:	Ergebnis Hauptkomponentenanalyse für Fische (Beispiel) .....	48
Abbildung 13:	Schematische Darstellung der Funktionsweise eines Neuronalen Netzes.....	49
Abbildung 14:	SOM Changes plot mit der Änderung der mittleren Distanz über 7.500 Iterationsschritte .....	53
Abbildung 15:	Schematische Darstellung des KI-basierten Systems zum Profilvergleich von gemessenen Fisch-PCB-Profilen mit modellierten Schattenprofilen .....	54
Abbildung 16:	SOM codes plot berechnete Schattenprofile (n: 93.210) mit der Darstellung der ermittelten Kongenerenprofile je SOM-Knoten.....	55
Abbildung 17:	SOM codes plot der berechneten Schattenprofile (n: 93.210) mit der Darstellung der Anteile von Schattenprofiltypen pro Knoten .....	56
Abbildung 18:	SOM codes plot der berechneten Schattenprofile (n: 93.210) mit der Darstellung der Anteile der Ursprungsländer pro Knoten.....	57
Abbildung 19:	Berechnete und modellierte mediane PCB-Profile von Fischen aus Binnengewässern und Verbrauchsprofilen sowie Meeresfischen und Emissionsprofilen .....	58
Abbildung 20:	SOM codes plot der berechneten Schattenprofile (n: 93.210) mit den Anteilen der Schattenprofiltypen je Knoten und den zugeordneten gemessenen Fisch PCB-Profilen (n: 8.584).....	59
Abbildung 21:	Anzahl der Fischproben die SOM-Knoten mit den angezeigten Ländern zugeordnet wurden .....	61
Abbildung 22:	Vergleich der Fangjahre der gemessenen Fische aus Binnengewässern und Meeren (x-Achse) mit dem Jahr, bis zu dem das Verbrauchprofil alterte (a) y-Achse) sowie dem Emissionsjahr (b) y-Achse) .....	62
Abbildung 23:	SOM codes plot (grid size 20 x20, n: 5.569) der ICES-7-PCB Profile ausgewählter Kompartimente der PDB .....	68



## Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Zeitplanung für die Bearbeitung AP 1 bis AP 4.....	15
Tabelle 2:	Übersicht der im Stockholmer Übereinkommen gelisteten POP .....	17
Tabelle 3:	Übersicht ausgewählter Parameter der 6 Indikator PCB plus PCB 118.....	21
Tabelle 4:	Zusammenstellung der Daten zur PCB-Produktion in t (gemäß Literaturdaten) ....	24
Tabelle 5:	Halbwertszeit ausgewählter PCB-Kongenere im Sediment in Jahren .....	39
Tabelle 6:	Parameter für die Berechnung der fraktionierten Emissionsprofile für ICES-7-PCB .....	41
Tabelle 7:	Übersicht der für das System ausgewählten Länder, welche ca. 90 % des globalen PCB-Verbrauchs (1930-2000) bzw. der PCB-Emissionen (1930-2020) verantworten .....	51
Tabelle 8:	Anzahl und Anteile der Zuordnung von Fischprofilen zu Schattenprofiltypen .....	60
Tabelle 9:	Ergebnisse der Literaturrecherche mit festgesetzten Suchparametern .....	75
Tabelle 10:	Ergebnisse der gezielten Recherche zur themenbezogenen Erweiterung der PDB .....	107
Tabelle 11:	Ergebnisse der Auswertung von Publikationen von Landesbehörden (bereitgestellt durch das UBA) .....	108

## Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Erläuterung
abs.	absoluter Wert
BAF	Bioakkumulationsfaktor
BfR	Bundesinstitut für Risikobewertung
BLV	Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit
bzw.	beziehungsweise
ca.	circa
CART	Klassifikations- und Regressionsbäume ( <i>Classification and Regression Trees</i> )
CAS	Chemical Abstracts Service
CB	chloriertes Biphenyl
dl-PCB	dioxinähnliche PCB ( <i>dioxin like PCB</i> )
DOM	gelöste organische Bestandteile ( <i>dissolved organic matter</i> )
EU	Europäische Union
FAO	Food and Agriculture Organisation
g	Gramm
ggf.	gegebenenfalls
HKA	Hauptkomponentenanalyse
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie
KI	Künstliche Intelligenz
K <sub>AW</sub>	Octanol-Luft-Verteilungskoeffizient
K <sub>OW</sub>	Octanol-Wasser-Verteilungskoeffizient
kt	Kilotonne
ICES	Internationaler Rat für Meeresforschung ( <i>International Council for the Exploration of the Sea</i> )
ICES-7-PCB	PCB Kongenere 28, 52, 101, 118, 138, 153, 180
l	Liter
LOD	Nachweisgrenze ( <i>Level of Detection</i> )
LOQ	Bestimmungsgrenze ( <i>Level of Quantification</i> )
mg	Milligramm
ML	Maschinelles Lernen
n. b.	nicht bekannt

Abkürzung	Erläuterung
NCBI	Nationales Zentrum für Biotechnologieinformation ( <i>National Center for Biotechnology Information</i> )
NN	Neuronales Netz
OC	Chlorkohlenwasserstoffe ( <i>Organochlorine compounds</i> )
OECD	Organisation für wirtschaftliche Zusammenarbeit und Entwicklung ( <i>Organisation for Economic Co-operation and Development</i> )
PBT	Persistent, Bioakkumulativ, Toxisch
PCB	Polychlorierte Biphenyle
PCDD	Polychlorierte Dibenzo-p-dioxine
PCDF	Polychlorierte Dibenzofurane
PDB	POP-Dioxin-Datenbank
PFOA	Perfluorooctansäure
PFOS	Perfluorooctansulfonsäure
POM	partikuläre organische Bestandteile ( <i>particulate organic matter</i> )
POP	Persistente organische Stoffe
Q	Quartal
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals, EC/1907/2006
SOM	Selbst-organisierende Karten ( <i>self-organizing-maps</i> )
SSC	Sekretariat des Stockholmer Übereinkommens ( <i>Secretariat of the Stockholm Convention</i> )
TEF	Toxizitätsfaktor
TEQ	Toxizitätsäquivalenten
u. a.	unter anderem
UBA	Umweltbundesamt, Dessau
UdSSR	Union der Sozialistischen Sowjetrepubliken (Sowjetunion)
UK	Vereinigtes Königreich ( <i>United Kingdom</i> )
UNEP	Umweltprogramm der Vereinten Nationen ( <i>United Nations Environment Program</i> )
vPvB	sehr persistent, sehr bioakkumulativ
WHO	Weltgesundheitsorganisation ( <i>World Health Organisation</i> )
z. B.	zum Beispiel

## Zusammenfassung

Persistente organische Stoffe (POP), wie Polychlorierte Biphenyle (PCB), Dioxine und Furane, stellen weltweit eine Belastung für die Umwelt dar. POPs sind unter anderem charakterisiert durch ein hohes Potenzial zur Bioakkumulation; sie reichern sich in Organismen und in der Nahrungskette an. Auf Organismen wirken diese Stoffgruppen oftmals toxisch, karzinogen, mutagen und teratogen; viele der Substanzen sind zudem hormonaktiv. Mit der POP-Dioxin-Datenbank (PDB) des Umweltbundesamts (UBA) (in Zusammenarbeit mit dem Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit (BVL) sowie dem Bundesinstitut für Risikobewertung (BfR)) steht ein umfangreicher, allerdings auch in seiner Zusammensetzung teils heterogener Datenbestand der Belastungssituation zur Verfügung.

Um ausgehend von einer analysierten Belastung (Senke, wie Böden und Biota) mögliche Quellen erkennen zu können, stellt der Vergleich von Kongenerenprofilen, insbesondere für PCBs (relative Anteile von Kongeneren an der Summe der PCB-Konzentration) einen vielversprechenden Ansatz dar. Problematisch ist jedoch, dass sich diese Profile über die Zeit verändern können, was die Zuordnung von Quellen und Senken erschwert. Mit den in der PDB erfassten Messwerten ist der dargestellte Profilvergleich der PCB-Kongeneren grundsätzlich möglich.

Im Forschungs- und Entwicklungsvorhaben „POP-Profilung – Kontaminationen auf der Spur“ sollten geeigneten Methoden für den Profilvergleich entwickelt werden. Der vorliegende Abschlussbericht der Dornier Power and Heat GmbH dokumentiert die Projektbearbeitung und liefert die erforderlichen Hintergrundinformationen für die Entwicklung eines geeigneten Systems zur Erkennung von PCB-Belastungsmustern. Im Rahmen des Vorhabens wurde der Fokus auf die Analyse von PCB-Profilen von Fischen gelegt. Ausgehend von der Datenanalyse wurden zunächst zwei wesentliche Belastungspfade identifiziert: partikelgebundener Eintrag in das Sediment mit anschließender Alterung und Aufnahme durch Fische aus Binnengewässern (Alterung) sowie atmosphärischer Transport von emittierten PCB-Belastungen in den Ozean und Aufnahme durch Meeresfische (Fraktionierung).

Darauf aufbauend ermöglicht das entwickelte System die Zuordnung von PCB-Belastungsprofilen von Fischen zu einem plausiblen Belastungspfad sowie zu einem potenziellen Herkunftsland der Belastung. Dazu wurden Verbrauchs- und Emissionsprofile von unterschiedlichen Ländern modelltechnisch gealtert bzw. fraktioniert, um mögliche Belastungsprofile erstellen zu können (Schattenprofile). Die Schattenprofile wurden durch *Self-Organizing-Maps* strukturiert und zu geeigneten Prototypen zusammengefasst. Diese können wiederum mit gemessenen Belastungsprofilen verglichen und ausgewertet werden.

Das entwickelte System schafft es, einen relativ großen Anteil von gemessenen PCB-Belastungsprofilen nach Fischen gefangen in Binnengewässern oder Meeren zu unterscheiden. Dabei zeigt sich, dass Meeresfisch insbesondere durch Emissionsprofile und den zugehörigen atmosphärischen Belastungspfad gekennzeichnet werden. Fische aus Binnengewässern hingegen weisen eine grundlegende Belastung durch gealterte Sedimentprofile auf, welche vermutlich atmosphärisch überprägt werden. Insbesondere die räumliche Herkunft der Fischproben und die vermutlichen Habitate liefern dabei Rückschlüsse auf die wesentlichen Belastungspfade.

## Summary

Persistent organic pollutants (POPs), such as polychlorinated biphenyls (PCBs), dioxins, and furans, represent a global environmental burden. POPs are characterised by a high potential for bioaccumulation, accumulating in organisms and across the food chain. These substance groups often have toxic, carcinogenic, mutagenic, and teratogenic effects on organisms; many of them are also hormonally active. The Environmental Protection Agency's POP-Dioxin Database (PDB), developed in collaboration with the Federal Office for Consumer Protection and Food Safety (BVL) and the Federal Institute for Risk Assessment (BfR), provides a comprehensive—though partially heterogeneous—dataset on contamination levels.

To identify potential sources based on analysed contamination (in sinks such as soils and biota), comparing congener profiles—especially for PCBs (relative congener proportions in total PCB concentration)—offers a promising approach. However, these profiles can change over time, complicating source-sink attribution. With the PDB's recorded data, a profile comparison of PCB congeners is feasible in principle.

The research and development project “POP Profiling – Kontaminationen auf der Spur” aimed to develop appropriate methods for profile comparison. This final report from Dornier Power and Heat GmbH documents the project work and provides the necessary background information for developing an effective system to detect PCB contamination patterns. The project focused on analysing PCB profiles in fish. Data analysis identified two main contamination pathways: particle-bound sediment deposition with subsequent ageing and uptake by freshwater fish (ageing), and atmospheric transport of emitted PCB contamination into the ocean, followed by uptake by marine fish (fractionation).

Based on these findings, the developed system allows the allocation of PCB contamination profiles in fish to plausible contamination pathways and potential source countries. To this end, consumer and emission profiles from different countries were modelled to simulate ageing and fractionation processes, thereby creating possible contamination profiles (shadow profiles). These shadow profiles were structured using self-organising maps and consolidated into suitable prototypes, which can then be compared and analysed against measured contamination profiles.

The system successfully distinguishes a considerable portion of measured PCB contamination profiles in fish caught in either freshwater bodies or seas. It reveals that marine fish are particularly marked by emission profiles and the associated atmospheric contamination pathway. In contrast, fish from freshwater bodies show a fundamental contamination from aged sediment profiles, likely influenced by atmospheric deposition. The spatial origin of fish samples and their likely habitats provide further insights into the primary contamination pathways.

# 1 Einleitung

## 1.1 Ausgangssituation

Persistente organische Stoffe (POP), wie Polychlorierte Biphenyle (PCB), Dioxine und Furane, stellen weltweit eine Belastung für die Umwelt dar. POPs sind unter anderem charakterisiert durch ein hohes Potenzial zur Bioakkumulation und reichern sich daher in Organismen und in der Nahrungskette an. Auf Organismen wirken diese Stoffe toxisch, oftmals karzinogen, mutagen und teratogen; viele der Substanzen sind zudem hormonaktiv.

Mit der POP-Dioxin-Datenbank (PDB) des Umweltbundesamts (UBA) (in Zusammenarbeit mit dem Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit (BVL) sowie dem Bundesinstitut für Risikobewertung (BfR) steht ein umfangreicher, in seiner Zusammensetzung teils heterogener Datenbestand der Belastungssituation zur Verfügung. Die Datenbank umfasst vorwiegend Ergebnisse diverser Mess- und Beobachtungsprogramme des Bundes, der Länder und anderer Einrichtungen aus Deutschland im Zeitraum zwischen 1979 bis 2018; zudem wurden im Rahmen von Forschungsaufträgen internationale Datensätze in der PDB ergänzt. Mittlerweile liegen ca. „48.000 Proben aus 17 Kompartimenten (Umwelt, Lebensmittel, Technosphäre, Humanproben)“ (UBA, 2020) mit einer Vielzahl an Messwerten vor.

Um ausgehend von einer analysierten Belastung (Senke) mögliche Quellen identifizieren zu können, stellt der Vergleich von Kongenerenprofilen (relative Anteile von Kongeneren an der Summe der PCB-Konzentration) insbesondere für PCBs einen geeigneten Ansatz dar. Problematisch ist jedoch, dass sich diese Profile über die Zeit verändern können, was die Zuordnung von Quellen und Senken erschwert: die verschiedenen Kongenere werden unterschiedlich transportiert und abgebaut, bestimmte Kongenere reichern sich in Relation stärker oder schwächer an, und es kommt zur Vermischung unterschiedlicher PCB-Quellen mit verschiedenen Kongenerenprofilen.

Mit den in der PDB erfassten Messwerten (u. a. zu den sechs Indikator-PCB sowie den 12 dioxin-ähnlichen PCB) ist der dargestellte Profilvergleich der PCB-Kongenere grundsätzlich möglich. Um diesen in dem umfangreichen Datenbestand sowie unter Berücksichtigung der oben angesprochenen Problematik der Zuordnung von Quellen und Senken (Veränderung der Kongenerenprofile) durchführen zu können, sollen geeignete Methoden entwickelt werden. Die Einbindung von Künstlicher Intelligenz, insbesondere das Maschinelle Lernen ist dafür eine vielversprechende Vorgehensweise. Das UBA verfolgt daher im Rahmen des Forschungsprojekts „POP-Profilung - Kontaminationen auf der Spur“ das Ziel, Methoden zu erarbeiten, „mit denen effizient und zielgenau in großen Datenbeständen Ähnlichkeiten von Belastungs- und potenziellen Quellenprofilen ermittelt und als Grundlage für weitere wissenschaftliche Auswertungen visualisiert werden können“ (UBA, 2020).

Zu diesem Zweck hat das UBA am 31.03.2021 die Dornier Power and Heat GmbH (vormals VPC GmbH) mit der Erbringung der Forschungs- und Entwicklungsleistungen beauftragt. Gemeinsam mit der Berliner Hochschule für Technik wurde das Projekt mit einem Fokus auf PCB in Fischen bearbeitet. Der vorliegende Abschlussbericht liefert dazu einerseits erforderliche Hintergrundinformationen zu POP und PCB, Modellierung von Trainingsdaten sowie den Einsatz von Verfahren des maschinellen Lernens. (Kapitel 2 bis 6). Anschließend wird ein geeignetes System zum Erkennen von PCB-Belastungsmustern entwickelt, angewandt und ausgewertet (Kapitel 7 bis 8).

Die Ergebnisse des Berichts wurden für die Veröffentlichung in einem peer-reviewed Fachjournal aufbereitet bzw. bereits veröffentlicht: Selle et al. (2024) und Blume et al. (2025).

## 1.2 Aufgabenstellung und Status

Entsprechend des Forschungsprojektes wurden wesentliche Teilaufgaben in vier Arbeitspaketen (AP) strukturiert. Die AP 1 bis 3 bauen teilweise inhaltlich aufeinander auf oder ergänzen sich mit dem Ziel, sowohl eine geeignete Datenbasis (AP 1) zu erstellen als auch geeignete Modelle zu entwickeln (AP 2) und Verfahren zu finden (AP 3), um die Daten hinsichtlich möglicher Quellen und Transportpfade interpretieren zu können. Im AP 4 wurden schließlich die Erkenntnisse gebündelt und darauf aufbauend die beabsichtigten Methoden entwickelt. Die Titel der AP lauten wie folgt:

AP 1: Recherche nach inhaltlich zusammenhängenden Daten zu PCB-Belastung von Mensch und Umwelt (Datenrecherche PCB-Belastungen)

AP 2: Modellierung von Trainingsdatensätzen zu miteinander verbundenen PCB-Belastungen in Umweltkompartimenten (Modellierung von Trainingsdatensätzen)

AP 3: Stand der Forschung zum Einsatz von KI-Methoden zur Mustererkennung in Datenbeständen (Mustererkennung mit KI-Methoden)

AP 4: Einsatz von KI-Methoden zur Erkennung von PCB-Belastungsmustern (Erkennung von PCB-Belastungsmustern).

Die Bearbeitung der einzelnen Arbeitspakete erfolgte nach einem zu Beginn des Projektes abgestimmten Zeitplan (siehe Tabelle 1), wobei Erkenntnisse aus dem Projektverlauf, insbesondere für das AP 1, auch nach Abschluss der jeweiligen Bearbeitungszeit integriert wurden.

**Tabelle 1: Zeitplanung für die Bearbeitung AP 1 bis AP 4**

Arbeitspakete	2021			2022				2023				2024
	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1
AP 1	X	X	X	O	O	O	O	O	O	O	O	
AP 2			X	X	X	X	X	X	X			
AP 3			X	X	X	X	X	X				
AP 4								X	X	X	X	X

In der Tabelle ist die Zeitplanung für die Bearbeitung der Arbeitspakete 1 bis 4 im geplanten Zeitraum vom 2. Quartal 2021 bis zum 1. Quartal 2024 dargestellt. Zeiträume der Hauptbearbeitung sind mit X bezeichnet (dunkelgrün hinterlegt) Zeiträume der fortlaufenden Nachbearbeitung mit O (hellgrün hinterlegt).

Quelle: eigene Darstellung.

Die Ergebnisse der weiteren AP wurden in den entsprechenden Kapiteln aufbereitet um das beabsichtigte System erstellen, anwenden und auswerten zu können. Die Rechercheergebnisse des AP 1 sind in Kapitel 4.4 sowie im Anhang aufbereitet. Es konnten ca. 108.500 Daten identifiziert werden, welche ggf. für die Erweiterung der PDB zur Verfügung stehen.

Der vorliegende Abschlussbericht stellt die Ergebnisse des Projekts dar.

## 2 Hintergrundinformationen POP

### 2.1 Geschichtliche und rechtliche Einordnung

Im Verlauf des vergangenen Jahrhunderts wurde eine Vielzahl organischer Chemikalien entwickelt und in signifikanter Größenordnung in die Umwelt freigesetzt. Die langfristigen Auswirkungen auf die Umwelt und insbesondere auf die Biosphäre waren und sind dabei noch häufig unklar (Breivik & Alcock, 2002).

In der Europäischen Union (EU) und anderen Industriestaaten kommen in diesem Zusammenhang Regulierungen und standardisierte Registrierungsverfahren für Chemikalien, in der Regel ab einem festgesetzten Produktions- oder Handelsvolumen, zur Anwendung. Die EU-Verordnung zu Registration, Evaluation, Authorisation und Restriction of Chemicals (REACH, EC/1907/2006), unterscheidet dabei u. a. persistente, bioakkumulative und toxische (PBT) sowie sehr persistente und sehr bioakkumulative (vPvB) Stoffe (Moermond et al., 2012). Die sogenannten Persistenten Organischen Stoffe (POP) stellen eine besondere Gruppe innerhalb der PBT dar, da sie sich zudem weit entfernt von ihrem Eintragungsort anreichern können (Moermond et al., 2012; Wirth et al., 2015).

Der globalen Bedeutung und Auswirkung von POP Rechnung tragend, trat am 17. Mai 2004 das Stockholmer Übereinkommen in Kraft (UNEP / SCC, 2019a). Zum letzten Erhebungsstand haben 152 Länder die Konvention unterschrieben und 185 Länder ratifiziert (UNEP / SCC, 2019b). Entsprechend Artikel 1 der aktuellen Fassung des Übereinkommens ist es das Ziel, „die menschliche Gesundheit und die Umwelt vor Persistenten Organischen Schadstoffen zu beschützen“ (UNEP / SCC, 2019a, S. 6). In Anhang D der Konvention werden dazu die Eigenschaften definiert, welche erforderlich sind, damit ein Stoff in das Übereinkommen aufgenommen wird (UNEP / SCC, 2019a):

- ▶ Persistenz (siehe Kapitel 2.2.2),
- ▶ Bioakkumulation (siehe Kapitel 2.2.3),
- ▶ Ferntransportpotenzial (siehe Kapitel 2.2.4) sowie
- ▶ nachteilige Auswirkungen auf die menschliche Gesundheit (siehe Kapitel 2.2.5).

Ursprünglich wurden 12 Schadstoffe/Schadstoffgruppen in das Übereinkommen übernommen (UNEP / SCC, 2017). Diese können als Pestizide, Industrieprodukte (jeweils absichtlich hergestellt) und unbeabsichtigte Nebenprodukte (z. B. bei Verbrennungsprozessen freigesetzt) klassifiziert werden. Mittlerweile wurde die Liste erweitert (u. a. um Hexabrombiphenyl, Perfluorooctansäure (PFOA) oder Perfluorooctansulfonsäure (PFOS) (siehe Tabelle 2) (UNEP / SCC, 2017, 2019c).



**Tabelle 2: Übersicht der im Stockholmer Übereinkommen gelisteten POP**

Kategorie	12 ursprüngliche POP des Übereinkommens	Weitere POP des Übereinkommens
Pestizide	Aldrin Heptachlor Chlordan Mirex Dieldrin Toxaphen Endrin DDT	$\alpha$ -Hexachlorcyclohexan $\beta$ -Hexachlorcyclohexan Chlordecon Dicofol Endosulfan Lindan Pentachlorphenol Pentachlorbenzol*
Industriechemikalien	PCB* Hexachlorbenzol	kurzkettige Chlorparaffine Decabromdiphenylether Hexabrombiphenyl Hexabromcyclododecan Hexa-/Heptabromdiphenylether PFOA PFOS Tetra-/Pentabromdiphenylether Hexachlorbutadien* polychlorierte Naphthaline* Pentachlorbenzol*
unbeabsichtigte Bildung	PCB* PCDD/PCDF	Hexachlorbutadien* polychlorierte Naphthaline* Pentachlorbenzol*

In der Tabelle sind die aktuell im Stockholm Übereinkommen gelisteten POP nach ihren Kategorien aufgeführt. Mit \* markierte Stoffe sind in mehreren Kategorien gelistet.

Quelle: eigene Darstellung in Anlehnung an (UNEP / SCC, 2017, 2019c).

Polychlorierte Biphenyle (PCB) gehören zu den ursprünglichen 12 POP des Stockholmer Übereinkommens. PCB sind relativ temperaturstabil, inert und besitzen eine geringe elektrische Leitfähigkeit, so dass sie vielfältig und in großen Mengen (weltweit mindestens 1.323,5 kt, Breivik et al., 2002) produziert und eingesetzt wurden, z. B. als Dichtungsmittel, Isolierflüssigkeit und Weichmacher. PCB sind in praktisch allen Umweltkompartimenten verbreitet (LfU BW, 1995, S. 1) und sind "im Hinblick auf Dauer und Höhe der Belastung [...] in Deutschland mit die bedeutsamsten POP" (UBA, 2020, S. 3). Sie wurden weltweit bereits ab den 1980er Jahren verboten, in West-Deutschland wurde ein Verbot der Verwendung des Inverkehrbringens oder der Herstellung in 1989 erlassen (LfU BW, 1995, S. 2; Zhang et al., 2013).

Eine Übersichtsdarstellung der relevanten historischen Produkte sowie ihrer Verbreitung ist in Kapitel 3 enthalten.

## 2.2 Chemisch-physikalische Eigenschaften

Bei den als POP im Stockholmer Übereinkommen gelisteten Schadstoffen handelt es sich vorwiegend um Verbindungen aus der Klasse der Halogenkohlenwasserstoffe, also Kohlenwasserstoffe in denen mindestens eines, bei POP typischerweise mehrere Wasserstoffatome durch Halogene wie Chlor, Fluor oder Brom ersetzt sind (LfU BY, 2021). POP sind durch Persistenz, Bioakkumulation, Ferntransportpotenzial sowie nachteilige Auswirkung auf die menschliche Gesundheit charakterisiert. Aufgrund ihrer spezifischen Stoffeigenschaften sind POP in diversen Umweltkompartimenten enthalten. Unter anderem eine mittlere

Flüchtigkeit sowie eine nennenswerte Wasserlöslichkeit ermöglichen ihre Verteilung über die Atmosphäre ebenso wie die Hydrosphäre (Lammel & Zetsch, 2007).

Wie bereits beschrieben, konzentriert sich der vorliegende Bericht auf die Gruppe der PCB, unter der alle chlosubstituierten Biphenyle verstanden werden (LfU BW, 1995, S. 4).

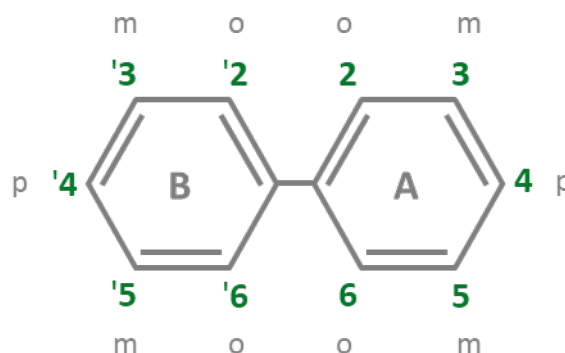
### 2.2.1 Chemischer Aufbau und Substitutionsstellung

PCB bestehen aus zwei gegeneinander drehbaren Phenylringen ( $C_6H_5$ ), deren Wasserstoffatome mit Chlor substituiert sind. Die Phenylringe sind durch eine C-C-Einfachbindung miteinander verbunden. PCB haben die allgemeine chemische Formel

$$(I.) \quad C_{12}H_{10-n}Cl_n,$$

wobei  $n$  die Anzahl der Chloratome (1-10) angibt. Je nach Chlorierungsgrad ergeben sich potenziell 209 unterschiedliche Strukturen, sogenannte Kongenere. Nach einer systematischen Nomenklatur von Ballschmiter & Zell (1980) werden die PCB entsprechend von 1 bis 209 nummeriert. PCB mit der gleichen Anzahl von Chloratomen können als Homologe zusammengefasst werden, also Monochlor-, Dichlor-, Trichlorbiphenyle etc. (Latscha et al., 2016, S. 23; LfU BW, 1995, S. 4). Der Chlorierungsgrad beeinflusst die physikalischen und chemischen Eigenschaften der Kongenere. Mit steigendem Chlorierungsgrad nehmen u. a. Dichte und Fettlöslichkeit zu, während Flüchtigkeit und Wasserlöslichkeit sowie die Reaktionsfähigkeit abnehmen (UBA, 2018). In Abbildung 1 sind die chemische Struktur sowie Nummerierung der Substitutionsstellung dargestellt.

**Abbildung 1: Chemische Struktur sowie Nummerierung der Substitutionsstellung der PCB**



Die Abkürzungen *ortho* (o), *meta* (m), *para* (p) bezeichnen die Positionen der Cl-Substituenten. A und B sind die jeweiligen Phenylringe.

Quelle: eigene Darstellung nach LfU BW (1995).

Die Positionen der Cl-Substituenten werden als *ortho*, *meta* oder *para* bezeichnet. Je nach Belegung der Positionen verändert sich die Molekülgeometrie, so dass z. B. ein freies Drehen der Phenylringe nur möglich ist, wenn die *ortho*-Position nicht (*non-ortho*) oder nur von einem Chloratom (*mono-ortho*) belegt ist. Die *non-* oder *mono-ortho*-PCB können eine coplanare Stellung annehmen – was bedeutet, dass beide Phenylringe planar in einer Ebene liegen können – und sind damit Dioxinen und Furanen ähnlich. Wenn zusätzlich beide *para*-Positionen sowie mindestens zwei *meta*-Positionen mit Chloratomen besetzt sind, werden sie als dioxinähnliche PCB (*dl*-PCB) bezeichnet (Anderson et al., 1997; Potrykus et al., 2017, S. 57; WHO, 2015). Die *dl*-PCB können besonders schlecht von Organismen metabolisiert oder ausgeschieden werden und sind relativ langsam mikrobiologisch abbaubar, weil ihnen – entsprechend der vorherigen Beschreibung – zwei benachbarte H-Atome in den *meta*- oder *para*-Positionen fehlen. Außerdem

sind die dl-PCB nochmals schädlicher für Organismen als die übrigen PCB (siehe Kapitel 2.2.5). Im Einzelnen sind die dl-PCB folgende Kongenere:

- ▶ PCB 77, 81, 126, 169 (non-ortho),
- ▶ PCB 105, 114, 118, 123, 156, 157, 167, 189 (mono-ortho).

Die weiteren 197 PCB-Kongenere können auch als nicht-dl-PCB zusammengefasst werden.

### 2.2.2 Persistenz

Unter Persistenz oder Stabilität wird die Beständigkeit einer Chemikalie gegenüber Abbau- und Transformationsprozessen bezeichnet. Zur Messung der Persistenz kann die Halbwertszeit verwendet werden, also der erforderliche Zeitraum, um die Stoffkonzentration im jeweiligen Kompartiment zu halbieren (Worch, 1997, S. 128). Daneben können Stoffkonzentrationen außer durch Abbauvorgänge natürlich auch durch Transport aus dem Kompartiment oder Verdünnung reduziert werden.

Gemäß Anhang D, Abs. 1b des Stockholm Übereinkommens erfüllen POP das Kriterium der Persistenz, wenn ihre Halbwertszeiten im Wasser größer 60 Tage oder im Boden größer 180 Tage oder im Sediment größer 180 Tage betragen (UNEP / SCC, 2019a).

Bei PCB hängt die Persistenz, insbesondere der Abbau, mit dem Chlorierungsgrad zusammen und nimmt tendenziell mit steigender Anzahl von Cl-Atomen zu (Worch, 1997, S. 146). Darüber hinaus beeinflussen die Cl-Positionen sowie Umgebungsbedingungen die Persistenz gegenüber Dechlorierungsprozessen (siehe Kapitel 2.2.1) (Shields et al., 2015, S. 359).

### 2.2.3 (Bio-)Akkumulation

POP werden u. a. über ihre Fähigkeit zur Bioakkumulation als solche eingestuft. Gemäß Anhang D, Abs. 1c des Stockholmer Übereinkommens wird das Kriterium der Bioakkumulation erfüllt, wenn der Biokonzentrationsfaktor (BCF) oder Bioakkumulationsfaktor (BAF) in aquatischen Spezies größer 5.000 ist. Bei fehlenden Daten zu BCF oder BAF, wird ein logarithmierter Octanol-Wasser-Verteilungskoeffizient ( $\log K_{ow}$ ) von größer 5 als Schwellenwert angenommen (UNEP / SCC, 2019a).

Als Bioakkumulation wird die relative Anreicherung eines Stoffes in einem Organismus gegenüber seiner Umgebung bezeichnet. Sie resultiert aus der respiratorischen oder dermalen Aufnahme (Biokonzentration) oder über die Nahrungsaufnahme (Biomagnifikation). Der Bioakkumulationsfaktor (BAF) gibt dabei das Verhältnis von Schadstoffkonzentration ( $C$ ) im Organismus gegenüber der des Lebensraums/der Umgebung wieder und wird wie folgt berechnet (Beyer & Biziuk, 2009):

$$(II.) \quad BAF = C_{Organismus} / C_{Umgebung}$$

Das Bioakkumulationspotenzial kann zudem über den spezifischen  $K_{ow}$  eines Stoffes abgeschätzt werden (Lammel & Zetsch, 2007). Der  $K_{ow}$  beschreibt das Verteilungsgleichgewicht einer polaren (Wasser) und einer unpolaren (*n*-Octanol) Flüssigkeit und ist ein Maß der Hydrophobie. Mit steigendem  $K_{ow}$  neigt der Stoff zur Lösung in der lipophilen Phase und damit zur Anreicherung in Böden und Biota (LfU BW, 1995, S. 19). PCB weisen einen vergleichsweise hohen  $K_{ow}$ -Wert auf; es kommt auch zur Anreicherung in der Nahrungskette (LfU BW, 1995, S. 22). Neben der Aufnahme durch Lebewesen können PCB auch an gelöste (DOM) oder an partikuläre (POM) organische Substanzen adsorbieren. Während PCB durch eine Bindung an DOM weniger bioverfügbar sind, werden sie partikelgebunden (POM) weiterhin über

Makrozoobenthos aufgenommen und können sich so in der Nahrungskette anreichern (Beyer & Biziuk, 2009).

#### 2.2.4 Ferntransportpotenzial

Unter dem Ferntransportpotenzial wird gemäß Anhang D, Abs. 1d des Stockholmer Übereinkommens eine Stoffeigenschaft verstanden, die bewirkt, dass eine Chemikalie an Orten gefunden wird, die weit entfernt vom Ort ihrer Freisetzung in die Umwelt liegen. Für Stoffe die vorwiegend über den Luftpfad verbreitet werden, stellt eine atmosphärische Halbwertszeit von mehr als 2 Tagen einen Beleg für ein solches Ferntransportpotenzial dar (UNEP / SCC, 2019a). Alternativ kann der Nachweis durch Monitoringdaten erbracht werden, welche auch die Ausbreitung über andere Transportpfade abbilden.

Wesentlich für den Ferntransport von PCB sind Emissionen in die Atmosphäre. Dabei spielen insbesondere Flüchtigkeit, Löslichkeit sowie die Umgebungstemperatur eine Rolle (Beyer & Biziuk, 2009; Wania & Mackay, 1993). In Kombination mit ihrer Persistenz ist es PCB möglich, sich in oder mit diversen Umweltmedien über weite Strecken zu bewegen. So ist eine Verteilung über die Atmosphäre wie auch ein partikelgebundener Transport über Wasser möglich (Beyer & Biziuk, 2009; Erickson, 2020; Mehmetli & Koumanova, 2008, S. 198).

Entsprechend der Hypothese der Globalen Destillation spielt für den Transport, insbesondere in kältere Regionen, die Kongeneren-spezifische Verteilung in den Kompartimenten Wasser/Boden/Biota gegenüber der Luft eine wesentliche Rolle. Im Zusammenspiel mit der unterschiedlichen Mobilität und Persistenz verschiedener Kongenere bewirkt dies eine Fraktionierung nach dem Chlorierungsgrad (Mackay & Wania, 1995; Weber et al., 2015, S. 92). Eine detaillierte Beschreibung kann Kapitel 3.2 entnommen werden.

#### 2.2.5 Toxizität

Gemäß Anhang D, Abs. 1e des Stockholm Übereinkommens erfüllen POP das Kriterium der Toxizität, wenn Nachweise über schädliche Wirkungen auf Menschen oder die Umwelt vorliegen oder Daten das Potenzial anzeigen (UNEP / SCC, 2019a).

Für die Gruppe der PCB insgesamt sind langfristige toxische Effekte belegt, insbesondere negative Beeinträchtigungen der Funktionen von Schilddrüse, Leber sowie des Nervensystems; Beeinflussung des Hormonsystems und des Immunsystems. Diejenigen PCB-Kongenere, deren Moleküle aufgrund des Substitutionsmusters der Cl-Atome in ihrer Gestalt den polychlorierten Dibenzodioxinen oder -furanen ähneln (dl-PCB) weisen zusätzlich eine dioxinartige Toxizität auf. Als giftigster Vertreter der Dioxine gilt das Dibenzo-p-Dioxin (2,3,7,8-TCDD), welches nach dem Ort des bekannten Chemieunfalls als „Seveso-Dioxin“ bekannt geworden ist. Die dioxinartige Giftigkeit eines PCB-Kongeners kann in Bezug auf das 2,3,7,8-TCDD durch sogenannte Toxizitätsäquivalente (TEQ) ausgedrückt werden, welche mit Hilfe von Faktoren (TEF) berechnet werden. Dabei werden die gemessenen PCB-Konzentrationen mit diesen TEF multipliziert. Die TEF der dl-PCB, welche durch die WHO festgesetzt wurden, liegen zwischen 0,00003 und 0,1 (van den Berg et al., 2006; Weber et al., 2015, S. 38).








Entsprechend der bisherigen Erkenntnisse können dl-PCB (ähnlich wie TCDD) langfristig karzinogen auf den Menschen wirken, erhöhen das Risiko für Tumore und können Einfluss auf das Hormon- und Nervensystem haben. Aufgrund ihrer Persistenz und Bioakkumulation können langfristige weitere Folgen auftreten, die allerdings bisher nicht abschließend belegt wurden (WHO, 2001, S. 141). Für nicht dl-PCB sind keine TEF definiert, zur Möglichkeit weiterer Beeinträchtigungen, etwa in Bezug auf Karzinogenität, liegen gemäß Angaben des BfR bisher keine ausreichenden Erkenntnisse vor (BfR, 2018).

Die Hauptquelle von PCB für Menschen stellt in diesem Zusammenhang die Nahrungsaufnahme von belasteten Lebensmitteln dar, wobei dl-PCB meistens den kleineren Anteil gegenüber den nicht dl-PCB ausmachen. Entsprechend ihrer Persistenz reichern sich vor allem höher chlorierte PCB in der Nahrungskette an, vornehmlich in tierischen Produkten (z. B. in Fisch, Milchprodukten, Eiern, Fleisch). Die Aufnahme über die Haut oder Atmung ist von untergeordneter Bedeutung, außer bei expliziter Exposition (WHO, 2016, S. 10). Zum Schutz der Gesundheit wurden vor diesem Hintergrund in der EU-Verordnung 1259/2011 Höchstgehalte für die Summen bestimmter PCB in bestimmten Lebensmitteln festgesetzt.

Für ein standardisiertes Monitoring wurden die sogenannten Indikator-PCB – PCB 28, 52, 101, 138, 153 und 180 – festgesetzt. Die Auswahl der Indikator-PCB erfolgte insbesondere aufgrund ihrer guten Nachweisbarkeit, ihrem in der Regel hohen Vorkommen in technischen PCB-Mischungen sowie der Abdeckung mehrerer Homologe (Moleküle mit 3 bis 7 Chloratomen). Darüber hinaus wird in verschiedenen Vorschriften für ein Monitoring zusätzlich PCB 118 als Vertreter der dl-PCB und die Bewertung ihrer spezifischen Toxizität erfasst (Weber et al., 2015, S. 38; Webster et al., 2013).

Basierend auf den zuvor beschriebenen Eigenschaften zeigt Tabelle 3 ausgewählte Parameter der 6 Indikator-PCB plus PCB 118 (auch ICES-7-PCB genannt).

**Tabelle 3: Übersicht ausgewählter Parameter der 6 Indikator PCB plus PCB 118**

Eigenschaften	PCB 28	PCB 52	PCB 101	PCB 118	PCB 138	PCB 153	PCB 180
CAS-Nr. * <sup>1</sup>	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	31508-00-6	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3
Molekülformel* <sup>1</sup>	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>4</sub>	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>
Molare Masse (g/mol)* <sup>2</sup>	257,5	292,0	326,4	326,4	360,8	360,8	395,3
Anzahl Chloratome* <sup>2</sup>	3	4	5	5	6	6	7
Octanol-Wasser-Verteilungs-koeffizient (log K <sub>OW</sub> = C <sub>O</sub> /C <sub>W</sub> )* <sup>3</sup>	5,500	6,025	6,404	6,404	6,988	6,991	7,359
TEF* <sup>a,4</sup>	-	-	-	0,00003	-	-	-
Struktur* <sup>1</sup>	2,4,4'	2,2',5,5'	2,2',4,5,5'	2,3',4,4',5	2,2',3,4,4',5'	2,2',4,4',5,5'	2,2',3,4,4',5,5'
2D-Struktur* <sup>1</sup>							

\*a: Für nicht dl-PCB liegen keine Toxizitätsäquivalente seitens der WHO vor, jedoch wurden in der EU-Verordnung 1259/2011 Höchstmengen für einzelne Lebensmittel festgesetzt.

Quellen: \*<sup>1</sup>: NBCI (2021g, 2021d, 2021f, 2021e, 2021b, 2021c, 2021a), \*<sup>2</sup>: LfU BW (1995, S. 6), \*<sup>3</sup>: Paasivirta & Sinkkonen (2009), \*<sup>4</sup>: van den Berg et al. (2006)

## 2.3 Erfassungsmethoden und Analyse

Um das Vorkommen von PCB in diversen Umweltkompartimenten analysieren zu können, sind unterschiedliche Erfassungsmethoden erforderlich. Zu unterscheiden sind aktive Probenahmen z. B. aus dem Boden sowie passive Probenahmen über Sammler z. B. bei Luftproben (Sobotka et al., 2021; Webster et al., 2013).

Um valide Analyseergebnisse zu erhalten, müssen zusätzliche Verunreinigungen bei der Probenahme ausgeschlossen sein. Auch müssen die Proben selbst für die eigentliche Analyse aufbereitet und gereinigt werden, um bereits vorhandene Verunreinigungen zu eliminieren. Ein

sogenanntes Clean-Up ist erforderlich, um jene Substanzen zu entfernen, die potenziell die Analyseergebnisse überlagern können (Webster et al., 2013).

Für eine Messung der einzelnen PCB-Kongenerere stehen unterschiedliche Verfahren zur Verfügung (LfU BW, 1995, S. 30):

- ▶ Chromatographie (Gas- bzw. Flüssigkeitschromatographie (HPLC)) mit Elektroneneinfangdetektoren oder Massenspektrometrie,
- ▶ Spektroskopie (Infrarot- bzw. Kernresonanzspektroskopie),
- ▶ Immunchemie (selektive Antigen-Antikörper-Reaktion, nur zum Nachweis der biologisch aktiven PCB).

Neben der HPLC kommt hauptsächlich die Gaschromatographie mit Elektroneneinfangdetektoren oder Massenspektrometrie zum Einsatz (Webster et al., 2013). Im Ergebnis kann ein aufgeschlüsseltes Kongenerenprofil ermittelt werden (siehe Abbildung 2).

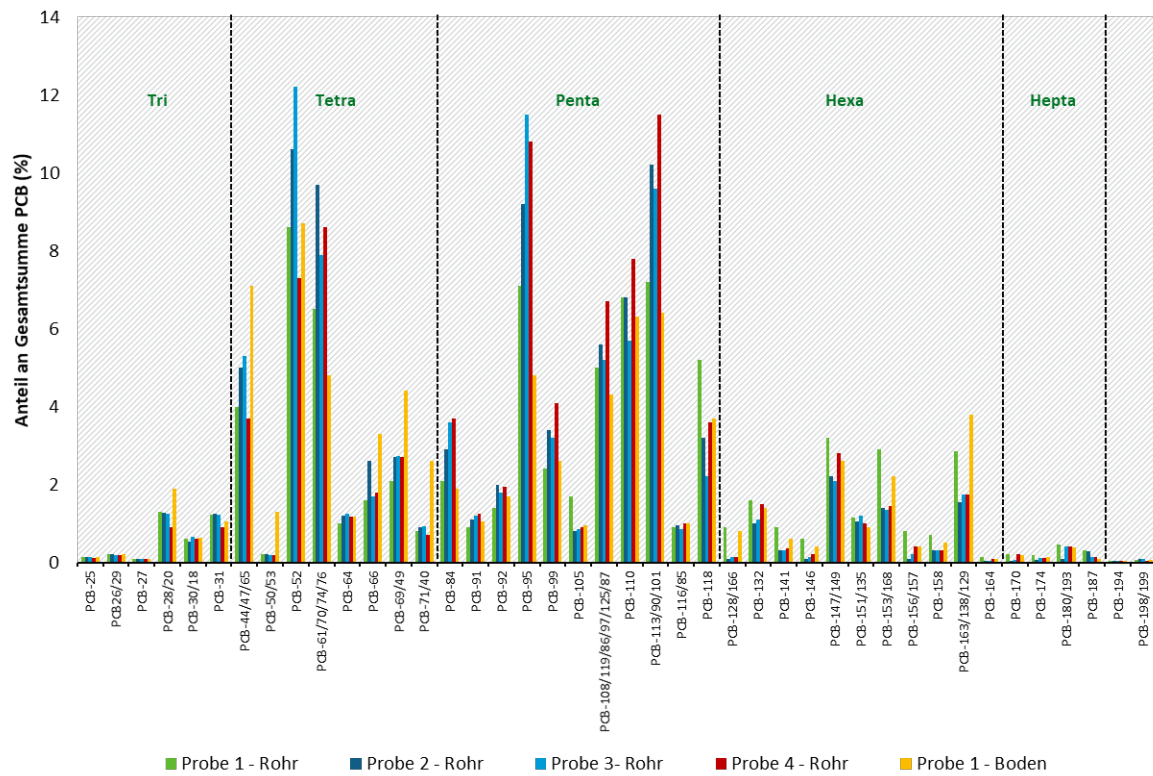
## 2.4 Kongenerenprofile

Industriell hergestellte PCB-Produkte stellen eine Mischung verschiedener Kongenerere dar. Die Produktion erfolgt durch Destillation des Produkts der Chlorierung von Biphenyl mit Fraktionierung nach Siedebereichen. Bei den Chlorierungsreaktionen von Biphenyl werden bestimmte Substitutionsmuster bevorzugt, so dass das entstehende Kongenerengemisch erstens nicht alle der theoretisch möglichen 209 Kongenerere und zweitens die vorhandenen Kongenerere nicht in gleichen Anteilen enthält. Für die Charakterisierung der durch Destillation erhaltenen Mischungen sind insbesondere die Anteile der Homologen (Chlorierungsgrad) relevant (LfU BW, 1995, S. 22).

Die über diese Prozesse hergestellten PCB-Produkte weisen weitestgehend konstante Zusammensetzungsverhältnisse der jeweils enthaltenen Kongeneren auf. Auch wenn diese in der Umwelt über Fraktionierungseffekte (siehe Kapitel 3.4) verändert werden können, verbleibt ein spezifisches Profil – ähnlich einem Fingerabdruck –, welches analysiert werden kann. Beispielhaft zeigt Abbildung 2 die Profile aus Resten von vier Abwasserrohren im Vergleich mit einer Bodenprobe vom selben Gelände. Die Balken zeigen den jeweiligen prozentualen Anteil an der gesamten analysierten PCB-Menge an.



**Abbildung 2: Beispielhafte Darstellung von Kongenerenprofilen mit Einteilung nach Homologen**



Beispielhafte Darstellung von Kongenerenprofilen mit Einteilung nach Homologen aus Resten von vier Abwasserrohren im Vergleich mit einer Bodenprobe vom selben Gelände. Der prozentuale Anteil an der Gesamtsumme wurde in Anlehnung an Figure 1 Saba & Boehm (2011) geschätzt.

Quelle: eigene Darstellung in Anlehnung an Figure 1 in Saba & Boehm (2011).

### 3 POP in der Umwelt

Aufgrund der zuvor beschriebenen Eigenschaften – Persistenz, Bioakkumulation und Potenzial zum Ferntransport – sind POP weltweit verteilt und können auch fernab ihrer Einsatzorte, wie in polaren Ökosystemen, nachgewiesen werden. Darüber hinaus reichern sich POP in der Nahrungskette an und können schädlich auf die betroffenen Organismen sowie die menschliche Gesundheit wirken (Breivik & Alcock, 2002; Prince et al., 2020; UBA, 2021d). Der Transportpfad von der Entstehung (Quelle) über verschiedene Umweltmedien zur Ablagerung (Senke) kann dabei vielschichtig sein. Zum besseren Verständnis dieses Pfades von den Quellen zu den Senken wird dieser Weg am Beispiel der PCB in den nachstehenden Abschnitten detaillierter beschrieben. Um gemessenen Belastungsprofilen mögliche Quellen zuzuordnen zu können, muss man dabei die Profilverschiebung durch Transport, Abbau und Bioakkumulation nachvollziehen.

#### 3.1 Quellen

PCB werden seit 1929/1930 industriell produziert. Der mengenmäßige Schwerpunkt lag dabei in den USA (Monsanto), aber auch in Deutschland (Bayer AG) wurden erhebliche Mengen PCB produziert (LfU BW, 1995, S. 2). Breivik et al. (2002) schätzten, dass weltweit mindestens 1.323 kt PCB produziert wurden, wobei die Menge aufgrund fehlender Dokumentation in einzelnen Ländern wahrscheinlich größer war. In Tabelle 4 sind Informationen und Daten zur PCB-Produktion zusammengestellt.

**Tabelle 4: Zusammenstellung der Daten zur PCB-Produktion in t (gemäß Literaturdaten)**

Produzent	Land	Handelsname	Start	Ende	Menge
Monsanto	USA	Aroclor	1930	1977	641.246
Geneva Ind.	USA	n. b.	1971	1973	454
Kanegafuchi	Japan	Kaneclor	1954	1972	56.326
Mitsubishi	Japan	Santotherm	1969	1972	2.461
Bayer AG	Westdeutschland	Clophen	1930	1983	159.062
Prodelec	Frankreich	Phenoclor, Pyralene	1930	1984	134.654
S.A. Cros	Spanien	n. b.	1955	1984	29.012
Monsanto	Großbritannien	Pyroclor	1954	1977	66.542
Caffaro	Italien	Fenclor, Apirolino	1958	1983	31.092
Chemka	ehem. Tschechoslowakei	Chemiko	1959	1984	21.482
Orgsteklo	Russland (ehem. UdSSR)	Sovol, Sovtol, TCB	1939	1990	141.800
Orgsintez	Russland (ehem. UdSSR)	Sovol, Sovtol, TCB	1972	1993	32.000
Xi'an	China	n. b.	1930	1993	8.000

Zusammengefasste Tabelle entsprechend der Arbeiten von Breivik et al. (2002, S. 183) und LfU BW (1995, S. 2). Sofern der Handelsname nicht dokumentiert war, wurde dies mit n. b. (nicht bekannt) vermerkt.

Quelle: Breivik et al. (2002), LfU BW (1995, S. 2).

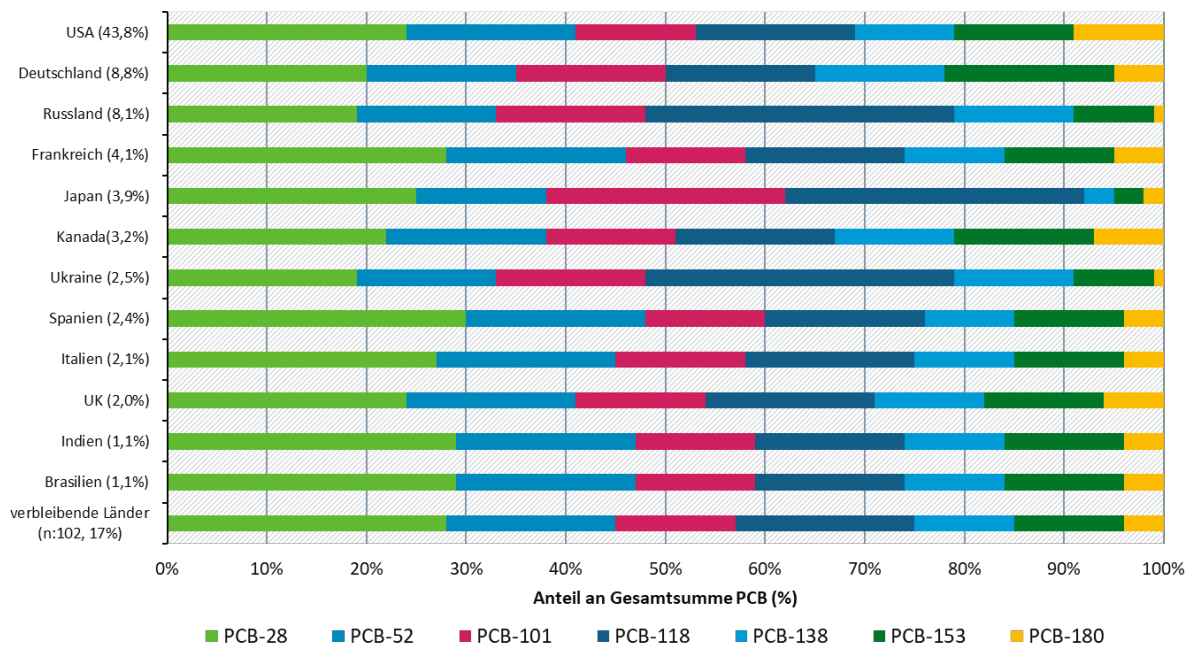
Bei der Herstellung von technischen PCB-Mischungen lässt man Biphenyl in Gegenwart von Eisen oder Eisen(III)chlorid mit Chlor reagieren, wobei der Chlorgehalt (Massenanteil) der



erhaltenen Produkte je nach Reaktionsbedingungen zwischen etwa 20 % und 70 % liegt. Der Chlorgehalt kann bei vielen technischen Mischungen dem jeweiligen Handelsnamen entnommen werden: Beispielsweise enthält das Produkt Aroclor 1254 von Monsanto 54 % Chlor (die Ziffern 12 bezeichnen das Biphenylgerüst). Der Handelsname des Produkts Clophen A30 der Firma Bayer AG bezieht sich auf das dominierende Homologe (Trichlorbiphenyle) (Breivik et al., 2002; LfU BW, 1995, S. 2).

Wie bereits angesprochen wurden PCB weltweit produziert. Die Produkte wurden teilweise im Produktionsland eingesetzt (verbraucht) aber ansonsten auch exportiert. So ergibt sich neben den dargestellten Produktionsmengen ein länderspezifisches Verbrauchsprofil aus Produktion, Import und Export (Breivik et al., 2002). Derartige Verbrauchsprofile wurden in Abbildung 3 für die Indikator-PCB plus PCB 118 (ICES-7-PCB) für ausgewählte Länder nach den Daten von Breivik et al. (2002) dargestellt. Dabei werden übergeordnete, regionale Unterschiede in den Verbrauchsprofilen deutlich, beispielsweise beim Einsatz von PCB 118 in Russland und Japan gegenüber den USA und Deutschland.

**Abbildung 3: Länderspezifische Verbrauchsprofile ausgewählter PCB von 1930 - 2000**



Basierend auf den Daten von Breivik et al. (2002) wurden die kumulierten Verbrauchsprofile für die Indikator PCB plus PCB 118 von 1930 bis 2000 berechnet. Einzeln aufgeführt sind alle Länder mit einem Anteil > 1 % am globalen Gesamtverbrauch (Wert in Klammern); das Verbrauchsprofil aller weiteren 102 in der Studie benannten Länder wurde ebenfalls berechnet. Quelle: Schematische Darstellung in Anlehnung an Breivik et al. (2002).

Der Verbrauch der produzierten technischen Mischungen erfolgt meistens in Form verschiedener Industrieprodukte, wobei nach geschlossener und offener Anwendung unterschieden werden kann:

- Die geschlossene Anwendung umfasst im Wesentlichen den Einsatz in Transformatoren, Kondensatoren oder als Hydrauliköl. Letzteres wurde vorwiegend im Bergbau eingesetzt, Transformatoren und Kondensatoren finden sich in einer Vielzahl elektrischer Geräte und Leuchtmittel (Weber et al., 2015, S. 45).
- In der offenen Anwendung kamen PCB insbesondere bei Fugen- und Dichtmassen sowie bei Farben, Lacken und Flammenschutzmitteln zum Einsatz (Weber et al., 2015, S. 46).

Auch wenn die industrielle Produktion im Jahr 1993 endete und später mit dem Stockholmer Übereinkommen verboten wurde (siehe Kapitel 2.1), sind bestehende PCB-Produkte weiterhin in der Verwendung. Zum Beispiel ist ein Großteil der verarbeiteten Fugenmassen mit PCB-Anteilen noch vorhanden, ebenso sind teilweise PCB-haltige Kondensatoren noch im Einsatz (Weber et al., 2015, S. 57).

Durch nicht fachgerechte Entsorgung konnten und können weiterhin PCB aus PCB-haltigen Produkten freigesetzt werden und stellen eine Quelle für Einträge in die Umwelt dar. Dabei kann es zu Leckagen bei Transformatoren oder zur Freisetzung beim Schreddern von Elektroschrott kommen. In diesem Zusammenhang sind auch Exporte von Elektroschrott, insbesondere nach Westafrika und Südostasien nicht außer Acht zu lassen und beeinträchtigen die regionale Belastung der Importländer (siehe auch Breivik et al. (2016)). Die in der offenen Anwendung eingesetzten Produkte (z. B. Fugenmasse, Farben) standen und stehen demgegenüber bereits ab ihrem Einsatz im direkten Kontakt mit den Umweltmedien Wasser und Luft und sind damit wesentlich für den Eintrag von PCB in die Umwelt verantwortlich.

Neben den beschriebenen industriell produzierten PCB-Mengen können PCB – analog zu den Dioxinen – auch unbeabsichtigt in thermischen und chemischen Prozessen entstehen. Als Beispiele für thermische Entstehungen sind unvollständige Verbrennungsprozesse in der Industrie, (Wald-)Brände oder Vulkanausbrüche zu nennen. Unter chemischen Prozessen sind u. a. Synthesen von Chlorverbindungen wie bei Farbpigmenten zu verstehen (Weber et al., 2015, S. 62). Anzumerken ist zudem, dass es bei der Verarbeitung und Schmelze von Metallschrott auch simultan zur Freisetzung von PCB durch Leckagen und zur Bildung von PCB durch die thermische Verwertung kommen kann (Weber et al., 2015, S. 62). Insgesamt sind die Einträge aus beabsichtigt produzierten technischen Gemischen aber als deutlich höher gegenüber den Einträgen von unbeabsichtigt produzierten PCB zu bewerten (Weber et al., 2015, S. 94).

### 3.2 Transportpfade

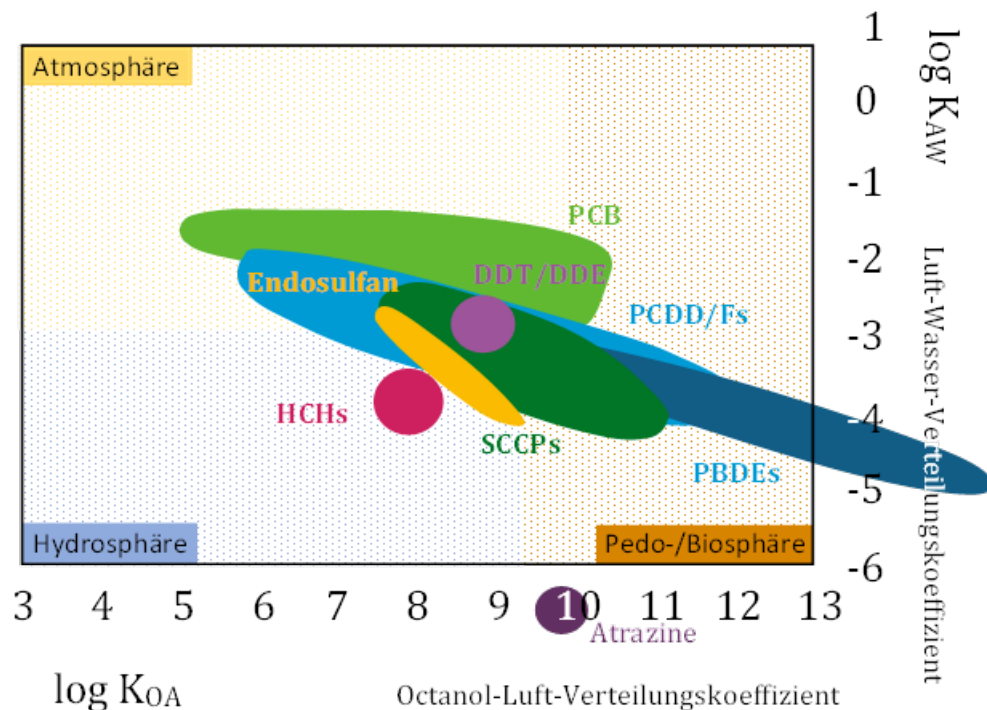
Ausgehend von den zuvor beschriebenen Quellen können PCB über diverse Pfade verbreitet werden. In Abbildung 4 (in Anlehnung an Lammel & Zetsch (2007)), ist die zu erwartende Verteilung relevanter POP in der Atmo-, Hydro-, Pedo- und Biosphäre abgebildet, basierend auf den spezifischen Octanol-Luft- sowie Luft-Wasser-Verteilungskoeffizienten. Die Grafik verdeutlicht die Fähigkeit der POP sich über Kompartimentgrenzen hinweg zu verteilen. Demnach verteilen sich PCB im thermodynamischen Gleichgewicht vorwiegend über die Atmosphäre und können aufgrund ihres spezifischen  $K_{OW}$  in der Pedo- und Biosphäre angereichert werden, außerdem ist der partikelgebundene Transport im Wasser und der Luft relevant.

Es ist zu beachten, dass die Umweltkompartimente als Multiphasensysteme zu verstehen sind. Das bedeutet, dass in jeder der genannten Sphären verschiedene Phasen vorhanden sind. Beispielsweise sind PCB in Böden (Pedosphäre) grundsätzlich sowohl an Partikel gebunden, im Bodenwasser gelöst und in der Bodenluft vorhanden. In den Weltmeeren spielt der Transport mit absinkendem Phytoplankton eine wichtige Rolle, der Haupteintrag erfolgt über Diffusionsvorgänge an der Grenzfläche Wasser/Luft (Gioia et al., 2013). Während des atmosphärischen Transports können PCB an Wassertropfen oder Aerosole gebunden sein. Inwiefern die beispielhaft genannten Prozesse stattfinden, hängt stark von den jeweiligen Umweltbedingungen und chemischen Eigenschaften der einzelnen PCB-Kongeneren ab (Lammel & Zetsch, 2007). Darüber hinaus ist anzumerken, dass PCB auch in freier Phase vorliegen können, beispielsweise nach Havarien.

Basierend auf diesen Überlegungen gibt es diverse potenzielle Verbreitungspfade für PCB. Aufgrund der chemischen Eigenschaften sowie der Exposition von PCB aus offener Anwendung kommt dem atmosphärischen Transport die Bedeutung als wichtigster Ausbreitungspfad zu (Potrykus et al., 2017, S. 72). Dabei wurden Verbreitungen über Distanzen von mehr als 30 km nachgewiesen (Weber et al., 2015, S. 92). Der Eintrag in Binnengewässer erfolgt hingegen wahrscheinlich vorwiegend mit dem Oberflächenabfluss durch belastete urbane Partikel (Prince et al., 2020).

Neben den beschriebenen Prozessen zwischen einzelnen Kompartimenten ist zudem der Eintrag von PCB durch anthropogene Handlungen (z. B. Aufbringung von belasteten Klärschlämmen) zu nennen (Weber et al., 2015, S. 61).

**Abbildung 4: Verteilungsverhalten von POP in der Umwelt**



Gemäß thermodynamischen Überlegungen zu erwartendes Verteilungsverhalten wichtiger Umweltchemikalien (PCB = polychlorierte Biphenyle, PCDD/F = polychlorierte Dibenzodioxine und -furane, HCH = Hexachlorcyclohexan, SCCP = kurzkettige chlorierte Paraffine, PBDE = polybromierte Diphenylether) in die Gasphase der Atmosphäre, die Hydrosphäre und die Pedo-/Biosphäre.

Quelle: eigene Darstellung in Anlehnung an Lammel & Zetsch (2007).

Über die genannten Prozesse gelangen PCB von ihren Quellen zu Senken und werden abgelagert (siehe Kapitel 3.3). Auf diesem Weg können sich die PCB-Kongenere in Abhängigkeit ihrer spezifischen Eigenschaften unterschiedlich verhalten und es kann zu sogenannten Fraktionierungseffekten kommen, also Verschiebungen des Kongenerenprofils verbunden mit der An- oder Abreicherungen einzelner PCB-Kongenere. Diese Prozesse sind komplex und Gegenstand der aktuellen Forschung (siehe auch Kapitel 3.4).

Aufgrund ihrer Persistenz muss die Deposition in einer Senke jedoch nicht bedeuten, dass die jeweiligen PCB dort verbleiben, stattdessen kann es zu sogenannten Sekundäremissionen (Reemissionen/Remobilisierung) kommen. Dieser Prozess ist maßgeblich von der Flüchtigkeit der einzelnen PCB abhängig (Weber et al., 2015, S. 91). Niedrig chlorierte PCB mit ihrer höheren Flüchtigkeit können eher aus Böden oder Wasser in die Atmosphäre emittiert werden als höher

chlorierte PCB (Beyer & Biziuk, 2009), auch die Remobilisierung aus Gewässersedimenten hängt vom Chlorierungsgrad ab.

Darüber hinaus können bereits abgelagerte PCB auch über die Nahrungsaufnahme bzw. den Kontakt zu belasteten Kompartimenten weiter getragen werden – z. B. über belastete Sedimente als Quelle für Fische oder über Bodenpartikel als Quelle für Nutz- und Wildtiere. In diesem Fall kann es durch die Aufnahme von PCB zur Bioakkumulation in den betroffenen Organismen kommen, wobei sich die PCB entlang der Nahrungskette anreichern (UBA, 2018; Weber et al., 2015, S. 173). Belastete Organismen stellen damit sowohl Transportmedium als auch Senke dar.

### 3.3 Senken

Die in die Umwelt eingetragenen PCB können nach dem Transport in unterschiedlichen Umweltkompartimenten abgelagert werden. Sofern sie nicht remobilisiert werden, kann das betroffene Kompartiment zur Senke für PCB werden. Entscheidend dafür sind einerseits die chemisch-physikalischen Eigenschaften der PCB und andererseits die Eigenschaften der Senken.

Wie in Kapitel 2.2.3 beschrieben weisen PCB einen vergleichsweise hohen  $K_{OW}$ -Wert auf und neigen damit zur Verteilung in lipophile Phasen und folglich zu einer Anreicherung in Böden und Biota (LfU BW, 1995, S. 19). Daher stellen Böden und Sedimente die wichtigste Senke dar, hier befinden sich mehr „als 90% aller in die Umwelt eingetragenen dl-PCB“ (Potrykus et al., 2017, S. 75). Da PCB stark an Bodenpartikeln sorbieren, insbesondere an organischen Bodenbestandteilen, haben Böden ein beachtliches Potenzial als Senken (Potrykus et al., 2017, S. 75). Die heutige Belastung von Böden und Sedimenten ist vor allem auf die historischen Einträge von PCB zurückzuführen, wobei die individuelle Belastungssituation stark von den Quellen in der Umgebung abhängt (Weber et al., 2015, S. 49).

PCB werden auch in messbaren Konzentrationen Luft und Wasser nachgewiesen. Basierend auf den chemisch-physikalischen Eigenschaften sind diese Kompartimente jedoch eher als Transportmedien statt als Senke anzusehen (LfU BW, 1995, S. 60).

Neben Böden und Sedimenten als Anreicherungskompartimente stellen organische Partikel bzw. Organismen potenzielle Senken dar. Hier führt die beschriebene Bioakkumulation zur Anreicherung von PCB-Kongeneren im Organismus, insbesondere im Fettgewebe. Von der Belastung sind sowohl wild lebende Tiere (z. B. Wildschweine) als auch Nutztiere betroffen (Potrykus et al., 2017, S. 82). Durch die kontinuierliche Lebensmittelüberwachung ist eine PCB-Kontamination vor allem für Lebensmittel nachfolgender Nutztierhaltungen bekannt (Weber et al., 2015, S. 99).

- Fleisch von Rindern und Schafen aus extensiver Haltung,
- Eier aus Freilandhaltung,
- Fische, insbesondere fettreiche Süßwasserfische.

Der Aufnahmepfad über die Nahrung ist dabei für über 90 % der im menschlichen Körper vorhandenen PCB-Belastungen verantwortlich, sofern keine gesonderte Exposition vorliegt (Weber et al., 2015, S. 29).

Parallel zur Deposition von PCB in Senken, kann es zum Abbau von PCB kommen. Wie eingangs beschrieben, weisen PCB jedoch eine relativ hohe Halbwertszeit auf (siehe Tabelle 5), die nach Schätzungen zwischen Jahren, Jahrzehnten und ggf. länger schwankt (Weber et al., 2015, S. 96).

Der Abbau von PCB selbst erfolgt über verschiedene Mechanismen, die insbesondere von der Anzahl der Cl-Atome aber auch von deren Position abhängen. So zeigen sich dl-PCB als relativ stabil und resistent gegenüber biologischem Abbau und Metabolismus (Beyer & Biziuk, 2009).

In Wasser oder Böden erfolgt der Abbau von PCB durch Mikroorganismen. Dabei kommt es entweder unter aeroben Bedingungen zur oxidativen Dechlorierung oder unter anaeroben Bedingungen zur reduktiven Dechlorierung. Zudem kann es zur hydrolytischen Dehalogenisierung kommen (Beyer & Biziuk, 2009). Anzumerken ist, dass eine anaerobe Reduktion ausschließlich für hochchlorierte PCB erfolgt, während niedrig chlorierte PCB ausschließlich für einen aeroben Abbau zugänglich sind (Beyer & Biziuk, 2009).

In der Atmosphäre erfolgt der Abbau vorwiegend über die Oxidation durch OH-Radikale, welche bei der Photolyse von Ozon entstehen. Die Geschwindigkeit der Reaktion ist abhängig von der Temperatur und Konzentration sowie vom Chlorierungsgrad. Dabei ist festzustellen, dass verstärkt niedrig chlorierte PCB-Kongenere abgebaut werden, die Reaktion mit höher chlorierten PCB ist vergleichsweise gehemmt (Lammel & Zetsch, 2007; Potrykus et al., 2017, S. 73). Der Abbau in der Atmosphäre erfolgt wesentlich schneller als in Böden und Gewässern (Lammel & Zetsch, 2007).

In höheren Organismen wird die Fähigkeit zum Abbau oder zur Transformation von PCB hingegen als gering eingeschätzt, jedoch können diese PCB zum Teil metabolisiert werden. Dabei werden PCB durch sogenannte Isoenzyme umgewandelt und können ausgeschieden werden. Insgesamt ist die Metabolisierung und die damit verknüpfte Ausscheidung von PCB jedoch geringer als die Aufnahme, so dass es zur Bioakkumulation der PCB-Kongenere im Organismus kommt (LfU BW, 1995, S. 72).

Abschließend ist festzustellen, dass zwar die PCB-Emissionen seit Inkrafttreten der unterschiedlichen Regulierungen und Verbote abgenommen haben. Die Schadstoffe sind jedoch mittlerweile globaler verteilt und reichern sich aufgrund des vergleichsweise langsamen Abbaus in den Quellen an, so dass sie weiterhin eine Gefährdung für die menschliche Gesundheit darstellen (UBA, 2018).

### 3.4 Profilverschiebung durch Transport, Abbau und Bioakkumulation

Durch mehrere Faktoren kann sich das Kongenerenprofil von PCB auf dem Weg von den Quellen zu den Senken ändern. Zum einen kann es zu Veränderungen in Folge präferentiellen Transports und Abbaus bestimmter Kongeneren über verschiedene Umweltkompartimente hinweg kommen, was als *weathering* (bzw. Alterung) bezeichnet wird. Andererseits kann es zu Profilverschiebungen bei der Schadstoffaufnahme und -anreicherung in Organismen kommen (siehe auch Kapitel 2.2.3, Bioakkumulation).

Entscheidend für die jeweils relevanten Effekte ist die Betrachtung des spezifischen Transportpfades von der Quelle bis zur Senke (siehe auch Kapitel 3.2). Zudem ist es für einen späteren Profilvergleich relevant, den dominierenden Eintragspfad zu identifizieren, welcher das PCB-Profil maßgeblich bestimmt. Im Fokus der bisher erfolgten Analysen standen Proben von Fischen, so dass folgende Pfade für potenzielle Profilverschiebungen recherchiert und betrachtet wurden (siehe auch Selle et al., 2024):

1. Quelle ⇒ Luft ⇒ Wasser (offenes Meer) ⇒ Biota (Senke)
2. Quelle ⇒ Oberflächenabfluss ⇒ Wasser (Binnengewässer) ⇒ Sediment ⇒ Biota (Senke)

Für 1. werden in der Literatur im Wesentlichen die nachfolgenden Effekte für die Fraktionierung von PCB-Profilen in der Atmosphäre dokumentiert. Grundlegend ist dabei die Annahme, dass Stoffe entsprechend ihrer physikochemischen Eigenschaften (insbesondere Chlorierungsgrad



und damit assoziierte Atommasse) ein unterschiedliches Ferntransportpotenzial aufweisen (von Waldow et al., 2010). Weitere Profilveränderungen finden bei den Phasenübergängen Luft-Wasser und Wasser-Biota statt.

- **„Global Fractionation“** Hypothesis (Wania & Mackay, 1993) bzw. **„Latitudinal Fractionation“** (Wania & Mackay, 1996).

Die Hypothese geht davon aus, dass Chlorkohlenwasserstoffe (inkl. PCB) mit zunehmender Volatilität über die Luft einfacher und weiter aus den gemäßigten Breiten (hauptsächliche Anwendung) in kältere Klimazonen transportiert werden und sich dort relativ anreichern. Hingegen werden schwere, weniger volatile Stoffe emissionsnah deponiert, weil sie sich bei Temperaturabfall eher im Wasser lösen und in Böden binden – und somit weniger in höhere Breiten transportiert werden (Wania & Mackay, 1993).

- **„Differential Removal“** Hypothesis (von Waldow et al., 2010)

Von Waldow et al. (2010) konnten in ihrer Studie zeigen, dass für die Fraktionierung des PCB-Profils in der Atmosphäre die Entfernung zur Emissionsquelle und nicht die Umgebungstemperatur entscheidend ist. Insbesondere höherchlorierte PCB werden in der Nähe zum Emissionsort partikelgebunden deponiert, während leichtere PCB weiter transportiert werden (Weber et al., 2015, S. 92).

Für den unter 2. genannten spezifischen Transportpfad ist der partikelgebundene Transport sowie die anschließende Ablagerung im Sediment relevant (Howell et al., 2011). Während des partikelgebundenen Transports findet wahrscheinlich keine Fraktionierung statt. Erst nach Ablagerung im Sedimentkörper beginnt der Alterungsprozess, bei dem die höherchlorierten PCB mikrobiell langsamer abgebaut werden als niedrigchlorierte PCB (Weber et al., 2015). Die Fische adoptieren dann ein Profil, welches ähnlich zum Sedimentprofil ist, es kommt demnach nur zu geringfügigen Profilverschiebungen (Morgan & Lohmann, 2010).

## 4 POP-Dioxin-Datenbank

### 4.1 Ziele und Aufbau

Im Rahmen des Stockholmer Übereinkommens übernimmt das UBA als oberste zuständige Bundesbehörde die Berichterstattung, die Führung nationaler Emissionsinventare, die Durchführung relevanter Forschungsaktivitäten, die wissenschaftliche Politikberatung sowie die Erarbeitung von Regulierungsvorschlägen. In diesem Zusammenhang wird in Zusammenarbeit mit dem BVL und dem BfR auch die PDB betrieben (UBA, 2021c).

Die PDB wurde als Archivierungs- und Informationssystem für themenbezogene Untersuchungsprogramme des Bundes und der Länder konzipiert. Sie umfasst Daten von Belastungen durch Dioxine und weitere POP über mehr als 20 Jahre und ermöglicht die Auswertung und zentrale Dokumentation der Ergebnisse. Für registrierte Fachnutzer wird zur Datenrecherche in der PDB eine Webanwendung angeboten (UBA, 2021c).

Die technischen und fachlichen Anforderungen an die PDB sind gestiegen, so dass die Struktur der PDB zukünftig modernisiert werden soll. Dabei sollen das Datenmodell angepasst, neue Schnittstellen implementiert und die Nutzerfreundlichkeit erhöht werden. Im Rahmen eines Forschungsprojektes zur PDB wurde z. B. vorgeschlagen, in der Datenstruktur den Grundsatz einer Zeile je Probe zu berücksichtigen (Fiedler, 2019; UBA, 2021b).

### 4.2 Datenbestand und -lücken

Die PDB erfasst systematisch Schadstoffbelastungen mit POP in der Umwelt. Dazu werden neben den stoffspezifischen Messdaten weitere Informationen zu den Proben und zur Probenahme bereitgestellt:

- ▶ Informationen zur Datenquelle (u. a. Messprogramm und Anlass, Forschungsobjekt),
- ▶ Daten zur Charakterisierung der Probe (u. a., Erfassungszeit und -ort, Kompartiment und je nach Kompartiment weitere spezifische Informationen),
- ▶ Informationen zur Analytik (u. a. Nachweisgrenze (LOD) und Bestimmungsgrenze (LOQ)).

Die PDB klassifiziert die Daten grundsätzlich nach dem beprobten Umweltkompartiment, dabei wird in 16 Kompartimente unterschieden, die entsprechend ihres Bezuges in vier Gruppen geordnet werden können:

- ▶ luftbezogen: Depositionen, Emissionen und Immissionen, Innenraummessungen,
- ▶ abiotisch: Boden, Gewässer, Stäube, Sediment,
- ▶ biotisch: Biota, z. T. Lebensmittel, Humanproben (Blut, Muttermilch),
- ▶ anthropogen: Futtermittel, Produkte, z. T. Lebensmittel, Abfälle.

Aktuell umfasst der Datenbestand der PDB ca. 1,7 Millionen Einzelmesswerte aus ca. 68.000 Proben (UBA, 2021a). Da jedoch je nach Messprogramm und Kompartiment unterschiedliche Parameter gemessen werden, ist entsprechend nicht für alle Proben stets das gesamte Analysespektrum abgedeckt. Beispielsweise werden auch die 6 Indikator-PCB nicht durchgängig erfasst. Damit variiert der Informationsgehalt der Proben trotz umfangreichen Datenbestandes (Fiedler, 2019).

Einen großen Umfang haben dabei die Proben aus dem Bereich der Lebensmittel. Aufgrund der Größe und Diversität des Kompartiments Lebensmittel wird dieses allerdings zwei verschiedenen Kompartiment-Gruppen (biotisch/anthropogen) zugeordnet. Im Rahmen der Bearbeitung dieses Vorhabens wurden diese Proben näher betrachtet, insbesondere die Ergebnisse zu Fischen und Fischereierzeugnissen. Fischereiprodukte stellen eine wichtige Quelle für die PCB-Belastung im menschlichen Körper dar (Freels et al., 2007). In der PDB liegen über einen großen Zeitraum diverse Planproben zu unterschiedlichen aquatischen Organismen vor. Für die Betrachtung konnte ein Datensatz von ca. 350 Proben von Fischen untersucht werden, für die Messwerte der ICES-7-PCB vorliegen. Aufgrund der unterschiedlichen Fanggebiete der Fische werden sowohl Binnengewässer (vorwiegend in Europa) als auch Meere (u. a. Nordostatlantik und Pazifik) abgedeckt. Die Ergebnisse der Analysen werden in Kapitel 8 dargestellt.

Im Zusammenhang mit der Analyse der Fischproben der PDB wurden weitere Datensätze recherchiert, um bisher erkannte Muster vergleichen und näher bestimmen zu können (siehe Kapitel 4.4).

### 4.3 Bereits integrierte Datensätze bestehender Studien

Auch wenn die PDB bereits einen umfangreichen Datenbestand zur Analyse von POP-Belastungen bereitstellt, erfordern gezielte Fragestellungen bzgl. Transportpfaden sowie der Verbindung von Quelle und Senke eine entsprechende Ergänzung des Datenbestands.

In diesem Zusammenhang erfolgten bereits in vorherigen Forschungsvorhaben gezielte Recherchen zur Erweiterung des Datenbestands der PDB:

- ▶ Weber et al. (2015) untersuchten den Datenbestand der PDB zu technischen Produkten, Erzeugnissen und Zubereitungen mit dem Ziel die PDB um Messergebnisse aus der Technosphäre zu erweitern. Dabei wurden insbesondere die Ergebnisse von Forschungsvorhaben des UBA berücksichtigt sowie weitere Quellen recherchiert. Weber et al. (2015) haben insgesamt über 800 Kongeneren-spezifische Proben zu PCDD, PCDF und PCB für die Übernahme in die PDB recherchiert.
- ▶ Potrykus et al. (2017) recherchierten diverse Datensätze zur Aufnahme in die PDB für die Kompartimente Technosphäre, Luft und pflanzliche Biota. Als Schadstoffe standen dabei dl-PCB, SCCP, PBDE und HBCD im Fokus. Insgesamt konnten ca. 1.800 qualitätsgesicherte Datensätze für die PDB aufbereitet werden.
- ▶ Fiedler (2019) untersuchte die Datenbank ebenfalls zur Technosphäre. Im Rahmen des Forschungsvorhabens konnten über 200 Proben zu PCDD, PCDF und PCB ergänzt werden.

Den genannten Publikationen liegen jeweils umfangreiche Quellenverzeichnisse bei, die die durchgeführten Datenrecherchen dokumentieren.

### 4.4 Erweiterung des Datenbestandes

Die Erweiterung des Datenbestandes im Rahmen des hier dokumentierten Vorhabens erfolgt nach drei unterschiedlichen Ansätzen:

- a) Literaturrecherche mit festgesetzten Suchparametern
- b) gezielte Recherche zur themenbezogenen Erweiterung der PDB
- c) Auswertung von Publikationen von Landesbehörden (bereitgestellt durch das UBA)



Der Fokus liegt dabei auf PCB-Messungen, insbesondere der sechs Indikator PCB bzw. zusätzlich PCB 118.

Für die Literaturrecherche (Ansatz a) wurde entsprechend der Vorgaben des Forschungsprojektes nach folgenden Schlagworten auf der National Library of Medicine (<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov>) gesucht:

*pcb AND (congener AND pattern) AND (source OR sink OR path OR transfer)*

Die Abfrage lieferte 327 Suchergebnisse als Basis für eine strukturierte Auswertung (zuletzt geprüft am 13.10.2021).

Im Rahmen der gezielten Recherche zur themenbezogenen Erweiterung der PDB (Ansatz b) lag der Fokus auf Fischen. Insgesamt wurden 8 Studien identifiziert von denen folgende für das Vorhaben relevante Daten enthalten:

- ▶ Die Forschungsgruppe um Felipe-Sotelo et al. (2008) hat 191 Proben von Fischen in unterschiedlichen europäischen Bergseen analysiert. Der Datensatz ist insbesondere für die Analyse einer möglichen temperaturbedingten Beeinflussung interessant. Es konnten 118 vorständige Datensätze mit gemessenen Konzentrationen für die 6 Indikator-PCB plus PCB118 bereitgestellt werden.
- ▶ Prince et al. (2020) haben einen globalen Datensatz zu Belastungen verschiedener Biota zusammengestellt, basierend auf einer Literaturrecherche, und veröffentlichten Ergebnissen zu PCB und stabilen Isotopen. Insgesamt stehen 178 Proben mit Messwerten zu den 6 Indikator-PCB plus PCB 118 zur Verfügung. Diese Daten wurden gemeinsam mit der Publikation veröffentlicht.
- ▶ Der Internationale Rat für Meeresforschung (ICES) sammelt seit mehreren Jahrzehnten Daten zu u. a. Biota, Sediment und Wasser im Nordostatlantik aus gezielten Forschungsprogrammen seiner Mitgliedsstaaten. Diese Datensätze sind sehr umfangreich und umfassen diverse PCB-Kongenere. Je nach Konfiguration stehen für die 6 Indikator-PCB plus PCB 118 insgesamt ca. 42.500 Proben zu Biota (ca. 32.500), Sedimenten (ca. 8.800) und Wasser (ca. 1.200) zur Verfügung. Diese Daten basieren auf regelmäßigen Datenlieferungen an den ICES und können über das ICES-Datenportal bezogen werden.

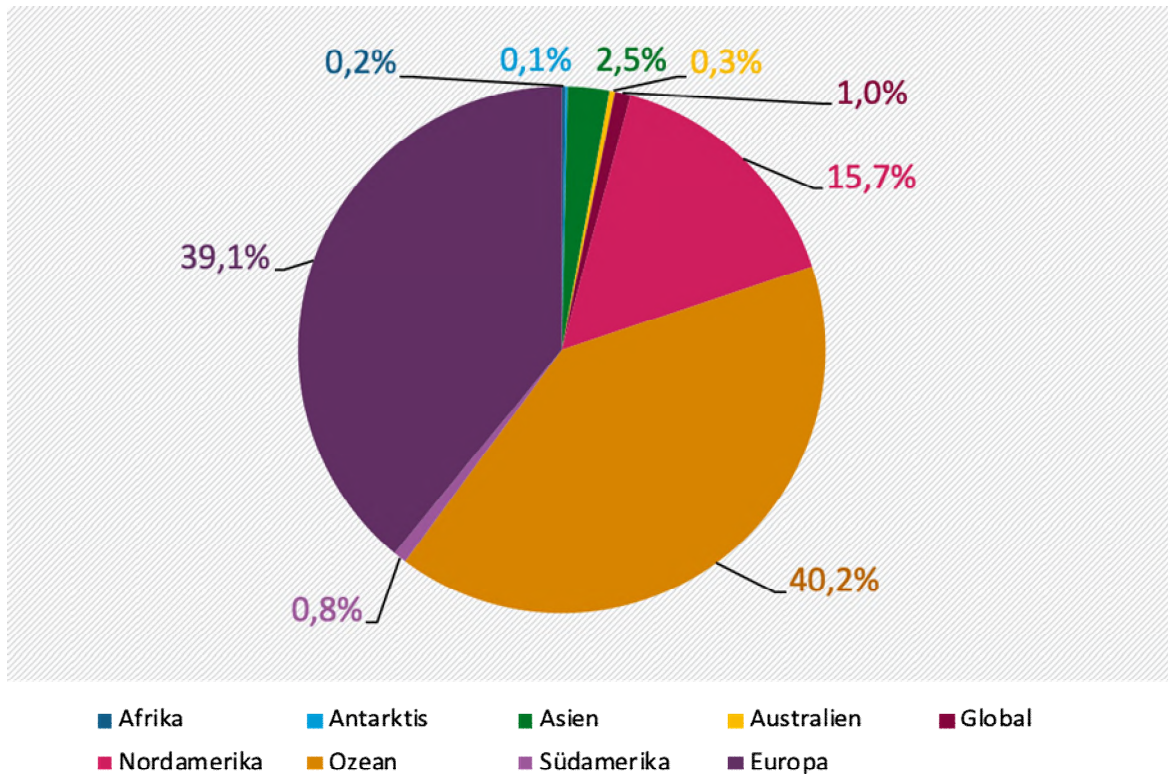
Um die Transportpfade in dem Lebensraum der Fische zu untersuchen, wurden zudem Studien gefunden, welche Proben zu Schelfsedimenten (Jönsson et al., 2003) beinhalten oder Luft- und Wasserproben über/in den Ozeanen auswerten (Gioia et al., 2008; Lohmann & Dachs, 2019).

Darüber hinaus wurde eine Auswahl an Publikationen von Landesbehörden ausgewertet, welche durch das UBA zuvor recherchiert wurden (Ansatz c). Von den insgesamt 85 untersuchten Unterlagen enthielten 78 Daten zu PCB bzw. 35 Daten zu den 6 Indikator-PCB plus PCB 118.

Insgesamt konnten durch die drei Rechercheverfahren (Ansätze a, b und c) 378 Veröffentlichungen identifiziert werden, die Informationen zu ca. 108.500 Proben mit PCB-Messwerten enthalten. Die zusammengetragenen Datensätze liefern darüber hinaus teilweise Messwerte zu weiteren Parametern und Schadstoffen. Wie in Abbildung 5 zu sehen ist, liegt der regionale Fokus der Daten auf Europa oder Nordamerika. Durch die Analyse zum Teildatensatz Fisch kommen zudem mehrere Daten aus Ozeanen, insbesondere den europäischen Meeresgebieten des Nordostatlantiks hinzu. Bezüglich der Kompartimente sind vorwiegend Proben unterschiedlicher Biota (insb. Fischen) enthalten. Weitere Kompartimente mit großen Datenmengen sind Lebensmittel, Humanproben und Sedimente (siehe Abbildung 6).

Die untersuchten Publikationen beinhalten ca. 45.000 Einzelproben welche veröffentlicht und bereits in einer verarbeitbaren Form oder als Open-Access-Datensatz aufbereitet sind. Zudem stellen 67 Veröffentlichungen Ergebnisse von Modellierungen oder methodischen Ansätzen oder Ergebnissen aus Laborversuchen dar.

**Abbildung 5: Rechercheergebnisse nach Lagebezug**



Die gesamten Rechercheergebnisse werden dargestellt nach übergeordneten Regionen.

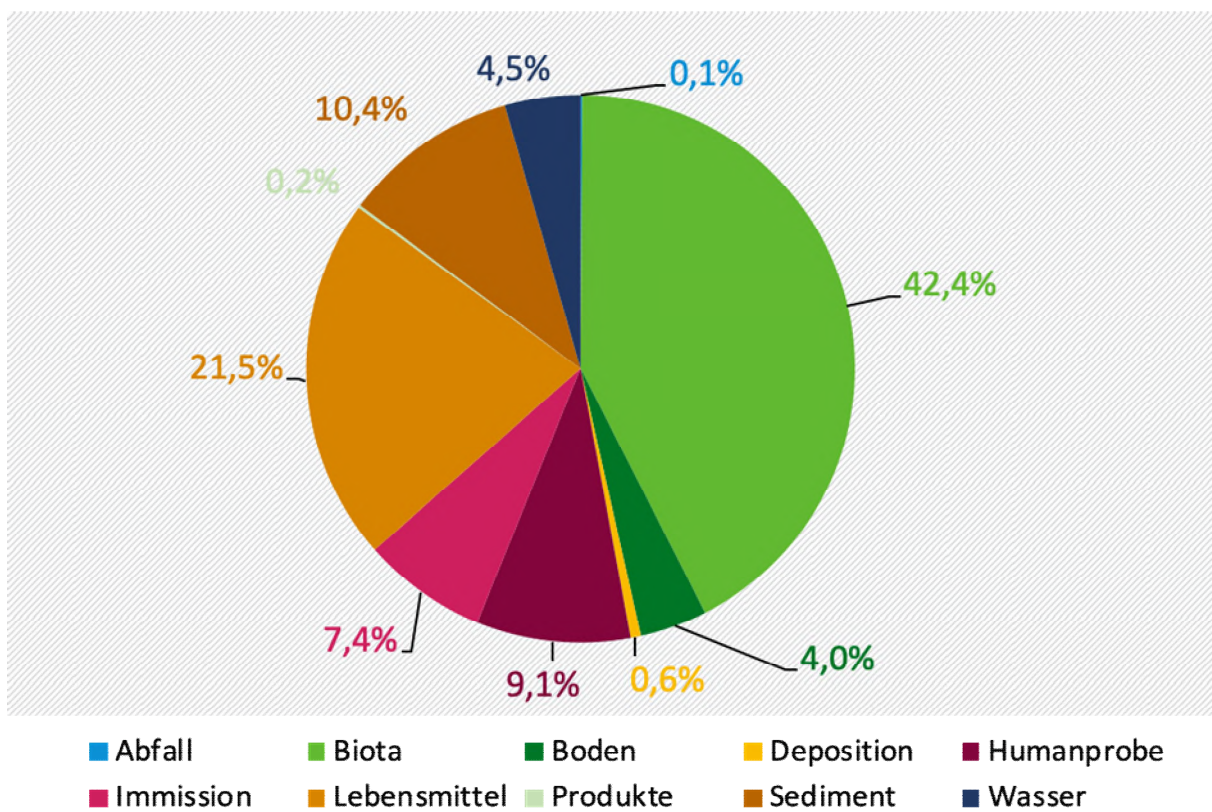
Quelle: eigene Darstellung.

Alle Rechercheergebnisse wurden entsprechend ihrer Quelle strukturiert und tabellarisch zusammengefasst. Zu jeder Quelle ist vermerkt, ob der Datensatz Messungen zu PCB enthält und ob allein die 6 Indikator-PCB oder zusätzlich auch PCB 118 erfasst wurden. Darüber hinaus sind die betroffenen Kompartimente, Jahr der Probenahme und Region verzeichnet. Ebenso ist festgehalten, ob die betroffenen Daten frei verfügbar sind, ggf. aufbereitet oder separat angefragt werden müssen. Bevor etwaige Daten für externe Nutzungen angefragt werden, sollen diese in Abstimmung mit dem UBA gesichtet und bewertet werden. Eine Übersicht der Rechercheergebnisse kann dem Anhang entnommen werden.

Die recherchierten Daten berücksichtigen ausschließlich gemessene Probenahmen und keine modellierten Ergebnisse. Modellerte oder abgeschätzte Werte, wie z. B. länderspezifische PCB-Profile (Breivik et al., 2002), wurden nach Erfordernis und separat aufbereitet, in die jeweiligen Analysen eingebunden und fallweise für die spätere Mustererkennung bereitgestellt.

Aufgrund der noch laufenden Überarbeitung des PDB muss die weitere Aufbereitung und ggf. erforderliche Qualitätssicherung in Abstimmung mit dem UBA erfolgen. Insbesondere müssen die Rechercheergebnisse vor Übernahme mit den Ergebnissen der bisherigen Daten abgeglichen werden, um etwaige Dopplungen zu vermeiden.

**Abbildung 6: Rechercheergebnisse nach Kompartiment**



Die gesamten Rechercheergebnisse werden dargestellt nach identifizierten Kompartimenten.

Quelle: eigene Darstellung.

## 5 Modellierung Trainingsdatensätze

PCB-Belastungsprofile können sich auf dem Weg von Quellen zu Senken verändern (siehe Kapitel 3.4). Die in Kapitel 4 diskutierten Daten umfassen dabei beobachtete (gemessene) PCB-Belastungen unterschiedlicher Umweltkompartimente und bilden eine Belastung zum jeweiligen Messort und -zeitpunkt ab. Mit zunehmender Distanz und Zeit verwischen jedoch mögliche Zusammenhänge zwischen Belastungs- und Quellprofil und erschweren einen Profilvergleich (siehe Kapitel 3.4). Um diese räumlichen und zeitlichen Lücken zu schließen, werden Trainingsdatensätze zur Ausbreitung und Verteilung von PCB-Kongeneren über Kompartimentgrenzen hinweg erzeugt, welche *weathering*-Effekte berücksichtigen und Basis für einen KI-basierten Profilvergleich sind.

### 5.1 Grundlagen der Modellierung

Mit der Modellierung wird innerhalb eines definierten Systems ein bestimmter Prozess mathematisch abgebildet, um z. B. das Verhalten einzelner Chemikalien in der Umwelt vorhersagen zu können (Trapp & Matthies, 1998, S. 3). Damit können sogenannte ökologische Simulationsmodelle (engl. *environmental fate models*) sowohl Aussagen über die ursprüngliche Menge und Zusammensetzung der Belastungsquellen liefern als auch über die möglichen Belastungspfade (Di Guardo et al., 2018). Ein Modell erzeugt dafür aus Eingangsparametern und -variablen ein Ergebnis, z. B. eine berechnete Stoffkonzentration.

Bei der Modellierung kann unterschieden werden in

- ▶ mechanistische Methoden  
(basierend auf Kenntnissen und Annahmen zu physikochemischen Prozessen) sowie
- ▶ empirische Methoden  
(basierend auf gemessenen oder beobachteten Daten).

Innerhalb der mechanistischen Methoden gibt es zudem unterschiedliche Ansätze der Betrachtung, welche trotz der unterschiedlichen Vorgehensweisen, in Modellen kombiniert werden können (Trapp & Matthies, 1998, S. 3):

- a) Hydrodynamische Prozesse in mehreren räumlichen Ebenen über die numerische Lösung partieller Differenzialgleichungen (z. B. für atmosphärische Transportmodelle).
- b) Kinetische Reaktionen mit einem Fokus auf der Berechnung von Phasenübergängen und biochemischen Veränderungen zwischen Kompartimenten über gewöhnliche Differenzialgleichungen (z. B. Multimedia Umweltmodelle bzw. Fugazitätsmodelle) (Parnis & Mackay, 2020).

Bei der Erstellung eines Modells sind die Prinzipien der guten **Modellierungspraxis** zu berücksichtigen. In der Literatur werden hierfür je nach Anwendungsfall unterschiedliche Aufteilungen vorgeschlagen (siehe z. B. Buser et al., 2012; Trapp & Matthies, 1998, S. 5). Da für das vorliegende Projekt teilweise eigene Berechnungen erstellt wurden, waren nachfolgende Aspekte maßgebend:

- ▶ Definition der entscheidungsrelevanten Fragestellungen, des Ziels und des Umfangs:  
Dabei sollte eine genaue Abgrenzung von Raum und Betrachtungszeitraum sowie der Systemgrenzen erfolgen.
- ▶ Entwicklung eines eigenen Modells:  
Die zugrundeliegenden Prozesse (chemisch, physikalisch, biologisch) müssen identifiziert



und mit geeigneten Parametern und Variablen in mathematische Gleichungen übertragen werden.

- ▶ *Alternativ Auswahl des anzuwendenden Modells:*  
Sofern bereits ein geeignetes Modell verfügbar ist, sollte dies mit seinen entsprechenden Spezifikationen beschrieben werden.
- ▶ Spezifizierung der Modelleingangs und -ausgangsdaten:  
Festlegung aller erforderlichen Modellparameter sowie Dokumentation aller Quellen, um die Reliabilität gewährleisten zu können.
- ▶ Bestimmung der Modellsensitivität:  
Identifikation der Eingangsparameter mit dem größten Einfluss auf das Modellergebnis.
- ▶ Verifizierung, Kalibrierung und Validierung:  
Prüfung der Plausibilität der Modellergebnisse anhand gemessener Daten und ggf. Anpassung der Modellparameter, um unabhängig gemessene Konzentrationen hinreichend modellieren zu können.
- ▶ Spezifikation der Unsicherheiten und Modellgrenzen:  
Angaben zur Aussageunsicherheit der modellierten Ergebnisse sowie der geeigneten Anwendungsfälle.

Entsprechend dieser vorgestellten Kriterien können Modelle erstellt bzw. angewandt und deren Ergebnisse bewertet werden. Im Rahmen des vorliegenden Forschungsprojekt wurde eine Methode für einen KI-basierten Vergleich von PCB-Profilen erarbeitet. In diesem Zusammenhang wurden zwei unterschiedliche Modellberechnungen für die Modellierung von Trainingsdaten erstellt und angewandt. Der vorliegende Bericht stellt die Dokumentation des Modells und deren Ergebnisse dar (siehe Kapitel 5.2, 7 und 8).

## 5.2 Methodik

Die eingangs beschriebenen Trainingsdaten wurden mit Hilfe eines Multimedia Umweltmodells berechnet.

Solche Modelle betrachten die Umwelt als eine Anzahl miteinander verbundener Phasen bzw. Kompartimente (Parnis & Mackay, 2020, S. 3). Die Kompartimente stehen teilweise in direktem Kontakt miteinander (z. B. Atmosphäre und Gewässeroberfläche), teilweise besteht keine direkte Beziehung zueinander (z. B. Atmosphäre und Sediment). Auch ist ein Stoffaustausch zwischen den Kompartimenten teilweise sehr schnell möglich, teilweise sehr langsam oder ggf. gar nicht. Basierend auf diesem Ansatz können Stoffgehalte in den einzelnen Kompartimenten in Massengleichungen beschrieben werden. Es besteht dabei entweder ein Gleichgewicht innerhalb eines Kompartiments oder es wird ein Gleichgewichtszustand zwischen Kompartimenten angestrebt. Grundsätzlich wird dabei unterschieden in (Parnis & Mackay, 2020, S. 5):

- ▶ Geschlossene Systeme im Gleichgewicht:  
Hierbei wird von einem geschlossenen System ohne Zu- oder Abfluss von Mengen ausgegangen, in dem ein Stoff entsprechend der Verteilungskoeffizienten auf diverse Kompartimente im System aufgeteilt wird. Dabei entspricht die Gesamtanzahl aller Teilchen im System der Summe aller Teilchen je Phase.
- ▶ Offenes System im Gleichgewichtszustand:  
In einem offenen System kann ein Stoff zu- oder abfließen. Ist das Stoffverhältnis über die

Zeit dennoch gleichbleibend wird von einem Gleichgewichtszustand gesprochen. Daher gilt, dass der gesamte Stoffeintrag dem gesamten Stoffaustrag entspricht.

► Dynamische offene Systeme:

In einem solchen System verändert sich die Menge eines Stoffes im System über die Zeit. Die Rate der Veränderung wird dabei verstanden als Differenz zwischen gesamten Stoffeintrag und gesamten Stoffaustrag.

Ausgehend von diesen Annahmen können Phasenübergänge von PCB mathematisch ausgedrückt und im Rahmen eines Modells berücksichtigt werden. Relevant ist dafür die Identifikation und Bestimmung der stoffspezifischen Verteilungskoeffizienten (bzw. Anteile) zwischen Luft, Wasser und Octanol. Neben den Verteilungskoeffizienten weisen Parnis & Mackay (2020) auf zusätzlich nachfolgende wesentliche Eigenschaften hin (siehe auch Kapitel 2.2.3):

- a) Wasserlöslichkeit  
Dieses Maß beschreibt den Grad der Löslichkeit eines Stoffes in Wasser, gegenüber der Präferenz in anderen weniger polaren Phasen in Lösung zu gehen (z. B. Fett, organische Materie). Beschrieben wird dies meist über den Octanol-Wasser-Koeffizienten ( $\log K_{ow}$ ).
- b) Dampfdruck  
Diese Eigenschaft beschreibt die Tendenz eines Stoffes zum Übergang in die Gasphase bzw. den Umgebungsdruck, unterhalb dessen ein Stoff beginnt, bei konstanter Temperatur gasförmig zu werden.
- c) Fugazität  
Hiermit wird die Tendenz eines Stoffes beschrieben sich in ein anderes Kompartiment zu verteilen, bis sich ein neues Gleichgewicht eingestellt hat.
- d) Ionisation  
Diese Eigenschaft bezieht sich auf die Ladung eines Stoffes, welche Einfluss auf die Wasserlöslichkeit bzw. den entsprechenden  $K_{ow}$  hat.
- e) Reaktivität und Persistenz  
Je nach Stoff und Umweltbedingungen beschreibt diese Eigenschaft die Fähigkeit mit anderen Stoffen in Reaktion zu treten bzw. als Stoff erhalten zu bleiben (siehe auch Kapitel 2.2.2). Diese wird über Halbwertszeit eines Stoffes angegeben.

Basierend auf diesem theoretischen Modellkonstrukt kann der Verbleib von unterschiedlichen PCB-Kongeneren in den Kompartimenten beschrieben und berechnet werden. Dadurch ist die Modellierung der potenziellen Fraktionierung innerhalb des PCB-Profils möglich und es können PCB-Profile für unterschiedliche Phasen modelliert werden.

Für die im Fokus befindlichen PCB-Profile von Fischen wurden zwei spezifische Transportpfade identifiziert (siehe auch Kapitel 3.4 sowie Selle et al., 2024):

1. Quelle  $\Rightarrow$  Luft  $\Rightarrow$  Wasser (offenes Meer)  $\Rightarrow$  Biota (Senke)
2. Quelle  $\Rightarrow$  Oberflächenabfluss  $\Rightarrow$  Wasser (Binnengewässer)  $\Rightarrow$  Sediment  $\Rightarrow$  Biota (Senke)

Für den ersten Transportpfad kommt es im Sinne der Modellierung zu einem Phasenübergang zwischen Atmosphäre, Wasser und Fisch, bei dem das PCB-Profil fraktioniert wird. Die Belastung erfolgt daher vorwiegend über PCB-Emissionen. Für den zweiten Transportpfad gelangt das PCB-Profil partikelgebunden (Howell et al., 2011) relativ stabil in das Sediment eines Binnengewässers, und die Kongenere werden dort entsprechend ihrer Halbwertszeiten abgebaut.

In beiden Fällen kommt es zu einer Veränderung des ursprünglichen Quellprofils, welches als sogenanntes Schattenprofil, ausgehend von der Quelle, modelliert werden kann.

5.3
 Modellierte Daten für PCB-Quellen (Schattenprofile)

Entsprechend der identifizierten Belastungspfade für Fische werden zwei unterschiedliche Schattenprofile modelliert, basierend auf den Ergebnissen von Breivik et. al (2002, 2016, default scenarios). Die nachfolgende Modellierung entspricht Selle et al. (2024):

- Schattenprofile ausgehend von Verbrauchsprofilen der Länder  
zur Darstellung der Alterung von PCB-Belastungen im Sediment nach partikelgebundenem Eintrag
- Schattenprofile ausgehend von Emissionsprofilen der Länder  
zur Darstellung des fraktionierten PCB-Profls nach der Emission von PCB und Phasenübergang von Atmosphäre zu Wasser und Biota (Fisch)

5.3.1
 Schattenprofile aus Verbrauchsprofilen

Die von Breivik et al. (2002, default scenario) ermittelten Daten geben den PCB-Verbrauch ausgewählter Länder für insgesamt 22 PCB-Kongenere für die Jahre 1930 bis 2000 an. Daraus werden zunächst die ICES-7-PCB (PCB 28, 52, 101,118, 138, 153, 180) extrahiert. Unter der Annahme, dass der Verbrauch und die davon ausgehende Kontamination über die Zeit kumulieren, werden für jedes Jahr die Belastungen der Vorjahre kumuliert, um anschließend ein jährliches PCB-Profil zu berechnen.

Die Studien von Sinkkonen & Paasivirta (2000) sowie Paasivirta & Sinkkonen (2009) listen Halbwertszeiten für die einzelnen PCB-Kongenere in Sediment auf (siehe Tabelle 5). Im Vergleich mit gemessenen Belastungsprofilen zeigt sich, dass die Daten von Sinkkonen & Paasivirta (2000) eine plausible Übereinstimmung generieren. Eine Ausnahme stellt die Halbwertszeit für PCB 52 dar, welche adäquater durch den Wert von Paasivirta & Sinkkonen (2009) abgebildet wird.

Tabelle 5:
 Halbwertszeit ausgewählter PCB-Kongenere im Sediment in Jahren

Quelle	PCB 28	PCB 52	PCB 101	PCB 118	PCB 138	PCB 153	PCB 180
Sinkkonen & Paasivirta (2000)	3	10	10	6,8	18,8	18,8	38
Paasivirta & Sinkkonen (2009)	2,6	5,7	5,1	5,1	6,7	8,6	13,7

Quelle: eigene Darstellung der Werte aus von Sinkkonen & Paasivirta (2000) sowie Paasivirta & Sinkkonen (2009).

Entsprechend der vorherigen Einteilung werden die Schattenprofile jeweils als geschlossenes System im Gleichgewicht modelliert mit der Halbwertszeit als spezifischem Verteilungskoeffizienten. Über die nachstehende Gleichung (I) kann für jedes Land und Jahr ein Verbrauchsprofil (Schattenprofil) berechnet werden. Dabei beschreibt  $C_n$  die Konzentration des jeweiligen Kongeners, welche sich aus der Ausgangskonzentration ( $C_0$ ) nach Multiplikation mit der Halbwertszeit und Dauer ergibt. Da im Sediment theoretisch PCB-Belastungen aus diversen Vorjahren vorliegen können, ergibt sich eine Vielzahl an modellierten Schattenprofilen.

(III.)
 
$$C_t^n = C_0^n \times e^{\frac{-\ln(2) \times t}{HWZ_n}}$$

wobei

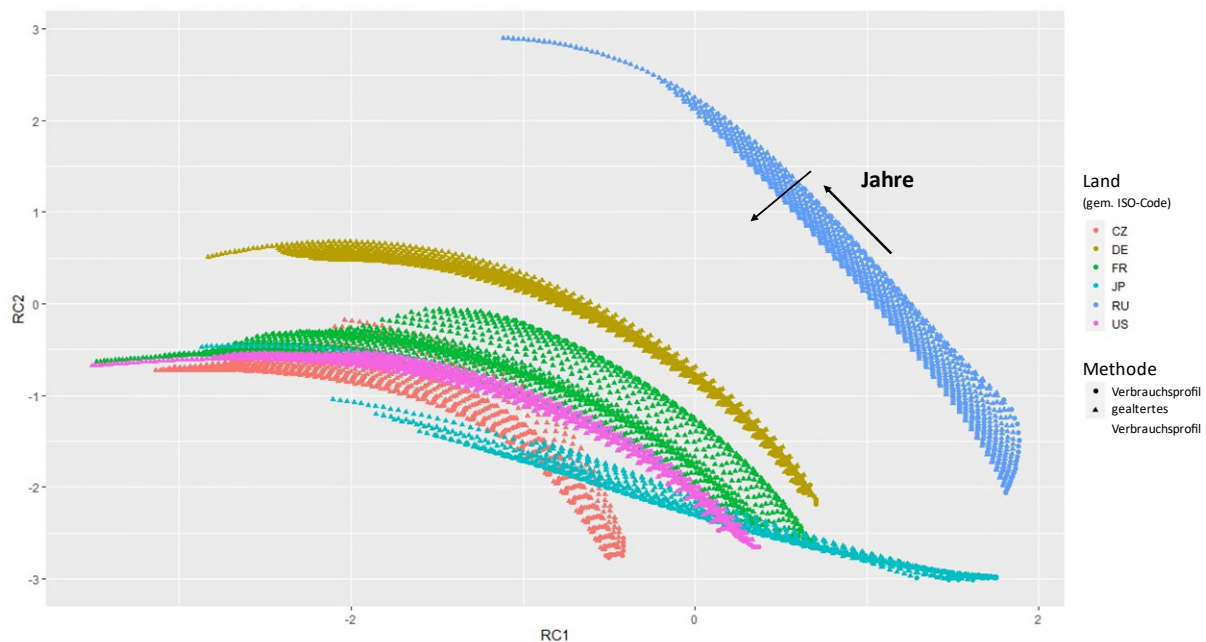
$C_t^n$ : Konzentration des  $n$ -Kongeners im trockenen Sediment [ng/kg],

$C_0^n$ : Ausgangskonzentration des  $n$ -Kongeners im trockenen Sediment [ng/kg],

t: Jahre seit dem PCB-Eintrag in den Sedimentkörper [a],  
 $HWZ_n$ : Halbwertszeit des n-Kongeners im Sediment in Jahren [a].

In Abbildung 7 kann die Entwicklung der Alterung des PCB-Profiles im Sediment graphisch nachvollzogen werden. Über die gegebene Halbwertszeit kommt es im Zeitverlauf zu einer Erhöhung der Anteile höherchlorierter Kongenere im Belastungsprofil. Leichtere Kongenere werden mikrobiell schneller abgebaut und nehmen daher im Anteil ab.

**Abbildung 7: Modellerte, gealterte PCB-Belastungen in Sedimenten (1930-2020)**



Basierend auf ausgewählten Verbrauchsprofilen von Breivik et al. (2002, default scenario) wurde die Alterung von PCB-Belastungen im Sediment modelliert. Die Darstellung zeigt das Ergebnis einer Hauptkomponentenanalyse (siehe auch Kapitel 6.2.2) mit Trajektorien unterschiedlicher Länder. Eine positive Verschiebung auf der x-Achse (RC1) bedeutet die Zunahme der PCB 28, 101 und 118 bei Abnahme von PCB 180 im PCB-Profil. Und eine positive Verschiebung auf der y-Achse (RC2) bedeutet die Zunahme von PCB 138 und 153 bei Abnahme von PCB 52 im PCB-Profil. Es wird deutlich, dass sich mit zunehmendem Alter die Anteile höherchlorierter PCB (138, 153, 180) im PCB-Profil erhöhen.

Quelle: eigene Darstellung.

### 5.3.2 Schattenprofile aus Emissionsprofilen

Neben den Daten zum Verbrauch geben Breivik et al. (2016, default scenario) aktualisierte Daten zu Emissionen für diverse PCB-Kongenere an. Diese werden als globales Gitternetz ausgewiesen, so dass sie für einen länderspezifischen Vergleich den jeweiligen Nationalgrenzen zugeordnet und akkumuliert werden müssen. Für die vorliegende Betrachtung werden konsequenterweise die ICES-7-PCB extrahiert.

Anders als bei alternden Verbrauchsprofilen im Sediment, welche immer kumulierte Profile über einen Zeitraum sind, werden bei den Emissionsprofilen nicht-kumulierte Profile für jedes Jahr im Zeitraum von 1982 – 2020 fraktioniert.

Entsprechend der vorherigen Einteilung werden die Emissionsprofile jeweils als geschlossenes System im Gleichgewicht modelliert, mit den Löslichkeiten der jeweiligen Phasenübergänge als spezifischem Verteilungskoeffizienten. Die Modellierung über ein offenes System im Gleichgewichtszustand brachte ähnliche Ergebnisse (siehe Selle et al., 2024). Über die nachstehenden Gleichungen (IV.) bis (VII.) können aus den Emissionsprofilen mithilfe der aus



Literaturdaten ermittelten Parameter die fraktionierten Schattenprofile der Länder modelliert werden. Die jährliche Betrachtung reicht dabei bis in das Jahr 1980 zurück, welches das Emissionsmaximum vor dem PCB-Verbot darstellt.

$$(IV.) \quad C_A^n = C_A \times P^n$$

wobei

$C_A^n$ : Konzentration des  $n$ -Kongeners in der Atmosphäre über dem Ozean [ng/m<sup>3</sup>],

$C_A$ : Gesamtkonzentration der ICES-7-PCB über dem Ozean [ng/m<sup>3</sup>],

$P^n$ : Anteil des  $n$ -Kongeners im ICES-7-PCB Mix.

$$(V.) \quad H_T^n = \frac{10^{(A^n - \frac{B^n}{T})}}{R \cdot T}$$

wobei

$H_T^n$ : temperaturabhängiger Henry-Koeffizient des  $n$ -Kongeners [-],  $A^n$ ,  $B^n$ : Temperaturkoeffizienten des  $n$ -Kongeners,

$T$ : mittlere Wassertemperatur (273,15–303,15 K) [K],  $R$ : allgemeine Gaskonstante [J/mol×K].

$$(VI.) \quad C_W^n = \frac{C_A^n}{H_T^n}$$

wobei

$C_W^n$ : Konzentration des  $n$ -Kongeners im Ozeanwasser [ng/m<sup>3</sup>].

$$(VII.) \quad C_F^n = C_W^n \times BAF^n$$

wobei

$C_F^n$ : Konzentration des  $n$ -Kongeners im Fisch [ng/kg Fett],

$BAF^n$ : Bioakkumulationsfaktor des  $n$ -Kongeners [m<sup>3</sup>/kg Fett].

Für die Gesamtkonzentration der ICES-7-PCB in Atmosphäre über dem Ozean wurde in den Berechnungen der Wert von 0,007 ng/m<sup>3</sup> verwendet (angenommen nach Gioia et al., 2012), die allgemeine Gaskonstante ( $R$ ) hat den Zahlenwert 8,314 J/mol×K. Die spezifischen Koeffizienten und Faktoren für einzelnen PCB-Kongener sind in Tabelle 6 zusammengestellt.

**Tabelle 6: Parameter für die Berechnung der fraktionierten Emissionsprofile für ICES-7-PCB**

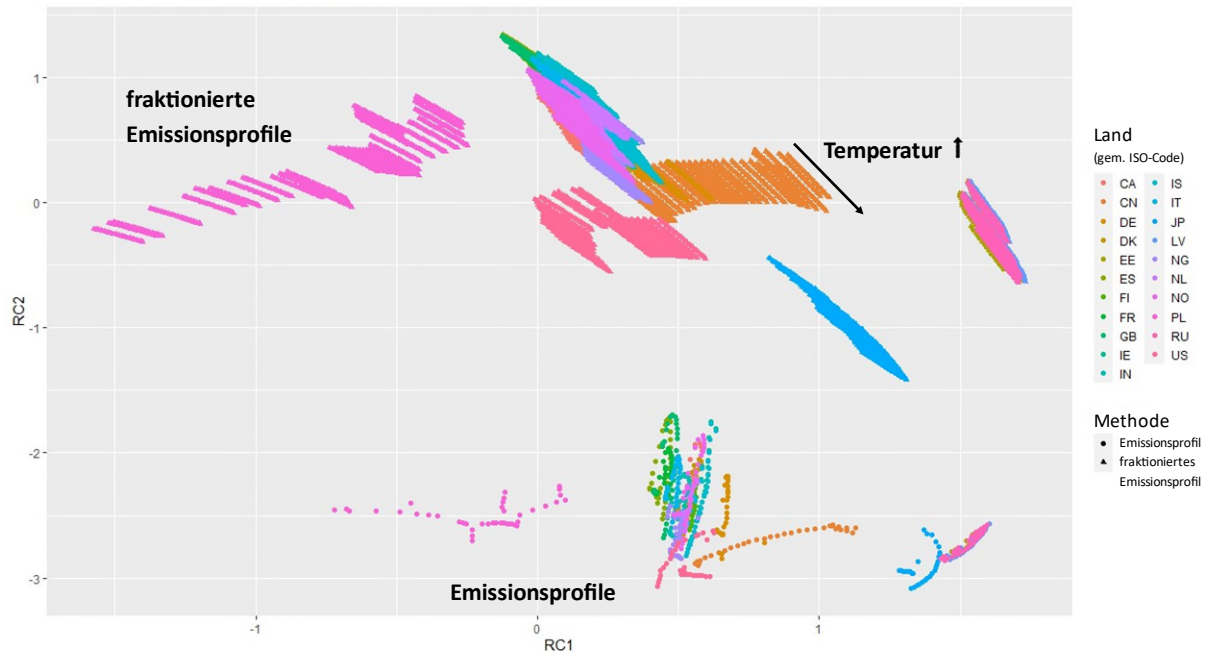
Parameter (Quelle)	PCB 28	PCB 52	PCB 101	PCB 118	PCB 138	PCB 153	PCB 180
Temperaturkoeffizienten für die Berechnung der Henry-Koeffizienten (A) Paasivirta & Sinkkonen (2009)	10,11	10,80	11,32	10,92	11,58	11,75	11,80
Temperaturkoeffizienten für die Berechnung der Henry-Koeffizienten (B) Paasivirta & Sinkkonen (2009)*	2547	2495	2764	2606	2936	2915	2977
Bioakkumulationsfaktoren (BAF) (m <sup>3</sup> /kg Fett, für Kabeljau) (angenommen nach Szlinder-Richert et al., 2009; Wodarg et al., 2004)*	1790	8188	52165	112707	98013	127947	106666

\* hier angegeben sind gerundete Werte

Quelle: eigene Darstellung, Quellen der genannten Werte sind jeweils angegeben.

In Abbildung 8 kann die Entwicklung der Fraktionierung des PCB-Profiles auf dem Transportpfad Atmosphäre → Wasser → Biota (Fisch) graphisch nachvollzogen werden. Über die gesetzten Modellparameter kommt es zu einer Erhöhung der Anteile höherchlorierter Kongenere im Belastungsprofil. Leichtere Kongenere werden in der Atmosphäre schneller abgebaut und nehmen daher im Anteil ab.

**Abbildung 8: Modellierte, fraktionierte PCB-Belastungen in Fischen (1980-2020)**



Basierend auf ausgewählten Emissionsprofilen von Breivik et al. (2016, default scenario) wurde die Fraktionierung des PCB-Profiles durch den Phasenübergang von Atmosphäre zu Wasser zu Fisch modelliert. Die Variabilität der Profile basiert auf den jeweiligen Emissionsjahren sowie einem Spektrum von potenziellen Temperaturen der Meere (0°C – 30°C). Die Darstellung zeigt das Ergebnis einer Hauptkomponentenanalyse für unterschiedliche Länderprofile (siehe auch Kapitel 6.2.2), in der eine positive Verschiebung auf der x-Achse (RC1) für die Zunahme von PCB 28, 101, 118 bei Abnahme von PCB 180 im PCB-Profil steht. Und eine positive Verschiebung auf der y-Achse (RC2) für die Zunahme von PCB 138, 153 bei Abnahme von PCB 52 im PCB-Profil steht. Es wird deutlich, dass die Fraktionierung grundsätzlich eine Erhöhung der Anteile höherchlorierter PCB (138, 153) bedingt (Verschiebung auf der y-Achse), je nach Wassertemperatur auch von PCB 180. Quelle: eigene Darstellung.

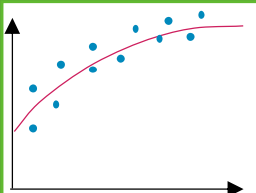
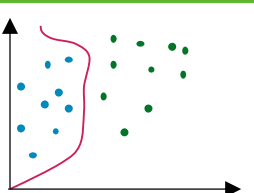

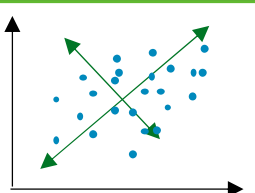

## 6 Identifikation von Quellen und Transportpfaden durch KI-Methoden

Das PCB-Kongenerenprofil bildet ein spezifisches Muster einer PCB-Belastung ab, welches im Abgleich mit dem Muster potenzieller Quellen geeignet für die Identifikation von Belastungspfaden sein kann (siehe Kapitel 2.4). Im Bereich der Lebensmittelüberwachung konnten so beispielsweise mögliche Ursprünge von Verunreinigungen von Futtermitteln mit PCB identifiziert werden (Covaci et al., 2002; Hoogenboom et al., 2020). Neben dem Vergleich einzelner Proben bietet die Analyse größerer Datenbestände die Chance, übergeordnete Muster zu erkennen, zu analysieren und zu interpretieren (Simonnet-Laprade et al., 2021). Der Bereich der sogenannten Künstlichen Intelligenz (KI) stellt dafür ein Spektrum an Methoden für die Mustererkennung bereit, von denen im nachfolgenden Kapitel ein Teil, insbesondere zur Erkennung von chemischen Profilen, vorgestellt wird.

### 6.1 Grundlagen Künstliche Intelligenz

Der Begriff Künstliche Intelligenz (KI) entstand in den 1950er-Jahren. Ziel war „der Versuch, normalerweise von Menschen erledigte geistige Aufgaben automatisiert zu lösen“ (Chollet & Allaire, 2018, S. 24). Ausgehend von diesem allgemeinen Ansatz ist der Teilbereich des Maschinellen Lernens (ML) für das aktuelle Forschungsvorhaben von besonderem Interesse. Aus Sicht der Programmierung stellt dies ein neues Paradigma dar: Während zuvor die Regeln für die zu analysierenden Daten vorgegeben wurden, werden nun sowohl Daten als auch Ergebnisse vorgegeben, um programmseitig die zugrundeliegenden Regeln zu identifizieren (Chollet & Allaire, 2018, S. 25; Rebala et al., 2019, S. 3).

**Abbildung 9: Übersicht unterschiedlicher Verfahren des maschinellen Lernens (Auswahl)**

Überwachtes Lernen		Unüberwachtes Lernen				
Regression	Klassifikation	Clusteranalyse	Dimensionsreduktion	Dichteschätzung	Assoziationsanalyse	
<ul style="list-style-type: none"><li>• Lineare Regression</li><li>• Polynomregression</li><li>• CART</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• k-NN</li><li>• SVM</li><li>• CART</li><li>• Naive Bayes</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• k-Means</li><li>• DBSCAN</li><li>• SOM</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• HKA</li><li>• SVD</li></ul>			
						
Verstärkendes Lernen						
(künstliche) Neuronale Netze						

Übersicht einer Auswahl unterschiedlicher Verfahren des maschinellen Lernens, eingeteilt nach Methoden des überwachten Lernens sowie des unüberwachten Lernens, in Übereinstimmung der verwendeten Literatur. Die dargestellten Graphen sollen die jeweiligen Ziele bzw. den Umgang der Verfahren mit den Eingabedaten verdeutlichen. Darüber hinaus werden weitere Verfahren genannt, jedoch oftmals unterschiedlich zugeordnet (Dimensionsschätzung, Assoziationsanalyse). Außerdem aufgeführt werden das verstärkende Lernen sowie Neuronale Netze aus dem Bereich des Deep Learning.

Quelle: eigene Darstellung (in Anlehnung an Kiss & Welz, o.J.; Martinez Formoso & Amaro, 2017; Schmidt, 2020; Schmitt, o.J.; Trekhleb, 2022).

Grundlegend soll ein Maschinelles-Learning-Modell aus den gegebenen Eingaben und zu erwartenden Ausgaben eine geeignete Repräsentation der Daten erlernen, u. a. durch eine sinnvolle Umwandlung der Daten. Unter der Repräsentation ist dabei die Art und Weise der Datendarstellung zu verstehen, etwa die Art der farblichen Darstellung oder die Transformation in geeignete Wertebereiche. Sollen beispielsweise Punkte innerhalb eines Koordinatensystems klassifiziert werden, kann es sinnvoll sein, das Koordinatensystem zu wechseln, um eindeutige Wertebereiche zu erhalten (z. B. positive gegenüber negativen Zahlen, siehe auch Visualisierung zur Dimensionsreduktion in Abbildung 9) (Chollet & Allaire, 2018, S. 26–27).

Je nach angewandtem Algorithmus werden verschiedene Transformationen vorgenommen und deren Ergebnis in Abhängigkeit der Fragestellung überprüft, um das Vorgehen je nach Bewertung anpassen und optimieren zu können. Einige der ML-Verfahren setzen dabei nur eine oder wenige Repräsentationen ein, so dass ihr Lernen als flach oder *Shallow-Learning* bezeichnet werden kann. Hingegen agieren andere ML-Verfahren mehrstufig in aufeinanderfolgenden Repräsentationen, um im Ergebnis möglichst aussagekräftige Repräsentationen zu erhalten – darunter wird die sogenannte Tiefe verstanden (*Deep-Learning*). Das Erlernen der geeigneten Repräsentationen erfolgt hier in der Regel in Form eines sogenannten künstlichen Neuronalen Netzes (NN), welches die Repräsentationen in Schichten (sogenannten *Layern*) übereinanderlegt und auswertet. Dieses wiederum entspricht einem mathematischen Modell aus mehreren Ebenen, Repräsentations- und Optimierungsschritten zur Findung der für die Aufgabenstellung geeigneten Daten-Darstellung (Chollet & Allaire, 2018, S. 29).

## 6.2 Grundlagen Mustererkennung in Datenbeständen

Beim Erlernen oder Erkennen von Mustern in Datenbeständen mit Hilfe von ML-Algorithmen kann grundsätzlich nachfolgenden Methoden unterschieden werden:

- ▶ überwachtes Lernen (Kapitel 6.2.1),
- ▶ unüberwachtes Lernen (Kapitel 6.2.2),
- ▶ verstärkendes Lernen (Kapitel 6.2.3).

Darüber hinaus gibt es die bereits erwähnten Neuronalen Netze aus dem Bereich des *Deep Learning*, welche sich aus den erforderlichen Repräsentationen der Daten aus diversen Schichten zusammensetzen (Kapitel 6.2.4).

Den Verfahren gemein ist das grundlegende Konzept von bekannten (*labelled*) und unbekannten (*unlabelled*) Daten. Ist beispielsweise für ein Bild im Rahmen der Klassifikationsaufgabe die korrekte Zuordnung der zu erkennenden Objekte bereits bekannt (z. B. Häuser, Tiere etc.), kann dieses Bild als *labelled data* bezeichnet werden. Ist die korrekte Zuordnung für das Bild hingegen unbekannt, ist die Rede von *unlabelled data* (Rebala et al., 2019, S. 18).

Anhand der eingebenden Daten kann das ausgewählte ML-Verfahren lernen, die vorhandenen Muster im Datensatz zu erkennen und bestenfalls zu generalisieren. Dabei kann es jedoch zu einer Überanpassung kommen, wenn das Modell mit unbekannten Daten konfrontiert wird. Zur Konfiguration des Modells wird dazu in der Regel die Datenmenge in einen sogenannten Trainings-, Validierungs- sowie einen Testdatensatz getrennt. Anhand der Validierungs- und Testdaten können die mit dem Trainingsdatensatz gelernten Modellaussagen einerseits optimiert und andererseits überprüft werden (Chollet & Allaire, 2018, S. 133; Rebala et al., 2019, S. 95).

### 6.2.1 Überwachtes Lernen

Methoden des überwachten Lernens leiten die zugrundeliegenden Muster und Regeln aus bereits bekannten Strukturen ab. In diesem Fall liegt für die an das Modell gestellte Frage, bereits die korrekte Antwort vor (*labelled data*). Der Algorithmus kann durch diese spezifischen Eigenschaften lernen, wie die korrekte Antwort für einen neuen Datenpunkt aussehen würde (Rebala et al., 2019, S. 18; Richter, 2019, S. 1).

Wie in Abbildung 9 dargestellt, können die wesentlichen Methoden des überwachten Lernens in zwei Bereiche gegliedert werden:

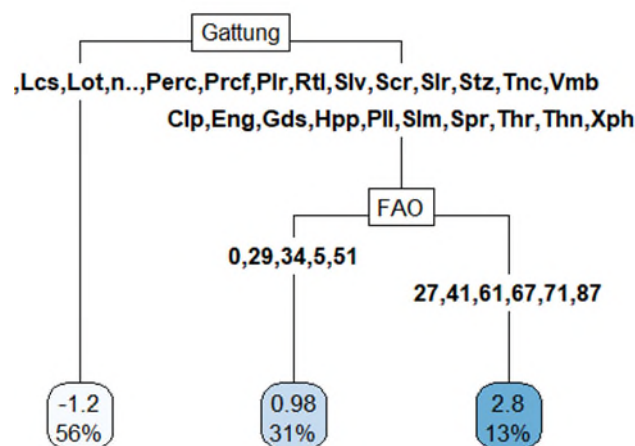
#### Regression

Methoden der Regression versuchen Zusammenhänge in den gegebenen Datensätzen zu finden, um Vorhersagen für die untersuchte Variable zu treffen. Beispielsweise können Preisentwicklungen oder Rohstoffverbräuche geschätzt werden. Um die Zusammenhänge für kontinuierliche Variablen optimal – zum Beispiel mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate – zu beschreiben, kommen sowohl lineare als auch polynomiale Funktionen in Frage. In Abbildung 9 wird die mögliche Regressionskurve für die gegebenen Punkte dargestellt (Adler, 2010, S. 423–462; Rebala et al., 2019, S. 25). Um hingegen Vorhersagen zu kategorialen Variablen zu ermöglichen, bedarf es der logistischen Regression (Rebala et al., 2019, S. 36).

## Klassifikation

Klassifikationsalgorithmen suchen nach einer geeigneten Abgrenzung der Daten in Klassen oder Kategorien. Für das Lernen des Algorithmus sind die abzugrenzenden Klassen bekannt, jedoch muss der genaue Verlauf der Entscheidungsgrenze (linear oder nicht-linear) bestimmt werden. Dem Bereich der überwachten Klassifikation sind Verfahren wie Naive Bayes, k-nearest-neighbors (k-NN), Support-Vector-Machines (SVM) oder Klassifikations- und Regressionsbäume (CART) zuzuordnen. In Abbildung 9 ist exemplarisch die Klassifizierung in zwei Klassen mit einer nicht-linearen Grenze dargestellt (Hude, 2020, S. 95–97; Rebala et al., 2019, S. 57).

**Abbildung 10: Ergebnis CART-Analyse für Fisch und Fischerzeugnisse (Beispiel)**



Ergebnis einer CART-Analyse zur Erklärung einer ermittelten Hauptkomponente für Proben von Fischen aus der PDB (n: 359).

Quelle: eigene Darstellung.

Im Rahmen der bisherigen Analyse der Daten zu Fischen wurde unter anderem das CART-Verfahren eingesetzt, bei dem „Daten in Form einer Sammlung binärer Entscheidungsregeln“ (Adler, 2010, S. 464) abgebildet werden. Der Datensatz wird dazu auf die stärksten Gemeinsamkeiten untersucht und in Gruppen und Untergruppen zerteilt, dabei können sowohl kontinuierliche als auch kategoriale Variablen verarbeitet werden. Ziel ist eine Baumstruktur mit der geringsten Komplexität zu erhalten. In Abbildung 10 ist die Auswertung von 359 Fischproben von Binnen- und Meeresfischen der PDB dargestellt, um die in einer HKA berechneten Werte mit zusätzlichen Variablen zu erklären. Im vorliegenden Fall konnten die Daten zunächst nach ihrer Gattung differenziert werden, wobei eine der resultierenden Gruppen anschließend nach ihrem FAO-Fanggebiet geteilt wird.

### 6.2.2 Unüberwachtes Lernen

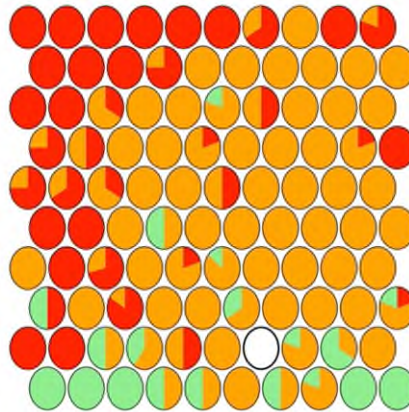
Sind die zugrundeliegenden Muster in einem Datensatz unbekannt, können Methoden des unüberwachten Lernens zum Einsatz kommen. Diese suchen nach Gemeinsamkeiten und Trends innerhalb der gegebenen Daten: Einerseits nach Daten deren Ausprägungen sich ähneln und so als Gruppe zusammengefasst werden können (sogenannte *Cluster*) oder andererseits durch die Dimensionsreduktion, um zugrundeliegende Muster zu identifizieren. Die Bedeutung sowie Bezeichnung der identifizierten Cluster oder Muster ist dabei nicht bekannt und erfordert weitere Interpretationen (Rebala et al., 2019, S. 22).

Wie in Abbildung 9 dargestellt, können auch die wesentlichen Methoden des unüberwachten Lernens in zwei Bereiche gegliedert werden:

## Clusteranalyse

In der Clusteranalyse kommen Verfahren zum Einsatz, die Daten bezüglich ihrer Distanz untereinander in einem n-dimensionalen Raum untersuchen. Dabei kann in hierarchische Verfahren und partitionierende Verfahren unterschieden werden. Erstere identifizieren anhand vorgegebener Kriterien die geeignete Anzahl an Clustern im Datensatz durch Vereinigung jeweils kleinerer Cluster zu größeren oder umgekehrt. Die partitionierenden Verfahren hingegen ermitteln die bestmögliche Zuordnung aller Daten in eine zuvor vorgegebene Anzahl an Clustern (z. B. das k-Means-Verfahren) (Sauer, 2019, S. 438).

### Abbildung 11: Ergebnis SOM für Fische (Beispiel)



Ergebnis eines self-organizing maps Algorithmus für die Verteilung der ICES-7-PCB in Proben von Fischen aus der PDB (n:326). Dabei hat der Algorithmus drei Cluster identifiziert (rot, orange, hellgrün).

Quelle: eigene Darstellung.

Die sogenannten Selbst-organisierenden Karten (*self-organizing-maps*, SOM) sind Verfahren der Clusteranalyse, die auch den neuronalen Netzen zugeordnet werden können. Ihr Ziel ist die Projektion von Objekten (Messwerten) in eine Ebene, bei der ähnliche Objekte (bzw. Messwerte) nah beieinander und unterschiedliche Objekte (bzw. Messwerte) weit entfernt platziert werden (Rebala et al., 2019, S. 138; Wehrens & Kruisselbrink, 2018). Dazu werden die Objekte einzelnen Knoten zugeordnet, deren Abstände untereinander minimiert werden. Jeder Knoten repräsentiert für sich ein neues Objekt mit gemitteltem Messwert, für die Eingangsobjekte wird der Abstand je Messwert ausgewiesen. Im Beispiel eines Kongenerenprofils werden alle sieben PCB Messwerte je als ein Objekt übergeben. Der Algorithmus verteilt diese nun auf dem vorgegebenen Grid (z. B. 8 x 8) und prüft die Abstände der Messwerte untereinander. Durch mehrere Iterationsschritte und Neuordnung der Objekte zu den Knoten werden die Abstände zwischen und innerhalb der Knoten minimiert und damit das SOM optimiert. In Abbildung 11 ist das Ergebnis eines SOM-Algorithmus dargestellt, welcher das PCB-Kongenerenprofil eines Datensatz von 326 Fischproben der PDB auf mögliche Muster hinsichtlich der PCB-Kongenerenprofile untersucht hat. Im Ergebnis wurden drei Gruppen identifiziert, welche sich räumlich im SOM abgrenzen lassen.

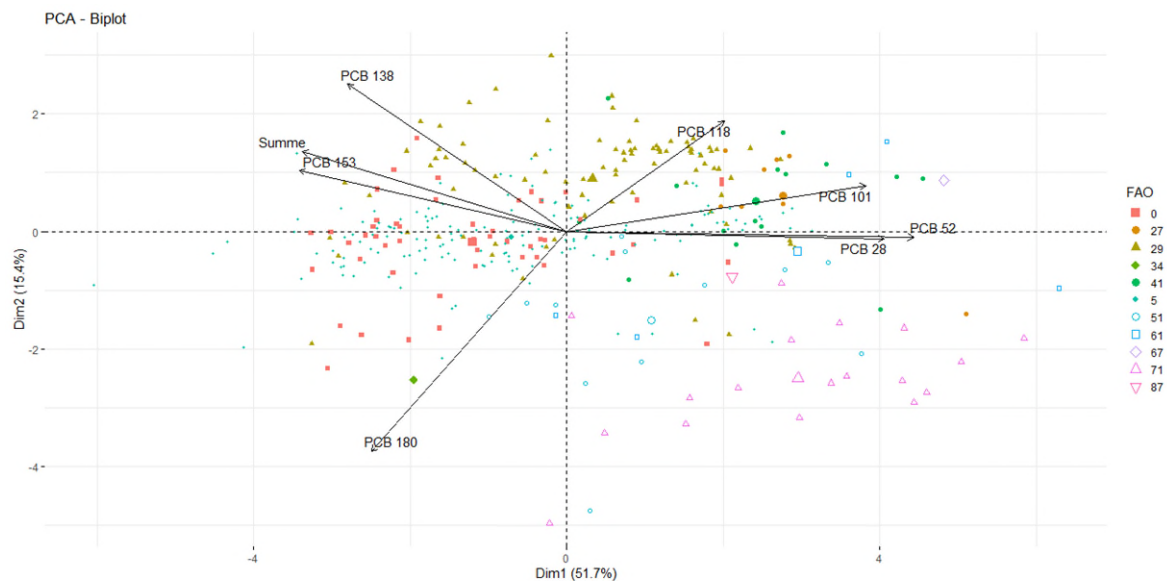
## Dimensionsreduktion

Diese Verfahren ermöglichen es "hochdimensionale Daten auf wenige Dimensionen zu reduzieren" (Hude, 2020, S. 83). Einerseits ermöglicht diese Transformation die grafische Ermittlung und Darstellung vorhandener Cluster, kann aber auch als Grundlage für weitere Berechnungen dienen. Andererseits reduziert die vereinfachte Gestalt der Daten die erforderliche Rechenleistung der eingesetzten Verfahren. Zu den Verfahren der Dimensionsreduktion zählen



u. a. die Hauptkomponenten-Analyse (HKA) sowie die *Singular Value Decomposition* (SVD) (Hude, 2020, S. 83; Rebala et al., 2019, S. 141–143; Richter, 2019, S. 312).

**Abbildung 12: Ergebnis Hauptkomponentenanalyse für Fische (Beispiel)**



Ergebnis einer HKA für die Anteile der ICES-7-PCB am jeweiligen Kongenerenprofil von Fischen aus der PDB (n:359). Es wurden zwei Komponenten ermittelt (Dim1, Dim2) welche Grundlage des neuen Koordinatensystems sind. Zu sehen sind die errechneten Ladungen je Variable (Pfeile) und ihr Zusammenhang mit den HK, außerdem sind die Proben entsprechend ihrer Zuordnung zu FAO-Fanggebieten dargestellt.

Quelle: eigene Darstellung.

Die Hauptkomponentenanalyse „reduziert eine Reihe möglicherweise korrelierter Variablen auf einen Satz unkorrelierter Variablen“ (Adler, 2010, S. 366), welche als Hauptkomponenten (HK) bezeichnet werden. Jede HK repräsentiert ein Muster und zeigt an, wie groß der Anteil der Varianz innerhalb des Datensatzes sowie je Variable durch eine HK erklärt werden kann (Adler, 2010, S. 366–369). In Abbildung 12 ist das Ergebnis einer HKA für 359 Fischproben der PDB dargestellt, bei der zwei HK ermittelt wurden, welche zusammen ca. 67 % der Varianz des Datensatzes erklären können. Einerseits wurde ein Muster identifiziert, bei dem sich die Anteile von PCB 28, 52, 101 gegenläufig zu den Anteilen von PCB 138 und 153 verhalten (schwarze Pfeile). Das Verhalten von PCB 180 kann andererseits besser durch die 2. HK beschrieben werden, wobei ein gegenläufiger Zusammenhang mit PCB 118 besteht.

### 6.2.3 Verstärkendes Lernen

Im Gegensatz zum überwachten Lernen, basiert das verstärkende Lernen auf der Interaktion mit der Umgebung. Für ein zuvor definiertes Ziel lernt der sogenannte Agent aus der Reaktion der Umgebung auf sein Handeln, indem diese ihn belohnt oder bestraft. Auf jede Handlung erfolgt daher eine positive oder negative Rückmeldung der Umgebung, so dass der Agent sein Handeln anpassen kann (Kiss & Welz, o.J.; Rebala et al., 2019, S. 193–198; Wuttke, o.J.).

Die technische Umsetzung basiert auf Markov-Entscheidungsproblemen und erfordert eine präzise Umgebungsbeschreibung zum Startpunkt. Dabei sind u. a. zu beachten, wann den Agenten die Rückmeldung auf seine Handlung erreicht und inwiefern sich die Umgebung daraufhin verändert. Methoden des verstärkenden Lernens finden aktuell Anwendung in diversen Bereichen mit sich verändernder Umgebung und komplexen Entscheidungsfindungen (z. B. Autonomes Fahren) (Kiss & Welz, o.J.; Rebala et al., 2019, S. 196).

#### 6.2.4 Neuronale Netze

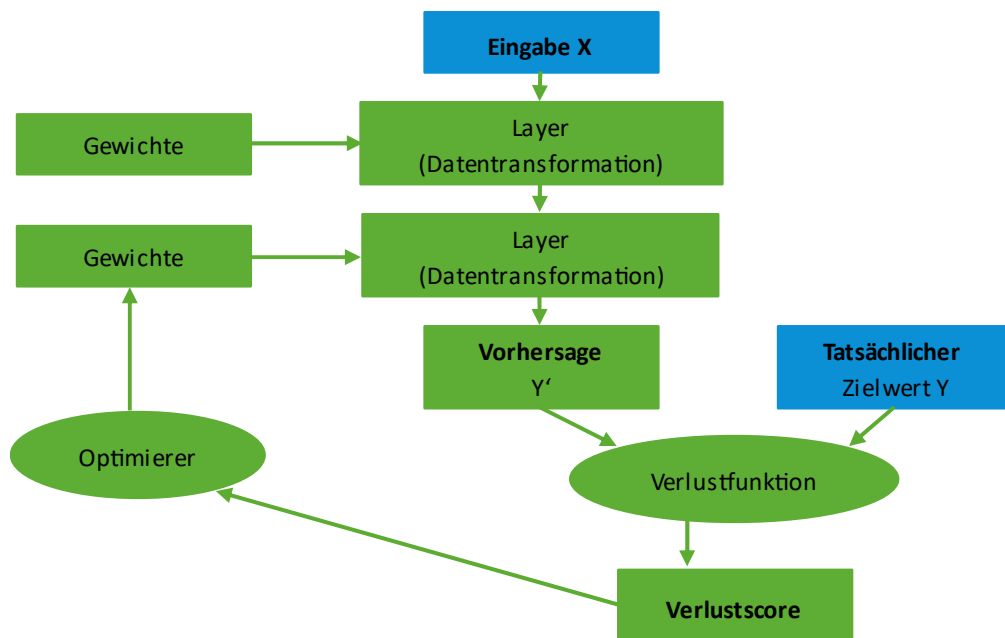
Neuronale Netze werden dem sogenannten Deep Learning zugeordnet, zur Abgrenzung von der biologischen Betrachtung von Neuronen werden sie häufig auch als künstliche Neuronale Netze bezeichnet. Damit ist „ein mehrstufiges Verfahren [gemeint], um Repräsentationen von Daten zu erlernen“ (Chollet & Allaire, 2018, S. 31). Dazu werden die Eingabedaten in mehreren Layern transformiert, mit dem Ziel eine geeignete Repräsentation zu finden, um Ausgabewerte möglichst nah an den Zielwerten zu ermitteln. Nach jedem Lern-Durchgang erfolgt hierfür ein Abgleich der Ergebnisse über eine Verlustfunktion. Zur Minimierung des Verlustwertes werden die erforderlichen Parameter oder Gewichte der Repräsentationen angepasst und der Algorithmus erlernt die geeignete Konfiguration zur Findung der Zielwerte. Die Stärke dieses Verfahrens liegt in der vielfachen Wiederholung und Optimierung dieses Vorgehens und einer geeignet großen Trainingsdatenmenge (Chollet & Allaire, 2018, S. 31; Rebala et al., 2019, S. 110–111). Das schematische Vorgehen ist in Abbildung 13 dargestellt.

### 6.3 Einsatz von Mustererkennung bei Schadstoffprofilen

Schadstoffprofile wie z. B. die Profile von PCB-Kongeneren (siehe Kapitel 2.4) oder anderen Schadstoffgemischen können Hinweise auf eine spezifische Belastung liefern. Durch die individuellen Einflüsse kann es zu einer Profilverschiebung (siehe Kapitel 3.4) kommen, und das Profil der analysierten Probe fungiert als Informationsträger dieser Belastungshistorie.

Beispielsweise analysierten Joerss et al. (2020) Profile von PFAS-Belastungen in Flusssedimenten aus China und Deutschland. Dabei setzten sie die Hauptkomponentenanalyse ein, um Belastungen vor und nach bekannten Belastungsquellen im Flussverlauf identifizieren und separieren zu können.

**Abbildung 13: Schematische Darstellung der Funktionsweise eines Neuronalen Netzes**



Ein Neuronales Netz (NN) führt diverse Transformationen der Eingabedaten durch, die detaillierte Vorgehensweise ist in sogenannten Gewichten gespeichert. Anschließend wird eine Vorhersage des NN mit dem tatsächlichen Zielwert abgeglichen und über eine Verlustfunktion wird die Abweichung vom Zielwert bestimmt (Verlustscore). Über einen Optimierer werden die gewählten Gewichte angepasst, mit dem Ziel die Verlustscores zu minimieren.

Quelle: eigene Darstellung nach Chollet & Allaire (2018, S. 31–33).

Für die Erkennung von Mustern in Schadstoffprofilen bei Fischen haben unter anderem Simonnet-Laprade et al. (2021) anschauliche Beispiele recherchiert und zusammengestellt.

Analog zu den zuvor genannten Kategorien wurden sowohl Methoden des überwachten als auch des unüberwachten Lernens eingesetzt, insbesondere Regression der partiellen kleinsten Quadrate, Klassifikationsbäume (überwachtes Lernen), hierarchische Clusteranalysis, SOM sowie HKA (unüberwachtes Lernen).

Dabei fällt auf, dass verstärkt Methoden der Dimensionsreduktion eingesetzt oder kombiniert werden. Beispielsweise verbinden Romanić et al. (2018) den Einsatz von SOM und Klassifikationsbäumen zur Mustererkennung von Chlorkohlenwasserstoffen und PCB in drei Karpfenarten. Dabei wurden die Daten durch das SOM strukturiert und zeigten bereits unterschiedliche Verteilungsmuster; mit Hilfe der Klassifikationsbäume konnten insbesondere Verteilungen schwererer Kongenere untersucht werden. Van Leeuwen et al. (2007) wiederum konnten Belastungsprofile von PCDD/F und PCB in Meeresfischen, gezüchteten Fischen sowie Muscheln mithilfe einer HKA identifizieren.

Da Verfahren des maschinellen Lernens insbesondere Muster und Strukturen in Datenbeständen identifizieren und davon lernen können, ergibt die Recherche zum Einsatz dieser Methoden in anderen Disziplinen eine Vielzahl unterschiedlicher Ergebnisse. Insbesondere aus dem Bereich der Bildanalyse und -klassifikation gibt es diverse Beispiele zur Mustererkennung (u. a. Gesichtserkennung, Auswertung medizinischer Befunde, Fingerabdrücke).

Einen kombinierten Ansatz für die Klassifikation und Zuordnung von Datenpunkten stellen Moreira & Silva (2017) vor: Die grundlegende Verteilung oder Zuordnung der Trainingsdaten wird über ein SOM ermittelt. Dieses ist in der Lage, Gruppen mit jeweils gemittelten Eigenschaften der Trainingsdaten zu berechnen (*SOM-Knoten/Prototypen*). Anschließend werden weitere Punkte (Testdaten) zu diesen SOM-Knoten mittels *k-nearest-neighbors (k-NN)* zugeordnet. Die Prototypen reduzieren die Ausgangsdaten effektiv und ermöglichen eine Zuordnung neuer Daten.

## 7 Systementwicklung zum Erkennen von PCB-Belastungsmustern

Ziel des Vorhabens ist es, Methoden zu erarbeiten, „mit denen effizient und zielgenau in großen Datenbeständen Ähnlichkeiten von Belastungs- und potenziellen Quellenprofilen ermittelt und als Grundlage für weitere wissenschaftliche Auswertungen visualisiert werden können“ (UBA, 2020). Basierend auf den zuvor dargestellten Rechercheergebnissen hat sich das Projekt auf PCB-Belastungsmuster von Fischen fokussiert, um hier einerseits mögliche Belastungsquellen ermitteln und andererseits mögliche Belastungspfade identifizieren zu können.

In Bezug auf die Zuordnung von möglichen Belastungsquellen stellt dabei die Vielzahl an Proben sowie an möglichen Belastungspfade eine Herausforderung dar. In räumlich begrenzten Fällen lässt sich ggf. ein direkter Verursacher identifizieren, im gesamten Datenbestand sind wahrscheinlich nur gröbere Aussagen möglich. Das KI-basierte System zur Mustererkennung von PCB-Belastungsprofilen von Fischen versucht daher die grundlegenden Muster der Belastungsprofile zu erklären und einen Bezug zu möglichen PCB-Quellen auf der Ebene von Nationalstaaten auszuweisen. Dazu wurde ein Datensatz von Fischen aus verschiedenen Ozeanen und Binnengewässern verwendet, wobei die geographischen Schwerpunkte im Nordostatlantik und der Ostsee liegen. Die Ergebnisse wurden in Blume et al. (2025) publiziert.

Das System wurde dazu wie folgt konzipiert: Aufbauend auf den zwei grundsätzlich möglichen Belastungspfaden für Fische (1. atmosphärischer und 2. partikelgebundener PCB-Eintrag, siehe auch Kapitel 5.2 sowie Selle et al., 2024) wurden zwei unterschiedliche Schattenprofiltypen als Trainingsdaten modelliert. Grundlage bildeten die Daten von Breivik et al. (2002, 2016, jeweils default scenario) zu verbrauchten und emittierten Mengen von 22 PCB-Kongeneren aus 114 Ländern. Die Zeitspanne der Verbrauchsdaten erstreckte sich von 1930 bis 2000; für die Emissionen lagen Daten für 1930 bis 2020 vor. Nicht für alle Länder waren – für jedes der genannten Jahre – Informationen vorhanden. Unter Berücksichtigung der relevanten Verbraucher bzw. Emittenten wurden Länder ausgewählt, welche einerseits ca. 80 % des globalen Verbrauchs bzw. der Emissionen ausmachen und andererseits entlang der europäischen Küste des Nordostatlantiks liegen oder Nachbarländer Deutschlands sind. Somit soll sichergestellt werden, dass Emittenten mit geographischem Bezug berücksichtigt werden. Eine Übersicht zeigt Tabelle 7.

**Tabelle 7: Übersicht der für das System ausgewählten Länder, welche ca. 90 % des globalen PCB-Verbrauchs (1930-2000) bzw. der PCB-Emissionen (1930-2020) verantworten**

Land	ISO-Code	kumulierter Verbrauch ICES-7-PCB (in t)	kumulierte Emissionen ICES-7-PCB (in t)
USA	US	103.002,5	2.182,6
Russland / UdSSR	RU	18.919,3	1.386,5
Frankreich	FR	9.726,4	597,9
Deutschland	DE	20.648,0	518,9
Spanien	ES	5.638,9	439,5
Ukraine	UA	5.858,1	405,4
Japan	JP	9.125,3	337,6
Vereinigtes Königreich	GB	4.705,0	301,8

Land	ISO-Code	kumulierter Verbrauch ICES-7-PCB (in t)	kumulierte Emissionen ICES-7-PCB (in t)
Canada	CA	7.514,8	292,9
Italien	IT	4.974,5	291,2
China	CN	(1.563,5)	216,6
Indien	IN	(2.564,0)	177,9
Mexiko	MX	(1.857,0)	139,0
Iran	IR	(1.932,0)	122,3
Südkorea	KR	(1.774,5)	111,0
Saudi-Arabien	SA	(1.653,9)	99,2
Kasachstan	KZ	(1.351,5)	94,3
Tschechien	CZ	1.662,5	73,4
Polen	PL	555,2	64,0
Österreich	AT	588,3	62,0
Schweiz	CH	502,8	44,5
Belgien	BE	1.686,8	39,7
Litauen	LT	481,2	34,9
Lettland	LV	395,9	31,6
Portugal	PT	132,0	28,9
Schweden	SE	615,5	21,7
Estland	EE	240,9	15,2
Finnland	FI	406,7	13,7
Dänemark	DK	234,3	9,1
Irland	IE	162,3	8,0
Norwegen	NO	176,2	7,4
Island	IS	23,3	1,3
Luxemburg	LU	30,1	-

Die Verbrauchsmengen wurden für die ICES-7-PCB als kumulierte Mengen der Jahre 1930 bis 2020 ermittelt. Länder deren Werte in Klammern (...) angegeben sind, wurden nicht für die Modellierung von gealterten Verbrauchsprofilen berücksichtigt, da sie nicht zu 80% des globalen Verbrauchs beitragen und geographisch weit entfernt zum Untersuchungsgebiet liegen. Quelle: eigene Darstellung nach Breivik et al. (2002, 2016, jeweils default scenario).

Aus den ausgewählten Verbrauchs- bzw. Emissionsprofilen wurden – durch die in Kapitel 5.3 beschriebenen Methoden – Schattenprofile modelliert. Dabei variierte einerseits die Dauer der Alterung (bei gealterten Verbrauchsprofilen) und andererseits die Wassertemperatur (bei fraktionierten Emissionsprofilen). Insgesamt entstand so ein Datensatz von 93.210

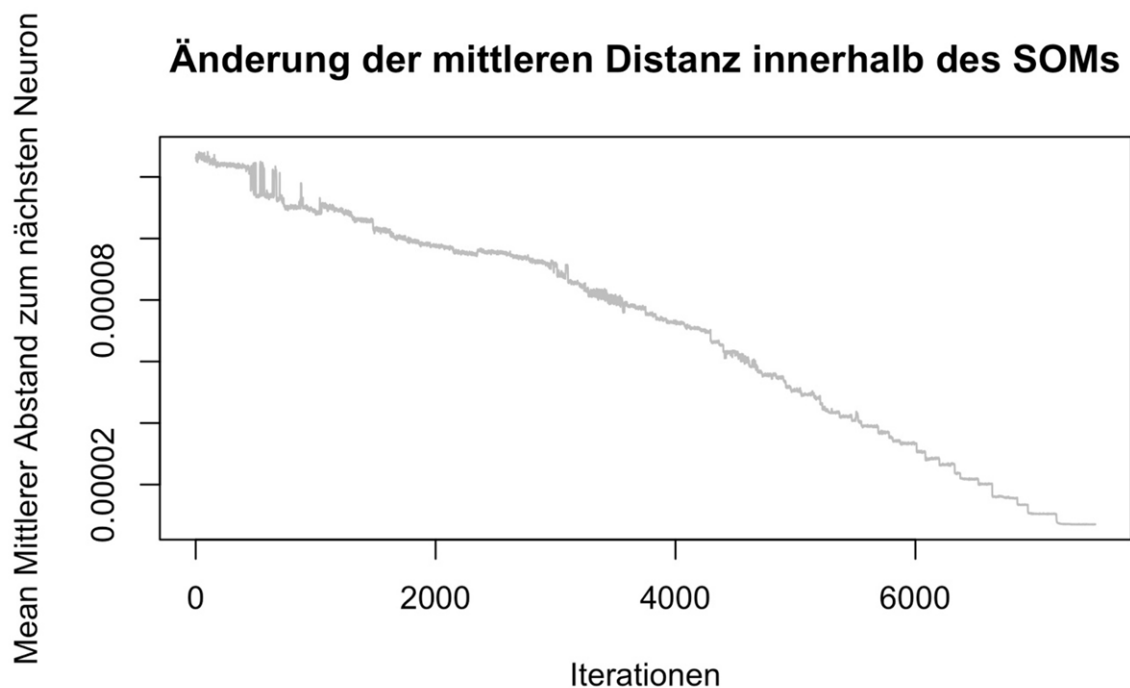
Schattenprofilen für den Zeitraum von 1982 bis 2020, welcher sich mit dem Fangzeitraum der später zu vergleichenden gemessenen Fischprofilen deckt:

- ▶ 494 Verbrauchsprofile, aus denen 52.780 gealterte Verbrauchsprofile modelliert wurden, sowie
- ▶ 1.248 Emissionsprofile, aus denen 38.688 fraktionierte Emissionsprofile modelliert wurden.

Diese Schattenprofile beinhalten kumulierte Verbrauchsprofile der ausgewählten Länder, welche seit dem Jahr 1930 im Sediment abgelagert wurden und bis in den Zeitraum 1982-2020 alterten, sowie Emissionsprofile aus den Jahren 1982 bis 2020, welche jeweils bei unterschiedlichen Wassertemperaturen aus der Atmosphäre in den Ozean eingetragen wurden.

Die Schattenprofile wurden anschließend durch ein SOM mit 7.500 Iterationen modelliert und einzelnen Knoten zugeordnet. Für eine ausreichende Differenzierung der insgesamt 93.210 Schattenprofile wurde eine *grid size* von 39 x 39 gewählt, so dass 1.521 Knoten berechnet wurden. Jeder Knoten repräsentiert ein aus den jeweils zugeordneten Schattenprofilen gemitteltes PCB-Kongenerenprofil. Die Variation der Merkmalsausprägungen (z. B. Herkunftsland plus Schattenprofiltyp) der zugeordneten Profile kann ebenfalls pro Knoten ausgewiesen werden. Konzeptionell können so Unschärfen bei der Zuordnung neuer Profile zu Belastungsquellen explizit ausgewiesen werden, da die Knoten selbst unrein sind und eine Mischung potenzieller Herkunftsländer und Transportpfade darstellen. Das für die Erstellung der Schattenprofil-Prototypen verwendete SOM-Modell wurde – wie schon erwähnt – über 7.500 Iterationsschritte optimiert (siehe Abbildung 14).

**Abbildung 14: SOM Changes plot mit der Änderung der mittleren Distanz über 7.500 Iterationsschritte**

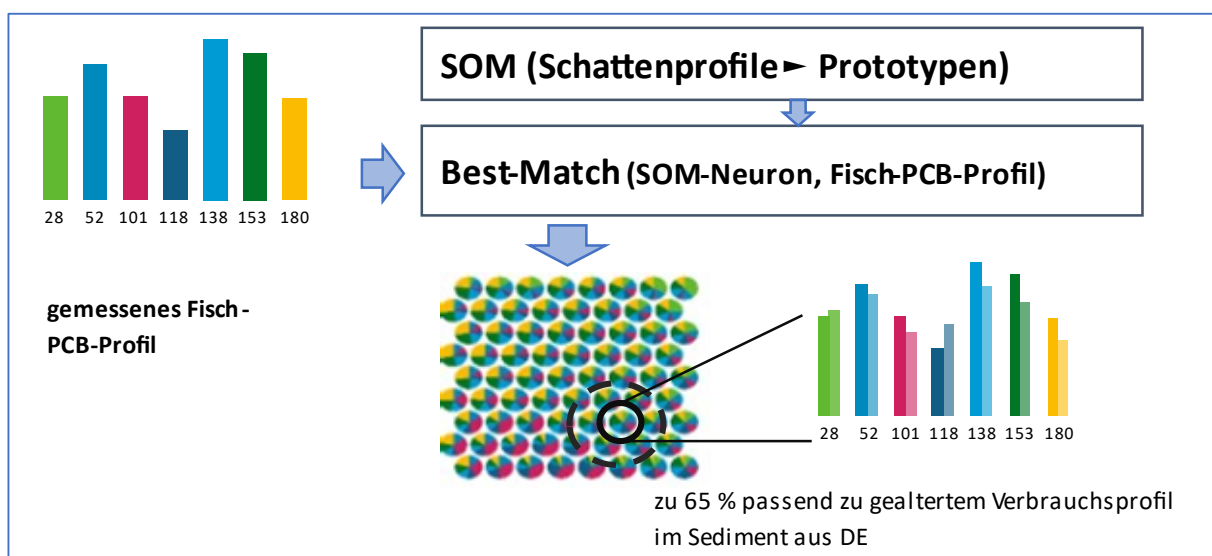


Der Changes plot zeigt die Veränderung der mittleren Distanz der eingegebenen Daten zum jeweils nächsten Knoten. Über die 7.500 erfolgten Iterationsschritte zeigt sich eine kontinuierliche Reduktion der mittleren Distanz.

Quelle: eigene Darstellung in Anlehnung an Blume et al. (2025).

In Anlehnung an das kombinierte Verfahren von Moreira & Silva (2017) wurden die berechneten Knoten als Prototypen verstanden, welche für einen Profilvergleich mit gemessenen Profilen durch Ermittlung der kürzesten Distanz genutzt wurden. Im Ergebnis konnten die gemessenen Profile mit 1.521 anstelle von 93.210 Profilen verglichen und ausgewertet werden. Abbildung 15 veranschaulicht den schematischen Aufbau des Vorgehens.

**Abbildung 15: Schematische Darstellung des KI-basierten Systems zum Profilvergleich von gemessenen Fisch-PCB-Profilen mit modellierten Schattenprofilen**



Für ein gemessenes Fisch-PCB-Profil wird mit zuvor über ein SOM ermittelten Prototypen die kürzeste Distanz ermittelt, um Aussagen zu einer potenziellen Belastungsquelle treffen zu können.

Quelle: eigene Darstellung.

Das aus den 93.210 Schattenprofilen berechnete SOM ist in Abbildung 16 zu sehen. Darin sind die gemittelten PCB-Profile der 1.521 Knoten als Kreisdiagramm (sog. *codes plot*) dargestellt. Entsprechend der unterschiedlichen Anteile der einzelnen Kongenere können verschiedene Bereiche visuell identifiziert werden: So sind etwa oben links Profile mit einem relativ großen Anteil von PCB 118 zu erkennen, unten rechts größere Anteile von PCB 180.

Zu jedem Knoten bzw. Prototypen sind weitere Eigenschaften der zugeordneten Schattenprofile vorhanden. Insgesamt wurden folgende Daten den Prototypen zugeordnet:

- Nationalstaat (Quelle des Verbrauchs- bzw. Emissionsprofils),
- Jahr (Jahr, bis zu dem das Profil im Sediment gealtert ist bzw. in dem die Emissionen erfolgten) sowie
- Wassertemperatur (in der Modellierung berücksichtigte Temperatur, Gleichung (V.)).

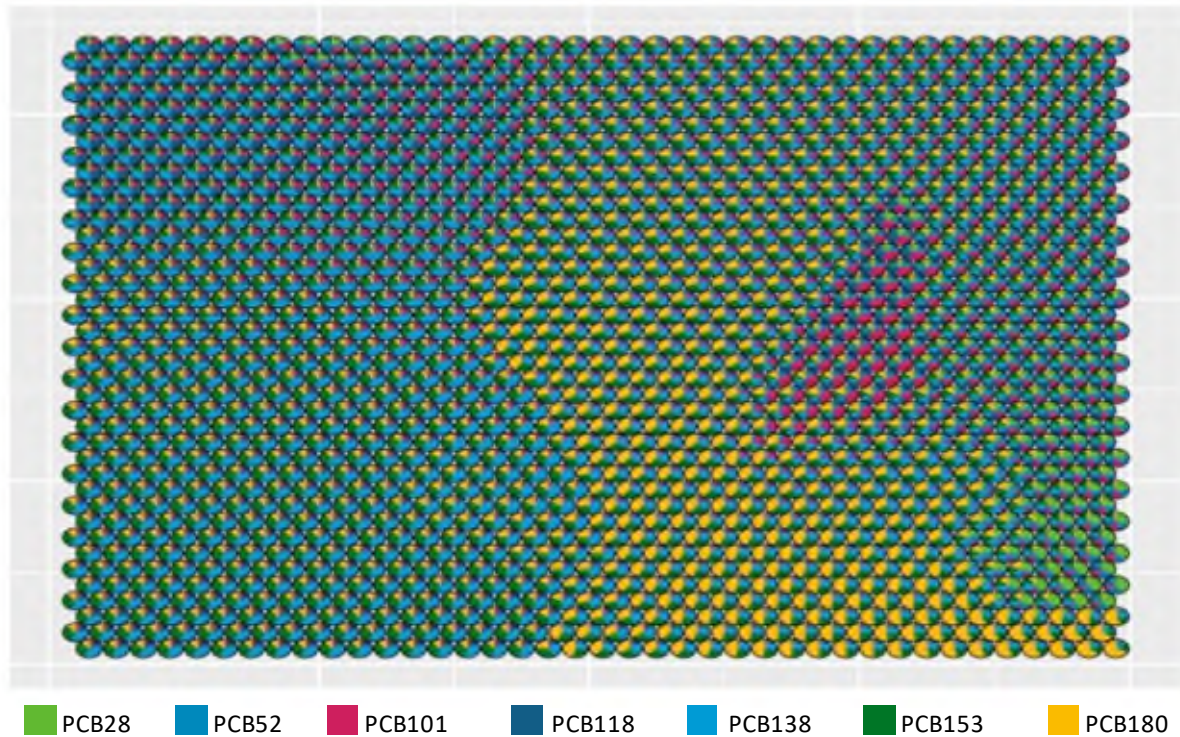
Werden die Anteile der Schattenprofiltypen an den jeweiligen Knoten in Form eines Kreisdiagramms über die ermittelten codes plot gelegt, ergeben sich klar abgegrenzte Einteilungen des SOM (siehe Abbildung 17). Ausgangsprofile (Verbrauchs- und Emissionsprofile) sind fast ausschließlich im unteren rechten Bereich verortet. An die Ausgangsprofile angrenzend erstrecken sich die gealterten Verbrauchsprofile in der rechten Hälfte des Grids. In der linken Hälfte ordnen sich die fraktionierten Verbrauchsprofile an. Auffallend sind zudem mehrere Linien von weißen SOM-Knoten, welche sowohl innerhalb der gealterten Profile als auch zu den fraktionierten Profilen eine Trennung aufbauen und welchen



keine Schattenprofile zugeordnet wurden. Prototypen mit gemischten Schattenprofiltypen treten nur vereinzelt auf, vorwiegend bei den Ausgangsprofilen.

**Abbildung 16: SOM codes plot berechnete Schattenprofile (n: 93.210) mit der Darstellung der ermittelten Kongenerenprofile je SOM-Knoten**

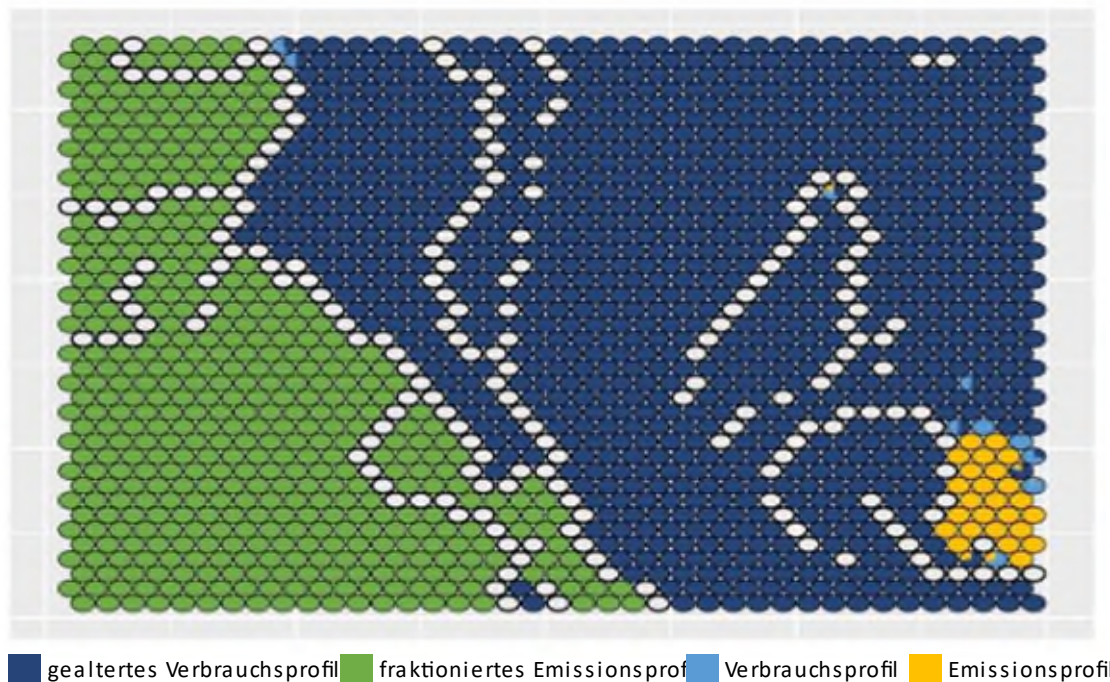
---



Der SOM codes plot mit 1.521 Knoten (Grid 39 x 39).

Quelle: eigene Darstellung in Anlehnung an Blume et al. (2025).

**Abbildung 17: SOM codes plot der berechneten Schattenprofile (n: 93.210) mit der Darstellung der Anteile von Schattenprofiltypen pro Knoten**



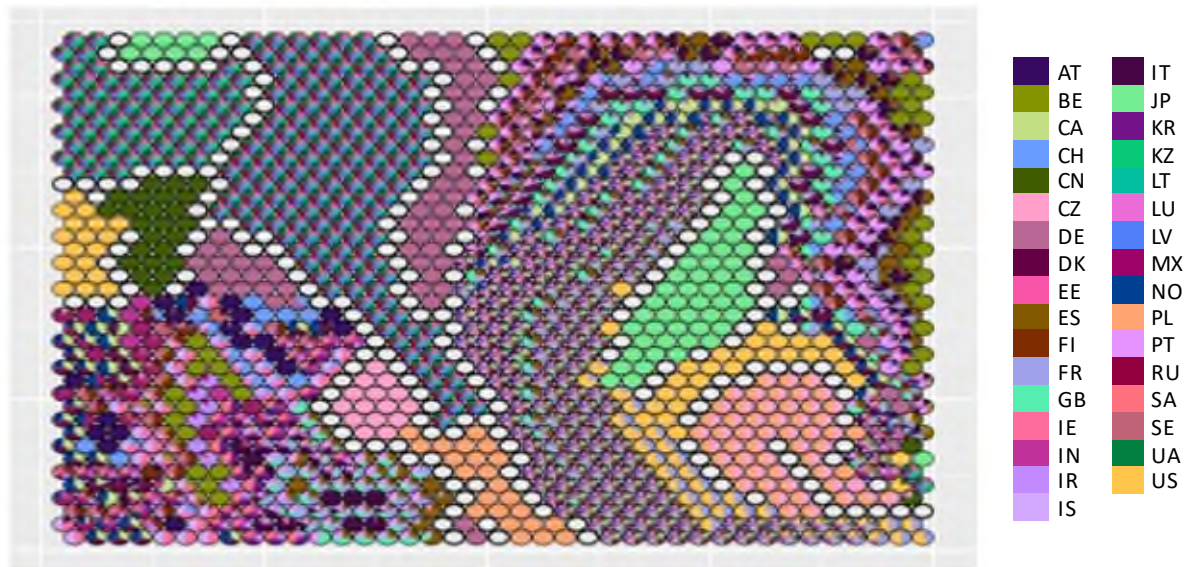
Der SOM codes plot mit 1.521 Knoten (Grid 39 x 39) und der Darstellung der zugehörigen Anteile der Schattenprofile: Verbrauchsprofil, gealtertes Verbrauchsprofil, Emissionsprofil sowie fraktioniertes Emissionsprofil. Weiße Knoten wurden keinem Schattenprofil zugeordnet.

Quelle: eigene Darstellung in Anlehnung an Blume et al. (2025).

Werden nach gleichem Verfahren anstelle der Anteile der Profiltypen die Anteile der Ursprungsländer über die ermittelten SOM-Knoten projiziert, ergeben sich ebenfalls abgrenzbare Bereiche (siehe Abbildung 18). In Verbindung mit Abbildung 17 lassen sich so fraktionierte Emissionsprofile aus Deutschland im mittleren linken Randbereich verorten, gealterte Verbrauchsprofile hingegen mittig, vorwiegend oben, zwischen gealterten Profilen unterschiedlicher Länder. Ebenso sind gealterte und fraktionierte Profile der USA und Japan klar getrennt, teilweise durch weiße SOM-Knoten. Profile aus Russland lassen sich gruppiert mit anderen Staaten der ehemaligen UdSSR im SOM verorten (links oben bis zur Mitte). Der weitere Bereich der fraktionierten Emissionsprofile wird unterschiedlichen Ländern zugeordnet, ebenso die gealterten Verbrauchsprofile unterschiedlicher Länder, welche sich rechten Bereich verteilen.



**Abbildung 18: SOM codes plot der berechneten Schattenprofile (n: 93.210) mit der Darstellung der Anteile der Ursprungsländer pro Knoten**

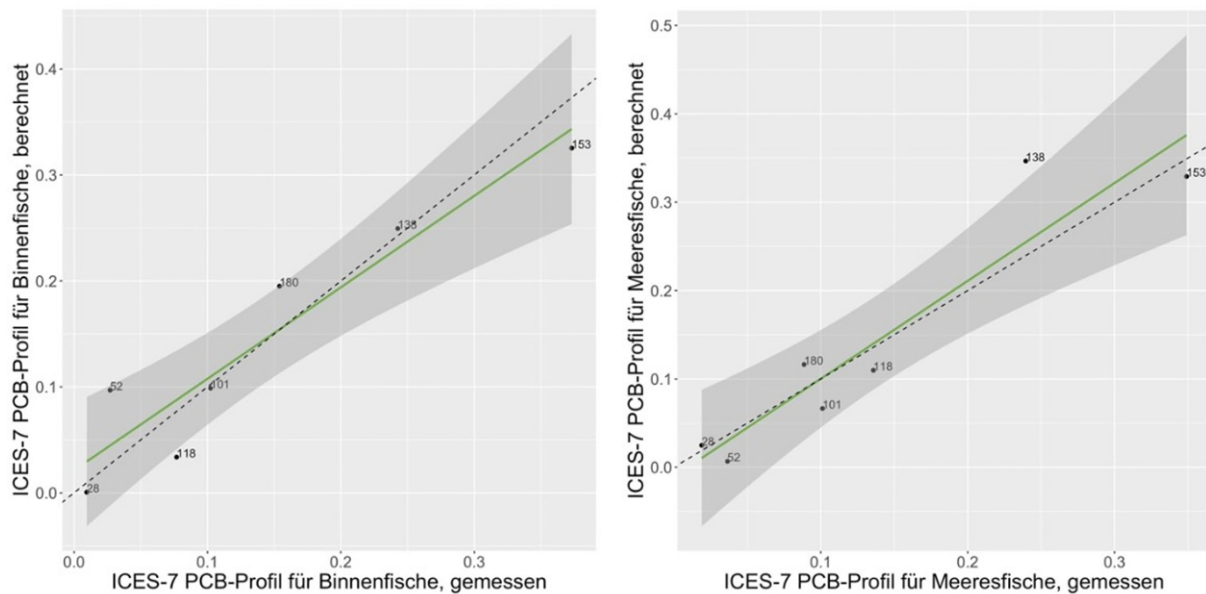


Der SOM codes plot mit 1.521 Knoten (Grid 39 x 39) und der Darstellung der zugehörigen Anteile der Ursprungsländer (Angabe mit zweistelligem ISO-Ländercode). Weiße Knoten wurden keinem Schattenprofil zugeordnet.

Quelle: eigene Darstellung in Anlehnung an Blume et al. (2025).

Teil der Entwicklung des Systems war dessen grundsätzliche Plausibilisierung, wobei eine detaillierte Beschreibung dazu dem Fachartikel von Selle et al. (2024) entnommen werden kann. Für Fische aus Binnengewässern (PDB, n: 239 Proben) sowie für Meeresfische (ICES, n: 4.479 Proben) wurden jeweils mittlere ICES-7-PCB Profile berechnet. Dem mittleren Profil der Fische aus Binnengewässern wurde ein modelliertes gealtertes Verbrauchsprofil und dem mittleren Profil der Meeresfische wurde ein fraktioniertes Emissionsprofil gegenübergestellt. Grundlage des gealterten Verbrauchsprofils war ein kumuliertes Profil des ICES-7-PCB Verbrauchs in Deutschland bis zum Jahr 1983, in dem die Hochphase für den Einsatz und die Produktion endete (Breivik et al. (2002), siehe auch Kapitel 2.1 sowie den Produktionsstopp von Bayer in Westdeutschland, Tabelle 4). Das Emissionsprofil basiert auf dem medianen globalen Emissionsprofil der Jahre 1982 bis 2020, entsprechend den Fangdaten der Fische im Datensatz zu Meeresfischen (gemäß Breivik et al., 2016). Beide Ausgangsprofile wurden gealtert bzw. fraktioniert. Da die Fische aus Binnengewässern vorwiegend zwischen 2014 und 2018 gefangen wurden, wurde – neben den kongenerensspezifischen Halbwertszeiten – für die Alterungsdauer des Verbrauchsprofils ein Wert von 33 Jahren angenommen ( $((2018 + 2014)/2 - 1983 = 33)$ ). Für die Fraktionierung des Emissionsprofils wurde neben relevanten Parametern für die Phasenübergänge eine mittlere Wassertemperatur von 6,5°C (entsprechend der mittleren Temperatur des Nordostatlantiks) angenommen. Die Gegenüberstellung der jeweiligen Profile unter Verwendung der beschriebenen Parameter erzeugte eine akzeptable Übereinstimmung der gemessenen und modellierten Profile (siehe Abbildung 19).

**Abbildung 19: Berechnete und modellierte mediane PCB-Profile von Fischen aus Binnengewässern und Verbrauchsprofilen sowie Meeresfischen und Emissionsprofilen**



Die Abbildung zeigt (a) das berechnete gegenüber dem gemessenen medianen PCB-Profil von Fischen aus Binnengewässern (PDB, n: 239) mit den Nummern der Kongenere, b) das berechnete gegenüber dem gemessenen medianen PCB-Profil von Meeresfischen (ICES, n: 4.479). Die grüne Linie stellt die lineare Regressionslinie der berechneten und gemessenen Daten dar, in dunkelgrau ist das 95 % Konfidenzintervall hinterlegt. Die schwarz gestrichelte Linie stellt eine 1:1 Gerade dar. Quelle: eigene Darstellung in Anlehnung an Selle et al. (2024).

Die Evaluation der Modellergebnisse erfolgt normalerweise durch die Teilung des analysierten Datensatzes in Trainings- und Testdaten. Im Fall des vorliegenden Modells sind zu den zu untersuchenden PCB-Profilen jedoch keine eindeutigen Belastungsquellen bekannt. Daher basiert der Modellaufbau grundsätzlich auf der Erstellung eigener Trainingsdaten (Schattenprofile) denen Testdaten (gemessene PCB-Belastungsprofile von Fischen) zugeordnet werden. Die Modellergebnisse können daher nur fallbezogen ausgewertet, interpretiert und hinsichtlich ihrer Plausibilität bewertet werden.

Das dargestellte Modell wurde für den Profilvergleich von ICES-7-PCB-Profilen belasteter Fische aus Binnengewässern und pelagisch lebender Meeresfische konzipiert und beruht auf der Annahme der primären Relevanz der identifizierten Belastungspfade für diese Fische. Für die Analyse und den Vergleich von Profilen anderer Fische (z. B. Plattfische), anderer aquatischer Lebewesen (z. B. Muscheln) oder anderer Kompartimente müssen zuvor die relevanten Belastungspfade identifiziert und entsprechende Schattenprofile modelliert werden.

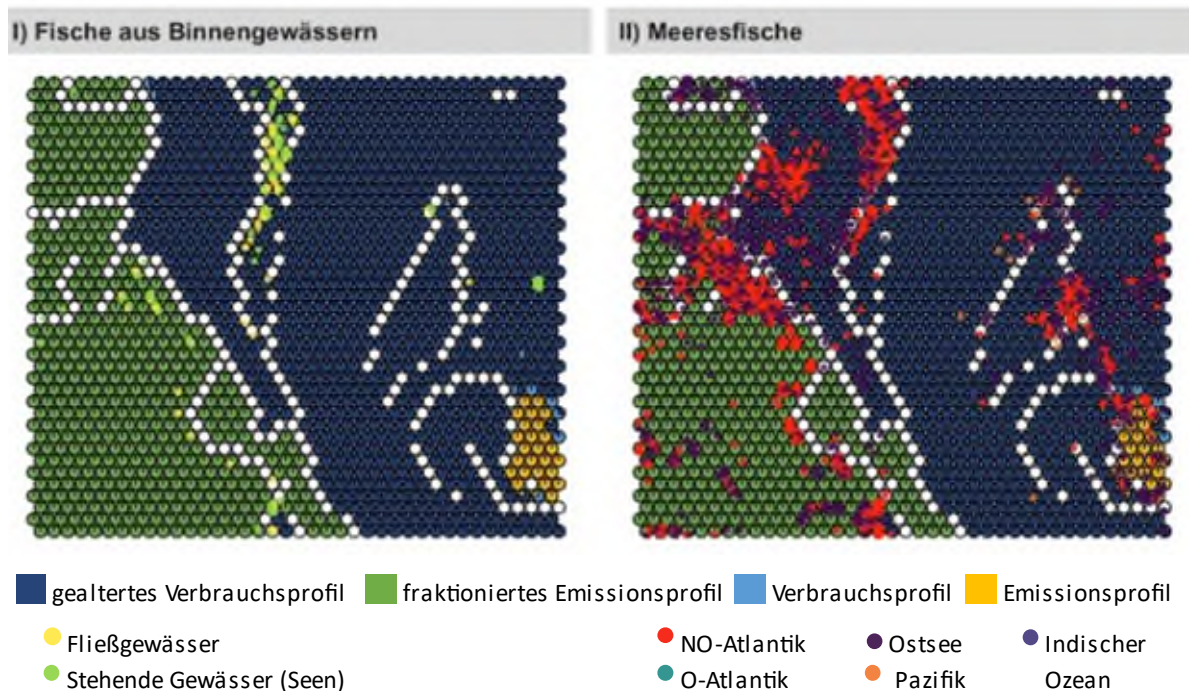
## 8 Systemanwendung

### 8.1 Ergebnisse

Ausgehend von dem zuvor beschriebenen System (siehe Kapitel 7) wurden Belastungsprofile von Fischen (Fischen aus Binnengewässern, n: 258; Meeresfische, n: 8.326; Gesamt: 8.584) den potenziellen Quellprofilen (1.521 Schattenprofiltypen) zugeordnet.

Abbildung 20 zeigt die Zuordnung der gemessenen Fischprofile zu den Prototypen, aufgeteilt nach Fischen aus Binnengewässern und aus Meeren. Die Proben von Fischen aus Binnengewässern finden sich vorwiegend im Bereich der gealterten Verbrauchsprofile (ca. 61,6%, dunkelblau gefärbte Knoten) sowie entlang der weißen, leeren Knoten zwischen gealterten Verbrauchsprofilen sowie im Grenzbereich zu fraktionierten Emissionsprofilen. Die Profile von Meeresfischen (siehe Abbildung 20) sind über das SOM verstreut, konzentrieren sich jedoch im Bereich der fraktionierten Emissionsprofile (55,9 %, hellgrüne Bereiche) und ebenfalls entlang leerer Knoten ohne zugeordnete Schattenprofile. Entsprechend den Eingangsdaten wird der Datensatz dominiert von Proben aus dem Nordostatlantik sowie der Ostsee, welche über die genannten SOM-Bereiche verteilt sind. Die genauen Ergebnisse können Tabelle 8 entnommen werden,

**Abbildung 20: SOM codes plot der berechneten Schattenprofile (n: 93.210) mit den Anteilen der Schattenprofiltypen je Knoten und den zugeordneten gemessenen Fisch PCB-Profilen (n: 8.584)**



Auf dem SOM codes plot mit 1.521 Knoten (Grid 39 x 39) sind die Anteile der Schattenprofiltypen sowie die Zuordnung der gemessenen Fischprofile zu den Prototypen (Knoten) nach deren Fanggebiet dargestellt. Links sind die Fische aus europäischen Binnen- und Fließgewässern, links die Meeresfische aus vorwiegend dem Nordost (NO)-Atlantik sowie der Ostsee dargestellt. Weiße Knoten wurden keinem Schattenprofil zugeordnet. Quelle: eigene Darstellung in Anlehnung an Blume et al. (2025).

**Tabelle 8: Anzahl und Anteile der Zuordnung von Fischprofilen zu Schattenprofiltypen**

Fanggebiet	gealtertes Verbrauchsprofil		unverändertes Verbrauchsprofil		leere SOM-Knoten		unverändertes Emissionsprofil		fraktioniertes Emissionsprofil		Σ
	Abs.	%	Abs.	%	Abs.	%	Abs.	%	Abs.	%	Abs.
Fließgewässer	102	60,7	0	0,0	39	23,2	0	0,0	27	16,1	168
Stehende Gewässer (Seen)	57	63,3	0	0,0	19	37,8	0	0,0	14	15,6	90
<b>Summe Binnengewässer</b>	<b>159</b>	<b>61,6</b>	<b>0</b>	<b>0,0</b>	<b>58</b>	<b>22,5</b>	<b>0</b>	<b>0,0</b>	<b>41</b>	<b>15,9</b>	<b>258</b>
Ostsee	745	19,4	39	1,0	753	19,6	88	2,3	2.222	57,8	3.847
NO-Atlantik	753	16,8	1	0,0	1.245	27,8	34	0,8	2.452	54,7	4.484
Weitere Meere	21	58,3	0	0,0	12	33,3	1	2,8	2	5,6	36
<b>Summe Meere</b>	<b>1.519</b>	<b>18,2</b>	<b>39</b>	<b>0,5</b>	<b>2.010</b>	<b>24,0</b>	<b>123</b>	<b>1,5</b>	<b>4.676</b>	<b>55,9</b>	<b>8.367</b>

Die rechnerische Differenz zwischen den gemessenen Proben (n: 8.584) und der Gesamtsumme (n: 8.625) der dargestellten Zuordnungen ergibt sich durch SOM-Knoten, welche zwei oder drei Schattenprofiltypen (gealterte sowie nicht veränderte Verbrauchs- oder Emissionsprofile) und somit mehreren Fischprofilen zugeordnet sind (n: 39).

Quelle: eigene Darstellung in Anlehnung an Blume et al. (2025).

Die Auswertung der zugrunde liegenden Schattenprofile je zugeordnetem SOM-Knoten ergibt Hinweise auf Quellländer der Kontamination (siehe Abbildung 21): Fische aus Binnengewässern, die über den partikelgebundenen Pfad belastet wurden, haben eine hohe Übereinstimmung mit gealterten Verbrauchsprofilen aus Deutschland (140 von 159 Proben). Fischproben, welche einem leeren SOM-Knoten zugeordnet wurden, befinden sich vorwiegend zwischen gealterten Verbrauchsprofilen aus Deutschland und fraktionierten Profilen aus insbesondere Polen und Spanien.

Meeresfische weisen eine hohe Übereinstimmung mit fraktionierten Emissionsprofilen aus Deutschland (2.996 von 4.676 Proben) auf. Außerdem werden viele Proben SOM-Knoten zugeordnet, die vorwiegend von den Ländern Spanien (795 von 4.676 Proben), Portugal (764 von 4.676 Proben) und Großbritannien (688 von 4.676 Proben) geteilt werden. Wenn Meeresfische einem gealterten Verbrauchsprofil zugeordnet werden, dann mehrheitlich Profilen aus Deutschland oder, wenn sie in der Ostsee gefangen wurden, auch Anrainerstaaten bzw. Ländern der ehemaligen UdSSR (Estland, Lettland, Litauen, Russland, Ukraine).

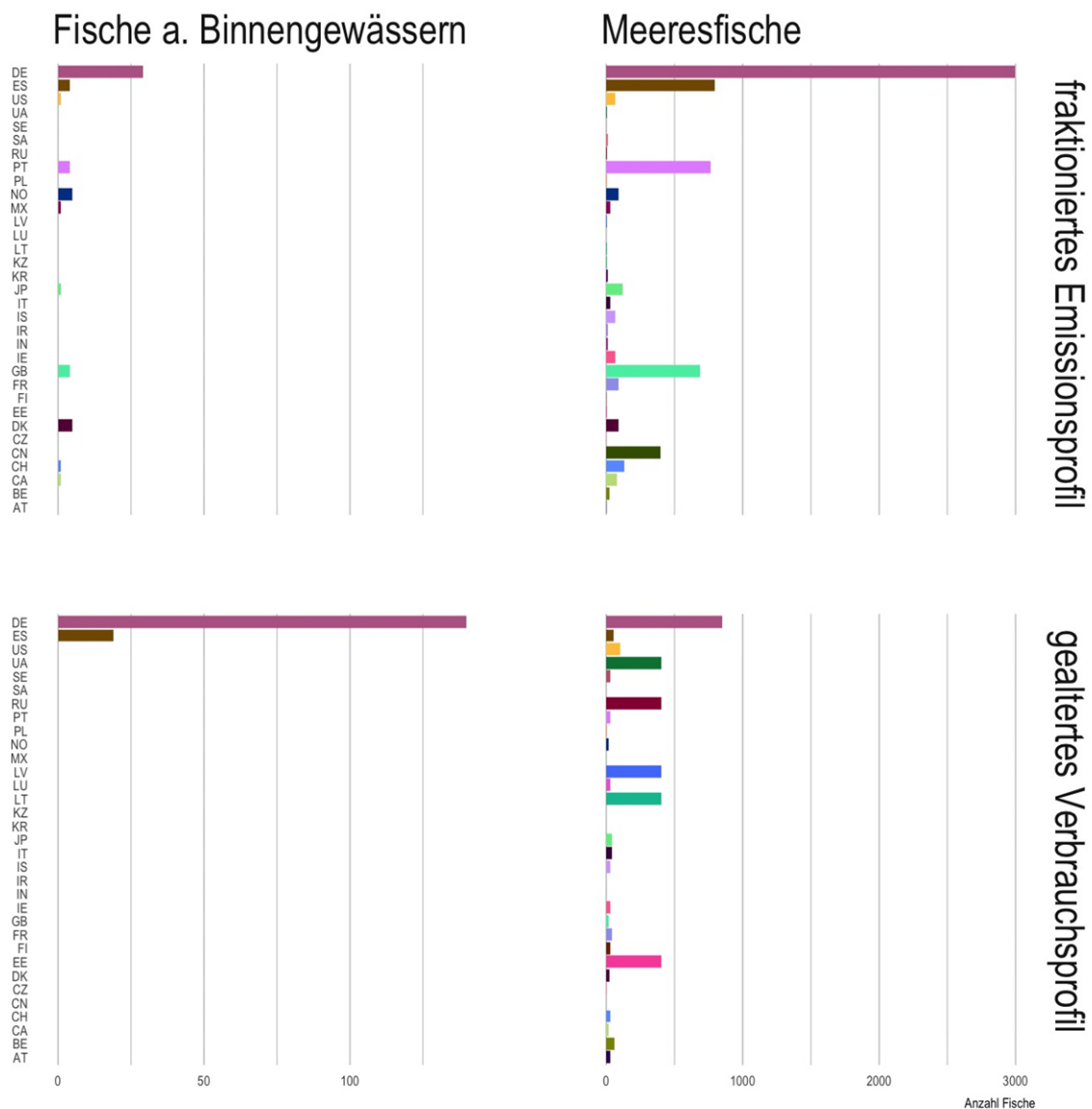
Neben den dominierenden Zuordnungen gibt es einige Zuordnungen zu weiteren europäischen Ländern (insbesondere Meeresfischen mit fraktioniertem Emissionsprofil). Auch werden Zuordnungen angezeigt, welche aufgrund der geographischen Distanz als unplausibel erscheinen, z. B. Binnenfische mit spanischem fraktionierten Emissionsprofil in Proben von einem See auf Färöer-Inseln. In Summe betrifft dies jedoch eine vergleichsweise sehr geringe Anzahl an Proben.

Die Auswertung von Fangjahr der Fischproben und mittlerem Alterungsjahr (bei zugeordneten gealterten Verbrauchsprofilen für Fische aus Binnengewässern) bzw. mittlerem Emissionsjahr (für zugeordnete fraktionierte Emissionsprofile für Meeresfische) ist in Abbildung 22 dargestellt: Fische aus Binnengewässern ordnen sich bevorzugt Schattenprofilen mit kürzerem Alterungszeitraum zu, beispielsweise Fische aus den Fangjahren 2009 bis 2018 ordnen sich



vorwiegend einem bis zum Jahr 2000 gealtertem Verbrauchsprofil zu. Die Auswertung für Meeresfische zeigt kein klares Bild mit einigen unplausiblen Ergebnissen. Unter anderem gibt es Zuordnungen von Fischprofilen zu Schattenprofilen die erst nach dem Fangdatum emittiert werden. Dennoch deutet die Grafik an, dass die Meeresfischprofile sich bevorzugt zu Schattenprofilen der Jahre 1982 und 1986 zuordnen; Jahre im Anschluss an die Hochphase des globalen PCB-Verbrauchs sowie Jahre, in denen das ursprüngliche Emissionsprofil aus Deutschland einen besonders hohen Anteil an leichten Kongeneren (CB28, CB52) aufweist.

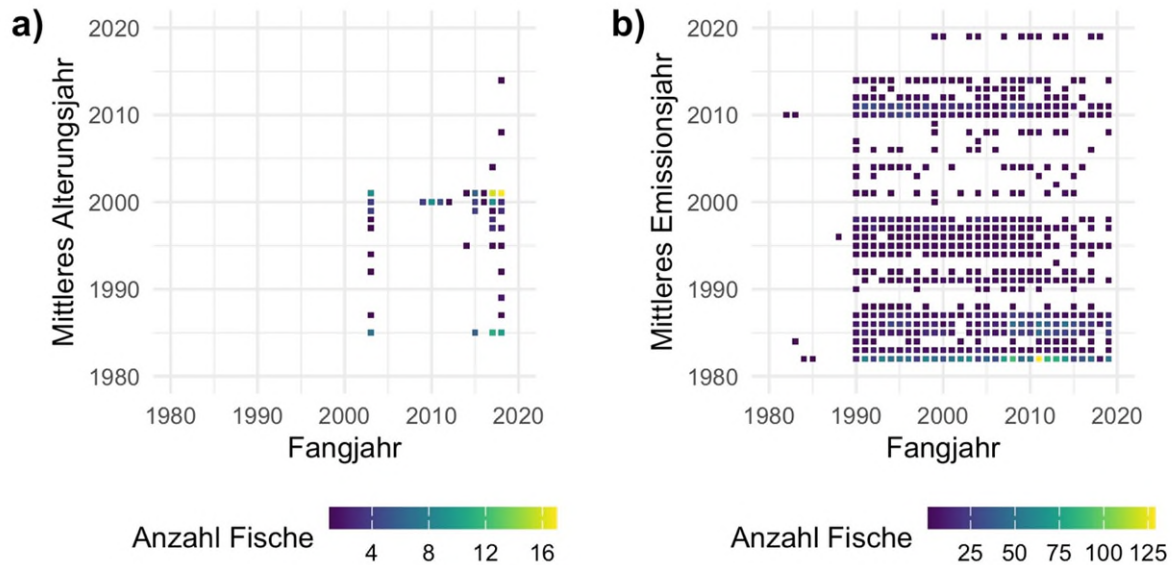
**Abbildung 21: Anzahl der Fischproben die SOM-Knoten mit den angezeigten Ländern zugeordnet wurden**



Anzahl der Fischproben welche SOM-Knoten mit Schattenprofilen mit den angezeigten Ländern (ISO-Länder-Code) zugeordnet wurden. Die Grafik ist aufgeteilt nach Kontaminationspfaden (gealterte Verbrauchsprofile, fraktionierte Emissionen) und Herkunft der Fischproben (Binnengewässer, Meere). Quelle: eigene Darstellung in Anlehnung an Blume et al. (2025).



**Abbildung 22: Vergleich der Fangjahre der gemessenen Fische aus Binnengewässern und Meeren (x-Achse) mit dem Jahr, bis zu dem das Verbrauchsprofil alterte (a) y-Achse) sowie dem Emissionsjahr (b) y-Achse)**



## 8.2 Interpretation

Die zuvor beschriebenen Ergebnisse werden nachstehend interpretiert, um die Aussagefähigkeit sowie die Grenzen des Systems zu verdeutlichen.

Wie zuvor beschrieben, basiert das entwickelte System auf der grundlegenden Annahme, dass sich die PCB-Profile von Fischen aus Binnengewässern und Meeresfischen aufgrund zwei dominierender jedoch unterschiedlicher Belastungspfade abgrenzen lassen. Demnach würde das Profil von Fischen aus Binnengewässern vorwiegend durch gealterte PCB-Profile im Sediment beeinflusst. Das Profil von Meeresfischen würde hingegen vorwiegend durch PCB-Profile belastet, welche durch unterschiedliche Phasenübergänge fraktioniert wurden (atmosphärischer Transport -> Eintrag ins Wasser -> Aufnahme im Organismus). Die modellierten Schattenprofile (vgl. Kapitel 5.3 und 7) für ausgewählte Nationalstaaten (Verbraucher und Emittenten) können als gealterte bzw. fraktionierte PCB-Profile mit Fisch-Profilen verglichen werden.

Es war daher zu erwarten, dass

- Binnenfische vorwiegend gealterten Verbrauchsprofilen und
- Meeresfische vorwiegend fraktionierten Emissionsprofilen zugeordnet werden.

Für eine plausible Profilzuordnung könnte man außerdem Folgendes erwarten:

- Der Staat eines gealterten Verbrauchsprofils, das einem Fisch aus Binnengewässern zugeordnet wird, liegt im Einzugsgebiet des Binnengewässers (partikelgebundener Eintrag); bei Meeresfischen sollte das Herkunftsland des zugewiesenen Emissionsprofils in der Nähe liegen bzw. eine geographisch plausible Beziehung zum Fanggebietes aufweisen (atmosphärischer Eintrag).

- Das Jahr bis zur Profilalterung (gealterte Verbrauchsprofile) sowie das Emissionsjahr (fraktioniertes Emissionsprofil) sollten vorwiegend gleich dem Fangjahr sein.
- Die Wassertemperatur für den Phasenübergang Atmosphäre -> Wasser (fraktionierte Emissionsprofile) sollte in etwa der mittleren Temperatur im Fanggebiet entsprechen.

Das erstellte SOM-Grid (siehe Abbildung 16) zeigt eine klare Aufteilung der unterschiedlichen Schattenprofiltypen sowie teilweise auch eine länderspezifische Differenzierung. Durch diese individuellen Fingerabdrücke je Belastungspfad und Land war eine wichtige Voraussetzung für eine informative Zuordnung der gemessenen PCB-Profile gegeben.

Entsprechend der Annahmen, konnten sowohl Fische aus Binnengewässern als auch Meeresfische mehrheitlich den identifizierten Belastungspfaden zugeordnet werden (jeweils ca. 61,6 % bzw. 55,9 %). Auch die Zuordnung zu potentiellen Quellenländern ist aufgrund der geographischen Nähe sowie ihrem Anteil am globalen Verbrauch bzw. den Emissionen plausibel, insbesondere in Anbetracht der Vielzahl verfügbarer potentieller Länderprofile im Modell. Daher scheint es insgesamt möglich, durch das entwickelte System gemessene PCB-Profile von Binnen- und Meeresfischen auf dominante Belastungspfade und potenzielle Emissionsländer zurückzuführen. Nachstehend werden die Ergebnisse näher – für Binnenfische und Meeresfische getrennt – erläutert.

### 8.2.1 Fische aus europäischen Binnengewässern

Erwartungsgemäß wurden ca. 61,9 % der Profile von Fischen aus Binnengewässern gealterten Verbrauchsprofilen zugeordnet, zudem vorwiegend Schattenprofilen aus Deutschland. Dieses Ergebnis ist plausibel und entspricht dem identifizierten Belastungspfad. Auch die fehlende Zuordnung zu gealterten Profilen von außerhalb Europas (z. B. Japan, USA) unterstreicht die getroffenen Annahmen zur Profilalterung. Die Zuordnung von ca. 22,5 % der Profile zu weißen, leeren SOM-Knoten zwischen gealterten Verbrauchsprofilen aus Deutschland und fraktionierten Emissionsprofilen anderer Länder (insbesondere Polen und Spanien) kann als Überlagerung beider Belastungspfade interpretiert werden (siehe Abbildung 18 in Verbindung mit Abbildung 20). Neben dem dominierenden partikel-gebundenen Eintrag erhalten einige Fischprofile eine spezifische Signatur von fraktionierten Emissionsprofilen (41 von 258 Profile) – geprägt von höheren Anteilen leichter Kongenere gegenüber gealterten Verbrauchsprofilen. Eine mögliche Quelle könnte der Eintrag von Vegetationsrückständen sein (z. B. Blättern), welche atmosphärisch geprägt sind und daher Emissionsprofile aufweisen (Jeremiason et al., 1999). Die Fischprofile wurden vorwiegend Emissionsprofilen aus Deutschland zugeordnet, was geographisch plausibel ist.

Da Alterungsende und Fangjahr nicht übereinstimmten (siehe Abbildung 22), erbringt die Zuordnung zu einem Eintragszeitpunkt und einer Alterungsdauer wahrscheinlich keine zusätzliche Information über die Belastungshistorie. Jedoch könnte die fehlende Übereinstimmung als Indiz für die Präferenz leichterer Kongenere gewertet werden und damit ein Hinweis auf lokal variierende Halbwertzeiten sein. Denn auch wenn die angewandten Halbwertzeiten (siehe Tabelle 5) effektive, also im Feld gemessene Angaben darstellen, werden dennoch die jeweiligen konkreten Abbaubedingungen von Standort zu Standort variieren.

### 8.2.2 Meeresfische

Die Meeresfische wurden erwartungsgemäß mehrheitlich (ca. 55,9 %) einem fraktionierten Emissionsprofil zugeordnet. Auch dominierende Zuordnung zu Emissionsprofilen aus Deutschland, Spanien, Großbritannien und Portugal erscheint plausibel mit Blick auf die geographische Nähe zum Untersuchungsgebiet und die historischen Emissionsbeträge. Weitere

Länderzuordnungen mit geringeren Anteilen befinden sich entsprechend den Modellannahmen innerhalb von Europa (u.a. Island, Norwegen), jedoch wurden auch einige Schattenprofile von Ländern außerhalb Europas zugeordnet (u.a. China, Kanada, Vereinigte Staaten). Aus der Zuordnung von Meeresfischen zu leeren, weißen SOM-Knoten können weitere Erkenntnisse abgeleitet werden:

1. Der Bereich der Ostsee erstreckt sich von der Öffnung zur Nordsee (Skagerrak) über den Belt bis in die Ostsee. In Blume et al. (2025) konnte gezeigt werden, dass umso eher beide identifizierten Belastungspfade sowie leere, weiße SOM-Knoten zwischen gealterten Verbrauchsprofilen sowie neben fraktionierten Emissionsprofilen gewählt wurden, je weiter östlich die Proben erfasst wurden. Aufgrund der Lage der Ostsee zwischen einer Vielzahl von Industriestaaten sowie dem nur geringen Wasseraustausch, kommen daher beide Belastungspfade als plausible Kontaminationsursachen in Frage.
2. Meeresfische werden, mit regionalen Differenzen, insbesondere zu leeren, weißen SOM-Knoten zugeordnet, die sich auf dem SOM-Plot insbesondere zwischen gealterten Verbrauchsprofilen oder angrenzend an fraktionierte Emissionsprofile befinden. Diese Knoten zeichnen sich durch einen Wechsel von relativ mittelschweren Kongeneren (CB 101, CB 118) und dem relativ schweren Kongener CB 180 im Vergleich zu ihrer Umgebung aus. Dies kann auf einen bisher im System nicht ausreichend berücksichtigten Fraktionierungsprozess hindeuten, der verstärkt temperaturabhängig ist und gealterte Verbrauchsprofile in Böden als Quelle nutzt, z. B. durch Remobilisierung aus Sekundärquellen. Eine Anpassung oder Erweiterung des Modells könnte die Zuordnung diesbezüglich verbessern, jedoch sind die Mechanismen und die Größenordnung dieser Verschiebungen noch nicht ausreichend verstanden, um sie modellieren zu können.

Die Zuordnungen von Wassertemperaturen wie auch von Emissionsjahren waren bei fraktionierten Emissionsprofilen begrenzt interpretierbar und deuten ebenfalls auf die Präferenz für leichtere Kongenere hin.

## 9 Fazit

Das Projekt *POP-Profilung – Kontaminationen auf der Spur* sollte Ähnlichkeiten von Belastungs- und potenziellen Quellenprofilen in großen Datenbeständen effizient und zielgenau ermitteln (UBA, 2020). Nach Abstimmung mit dem UBA wurde der Fokus für die Bearbeitung auf die Analyse und Auswertung von PCB-Belastungen bei Fischen gelegt.

Fische bieten den Vorteil, dass für diese sowohl die PDB als auch international größere Datenmengen über einen längeren Zeitraum und aus unterschiedlichen Herkunftsgebieten bereitstehen. Zudem liegen zu PCB-Belastungen von Fischen bereits Ergebnisse unterschiedlicher Studien vor, da Fische als Lebensmittel eine potenzielle Belastungsquelle für den Menschen darstellen. Allerdings sind jene größeren Zeiträume und Herkunftsgebiete eine Herausforderung, da die Proben durch multiple Belastungspfade kontaminiert worden sein können. Grundsätzlich widerspiegelt aber das PCB-Profil einer Fischprobe diese Belastungspfade mit den zugrundeliegenden Fraktionierungsprozesse von der Quelle bis zum Fisch. Die Fraktionierung (Veränderung der PCB-Profils) ergibt sich als Folge von Abbau und Phasenübergängen, welche – kongenerensspezifisch – vom Medium (Wasser, Luft, Sediment/Boden, Biota) und von der Temperatur abhängen.

Im Forschungs- und Entwicklungsvorhaben wurde für den Profilvergleich bei PCB-Kongeneren ein geeignetes System entwickelt, welches gemessene Belastungsprofile mit modellierten Belastungsprofilen vergleicht. Ausgehend von den identifizierten dominierenden Belastungspfaden – (a) partikelgebundener Transport von Primärquellen in Gewässer und gealterte PCB-Profile aus dem Sediment als sekundäre Quelle der Fischbelastung sowie (b) Fraktionierung von Emissionsprofilen mit den Übergängen Luft/Wasser/Fisch – wurden Verbrauchs- und Emissionsdaten der Jahre 1930 bzw. 1982 bis 2020 der größten Herkunftsländer gealtert (a) bzw. fraktioniert (b). Diese sogenannten *Schattenprofile* konnten wiederum über die Methode des *Self-Organizing-Maps* zu Prototypen zusammengefasst und für einen Vergleich mit gemessenen Profilen genutzt werden.

Gemessene ICES-7-PCB-Profile (PCB 28, 52, 101, 118, 138, 153, 180) von Fischen wurden gealterten Verbrauchs- und fraktionierten Emissionsprofilen einzelner Nationalstaaten plausibel zugeordnet. Insbesondere Belastungsprofile von Meeresfischen zeigten eine hohe Übereinstimmung mit fraktionierten Emissionsprofilen, unter anderem aus Deutschland, Spanien oder Großbritannien. Auch konnte ein Unterschied zwischen Fischen aus dem offenen Meer (Nordostatlantik) und aus der Ostsee festgestellt werden. Die Ergebnisse legen nahe, dass die Ostsee – im Gegensatz zum offenen Meer – sowohl atmosphärisch als auch partikelgebundenen mit PCB belastet wird.

Die gemessenen Profile von Fischen aus Binnengewässern konnten ebenfalls vorwiegend gealterten Verbrauchsprofilen aus Deutschland zugeordnet werden. Außerdem wurde ein Anteil der Binnenfischprofile Bereichen der *Self-Organizing-Maps* zugeordnet, welche zwischen gealterten Verbrauchs- und fraktionierten Emissionsprofilen liegen. Dies deutet wahrscheinlich auf eine Belastung sowohl durch partikelgebundene als auch atmosphärische PCB-Einträge bei Binnengewässern hin. Letztere könnten beispielsweise über eingetragene Blätter oder auch absinkendes Phytoplankton in die Sedimentkörper von Flüssen und Seen gelangen.

Mit dem entwickelten System sind grundsätzlich Aussagen zu Herkunftsländern der Belastungsquellen sowie zum Zeitpunkt der Emission oder des partikelgebundenen Eintrages möglich, wobei die Ergebnisse teils nur bedingt interpretierbar waren. Entweder waren Eingangsgrößen und Systemannahmen für eine solche räumlich und zeitlich differenzierten Aussagen zu ungenau, oder es macht sich hier das bereits angesprochene Problem multipler

Quellen bemerkbar, welches die Zuordnung erschwerte. Aussagen zu den Wassertemperaturen für den Phasenübergang Luft-Wasser als relevante Faktoren der genannten Transportprozesse waren ebenfalls nur begrenzt interpretierbar.

Insgesamt ermöglichte das entwickelte System einen plausiblen Profilvergleich von PCB-Belastungsprofilen von Fischen mit möglichen Belastungsquellen. Es zeigte jedoch auch, dass es Grenzen in der Interpretierbarkeit der Ergebnisse gibt, und dass sich Belastungspfade teilweise überlagern.

## 10 Ausblick und Handlungsempfehlungen

Das im Rahmen des Forschungsvorhabens entwickelte System zeigt einen Weg auf, um Proben von mit PCB belasteten Fischen, über ihr Kongenerenprofil einer möglichen Quelle zuzuordnen. Aufgrund der vielschichtigen und großräumigen Belastungspfade und -möglichkeiten sowie der Datenverfügbarkeit zum Verbrauch und zu Emissionen von PCB wird die potenzielle Quelle dabei auf der Ebene von Nationalstaaten ausgewiesen.

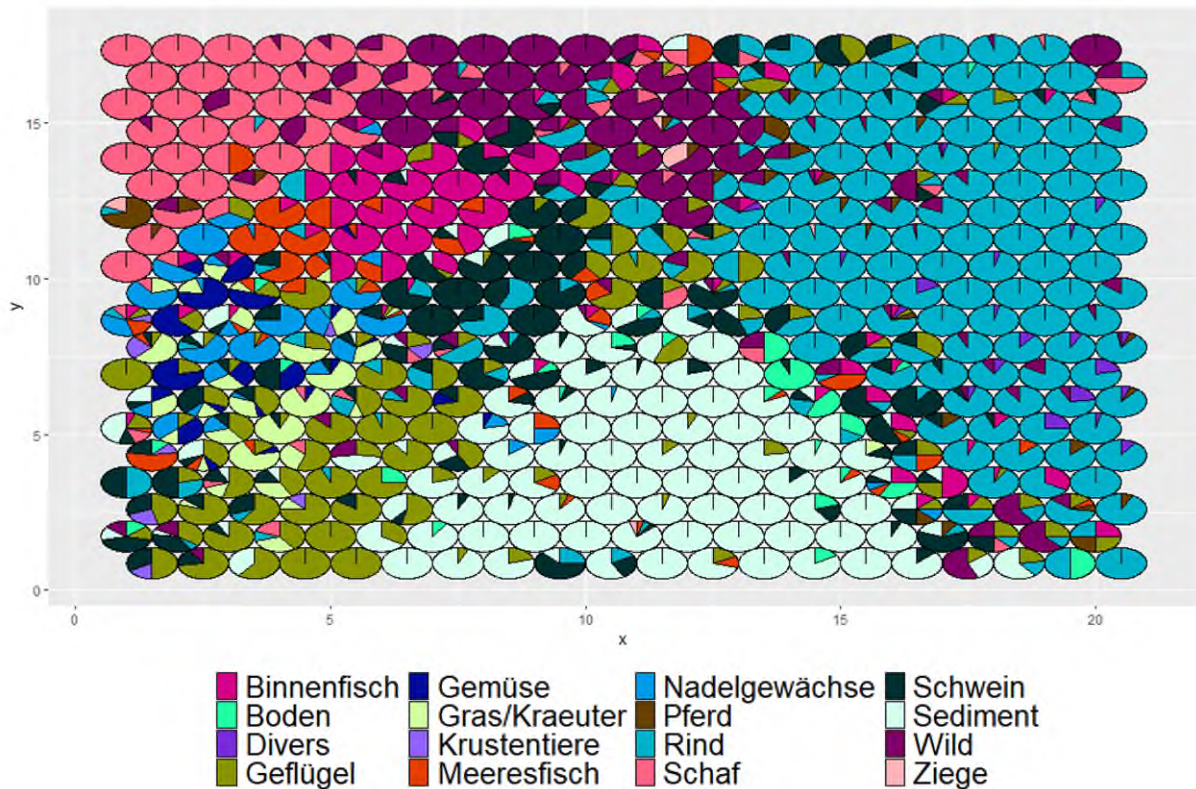
Aufbauend auf den Ergebnissen des Berichts und den Erfahrungen in der Bearbeitung des Datenbestandes haben sich einzelne mögliche Handlungsempfehlungen ergeben, welche nachstehend aufgeführt werden:

- ▶ Das System konnte einen Großteil der im offenen Meer lebende Fische als auch Fische aus Binnengewässern relativ plausibel dem atmosphärischen Belastungspfad zuordnen. Bei Binnenfischen und Fischen aus der Ostsee deuten die Ergebnisse jedoch an, dass Prozesse wahrscheinlich überlagern. Deshalb sollte eine vertiefende Analyse von möglichen Quellen (z. B. Eintrag von belastetem Laub) erfolgen; Schattenprofile sollten ggf. entsprechend erweitert werden.
- ▶ Durch die identifizierten Belastungspfade können zwar bei Meeres- und Binnenfischen die Belastungsmuster relativ gut voneinander unterschieden werden, jedoch könnte hier eine weiterführende Analyse von Sedimentdaten und sedimentnah lebenden Plattfischen dazu beitragen, noch existierende Interpretationslücken zu schließen. Je nach Datenverfügbarkeit sollten dazu Sedimente an unterschiedlichen Stationen entlang eines Flusslaufs analysiert werden. Erwartungsgemäß müssten Plattfische in der Nähe von Flussmündungen vorwiegend ein gealtertes Verbrauchsprofil aufweisen. Küstenfern lebende Plattfische wiederum sollten ein fraktioniertes Profil aufweisen, welches durch absinkendes Plankton in deren Lebensräume eingetragen würde.
- ▶ Der Datenbestand der PDB ist aktuell im sogenannten *long* Format gespeichert, d. h., dass je Zeile in der Datenbank eine Messung gespeichert wird. Über eine zugehörige Probennummer können zusammengehörige Daten identifiziert werden. Die Daten sind jedoch nicht homogen (z. B. unterschiedliche Maßeinheiten), so dass sie für einen Profil-Vergleich separat aufbereitet werden müssten. Eine Speicherung im *wide* Format – alle Messungen einer Probe werden harmonisiert in einer Zeile gespeichert – würde einen Profilvergleich erleichtern.
- ▶ Aufbauend auf den Ergebnissen des Arbeitspakets 1 könnte der Datenbestand der PDB erweitert werden. Wichtig ist dazu einerseits, die Nutzungsbedingungen mit den Urhebern der Daten abzustimmen, und andererseits mögliche Dopplungen mit den Bestandsdaten zu prüfen und zu klären, ob die Datenübernahme sinnvoll ist oder diese bereits in anderen internationalen Datenbanken (ICES) verfügbar sind.
- ▶ Die vorgestellten Arbeiten fokussierten auf PCB, das Forschungs- und Entwicklungsvorhaben zielt jedoch allgemein auf POP ab. Daher sollten Gemeinsamkeiten und Unterschiede in den Eigenschaften zwischen ausgewählten POP und PCB identifiziert werden. So könnten die Ergebnisse ggf. übertragen und das entwickelte System ggf. erweitert werden.
- ▶ PCB-Kongenerenprofile eignen sich grundsätzlich um kompartimentübergreifend Belastungspfade zu identifizieren. In Abbildung 23 wurden exemplarisch gemessene Belastungsprofile unterschiedlicher Kompartimente aus der PDB mittels SOM ausgewertet.



Die Kompartimente wurden zuvor weiter differenziert, wobei sich klare Cluster innerhalb des SOM abgrenzen lassen. Beispielsweise sind Sedimentproben eindeutig von Rinder- oder Schafsproben zu unterscheiden; damit sollten sich die Belastungspfade ebenfalls voneinander unterscheiden lassen. Die Aufbereitung und Analyse weiterer Kompartimente könnte ggf. weitere Erkenntnisse zu bisher nicht betrachteten Belastungspfaden von den Quellen zu den Senken liefern oder auf verschiedene Fraktionierungseffekte entlang ähnlicher Belastungspfade hindeuten.

**Abbildung 23: SOM codes plot (grid size 20 x20, n: 5.569) der ICES-7-PCB Profile ausgewählter Kompartimente der PDB**



Quelle: eigene Darstellung.

## 11 Quellenverzeichnis

Adler, J. (2010). R in a Nutshell (Dt. Ausg.). O'Reilly.

Anderson, P. L., Haglund, P., & Tysklind, M. (1997). The internal barriers of rotation for the 209 polychlorinated biphenyls. *Environmental Science & Pollution Research*, 4(2), 75–81.

Ballschmiter, K., & Zell, M. (1980). Analysis of polychlorinated biphenyls (PCB) by glass capillary gas chromatography. *Fresenius' Zeitschrift für analytische Chemie*, 302(1), 20–31.

<https://doi.org/10.1007/BF00469758>

Beyer, A., & Biziuk, M. (2009). Environmental Fate and Global Distribution of Polychlorinated Biphenyls. In D. M. Whitacre (Hrsg.), *Reviews of Environmental Contamination and Toxicology* (Bd. 201, S. 137–158). Springer US.

BfR. (2018). Non-dioxin-like PCBs are undesirable in food and feed. BfR Communication, 037, 1–7.

Blume, A., Gräff, T., Höllrigl-Rosta, A., & Selle, B. (2025). Tracing PCB contamination in fish using shadow profiles and self-organizing maps. *Marine Pollution Bulletin*, 220, 118343.

<https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2025.118343>

Breivik, K., & Alcock, R. (2002). Emission impossible? The challenge of quantifying sources and releases of POPs into the environment: Arctic pollution issues. *Environment International*, 137–138.

Breivik, K., Armitage, J. M., Wania, F., Sweetman, A. J., & Jones, K. C. (2016). Tracking the Global Distribution of Persistent Organic Pollutants Accounting for E-Waste Exports to Developing Regions. *Environmental science & technology*, 50(2), 798–805. <https://doi.org/10.1021/acs.est.5b04226>

Breivik, K., Sweetman, A., Pacyna, J. M., & Jones, K. C. (2002). Towards a global historical emission inventory for selected PCB congeners—A mass balance approach: 1. Global production and consumption. *The Science of the Total Environment*, 290, 181–198.

Buser, A. M., MacLeod, M., Scheringer, M., Mackay, D., Bonnell, M., Russell, M. H., DePinto, J. V., & Hungerbühler, K. (2012). Good modeling practice guidelines for applying multimedia models in chemical assessments. *Integrated environmental assessment and management*, 8(4), 703–708.

<https://doi.org/10.1002/ieam.1299>

Chollet, F., & Allaire, J. J. (with MITP Verlags-GmbH & Co. KG). (2018). *Deep Learning mit R und Keras: Das Praxis-Handbuch ; von Entwicklern von Keras und RStudio* (1. Auflage). mitp.

Covaci, A., Jake Ryan, J., & Schepens, P. (2002). Patterns of PCBs and PCDD/PCDFs in chicken and pork fat following a Belgian food contamination incident. *Chemosphere*, 47(2), 207–217.

[https://doi.org/10.1016/S0045-6535\(01\)00191-6](https://doi.org/10.1016/S0045-6535(01)00191-6)

Di Guardo, A., Gouin, T., MacLeod, M., & Scheringer, M. (2018). Environmental fate and exposure models: Advances and challenges in 21st century chemical risk assessment. *Environmental science. Processes & impacts*, 20(1), 58–71. <https://doi.org/10.1039/c7em00568g>

Erickson, M. D. (2020). Environmental PCB forensics: Processes and issues. *Environmental science and pollution research international*, 27(9), 8926–8937. <https://doi.org/10.1007/s11356-019-07416-9>

Felipe-Sotelo, M., Tauler, R., Vives, I., & Grimalt, J. O. (2008). Assessment of the environmental and physiological processes determining the accumulation of organochlorine compounds in European mountain lake fish through multivariate analysis (PCA and PLS). *The Science of the Total Environment*, 404(1), 148–161.

<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2008.06.020>

Fiedler, H. (2019). Expert Report on the Usability of Data from the POP Database in the Field of 'Technosphere'. UBA.

- Freels, S., Chary, L. K., Turyk, M., Piorkowski, J., Mallin, K., Dimos, J., Anderson, H., McCann, K., Burse, V., & Persky, V. (2007). Congener profiles of occupational PCB exposure versus PCB exposure from fish consumption. *Chemosphere*, 69(3), 435–443. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2007.04.087>
- Gioia, R., Dachs, J., Nizzetto, L., Lohmann, R., & Jones, K. C. (2013). Atmospheric Transport, Cycling and Dynamics of Polychlorinated Biphenyls (PCBs) from Source Regions to Remote Oceanic Areas. In L. L. McConnell, J. Dachs, & C. J. Hapeman (Hrsg.), *Occurrence, Fate and Impact of Atmospheric Pollutants on Environmental and Human Health* (S. 3–18). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/bk-2013-1149.ch001>
- Gioia, R., Li, J., Schuster, J., Zhang, Y., Zhang, G., Li, X., Spiro, B., Bhatia, R. S., Dachs, J., & Jones, K. C. (2012). Factors affecting the occurrence and transport of atmospheric organochlorines in the China Sea and the northern Indian and South East Atlantic Oceans. *Environmental science & technology*, 46(18), 10012–10021. <https://doi.org/10.1021/es302037t>
- Gioia, R., Nizzetto, L., Lohmann, R., Dachs, J., Temme, C., & Jones, K. C. (2008). Polychlorinated biphenyls (PCBs) in air and seawater of the Atlantic Ocean: Sources, trends and processes. *Environmental science & technology*, 42(5), 1416–1422. <https://doi.org/10.1021/es071432d>
- Hoogenboom, R. L. A. P., Malisch, R., van Leeuwen, S. P. J., Vanderperren, H., Hove, H., Fernandes, A., Schächtele, A., & Rose, M. (2020). Congener patterns of polychlorinated dibenzo-p-dioxins, dibenzofurans and biphenyls as a useful aid to source identification during a contamination incident in the food chain. *The Science of the Total Environment*, 746, 141098. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.141098>
- Howell, N. L., Lakshmanan, D., Rifai, H. S., & Koenig, L. (2011). PCB dry and wet weather concentration and load comparisons in Houston-area urban channels. *The Science of the Total Environment*, 409(10), 1867–1888.
- Hude, M. (2020). *Predictive Analytics und Data Mining*. Springer Fachmedien Wiesbaden. <https://doi.org/10.1007/978-3-658-30153-8>
- Jeremiason, J. D., Eisenreich, S. J., Paterson, M. J., Beaty, K. G., Hecky, R., & Elser, J. J. (1999). Biogeochemical cycling of PCBs in lakes of variable trophic status: A paired-lake experiment. *Limnology and Oceanography*, 44(3part2), 889–902. [https://doi.org/10.4319/lo.1999.44.3\\_part\\_2.0889](https://doi.org/10.4319/lo.1999.44.3_part_2.0889)
- Joerss, H., Schramm, T.-R., Sun, L., Guo, C., Tang, J., & Ebinghaus, R. (2020). Per- and polyfluoroalkyl substances in Chinese and German river water—Point source- and country-specific fingerprints including unknown precursors. *Environmental pollution (Barking, Essex : 1987)*, 267, 115567. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.115567>
- Jönsson, A., Gustafsson, O., Axelman, J., & Sundberg, H. (2003). Global accounting of PCBs in the continental shelf sediments. *Environmental science & technology*, 37(2), 245–255. <https://doi.org/10.1021/es0201404>
- Kiss, E. M., & Welz, A. (o.J.). *Maschinelles Lernen: Konzepte, Methoden, Tools*. <https://www.elab2go.de/ml/>
- Lammel, G., & Zetsch, C. (2007). POPs – schwer abbaubare Chemikalien. *Chemie in unserer Zeit*, 41(3), 276–284. <https://doi.org/10.1002/ciuz.200700421>
- Latscha, H. P., Kazmaier, U., & Klein, H. (2016). *Organische Chemie*. Springer Berlin Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-46180-8>
- LfU BW (Hrsg.) (with Fiedler, H., Lau, C., Schulz, S., Wagner, C., Hutzinger, O., & Trenck, K. T.). (1995). *Stoffbericht Polychlorierte Biphenyle (PCB) (1. Auflage)*.
- LfU BY. (2021, Januar 1). *Persistente organische Schadstoffe (POP)*. [https://www.lfu.bayern.de/analytik\\_stoffe/pop/index.htm](https://www.lfu.bayern.de/analytik_stoffe/pop/index.htm)
- Lohmann, R., & Dachs, J. (2019). Polychlorinated Biphenyls in the Global Ocean. In *World Seas: An Environmental Evaluation* (S. 269–282). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-805052-1.00017-6>

- Mackay, D., & Wania, F. (1995). Transport of contaminants to the Arctic: Partitioning, processes and models. *Science of The Total Environment*, 160–161, 25–38. [https://doi.org/10.1016/0048-9697\(95\)04342-X](https://doi.org/10.1016/0048-9697(95)04342-X)
- Martinez Formoso, D., & Amaro, R. (2017, Januar 1). Machine Learning Mindmap / Cheatsheet. <https://github.com/neuyhq/https-github.com-dformoso-machine-learning-mindmap>
- Mehmetli, E., & Koumanova, B. (Hrsg.). (2008). The fate of persistent organic pollutants in the environment: Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop on the Fate of Persistent Organic Pollutants in the Environment, Istanbul, Turkey, 25–27 April 2007. Springer.
- Moermond, C. T. A., Janssen, M. P. M., Knecht, J. A., Montforts, M. H. M. M., Peijnenburg, W. J. G. M., Zweers, P. G. P. C., & Sijm, D. T. H. M. (2012). PBT assessment using the revised annex XIII of REACH: a comparison with other regulatory frameworks. *Integrated environmental assessment and management*, 8(2), 359–371. <https://doi.org/10.1002/ieam.1248>
- Moreira, L. J., & Silva, L. A. (2017). Prototype Generation Using Self-Organizing Maps for Informativeness-Based Classifier. *Computational intelligence and neuroscience*, 2017, 4263064. <https://doi.org/10.1155/2017/4263064>
- Morgan, E. J., & Lohmann, R. (2010). Dietary uptake from historically contaminated sediments as a source of PCBs to migratory fish and invertebrates in an urban estuary. *Environmental science & technology*, 44(14), 5444–5449. <https://doi.org/10.1021/es100450f>
- NBCI. (2021a, Januar 1). 2,2',3,4,4',5,5'-Heptachlorobiphenyl. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/37036>
- NBCI. (2021b, Januar 1). 2,2',3,4,4',5'-Hexachlorobiphenyl. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/37035>
- NBCI. (2021c, Januar 1). 2,2',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/pcb-153>
- NBCI. (2021d, Januar 1). 2,2',5,5'-Tetrachlorobiphenyl. [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2\\_2\\_5\\_5\\_-Tetrachlorobiphenyl](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2_2_5_5_-Tetrachlorobiphenyl)
- NBCI. (2021e, Januar 1). 2,3',4,4',5-Pentachlorobiphenyl. [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1\\_2\\_4-trichloro-5-3\\_4-dichlorophenyl\\_benzene](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1_2_4-trichloro-5-3_4-dichlorophenyl_benzene)
- NBCI. (2021f, Januar 1). [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1\\_2\\_4-trichloro-5-2\\_5-dichlorophenyl\\_benzene](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1_2_4-trichloro-5-2_5-dichlorophenyl_benzene). [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1\\_2\\_4-trichloro-5-2\\_5-dichlorophenyl\\_benzene](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1_2_4-trichloro-5-2_5-dichlorophenyl_benzene)
- NBCI. (2021g, Januar 1). PubChem Compound Summary for CID 23448, 2,4,4'-Trichlorobiphenyl. [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2\\_4\\_4\\_-Trichlorobiphenyl](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2_4_4_-Trichlorobiphenyl)
- Paasivirta, J., & Sinkkonen, S. I. (2009). Environmentally Relevant Properties of All 209 Polychlorinated Biphenyl Congeners for Modeling Their Fate in Different Natural and Climatic Conditions. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 54(4), 1189–1213. <https://doi.org/10.1021/jc800501h>
- Parnis, J. M., & Mackay, D. (2020). Multimedia environmental models: The fugacity approach (Third edition). CRC Press.
- Potrykus, A., Zettl, E., Milunov, M., Quass, U., & Filzmoser, P. (2017). Evaluierung von Monitoringdaten zu POPs, POP-Kandidaten und Ersatzstoffen zur Aufklärung von Ursachen, Pfaden und Trends der Umweltbelastung.
- Prince, K. D., Taylor, S. D., & Angelini, C. (2020). A Global, Cross-System Meta-Analysis of Polychlorinated Biphenyl Biomagnification. *Environmental science & technology*, 54(18), 10989–11001. <https://doi.org/10.1021/acs.est.9b07693>

- Rebala, G., Ravi, A., & Churiwala, S. (2019). An Introduction to Machine Learning. Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-15729-6>
- Richter, S. (2019). Statistisches und maschinelles Lernen. Springer Berlin Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-59354-7>
- Romanić, S. H., Vuković, G., Klinčić, D., & Antanasijević, D. (2018). Self-organizing maps for indications of airborne polychlorinated biphenyl (PCBs) and organochlorine pesticide (OCPs) dependence on spatial and meteorological parameters. *The Science of the Total Environment*, 628–629, 198–205. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.02.012>
- Saba, T., & Boehm, P. D. (2011). Quantitative Polychlorinated Biphenyl (PCB) Congener and Homologue Profile Comparisons. *Environmental Forensics*, 12(2), 134–142. <https://doi.org/10.1080/15275922.2011.572950>
- Sauer, S. (2019). Moderne Datenanalyse mit R: Daten einlesen, aufbereiten, visualisieren, modellieren und kommunizieren. Springer Gabler. <https://doi.org/10.1007/978-3-658-21587-3>
- Schmidt, M. (2020, Januar 1). CPSC 540: Machine Learning. Density Estimation: Vorlesung. <https://www.cs.ubc.ca/~schmidtm/Courses/540-W20/L5.pdf>
- Schmitt, M. (o.J.). Was ist Machine Learning? - Eine visuelle Erklärung. <https://www.datarevenue.com/de-blog/was-ist-machine-learning>
- Selle, B., Blume, A., Höllrigl-Rosta, A., & Gräff, T. (2024). Analysis and modelling of profiles to understand fractionation processes for contaminations with polychlorinated biphenyls observed in fish. *Science of The Total Environment*, 920, 170925. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.170925>
- Shields, W. J., Saba, T., Boehm, P. D., & Pietari, J. (2015). Congeners. In B. L. Murphy & R. D. Morrison (Hrsg.), *Introduction to environmental forensics* (Third edition, S. 348–393). Elsevier.
- Simonnet-Laprade, C., Bayen, S., Le Bizec, B., & Dervilly, G. (2021). Data analysis strategies for the characterization of chemical contaminant mixtures. Fish as a case study. *Environment International*, 155, 106610. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2021.106610>
- Sinkkonen, & Paasivirta, J. (2000). Degradation half-life times of PCDDs, PCDFs and PCBs for environmental fate modeling. *Chemosphere*, 40(9–11), 943–949. [https://doi.org/10.1016/S0045-6535\(99\)00337-9](https://doi.org/10.1016/S0045-6535(99)00337-9)
- Sobotka, J., Lammel, G., Slobodník, J., Schink, A., Prokeš, R., & Vrana, B. (2021). Dynamic passive sampling of hydrophobic organic compounds in surface seawater along the South Atlantic Ocean east-to-west transect and across the Black Sea. *Marine pollution bulletin*, 168, 112375. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2021.112375>
- Szinder-Richert, J., Barska, I., Mazerski, J., & Usydus, Z. (2009). PCBs in fish from the southern Baltic Sea: Levels, bioaccumulation features, and temporal trends during the period from 1997 to 2006. *Marine pollution bulletin*, 58(1), 85–92. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2008.08.021>
- Trapp, S., & Matthies, M. (1998). *Chemodynamics and Environmental Modeling: An Introduction*. Springer Berlin Heidelberg.
- Trekhele, O. (2022, Januar 1). README.md. Homemade Machine Learning. Machine Learning Map. <https://github.com/trekhele/homemade-machine-learning>
- UBA. (2018). Dioxine und dioxinähnliche PCB in Umwelt und Nahrungsketten. Hintergrund.
- UBA. (2020). Leistungsbeschreibung. POP-Profilung—Kontaminationen auf der Spur. Nutzung von Methoden der künstlichen Intelligenz zur Profilanalyse von PCB-Belastungen mit Erarbeitung von Auswerteverfahren und Erstellung von IT-Werkzeugen. 11.12.2020. (nicht öffentlich).
- UBA. (2021a, Januar 1). POP-Dioxin-Datenbank des Bundes und der Länder. <https://www.umweltbundesamt.de/themen/chemikalien/dioxine/pdb-portal-start>



UBA. (2021b, Januar 1). POP-Dioxin-Datenbank. Forschung, Entwicklung und Datengewinnung.  
<https://www.umweltbundesamt.de/pdb-portal-forschung-entwicklung>

UBA. (2021c, Januar 1). Rolle des UBA im Kontext POP.  
<https://www.umweltbundesamt.de/themen/chemikalien/persistente-organische-schadstoffe-pop/rolle-des-uba-im-kontext-pop>

UBA. (2021d, Januar 1). Was sind persistente organische Schadstoffe?  
<https://www.umweltbundesamt.de/themen/chemikalien/persistente-organische-schadstoffe-pop>

UNEP / SCC. (2017). The 16 New POPs: An introduction to the chemicals added to the Stockholm Convention as Persistent Organic Pollutants by the Conference of the Parties.  
<http://www.pops.int/Portals/0/download.aspx?d=UNEP-POPS-PUB-Brochure-16NewPOPs-201706.English.pdf>

UNEP / SCC. (2019a). Stockholm Convention on Persistent Organic Pollutants (POPs).  
<http://chm.pops.int/Portals/0/download.aspx?d=UNEP-POPS-COP-CONVTEXT-2021.English.pdf>

UNEP / SCC. (2019b). Stockholm Convention. Status of ratification.  
<http://www.pops.int/Portals/0/download.aspx?d=UNEP-POPS-COP-CONVTEXT-2021.English.pdf>

UNEP / SCC. (2019c, Januar 1). Stockholm Convention. The new POPs under the Stockholm Convention.  
<http://www.pops.int/TheConvention/ThePOPs/TheNewPOPs/tabid/2511/Default.aspx>

van den Berg, M., Birnbaum, L. S., Denison, M., De Vito, M., Farland, W., Feeley, M., Fiedler, H., Hakansson, H., Hanberg, A., Haws, L., Rose, M., Safe, S., Schrenk, D., Tohyama, C., Tritscher, A., Tuomisto, J., Tysklind, M., Walker, N., & Peterson, R. E. (2006). The 2005 World Health Organization Re-evaluation of Human and Mammalian Toxic Equivalency Factors for Dioxins and Dioxin-like Compounds. *Toxicological Science*, 93(2), 223–241.

van Leeuwen, Leonards, P. E. G., Traag, W. A., Hoogenboom, L. A. P., & Boer, J. (2007). Polychlorinated dibenzo-p-dioxins, dibenzofurans and biphenyls in fish from the Netherlands: Concentrations, profiles and comparison with DR CALUX bioassay results. *Analytical and bioanalytical chemistry*, 389(1), 321–333.  
<https://doi.org/10.1007/s00216-007-1352-6>

von Waldow, H., MacLeod, M., Jones, K., Scheringer, M., & Hungerbühler, K. (2010). Remoteness from emission sources explains the fractionation pattern of polychlorinated biphenyls in the northern hemisphere. *Environmental science & technology*, 44(16), 6183–6188.

Wania, F., & Mackay, D. (1993). Global Fractionation and Cold Condensation of Low Volatility Organochlorine Compounds in Polar Regions. *Ambio*, 22(1), 10–18.

Wania, F., & Mackay, D. (1996). Peer reviewed: Tracking the distribution of persistent organic pollutants. *Environmental science & technology*, 30(9), 390–396. <https://doi.org/10.1021/es962399q>

Weber, R., Hollert, H., Kamphues, J., Ballschmiter, K., Blepp, M., & Herold, C. (2015). Analyse und Trendabschätzung der Belastung der Umwelt und von Lebensmitteln mit ausgewählten POPs und Erweiterung des Datenbestandes der POP-Dioxin-Datenbank des Bundes und der Länder mit dem Ziel pfadbezogener Ursachenaufklärung (Bd. 114/2005).

Webster, L., Roose, L., Bersuder, P., Kotterman, M., Haarich, M., & Vorkamp, K. (2013). Determination of polychlorinated biphenyls (PCBs) in sediment and biota. *ICES*. <https://doi.org/10.17895/ICES.PUB.5078>

Wehrens, R., & Kruisselbrink, J. (2018). Flexible Self-Organizing Maps in kohonen 3.0. *Journal of Statistical Software*, 87(7). <https://doi.org/10.18637/jss.v087.i07>

WHO. (2001). Evaluation of certain food additives and contaminants.: Fifty-seventh report of the Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additives (Bd. 909).



WHO. (2015). Evaluation of certain food additives and contaminants: Eightieth report of the Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additives (Bd. 995).

WHO. (2016). Safety evaluation of certain food additives and contaminants, supplement 1: Non-dioxin-like polychlorinated biphenyls (Nummer 1, S. 115–116). [https://doi.org/10.1016/S0168-1605\(03\)00167-3](https://doi.org/10.1016/S0168-1605(03)00167-3)

Wirth, O., Reihlen, A., Bunke, D., & Jepsen, D. (2015). REACH in der Praxis IV- Zukunft der Per- und polyfluorierten Chemikalien (PFC). UBA.

Wodarg, D., Kömp, P., & McLachlan, M. S. (2004). A baseline study of polychlorinated biphenyl and hexachlorobenzene concentrations in the western Baltic Sea and Baltic Proper. *Marine Chemistry*, 87(1–2), 23–36. <https://doi.org/10.1016/j.marchem.2003.12.002>

Worch, E. (1997). *Wasser und Wasserinhaltsstoffe: Eine Einführung in die Hydrochemie*. Springer.

Wuttke, L. (o.J.). *Machine Learning: Definition, Algorithmen, Methoden und Beispiele*. <https://datasolut.com/was-ist-machine-learning/>

Zhang, L., Li, J., Zhao, Y., Li, X., Wen, S., Shen, H., & Wu, Y. (2013). Polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) and indicator polychlorinated biphenyls (PCBs) in foods from China: Levels, dietary intake, and risk assessment. *Journal of agricultural and food chemistry*, 61(26), 6544–6551. <https://doi.org/10.1021/jf4006565>

## A Anhang

### A.1 Quellenübersicht für recherchierte PCB-Datensätze

**Tabelle 9: Ergebnisse der Literaturrecherche mit festgesetzten Suchparametern**

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
1	Adebusoye et al. (2008)	Evidence of aerobic utilization of di-ortho-substituted trichlorobiphenyls as growth substrates by <i>Pseudomonas</i> sp. SA-6 and <i>Ralstonia</i> sp. SA-4	10.1111/j.1462-2920.2007.01533.x	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
2	Adeogun et al. (2016)	Intersex and alterations in reproductive development of a cichlid, <i>Tilapia guineensis</i> , from a municipal domestic water supply lake (Eleyele) in Southwestern Nigeria	10.1016/j.scitotenv.2015.09.061	x	/	/	Biota	83	Afrika	#
3	Agudo et al. (2009)	Polychlorinated biphenyls in Spanish adults: determinants of serum concentrations	10.1016/j.envres.2009.03.009	x	/	/	Humanprobe	953	Europa	#
4	Akai et al. (2001)	Dioxin-like PCBs released from waste incineration and their deposition flux	10.1021/es001945j	x	/	/	Immission	9	Asien	#
5	Allan & Rannekleiv (2011)	Occurrence of PAHs and PCBs in the Alna River, Oslo (Norway)	10.1039/c1em10314h	x	x	x	Sediment	3	Europa	#
6	Allan & Rannekleiv (2011)	Occurrence of PAHs and PCBs in the Alna River, Oslo (Norway)	10.1039/c1em10314h	x	x	x	Wasser	3	Europa	#
7	André, Gharbi & Guillaume (2009)	A novel stationary phase based on amino derivatized nanotubes for HPLC separations: theoretical and practical aspects	10.1002/jssc.200800683	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
8	Anezaki & Nakano (2015)	Unintentional PCB in chlorophenylsilanes as a source of contamination in environmental samples	10.1016/j.jhazmat.2015.01.026	x	/	/	Produkte	5	Global	#
9	Anezaki, Nakano & Kashiwagi (2016)	Estimation of Polychlorinated Biphenyl Sources in Industrial Port Sediments Using a Bayesian Semifactor Model Considering Unidentified Sources	10.1021/acs.est.5b03501	x	x	x	Sediment	21	Asien	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
10	Angulo, Martínez & Jodral (1999)	PCB congeners transferred by human milk, with an estimate of their daily intake	10.1016/s0278-6915(99)00101-5	x	x	x	Humanprobe	100	Europa	#
11	Anh et al. (2019)	Characterization of 209 polychlorinated biphenyls in street dust from northern Vietnam: Contamination status, potential sources, and risk assessment	10.1016/j.scitotenv.2018.10.240	x	x	x	Deposition	32	Asien	#
12	Anh et al. (2020)	Polychlorinated biphenyls in settled dusts from an end-of-life vehicle processing area and normal house dusts in northern Vietnam: Occurrence, potential sources, and risk assessment	10.1016/j.scitotenv.2020.138823	x	x	x	Deposition	27	Asien	#
13	Antignac et al. (2016)	Country-specific chemical signatures of persistent organic pollutants (POPs) in breast milk of French, Danish and Finnish women	10.1016/j.envpol.2016.07.069	x	/	/	Humanprobe	554	Europa	#
14	Arrebola et al. (2018)	Differential contribution of animal and vegetable food items on persistent organic pollutant serum concentrations in Spanish adults. Data from BIOAMBIENT.ES project	10.1016/j.scitotenv.2018.03.283	x	x	/	Humanprobe	1880	Europa	#
15	Ashley et al. (2003)	A comparison of congeneric PCB patterns in American eels and striped bass from the Hudson and Delaware River estuaries	10.1016/S0025-326X(03)00235-2	x	x	x	Biota	224	Nordamerika	#
16	Astoviza et al. (2016)	Airborne PCB patterns and urban scale in the Southern Río de la Plata Basin, Argentina	10.1016/j.scitotenv.2016.07.101	x	x	x	Immission	141	Südamerika	#
17	Ba et al. (2009)	Estimation and characterization of PCDD/Fs and dioxin-like PCBs from secondary copper and aluminum metallurgies in China	10.1016/j.chemosphere.2009.02.052	x	/	/	Produkte	50	Asien	#
18	Backe, Cousins & Larsson (2004)	PCB in soils and estimated soil-air exchange fluxes of selected PCB congeners in the south of Sweden	10.1016/j.envpol.2003.08.038	x	x	x	Boden	11	Europa	#
							Immission	260		
							Wasser	206		
19	Baek et al. (2010)	Spatial and seasonal distribution of polychlorinated biphenyls (PCBs) in the vicinity of an iron and steel making plant	10.1021/es903251h	x	x	x	Immission	60	Asien	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
20	Baek, Choi & Chang (2011)	Three-year atmospheric monitoring of organochlorine pesticides and polychlorinated biphenyls in polar regions and the South Pacific	10.1021/es1042996	x	x	x	Immission	9	Global	#
21	Balmer et al. (2011)	Relationship between persistent organic pollutants (POPs) and ranging patterns in common bottlenose dolphins (Tursiops truncatus) from coastal Georgia, USA	10.1016/j.scitotenv.2011.01.052	x	x	x	Biota	102	Ozean	#
22	Bannavti et al. (2021)	Room-to-Room Variability of Airborne Polychlorinated Biphenyls in Schools and the Application of Air Sampling for Targeted Source Evaluation	10.1021/acs.est.0c08149	x	x	x	Immission	27	Nordamerika	#
23	Basu et al. (2009)	Partial pressures of PCB-11 in air from several Great Lakes sites	10.1021/es900919d	x	/	/	Immission	554	Nordamerika	#
24	Batterman et al. (2009)	PCBs in air, soil and milk in industrialized and urban areas of KwaZulu-Natal, South Africa	10.1016/j.envpol.2008.08.015	x	x	x	Boden	6	Afrika	#
							Immission	58		
							Lebensmittel	2		
25	Belpaire et al. (2011)	What can we learn from monitoring PCBs in the European eel? A Belgian experience	10.1016/j.envint.2010.10.006	x	x	x	Biota	48	Europa	#
26	Bernard et al. (2002)	The Belgian PCB/dioxin incident: analysis of the food chain contamination and health risk evaluation	10.1006/enrs.2001.4274	x	x	x	Lebensmittel	355	Europa	#
27	Bernhoff et al. (1997)	Organochlorines in polar bears (Ursus maritimus) at Svalbard	10.1016/s0269-7491(96)00122-4	x	/	/	Biota	126	Europa	#
28	Besseling et al. (2013)	Effects of microplastic on fitness and PCB bioaccumulation by the lugworm Arenicola marina (L.)	10.1021/es302763x	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
29	Billingsley et al. (1997)	Comparison of the degradation patterns of polychlorinated biphenyl congeners in Aroclors by Pseudomonas strain LB400 after growth on various carbon sources	10.1139/m97-166	x	x	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
30	Binelli et al. (2009)	Congener profiles of polychlorinated biphenyls in core sediments of Sunderban mangrove wetland (N.E. India) and their ecotoxicological significance	10.1007/s10661-008-0351-1	x	x	x	Sediment	42	Asien	O

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
31	Bizzotto et al. (2009)	Comparison of glacial and non-glacial-fed streams to evaluate the loading of persistent organic pollutants through seasonal snow/ice melt	10.1016/j.chemosphere.2008.10.013	x	/	/	Wasser	23	Europa	#
32	Bodin et al. (2008)	Congener-specific accumulation and trophic transfer of polychlorinated biphenyls in spider crab food webs revealed by stable isotope analysis	10.1016/j.envpol.2007.01.051	x	x	x	Biota	194	Europa	#
33	Bonfanti et al. (2009)	The effects of accumulation of an environmentally relevant polychlorinated biphenyl mixture on cytochrome P450 and P-glycoprotein expressions in fetuses and pregnant rats	10.1016/j.chemosphere.2009.01.063	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
34	Borgå et al. (2005)	Bioaccumulation of PCBs in Arctic seabirds: influence of dietary exposure and congener biotransformation	10.1016/j.envpol.2004.09.016	x	x	x	Biota	40	Europa	#
35	Borrell et al. (2007)	Concentrations and patterns of organochlorine pesticides and PCBs in Mediterranean monk seals ( <i>Monachus monachus</i> ) from Western Sahara and Greece	10.1016/j.scitotenv.2007.03.013	x	/	/	Biota	37	Ozean	#
36	Boucher et al. (2016)	Altered fine motor function at school age in Inuit children exposed to PCBs, methylmercury, and lead	10.1016/j.envint.2016.08.010	x	x	x	Humanprobe	265	Nordamerika	#
37	Brambilla et al. (2011)	Polychlorodibenzodioxin and -furan (PCDD and PCDF) and dioxin-like polychlorobiphenyl (DL-PCB) congener levels in milk of grazing sheep as indicators of the environmental quality of rural areas	10.1021/jf2010673	x	/	/	Biota	7	Europa	#
38	Breivik et al. (2002)	Towards a global historical emission inventory for selected PCB congeners--a mass balance approach. 2. Emissions	10.1016/s0048-9697(01)01076-2	x	x	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	O
39	Bright et al. (1995)	Effects of local and distant contaminant sources: polychlorinated biphenyls and other organochlorines in bottom-dwelling animals from an Arctic estuary	10.1016/0048-9697(95)04362-5	x	x	x	Biota	/	Nordamerika	#
40	Brown et al. (2015)	Local contamination, and not feeding preferences, explains elevated PCB concentrations in Labrador ringed seals ( <i>Pusa hispida</i> )	10.1016/j.scitotenv.2015.02.019	x	x	x	Biota	236	Nordamerika	#
41	Bruckmeier et al. (1997)	PCBs and PCDD/Fs in lake sediments of Grosser Arbersee, Bavarian Forest, South Germany	10.1016/s0269-7491(96)00118-2	x	x	x	Sediment	12	Europa	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
42	Buckman et al. (2006)	Biotransformation of polychlorinated biphenyls (PCBs) and bioformation of hydroxylated PCBs in fish	10.1016/j.aquatox.2006.02.033	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
43	Burd et al. (2014)	Distribution and uptake of key polychlorinated biphenyl and polybrominated diphenyl ether congeners in benthic infauna relative to sediment organic enrichment	10.1007/s00244-014-0017-7	x	/	/	Biota	19	Nordamerika	#
44	Burd et al. (2014)	Distribution and uptake of key polychlorinated biphenyl and polybrominated diphenyl ether congeners in benthic infauna relative to sediment organic enrichment	10.1007/s00244-014-0017-7	x	/	/	Sediment	200	Nordamerika	#
45	Burse et al. (1994)	Determination of polychlorinated biphenyl levels in the serum of residents and in the homogenates of seafood from the New Bedford, Massachusetts, area: a comparison of exposure sources through pattern recognition techniques	10.1016/0048-9697(94)90436-7	x	x	x	Humanprobe	23	Nordamerika	O
46	Cabrerizo et al. (2012)	Influence of organic matter content and human activities on the occurrence of organic pollutants in antarctic soils, lichens, grass, and mosses	10.1021/es203425b	x	/	/	Biota	18	Antarktis	#
							Boden	26		
47	Cabrerizo et al. (2018)	Legacy and Emerging Persistent Organic Pollutants (POPs) in Terrestrial Compartments in the High Arctic: Sorption and Secondary Sources	10.1021/acs.est.8b05011	x	x	x	Biota	18	Nordamerika	O
							Boden	36		
48	Cai et al. (2008)	The status of soil contamination by semivolatile organic chemicals (SVOCs) in China: a review	10.1016/j.scitotenv.2007.08.026	x	x	x	Boden	466	Global	#
49	Carlson & Hites (2005)	Polychlorinated biphenyls in salmon and salmon feed: global differences and bioaccumulation	10.1021/es048023r	x	x	x	Biota	45	Global	#
							Lebensmittel	10		
							Produkte	13		



Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
50	Castro-Jiménez et al. (2009)	Polychlorinated biphenyls (PCBs) in the atmosphere of sub-alpine northern Italy	10.1016/j.envpol.2008.10.007	x	x	x	Immission	60	Europa	O
51	Chandra Yadav et al. (2019)	Examining the role of total organic carbon and black carbon in the fate of legacy persistent organic pollutants (POPs) in indoor dust from Nepal: Implication on human health	10.1016/j.ecoenv.2019.03.048	x	x	x	Deposition	24	Asien	#
52	Chen et al. (2001)	Disposition of polychlorinated dibenzo-p-dioxins, dibenzofurans, and non-ortho polychlorinated biphenyls in pregnant long evans rats and the transfer to offspring	10.1006/taap.2001.9143	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
53	Chitsaz, Fennell & Rodenburg (2020)	Sources of polychlorinated biphenyls to Upper Hudson River sediment post-dredging	10.1016/j.j.chemosphere.2020.127438	x	/	/	Sediment	130	Nordamerika	#
54	Chuiko et al. (2007)	Chemical contamination of the Rybinsk Reservoir, northwest Russia: relationship between liver polychlorinated biphenyls (PCB) content and health indicators in bream (Abramis brama)	10.1016/j.j.chemosphere.2006.09.046	x	/	/	Biota	28	Europa	#
55	Colciago et al. (2009)	Chronic treatment with polychlorinated biphenyls (PCB) during pregnancy and lactation in the rat Part 2: Effects on reproductive parameters, on sex behavior, on memory retention and on hypothalamic expression of aromatase and 5alpha-reductases in the offspring	10.1016/j.taap.2009.04.023	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
56	Colombo et al. (2005)	Vertical fluxes and accumulation of PCBs in coastal sediments of the Río de la Plata estuary, Argentina	10.1016/j.j.chemosphere.2005.03.090	x	x	x	Sediment	39	Südamerika	#
57	Combi et al. (2013)	Sources and temporal patterns of polychlorinated biphenyls around a large South American grain-shipping port (Paranaguá Estuarine System, Brazil)	10.1007/s00244-012-9872-2	x	x	x	Sediment	3	Südamerika	#
58	Combi et al. (2016)	Polychlorinated biphenyls (PCBs) in sediments from the western Adriatic Sea: Sources, historical trends and inventories	10.1016/j.scitotenv.2016.04.086	x	x	x	Sediment	/	Europa	#
59	Correia et al. (2011)	Studying placental transfer of highly purified non-dioxin-like PCBs in two models of the placental barrier	10.1016/j.j.placenta.2010.12.024	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
60	Corsolini et al. (2002)	Polychloronaphthalenes and other dioxin-like compounds in Arctic and Antarctic marine food webs	10.1021/es025511v	x	/	/	Biota	27	Global	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
61	Corsolini et al. (2007)	Polybrominated diphenyl ethers, polychlorinated dibenzo-dioxins, -furans, and -biphenyls in three species of Antarctic penguins	10.1065/espr2006.01.017	x	/	/	Biota	34	Antarktis	#
62	Corsolini et al. (2011)	Chlorinated biphenyls and pesticides in migrating and resident seabirds from East and West Antarctica	10.1016/j.envint.2011.05.017	x	x	x	Biota	77	Antarktis	#
63	Couderc et al. (2015)	Occurrence of POPs and other persistent organic contaminants in the European eel ( <i>Anguilla anguilla</i> ) from the Loire estuary, France	10.1016/j.scitotenv.2014.09.053	x	x	x	Biota	45	Europa	#
64	Covaci et al. (2002)	Distribution of PCBs and organochlorine pesticides in umbilical cord and maternal serum	10.1016/s0048-9697(02)00167-5	x	x	x	Humanprobe	88	Europa	#
65	Covaci, Ryan & Schepens (2002)	Patterns of PCBs and PCDD/PCDFs in chicken and pork fat following a Belgian food contamination incident	10.1016/s0045-6535(01)00191-6	x	x	x	Lebensmittel	6	Europa	#
66	Csiszar, Diamond & Thibodeaux (2012)	Modeling urban films using a dynamic multimedia fugacity model	10.1016/j.chemosphere.2011.12.044	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
67	Cui et al. (2015)	A preliminary compilation and evaluation of a comprehensive emission inventory for polychlorinated biphenyls in China	10.1016/j.scitotenv.2015.06.144	x	x	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	O
68	Cui et al. (2019)	Modeling primary and secondary fractionation effects and atmospheric transport of polychlorinated biphenyls through single-source emissions	10.1007/s10653-019-00252-3	x	x	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
69	Cumbee et al. (2008)	Clapper rails as indicators of mercury and PCB bioavailability in a Georgia saltmarsh system	10.1007/s10646-008-0202-4	x	/	/	Biota	52	Nordamerika	#
70	Custer & Read (2006)	Polychlorinated biphenyl congener patterns in tree swallows ( <i>Tachycineta bicolor</i> ) nesting in the Housatonic River watershed, western Massachusetts, USA, using a novel statistical approach	10.1016/j.envpol.2005.10.011	x	x	x	Biota	211	Nordamerika	#
71	Custer, Custer & Gray (2010)	Polychlorinated biphenyls, dioxins, furans, and organochlorine pesticides in belted kingfisher eggs from the upper Hudson River basin, New York, USA	10.1002/etc.26	x	x	x	Biota	19	Nordamerika	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
72	Dang, Walters & Lee (2016)	Assessing atmospheric concentration of polychlorinated biphenyls by evergreen Rhododendron maximum next to a contaminated stream	10.1002/etc.3404	x	x	x	Biota	3	Nordamerika	#
							Immission	3		
73	Danis et al. (2005)	Bioaccumulation of PCBs in the cuttlefish <i>Sepia officinalis</i> from seawater, sediment and food pathways	10.1016/j.envpol.2004.07.010	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
74	Danis et al. (2006)	Bioaccumulation and effects of PCBs and heavy metals in sea stars ( <i>Asterias rubens</i> , L.) from the North Sea: a small scale perspective	10.1016/j.scitotenv.2005.05.029	x	/	/	Biota	10	Europa	#
75	Dawn et al. (2002)	Patterns of contamination among vascular plants exposed to local sources of polychlorinated biphenyls in the Canadian Arctic and Subarctic	10.1016/s0048-9697(02)00134-1	x	x	x	Biota	1043	Nordamerika	#
76	De Solla et al. (2007)	Snapping turtles ( <i>Chelydra serpentina</i> ) as bioindicators in Canadian areas of concern in the Great Lakes Basin. 1. Polybrominated diphenyl ethers, polychlorinated biphenyls, and organochlorine pesticides in eggs	10.1021/es0710205	x	/	/	Biota	148	Nordamerika	#
77	DeCaprio et al. (2005)	Polychlorinated biphenyl (PCB) exposure assessment by multivariate statistical analysis of serum congener profiles in an adult Native American population	10.1016/j.envres.2004.09.004	x	x	x	Humanprobe	753	Nordamerika	#
78	Delistraty (2013)	Ecotoxicity and risk to human fish consumers of polychlorinated biphenyls in fish near the Hanford Site (USA)	10.1016/j.scitotenv.2012.12.028	x	/	/	Biota	129	Nordamerika	#
79	Desforges et al. (2014)	Heightened biological uptake of polybrominated diphenyl ethers relative to polychlorinated biphenyls near-source revealed by sediment and plankton profiles along a coastal transect in British Columbia	10.1021/es500218b	x	x	x	Biota	11	Nordamerika	#
							Sediment	9		
80	Deshpande et al. (2013)	Bioaccumulation of polychlorinated biphenyls and organochlorine pesticides in young-of-the-year bluefish ( <i>Pomatomus saltatrix</i> ) in the vicinity of a Superfund Site in New Bedford Harbor, Massachusetts, and in the adjacent waters	10.1016/j.marpolbul.2013.04.008	x	/	/	Biota	74	Nordamerika	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
81	Deutch & Hansen (1999)	High blood levels of persistent organic pollutants are statistically correlated with smoking	<a href="https://pure.au.dk/portal/da/publications/high-blood-levels-of-persistent-organic-pollutants-are-statistica">https://pure.au.dk/portal/da/publications/high-blood-levels-of-persistent-organic-pollutants-are-statistica</a>	x	/	/	Humanprobe	335	Europa	#
82	Dierking et al. (2009)	Spatial patterns in PCBs, pesticides, mercury and cadmium in the common sole in the NW Mediterranean Sea, and a novel use of contaminants as biomarkers	10.1016/j.marpolbul.2009.07.008	x	x	x	Biota	30	Ozean	#
83	Dip et al. (2003)	Age- and sex-dependent distribution of persistent organochlorine pollutants in urban foxes	10.1289/ehp.6226	x	x	x	Biota	192	Europa	#
84	Du, Belton & Rodenburg (2008)	Source apportionment of polychlorinated biphenyls in the tidal Delaware River	10.1021/es703047a	x	x	x	Wasser	150	Nordamerika	#
85	Duarte-Davidson & Jones (1994)	Polychlorinated biphenyls (PCBs) in the UK population: estimated intake, exposure and body burden	10.1016/0048-9697(94)90170-8	x	x	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
86	El Nemr et al. (2013)	Levels, distribution, and risk assessment of organochlorines in surficial sediments of the Red Sea coast, Egypt	10.1007/s10661-012-2907-3	x	x	x	Sediment	17	Afrika	O
87	El-Rahman et al. (2019)	PCDD/PCDFs and PCBs in the irrigation water in Egypt: levels, patterns, and potential sources	10.1007/s10661-019-7623-9	x	x	x	Wasser	24	Afrika	#
88	Elliott et al. (1989)	Environmental contaminants and reproductive success of great blue herons Ardea herodias in British Columbia, 1986-1987	10.1016/0269-7491(89)90099-7	x	/	/	Biota	46	Nordamerika	#
89	Elliott et al. (2000)	Contaminants in ospreys from the Pacific Northwest: II. Organochlorine pesticides, polychlorinated biphenyls, and mercury, 1991-1997	10.1007/s002449910012	x	/	/	Biota	111	Nordamerika	#
90	Endo, Yuyama & Takada (2013)	Desorption kinetics of hydrophobic organic contaminants from marine plastic pellets	10.1016/j.marpolbul.2013.07.018	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
91	Fang et al. (2006)	Concentrations of polychlorinated biphenyl congeners in cultivated oysters (Crassostrea gigas) in western Taiwan	10.1007/s00244-005-1051-2	x	x	x	Biota	53	Asien	#
92	Fängström et al. (2005a)	Polybrominated diphenyl ethers and traditional organochlorine pollutants in fulmars (Fulmarus glacialis) from the Faroe Islands	10.1016/j.j.chemosphere.2005.01.065	x	/	/	Biota	51	Europa	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
93	Fängström et al. (2005b)	Concentrations of polybrominated diphenyl ethers, polychlorinated biphenyls, and polychlorobiphenylols in serum from pregnant Faroese women and their children 7 years later	10.1021/es0513032	x	/	/	Humanprobe	99	Europa	#
94	Farrar et al. (2005)	Field calibration of rapidly equilibrating thin-film passive air samplers and their potential application for low-volume air sampling studies	10.1021/es048904y	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
95	Fernandez et al. (2004)	Spatial variation in hepatic levels and patterns of PCBs and PCDD/Fs among young-of-the-year and adult Atlantic tomcod (Microgadus tomcod) in the Hudson River estuary	10.1021/es034177f	x	x	x	Biota	28	Nordamerika	#
96	Fernández-González et al. (2013)	Inputs of polychlorinated biphenyl residues in animal feeds	10.1016/j.foodchem.2013.02.021	x	x	x	Lebensmittel	34	Europa	#
97	Ferni & Letcher (2010)	Historical contaminants, flame retardants, and halogenated phenolic compounds in peregrine Falcon (Falco peregrinus) nestlings in the Canadian Great Lakes Basin	10.1021/es100400n	x	/	/	Biota	34	Nordamerika	#
98	Fitzgerald et al. (1996)	Polychlorinated biphenyl (PCB) and dichlorodiphenyl dichloroethylene (DDE) exposure among Native American men from contaminated Great Lakes fish and wildlife	10.1177/074823379601200308	x	/	/	Biota	18	Nordamerika	#
							Boden	74		
							Humanprobe	93		
							Sediment	8		
							Wasser	29		
99	Frederiksen et al. (2020)	PCB in serum and hand wipes from exposed residents living in contaminated high-rise apartment buildings and a reference group	10.1016/j.ijheh.2019.113430	x	x	/	Humanprobe	94	Europa	#
100	Gao et al. (2013)	Seasonal and spatial distributions and possible sources of polychlorinated biphenyls in surface sediments of Yangtze Estuary, China	10.1016/j.jchemosphere.2013.01.085	x	x	x	Sediment	30	Asien	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
101	Gautam et al. (2020)	Obesogenic Toxicants in Breast Milk of Lactating Women: Investigation of a Risk Factor for Childhood Obesity	10.1177/1099800420909151	x	/	/	Humanprobe	45	Nordamerika	#
102	Ge et al. (2013)	Distribution, sources and risk assessment of polychlorinated biphenyls in soils from the Midway Atoll, North Pacific Ocean	10.1371/journal.pone.0071521	x	x	x	Boden	111	Nordamerika	#
103	Ge et al. (2014)	Occurrence, distribution and seasonal variations of polychlorinated biphenyls and polybrominated diphenyl ethers in surface waters of the East Lake, China	10.1016/j.chemosphere.2013.12.014	x	/	/	Wasser	108	Asien	#
104	Gerig et al. (2015)	Congener Patterns of Persistent Organic Pollutants Establish the Extent of Contaminant Biotransport by Pacific Salmon in the Great Lakes	10.1021/acs.est.5b05091	x	/	/	Biota	107	Nordamerika	#
105	Gewurtz et al. (2009)	Factors influencing trends of polychlorinated naphthalenes and other dioxin-like compounds in lake trout ( <i>Salvelinus namaycush</i> ) from Lake Ontario, North America (1979-2004)	10.1897/08-307.1	x	/	/	Biota	24	Nordamerika	#
106	Gewurtz et al. (2018)	Levels, patterns, trends and significance of polychlorinated naphthalenes (PCNs) in Great Lakes fish	10.1016/j.scitotenv.2017.11.332	/	/	/	Biota	/	Nordamerika	#
107	Glasius et al. (2005)	Halogenated organic contaminants in marine fish and mussels from southern Greenland--pilot study on relations to trophic levels and local sources	10.1039/b411959b	x	x	x	Biota	39	Europa	#
108	Gomora et al. (2012)	Polychlorinated biphenyls and their hydroxylated metabolites in placenta from Madrid mothers	10.1007/s11356-011-0545-x	x	x	x	Humanprobe	17	Europa	#
109	Granek et al. (2016)	Spatial and temporal variability of contaminants within estuarine sediments and native <i>Olympia</i> oysters: A contrast between a developed and an undeveloped estuary	10.1016/j.scitotenv.2016.03.043	x	x	x	Biota	/	Nordamerika	O
							Sediment	/		
110	Grant et al. (2011)	Environmental fractionation of PCBs and PBDEs during particle transport as recorded by sediments in coastal waters	10.1002/etc.542	x	/	/	Sediment	41	Nordamerika	#
111	Greenfield & Allen (2013)	Polychlorinated biphenyl spatial patterns in San Francisco Bay forage fish	10.1016/j.chemosphere.2012.09.066	x	x	x	Biota	36	Nordamerika	#



Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
112	Grilo et al. (2013)	Organochlorine accumulation on a highly consumed bivalve ( <i>Scrobicularia plana</i> ) and its main implications for human health	10.1016/j.scitotenv.2013.04.096	x	x	x	Biota	3	Europa	#
							Sediment	3		
							Wasser	3		
113	Guo et al. (2021)	Polychlorinated biphenyls (PCBs) in the colostrum samples from the Yangtze River Region: Exposure profile and risk assessment	10.1016/j.envpol.2021.117253	x	x	x	Humanprobe	60	Asien	#
114	Gustafsson et al. (2001)	Process-diagnostic patterns of chlorobiphenyl congeners in two radiochronologically characterized sediment cores from the northern Baffin Bay	10.1016/s0045-6535(01)00088-1	x	x	x	Sediment	8	Ozean	#
115	Hansen et al. (2017)	Variations in serum concentrations of selected organochlorines among delivering women in Argentina. The EMASAR study	10.1039/c7em00278e	x	x	x	Humanprobe	698	Südamerika	#
116	Hany et al. (1999)	Developmental exposure of rats to a reconstituted PCB mixture or aroclor 1254: effects on organ weights, aromatase activity, sex hormone levels, and sweet preference behavior	10.1006/taap.1999.8710	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
117	Hao et al. (2018)	Distribution, seasonal variation and inhalation risks of polychlorinated dibenzo-p-dioxins and dibenzofurans, polychlorinated biphenyls and polybrominated diphenyl ethers in the atmosphere of Beijing, China	10.1007/s10653-017-9961-2	x	x	x	Immission	52	Asien	#
118	Harris et al. (2003)	Reproductive success and chlorinated hydrocarbon contamination of resident great blue herons ( <i>Ardea herodias</i> ) from coastal British Columbia, Canada, 1977 to 2000	10.1016/s0269-7491(02)00220-8	x	/	/	Biota	535	Nordamerika	#
119	He et al. (2006)	Distribution patterns of nitrobenzenes and polychlorinated biphenyls in water, suspended particulate matter and sediment from mid- and down-stream of the Yellow River (China)	10.1016/j.chemosphere.2006.02.033	x	/	/	Sediment	12	Asien	#
							Wasser	12		
120	Heemken et al. (2000)	Temporal variability of organic micropollutants in suspended particulate matter of the River Elbe at Hamburg and the River Mulde at Dessau, Germany	10.1007/s002449910003	x	x	x	Sediment	24	Europa	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
121	Heiger-Bernays et al. (2019)	Human health risks due to airborne polychlorinated biphenyls are highest in New Bedford Harbor communities living closest to the harbor	10.1016/j.scitotenv.2019.135576	x	x	x	Immission	54	Nordamerika	O
122	Heinzow et al. (2007)	PCB and dioxin-like PCB in indoor air of public buildings contaminated with different PCB sources--deriving toxicity equivalent concentrations from standard PCB congeners	10.1016/j.chemosphere.2006.05.120	x	x	x	Immission	384	Europa	#
123	Hellar-Kihampa et al. (2013)	Spatial monitoring of organohalogen compounds in surface water and sediments of a rural-urban river basin in Tanzania	10.1016/j.scitotenv.2012.12.083	x	x	x	Biota	15	Afrika	#
							Sediment	15		
124	Heres et al. (2010)	Tracing and analytical results of the dioxin contamination incident in 2008 originating from the Republic of Ireland	10.1080/19440049.2010.522598	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
125	Herrick, Meeker & Altshul (2011)	Serum PCB levels and congener profiles among teachers in PCB-containing schools: a pilot study	10.1186/1476-069X-10-56	x	/	/	Humanprobe	18	Nordamerika	#
126	Hoang et al. (2021)	Historical record of polychlorinated biphenyls in a sediment core from Lake Biwa, Japan: Significance of unintentional emission and weathering signals revealed by full congener-specific analysis	10.1016/j.scitotenv.2021.147913	x	x	x	Sediment	21	Asien	#
127	Hobbs, Lebeuf & Hammil (2002)	PCBs and OCPs in male harbour, grey, harp and hooded seals from the Estuary and Gulf of St Lawrence, Canada	10.1016/s0048-9697(01)01074-9	x	x	x	Biota	34	Nordamerika	#
128	Holt et al. (2016)	Spatiotemporal patterns and potential sources of polychlorinated biphenyl (PCB) contamination in Scots pine (Pinus sylvestris) needles from Europe	10.1007/s11356-016-7171-6	x	x	x	Biota	17	Europa	O
129	Hong et al. (2003)	Horizontal and vertical distribution of PCBs and chlorinated pesticides in sediments from Masan Bay, Korea	10.1016/s0025-326x(02)00399-5	x	x	x	Sediment	20	Asien	#
130	Hong et al. (2005)	Congener-specific survey for polychlorinated biphenyls in sediments of industrialized bays in Korea: regional characteristics and pollution sources	10.1021/es050397c	x	x	x	Sediment	49	Asien	#
131	Hong et al. (2010)	Temporal trend, spatial distribution, and terrestrial sources of PBDEs and PCBs in Masan Bay, Korea	10.1016/j.marpolbul.2010.05.023	x	/	/	Sediment	42	Asien	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
132	Hong et al. (2012)	Occurrence of polychlorinated biphenyls (PCBs) together with sediment properties in the surface sediments of the Bering Sea, Chukchi Sea and Canada Basin	10.1016/j.chemosphere.2012.05.033	x	/	/	Sediment	24	Nordamerika	#
133	Hoogenboom et al. (2016)	Polychlorinated dibenzo-p-dioxins and dibenzofurans (PCDD/Fs) and biphenyls (PCBs) in home-produced eggs	10.1016/j.chemosphere.2016.02.034	x	x	x	Lebensmittel	62	Europa	#
134	Howell, Rifai & Koenig (2011)	Comparative distribution, sourcing, and chemical behavior of PCDD/Fs and PCBs in an estuary environment	10.1016/j.chemosphere.2011.02.082	x	/	/	Biota	145	Nordamerika	#
							Sediment	98		
							Wasser	159		
135	Hu et al. (2010)	Atmospheric PCB congeners across Chicago	10.1016/j.atmosenv.2010.01.006	x	x	x	Immission	184	Nordamerika	#
136	Huang et al. (2020)	Enrichment behavior of contemporary PAHs and legacy PCBs at the sea-surface microlayer in harbor water	10.1016/j.chemosphere.2019.125647	x	/	/	Sediment	10	Asien	#
							Wasser	10		
137	Huang, Lee & Fang (2011)	Distribution and source differentiation of PAHs and PCBs among size and density fractions in contaminated harbor sediment particles and their implications in toxicological assessment	10.1016/j.marpolbul.2010.11.022	x	/	/	Sediment	12	Asien	#
138	Huo et al. (2017)	Historical record of polychlorinated biphenyls (PCBs) and special occurrence of PCB 209 in a shallow fresh-water lake from eastern China	10.1016/j.chemosphere.2017.06.073	x	x	x	Sediment	60	Asien	#
139	Huwe et al. (2009)	Survey of polychlorinated dibenzo-p-dioxins, polychlorinated dibenzofurans, and non-ortho-polychlorinated biphenyls in U.S. meat and poultry, 2007-2008: effect of new toxic equivalency factors on toxic equivalency levels, patterns, and temporal trends	10.1021/jf902251t	x	/	/	Lebensmittel	510	Nordamerika	#
140	Hwang & Foster (2008)	Polychlorinated biphenyls in stormwater runoff entering the tidal Anacostia River, Washington, DC, through small urban catchments and combined sewer outfalls	10.1080/10934520801893527	x	x	x	Wasser	6	Nordamerika	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
141	Hwang et al. (2001)	Fingerprinting PCB patterns among Mohawk women	10.1038/sj.jea.7500159	x	/	/	Humanprobe	93	Nordamerika	#
142	Hwang, Green & Young (2006)	Tidal salt marsh sediment in California, USA. Part 1: occurrence and sources of organic contaminants	10.1016/j.chemosphere.2005.12.024	x	x	x	Sediment	34	Nordamerika	#
143	Ikonomou et al. (2002)	PCBs in dungeness crab reflect distinct source fingerprints among harbor/industrial sites in British Columbia	10.1021/es011209v	x	/	/	Biota	65	Nordamerika	#
144	Im et al. (2002)	Concentrations and profiles of polychlorinated dibenzo-p-dioxins and dibenzofurans in soils from Korea	10.1021/es020531i	/	/	/	Boden	23	Asien	#
145	Imamoglu & Christensen (2002)	PCB sources, transformations, and contributions in recent Fox River, Wisconsin sediments determined from receptor modeling	10.1016/s0043-1354(02)00050-7	x	/	/	Sediment	74	Nordamerika	#
146	Imamoglu et al. (2004)	Sources and dechlorination of polychlorinated biphenyl congeners in the sediments of Fox River, Wisconsin	10.1021/es035165x	x	x	x	Sediment	8	Nordamerika	#
147	Imamoglu, Li & Christensen (2002a)	Modeling polychlorinated biphenyl congener patterns and dechlorination in dated sediments from the Ashtabula River, Ohio, USA	10.1002/etc.5620211105	x	x	x	Sediment	4	Nordamerika	#
148	Imamoglu, Li & Christensen (2002b)	PCB sources and degradation in sediments of Ashtabula River, Ohio, USA, determined from receptor models	10.2166/wst.2002.0061	x	x	x	Sediment	56	Ozean	#
149	Ingelido et al. (2009)	Levels and profiles of polychlorinated dibenzo-p-dioxins, polychlorinated dibenzofurans, and polychlorinated biphenyls in feedstuffs and milk from farms in the vicinity of incineration plants in Tuscany, Italy	10.1007/s00244-008-9262-y	x	x	x	Lebensmittel	10	Europa	#
150	Iwata et al. (2004)	Toxicokinetics of PCDD, PCDF, and coplanar PCB congeners in Baikal seals, <i>Pusa sibirica</i> : age-related accumulation, maternal transfer, and hepatic sequestration	10.1021/es035461+	x	/	/	Biota	43	Asien	#
151	Iwegbue et al. (2020)	Spatial characteristics and risk assessment of polychlorinated biphenyls in surficial sediments around crude oil production facilities in the Escravos River Basin, Niger Delta, Nigeria	10.1016/j.marpolbul.2020.111462	x	x	x	Sediment	25	Afrika	#
152	Izadifard, Achari & Langford (2008)	The pathway of dechlorination of PCB congener by a photochemical chain process in 2-propanol: the role of medium and quenching	10.1016/j.chemosphere.2008.07.003	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
153	Jacobson et al. (1989)	Determinants of polychlorinated biphenyls (PCBs), polybrominated biphenyls (PBBs), and dichlorodiphenyl trichloroethane (DDT) levels in the sera of young children	10.2105/ajph.79.10.1401	x	/	/	Humanprobe	236	Nordamerika	#
154	Jaikanlaya et al. (2009)	PCBs contamination in seafood species at the Eastern Coast of Thailand	10.1016/j.chemosphere.2009.03.018	x	x	x	Biota	108	Asien	#
155	Jiang et al. (2011)	Polybrominated diphenyl ethers and polychlorinated biphenyls in sediments of southwest Taiwan: regional characteristics and potential sources	10.1016/j.marpolbul.2010.12.019	x	/	/	Sediment	57	Asien	#
156	Joyse et al. (2015)	Using performance reference compound-corrected polyethylene passive samplers and caged bivalves to measure hydrophobic contaminants of concern in urban coastal seawaters	10.1016/j.chemosphere.2014.12.067	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
157	Ju et al. (2009)	Analysis and evaluation of chlorinated persistent organic compounds and PAHs in sludge in Korea	10.1016/j.chemosphere.2008.09.059	x	/	/	Abfall	6	Asien	#
158	Judd, Griffith & Faustman (2004)	Contribution of PCB exposure from fish consumption to total dioxin-like dietary exposure	10.1016/j.yrtph.2004.06.004	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
159	Kalantzi et al. (2001)	The global distribution of PCBs and organochlorine pesticides in butter	10.1021/es0002464	x	/	/	Lebensmittel	63	Global	#
160	Kannan et al. (1989)	Polychlorinated biphenyls (PCBs) in sediments in Hong Kong: a congener-specific approach to the study of coplanar PCBs in aquatic ecosystems	10.1016/0269-7491(89)90189-9	x	/	/	Sediment	14	Asien	#
161	Kim & Masunaga (2005)	Behavior and source characteristic of PCBS in urban ambient air of Yokohama, Japan	10.1016/j.envpol.2005.03.011	x	/	/	Immission	11	Asien	#
162	Kim et al. (2004)	Detailed PCB congener patterns in incinerator flue gas and commercial PCB formulations (Kanachlor)	10.1016/j.chemosphere.2003.11.056	x	x	x	Immission	6	Asien	O
163	Kim et al. (2014)	Using SPMDs for monitoring hydrophobic organic compounds in urban river water in Korea compared with using conventional water grab samples	10.1016/j.scitotenv.2013.06.033	x	/	/	Wasser	/	Asien	#
164	Kim et al. (2017)	Monitoring and risk assessment of polychlorinated biphenyls (PCBs) in agricultural soil from two industrialized areas	10.1007/s10653-017-9920-y	x	x	x	Boden	30	Asien	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
165	Kim, Lee & Oh (2002)	Characteristics of trophic transfer of polychlorinated biphenyls in marine organisms in Incheon North Harbor, Korea	10.1002/etc.5620210421	x	x	x	Biota	75	Asien	#
166	Kleivana, Severinsen & Skaare (2000)	Biological transport and mammal to mammal transfer of organochlorines in Arctic fauna	10.1016/s0141-1136(99)00079-3	x	/	/	Biota	42	Ozean	#
167	Klinefelter et al. (2018)	Genetic differences in the aryl hydrocarbon receptor and CYP1A2 affect sensitivity to developmental polychlorinated biphenyl exposure in mice: relevance to studies of human neurological disorders	10.1007/s00335-017-9728-1	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
168	Ko & Baker (2004)	Seasonal and annual loads of hydrophobic organic contaminants from the Susquehanna River basin to the Chesapeake Bay	10.1016/j.marpolbul.2003.10.014	x	/	/	Wasser	45	Nordamerika	#
169	Konishi et al. (2016)	Trends in the enantiomeric composition of polychlorinated biphenyl atropisomers in human breast milk	10.1007/s11356-015-4620-6	x	/	/	Humanprobe	10	Asien	#
170	Korrick & Altshul (1998)	High breast milk levels of polychlorinated biphenyls (PCBs) among four women living adjacent to a PCB-contaminated waste site	10.1289/ehp.98106513	x	x	x	Humanprobe	8	Nordamerika	#
171	Kostyniak et al. (2005)	Formulation and characterization of an experimental PCB mixture designed to mimic human exposure from contaminated fish	10.1093/toxsci/kfi338	x	x	x	Biota	8	Nordamerika	#
172	Krümmel et al. (2005)	Concentrations and fluxes of salmon-derived polychlorinated biphenyls (PCBs) in lake sediments	10.1021/es050657q	x	/	/	Biota	/	Nordamerika	#
							Sediment	/		
173	Kukučka et al. (2015)	Source identification, spatio-temporal distribution and ecological risk of persistent organic pollutants in sediments from the upper Danube catchment	10.1016/j.chemosphere.2015.08.001	x	x	x	Sediment	6	Europa	#
174	Kunisue et al. (2002)	Seasonal variation of persistent organochlorine accumulation in birds from Lake Baikal, Russia, and the role of the south Asian region as a source of pollution for wintering migrants	10.1021/es011051e	x	x	x	Biota	98	Asien	#
175	Kunisue et al. (2003)	Congener-specific patterns and toxic assessment of polychlorinated biphenyls in resident and migratory birds from Southern India and Lake Baikal in Russia	10.1007/s00244-003-2213-8	x	x	x	Biota	35	Asien	#



Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
176	Kvalem et al. (2009)	Role of dietary patterns for dioxin and PCB exposure	10.1002/mnfr.200800462	x	x	x	Humanprobe	184	Europa	#
177	Lackmann, Schaller & Angerer (2005)	[Lactational transfer of presumed carcinogenic and teratogenic organochlorine compounds within the first six months of life]	10.1055/s-2005-873204	x	/	/	Humanprobe	40	Europa	#
178	Lamon et al. (2009)	Modeling the global levels and distribution of polychlorinated biphenyls in air under a climate change scenario	10.1021/es900438j	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
179	Lamon et al. (2012)	Modeling the influence of climate change on the mass balance of polychlorinated biphenyls in the Adriatic Sea	10.1016/j.chemosphere.2012.02.010	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
180	Lanting et al. (1998)	Determinants of polychlorinated biphenyl levels in plasma from 42-month-old children	10.1007/s002449900360	x	/	/	Humanprobe	406	Europa	#
181	Lazarus et al. (2016)	Chesapeake Bay fish-osprey (Pandion haliaetus) food chain: Evaluation of contaminant exposure and genetic damage	10.1002/etc.3386	x	/	/	Biota	302	Nordamerika	#
182	Leblanc et al. (2006)	Tests of bioaccumulation models for polychlorinated biphenyl compounds: a study of young-of-the-year bluefish in the Hudson River estuary, USA	10.1897/05-444r.1	x	/	/	Biota	101	Nordamerika	#
							Wasser	6		
183	Li et al. (2011a)	Concentrations, spatial distributions and congener profiles of polychlorinated biphenyls in soils from a coastal city--Tianjin, China	10.1016/j.chemosphere.2011.08.010	x	x	x	Boden	82	Asien	#
184	Li et al. (2011b)	Short-range transport of contaminants released from e-waste recycling site in South China	10.1039/c0em00633e	x	/	/	Boden	24	Asien	#
185	Li et al. (2019)	Polychlorinated biphenyls are still alarming persistent organic pollutants in marine-origin animal feed (fishmeal)	10.1016/j.chemosphere.2019.05.250	x	/	/	Produkte	102	Global	#
186	Li et al. (2021)	Effect of laying sequence and selection of maternal tissues in assessment of maternal transfer of organohalogenated contaminants during chicken egg formation: A pilot study	10.1016/j.envpol.2020.116157	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
187	Lilienthal & Winneke (1991)	Sensitive periods for behavioral toxicity of polychlorinated biphenyls: determination by cross-fostering in rats	10.1016/0272-0590(91)90226-t	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
188	Lin, Hsu & Liao (2012)	Coexposure of dioxin-like polychlorinated biphenyls and polychlorinated dibenzo-p-dioxins and dibenzofurans in free-range hens and implications derived from congener profile analysis	10.1021/jf204468s	x	/	/	Lebensmittel	18	Asien	#
189	Liu & Kueh (2005)	Biomonitoring of heavy metals and trace organics using the intertidal mussel <i>Perna viridis</i> in Hong Kong coastal waters	10.1016/j.marpolbul.2005.04.014	x	x	x	Biota	/	Asien	#
190	Liu et al. (2011)	Polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) and indicator polychlorinated biphenyls (PCBs) in marine fish from four areas of China	10.1016/j.chemosphere.2010.12.045	x	x	x	Biota	44	Asien	O
191	Liu et al. (2013)	Heavy metals and organic compounds contamination in soil from an e-waste region in South China	10.1039/c3em00043e	x	x	x	Boden	41	Asien	#
192	Liu et al. (2020)	Polychlorinated biphenyls in the soil-crop-atmosphere system in e-waste dismantling areas in Taizhou: Concentrations, congener profiles, uptake, and translocation	10.1016/j.envpol.2019.113622	x	x	x	Biota	7	Asien	#
							Boden	14		
							Immission	11		
193	Loganathan et al. (1997)	Distribution of selected PCB congeners in the Babcock Street sewer district: a multimedia approach to identify PCB sources in combined sewer overflows (CSOs) discharging to the Buffalo River, New York	10.1007/s002449900234	x	x	x	Immission	4	Nordamerika	#
							Sediment	10		
194	Lopes, Persat & Babut (2012)	Transfer of PCBs from bottom sediment to freshwater river fish: a food-web modelling approach in the Rhône River (France) in support of sediment management	10.1016/j.ecoenv.2012.04.007	x	x	x	Biota	2403	Europa	#
195	Lu et al. (2015)	The distribution of Polychlorinated Biphenyls (PCBs) in the River Thames Catchment under the scenarios of climate change	10.1016/j.scitotenv.2015.06.084	x	x	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
196	Lupton et al. (2017)	Survey of polychlorinated dibenzo-p-dioxins, polychlorinated dibenzofurans and non-ortho-polychlorinated biphenyls in US meat and poultry, 2012-13: toxic equivalency levels, patterns, temporal trends and implications	10.1080/19440049.2017.1340674	x	/	/	Lebensmittel	515	Nordamerika	#
197	Ma et al. (2013)	[Vertical distribution of PBDEs and DL-PCBs in sediments of Taihu Lake]	<a href="https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/23745425/">https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/23745425/</a>	x	/	/	Sediment	/	Asien	#
198	Madenjian et al. (2012)	Net trophic transfer efficiencies of polychlorinated biphenyl congeners to lake trout ( <i>Salvelinus namaycush</i> ) from its prey	10.1002/etc.1996	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
199	Magar et al. (2005)	Long-term recovery of PCB-contaminated sediments at the Lake Hartwell superfund site: PCB dechlorination. 1. End-member characterization	10.1021/es048622y	x	x	x	Sediment	280	Nordamerika	#
200	Maisano et al. (2016)	PCB and OCP accumulation and evidence of hepatic alteration in the Atlantic bluefin tuna, <i>T. thynnus</i> , from the Mediterranean Sea	10.1016/j.marenvres.2016.03.003	x	x	x	Lebensmittel	20	Ozean	#
201	Martí, Bayona & Albaigés (2001)	A potential source of organic pollutants into the northeastern Atlantic: the outflow of the Mediterranean deep-lying waters through the Gibraltar Strait	10.1021/es000258p	x	x	x	Wasser	32	Ozean	#
202	Martinez & Hornbuckle (2011)	Record of PCB congeners, sorbents and potential toxicity in core samples in Indiana Harbor and Ship Canal	10.1016/j.chemosphere.2011.08.018	x	/	/	Sediment	44	Nordamerika	#
203	Matykiewiczová, Klánová & Klán (2007)	Photochemical degradation of PCBs in snow	10.1021/es0714686	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
204	Maul et al. (2006)	Bioaccumulation and trophic transfer of polychlorinated biphenyls by aquatic and terrestrial insects to tree swallows ( <i>Tachycineta bicolor</i> )	10.1897/05-309r.1	x	/	/	Biota	37	Nordamerika	#
205	Maul et al. (2010)	Congener-specific egg contribution of polychlorinated biphenyls to nestlings in two passerine species	10.1016/j.envpol.2010.04.009	x	x	x	Biota	100	Nordamerika	#
206	McKinney et al. (2010)	The role of diet on long-term concentration and pattern trends of brominated and chlorinated contaminants in western Hudson Bay polar bears, 1991-2007	10.1016/j.scitotenv.2010.08.033	x	/	/	Biota	92	Nordamerika	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
207	Megson et al. (2014)	Identifying the provenance of Leach's storm petrels in the North Atlantic using polychlorinated biphenyl signatures derived from comprehensive two-dimensional gas chromatography with time-of-flight mass spectrometry	10.1016/j.chemosphere.2014.04.061	x	x	x	Biota	25	Global	#
208	Meharg et al. (2003)	PCB congener dynamics in a heavily industrialized river catchment	10.1016/s0048-9697(03)00067-6	x	/	/	Biota	/	Europa	#
							Sediment	/		
209	Meijer et al. (2002)	Influence of environmental variables on the spatial distribution of PCBs in Norwegian and U.K. soils: implications for global cycling	10.1021/es010322i	x	x	x	Boden	67	Europa	#
210	Metcalfe & Charlton (1990)	Freshwater mussels as biomonitors for organic industrial contaminants and pesticides in the St. Lawrence River	10.1016/0048-9697(90)90264-u	x	x	x	Biota	38	Nordamerika	#
211	Metcalfe et al. (2004)	Intra- and inter-species differences in persistent organic contaminants in the blubber of blue whales and humpback whales from the Gulf of St. Lawrence, Canada	10.1016/j.marenvres.2003.08.003	x	/	/	Biota	91	Nordamerika	#
212	Miao et al. (2000)	Distribution of polychlorinated biphenyls in marine species from French Frigate Shoals, North Pacific Ocean	10.1016/s0048-9697(00)00484-8	x	/	/	Biota	/	Ozean	#
							Sediment	/		
213	Michaud et al. (2007)	Biodegradative potential and characterization of psychrotolerant polychlorinated biphenyl-degrading marine bacteria isolated from a coastal station in the Terra Nova Bay (Ross Sea, Antarctica)	10.1016/j.marpolbul.2007.07.011	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
214	Michielsen et al. (2019)	A Nondestructive Method to Identify POP Contamination Sources in Omnivorous Seabirds	10.1007/398_2018_12	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
215	Minh et al. (2002)	Persistent organochlorine residues and their bioaccumulation profiles in resident and migratory birds from North Vietnam	10.1002/etc.5620211014	x	x	x	Biota	101	Asien	#
216	Minh et al. (2006)	Contamination by polybrominated diphenyl ethers and persistent organochlorines in catfish and feed from Mekong River Delta, Vietnam	10.1897/05-600r.1	x	/	/	Biota	20	Asien	#
							Produkte	5		

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
217	Miniero et al. (2011)	Persistent organic pollutants (POPs) in fish collected from the urban tract of the river Tiber in Rome (Italy)	10.4415/ANN_11_03_12	x	x	/	Biota	/	Europa	#
218	Miyawaki et al. (2018)	Compound-specific isotopic and congener-specific analyses of polychlorinated biphenyl in the heat medium and rice oil of the Yusho incident	10.1007/s11356-017-0175-z	x	x	x	Produkte	5	Asien	#
219	Monosson et al. (2003)	PCB congener distributions in muscle, liver and gonad of Fundulus heteroclitus from the lower Hudson River Estuary and Newark Bay	10.1016/S0045-6535(03)00228-5	x	/	/	Lebensmittel	2	Europa	#
220	Morgan & Lohmann (2010)	Dietary uptake from historically contaminated sediments as a source of PCBs to migratory fish and invertebrates in an urban estuary	10.1021/es100450f	x	/	/	Lebensmittel	65	Nordamerika	#
221	Morrissey, Bendell-Young & Elliott (2005)	Identifying sources and biomagnification of persistent organic contaminants in biota from mountain streams of southwestern British Columbia, Canada	10.1021/es050431n	x	/	/	Biota	55	Nordamerika	#
222	Morrissey, Elliott & Ormerod (2010)	Local to continental influences on nutrient and contaminant sources to river birds	10.1021/es903084m	x	/	/	Biota	54	Global	#
223	Moss et al. (2009)	Concentrations of persistent organic pollutants in plasma from two species of turtle from the Tennessee River Gorge	10.1016/j.chemosphere.2009.03.054	x	/	/	Biota	10	Nordamerika	#
224	Motelay-Massei et al. (2004)	Distribution and spatial trends of PAHs and PCBs in soils in the Seine River basin, France	10.1016/j.chemosphere.2003.11.054	x	x	x	Boden	37	Europa	#
225	Mugnai et al. (2011)	Polychlorinated biphenyls in two salt marsh sediments of the Venice Lagoon	10.1007/s10661-010-1826-4	x	x	x	Sediment	16	Europa	#
226	Muir et al. (1992)	Organochlorine contaminants in narwhal (Monodon monoceros) from the Canadian Arctic	10.1016/0269-7491(92)90131-s	x	/	/	Biota	21	Nordamerika	#
227	Mumtaz et al. (2016)	Polychlorinated biphenyl (PCBs) in rice grains and straw; risk surveillance, congener specific analysis, distribution and source apportionment from selected districts of Punjab Province, Pakistan	10.1016/j.scitotenv.2015.10.126	x	/	/	Biota	40	Asien	#
228	Nfon, Cousins & Broman (2008)	Biomagnification of organic pollutants in benthic and pelagic marine food chains from the Baltic Sea	10.1016/j.scitotenv.2008.02.029	x	x	x	Biota	130	Ozean	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
229	Noblet, Zeng & Ritter (2003)	Evaluation of polychlorinated biphenyl bioaccumulation patterns in white sea urchins ( <i>Lytechinus pictus</i> ) using multiple approaches	10.1897/02-501a	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
230	Nollet et al. (2005)	Carbon/electron source dependence of polychlorinated biphenyl dechlorination pathways for anaerobic granules	10.1016/j.chemosphere.2004.07.036	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
231	Ogura, Masunaga & Nakanishi (2004)	Quantitative source identification of dioxin-like PCBs in Yokohama, Japan, by temperature dependence of their atmospheric concentrations	10.1021/es0354622	x	/	/	Immission	22	Asien	#
232	Oh et al. (2003)	PCB and PCDD/F totals, TEQs, and congener patterns in Korean coastal marine environments, 1987, 1988, 1990, and 1996-1999	10.1007/s00244-002-2026-1	x	/	/	Biota	57	Asien	#
							Sediment	6		
233	Oliveira et al. (2011)	Concentrations of polychlorinated biphenyls in water from US Lake Ontario tributaries between 2004 and 2008	10.1016/j.chemosphere.2010.12.012	x	/	/	Wasser	90	Nordamerika	#
234	Papp et al. (2007)	PCB congener profiles in nestling tree swallows and their insect prey	10.1007/s00244-006-0037-z	x	/	/	Biota	26	Nordamerika	#
235	Paterson, Di Pierdomenico & Haffner (2020)	Basin-Specific Pollutant Bioaccumulation Patterns Define Lake Huron Forage Fish	10.1002/etc.4794	x	x	/	Biota	140	Nordamerika	#
236	Pavlova et al. (2016)	Release of PCBs from Silvretta glacier (Switzerland) investigated in lake sediments and meltwater	10.1007/s11356-015-5854-z	x	x	x	Sediment	60	Europa	#
							Wasser	12		
237	Peltonen et al. (2014)	PCDD/Fs, PCBs and PBDEs in zooplankton in the Baltic Sea - spatial and temporal shifts in the congener-specific concentrations	10.1016/j.chemosphere.2014.04.026	x	x	x	Biota	12	Ozean	#
238	Perharic & Vracko (2012)	Development of national human biomonitoring programme in Slovenia	10.1016/j.ijheh.2011.10.014	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
239	Peterson et al. (2014)	Effects of age, adipose percent, and reproduction on PCB concentrations and profiles in an extreme fasting North Pacific marine mammal	10.1371/journal.pone.0096191	x	/	/	Biota	116	Ozean	#



Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
240	Poole, Elkin & Bethke (1998)	Organochlorine and heavy metal contaminants in wild mink in western Northwest Territories, Canada	10.1007/s002449900337	x	x	x	Biota	1025	Nordamerika	#
241	Portolés et al. (2016)	Evaluation of the capabilities of atmospheric pressure chemical ionization source coupled to tandem mass spectrometry for the determination of dioxin-like polychlorobiphenyls in complex-matrix food samples	10.1016/j.aca.2016.06.038	x	x	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
242	Powell et al. (2017)	Trophic dilution of cyclic volatile methylsiloxanes (cVMS) in the pelagic marine food web of Tokyo Bay, Japan	10.1016/j.scitotenv.2016.10.189	x	/	/	Biota	19	Asien	#
							Sediment	20		
243	Pozo et al. (2016)	Assessing persistent organic pollutants (POPs) in the Sicily Island atmosphere, Mediterranean, using PUF disk passive air samplers	10.1007/s11356-016-7131-1	x	x	x	Immission	18	Europa	#
244	Pruell et al. (2000)	Organic contaminant distributions in sediments, polychaetes (Nereis virens) and American lobster (Homarus americanus) from a laboratory food chain experiment	10.1016/s0141-1136(99)00046-x	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
245	Raikow et al. (2011)	The distance that contaminated aquatic subsidies extend into lake riparian zones	10.1890/09-1504.1	x	x	x	Biota	30	Nordamerika	#
246	Ravenscroft et al. (2018)	Patterns of PCB exposure among Akwesasne adolescents: The role of dietary and inhalation pathways	10.1016/j.envint.2018.05.005	x	/	/	Humanprobe	271	Nordamerika	#
247	Ray et al. (1998)	Comparative levels of organochlorine compounds in flounders from the northeast coast of Newfoundland and an offshore site	10.1016/s0045-6535(97)10192-8	x	/	/	Biota	15	Nordamerika	#
248	Reese, Estes & Jarman (2012)	Organochlorine contaminants in coastal marine ecosystems of southern Alaska: inferences from spatial patterns in blue mussels (Mytilus trossulus)	10.1016/j.chemosphere.2012.03.096	x	x	x	Biota	44	Nordamerika	#
249	Reindl, Falkowska & Grajewska (2019)	Halogenated organic compounds in the eggs of aquatic birds from the Gulf of Gdansk and Wloclawek Dam (Poland)	10.1016/j.chemosphere.2019.124463	x	x	x	Biota	70	Europa	#
250	Ricca, Keith & Anthony (2008)	Sources of organochlorine contaminants and mercury in seabirds from the Aleutian archipelago of Alaska: inferences from spatial and trophic variation	10.1016/j.scitotenv.2008.06.030	x	/	/	Biota	39	Nordamerika	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
251	Risso et al. (2016)	A comprehensive approach to actual polychlorinated biphenyls environmental contamination	10.1007/s11356-016-6108-4	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
252	Rodenburg & Delistraty (2019)	Alterations in fingerprints of polychlorinated biphenyls in benthic biota at the Portland Harbor Superfund Site (Oregon, USA) suggest metabolism	10.1016/j.chemosphere.2019.02.039	x	x	x	Biota	130	Nordamerika	#
253	Rodenburg & Meng (2013)	Source apportionment of polychlorinated biphenyls in Chicago air from 1996 to 2007	10.1021/es305024p	x	x	x	Immission	4380	Nordamerika	#
254	Rodenburg, Pierdomenico & Haffner (2020)	Polychlorinated biphenyl congener patterns in fish near the Hanford Site (Washington State, USA)	10.1021/es504961a	x	/	/	Biota	28	Nordamerika	#
							Boden	8		
							Sediment	34		
							Wasser	8		
255	Romanić et al. (2018)	Self-organizing maps for indications of airborne polychlorinated biphenyl (PCBs) and organochlorine pesticide (OCPs) dependence on spatial and meteorological parameters	10.1016/j.scitotenv.2018.02.012	x	x	x	Immission	38	Europa	#
256	Romano et al. (2013)	PBDEs and PCBs in sediments of the Thi Nai Lagoon (Central Vietnam) and soils from its mainland	10.1016/j.chemosphere.2012.10.067	x	/	/	Boden	7	Asien	#
							Sediment	18		
257	Roots et al. (2010)	Distribution pattern of PCBs, HCB and PeCB using passive air and soil sampling in Estonia	10.1007/s11356-009-0147-z	x	x	x	Boden	5	Europa	#
							Immission	20		
258	Rose et al. (2001)	An historical record of toxaphene and its congeners in a remote lake in western Europe	10.1021/es0015895	x	/	/	Sediment	20	Europa	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
259	Ross et al. (2004)	Harbor seals ( <i>Phoca vitulina</i> ) in British Columbia, Canada, and Washington State, USA, reveal a combination of local and global polychlorinated biphenyl, dioxin, and furan signals	10.1897/03-85	x	/	/	Biota	60	Nordamerika	#
260	Rossi et al. (2004)	Urban stormwater contamination by polychlorinated biphenyls (PCBs) and its importance for urban water systems in Switzerland	10.1016/S0048-9697(03)00361-9	x	x	x	Wasser	89	Europa	#
261	Rosko et al. (2014)	Seasonal variability of polychlorinated biphenyls (PCBs) and polychlorinated diphenyl ethers (PBDEs) congener profiles in butter in Poland: dietary risk evaluation	10.1080/03601234.2014.858514	x	x	x	Lebensmittel	145	Europa	#
262	Roze et al. (2009)	Prenatal exposure to organohalogens, including brominated flame retardants, influences motor, cognitive, and behavioral performance at school age	10.1289/ehp.0901015	x	/	/	Humanprobe	62	Europa	#
263	Ruusm, Daae & Hylland (2012)	Accumulation of polychlorinated biphenyls from contaminated sediment by Atlantic cod ( <i>Gadus morhua</i> ): direct accumulation from resuspended sediment and dietary accumulation via the polychaete <i>Nereis virens</i>	10.1002/etc.1973	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
264	Saba & Su (2013)	Tracking polychlorinated biphenyls (PCBs) congener patterns in Newark Bay surface sediment using principal component analysis (PCA) and positive matrix factorization (PMF)	10.1016/j.jhazmat.2013.05.046	x	/	/	Sediment	133	Nordamerika	O
265	Sandanger et al. (2003)	Human plasma levels of POPs, and diet among native people from Uelen, Chukotka	10.1039/b302025h	x	x	x	Humanprobe	50	Asien	#
266	Sather et al. (2001)	Similarity of an Aroclor-based and a full congener-based method in determining total PCBs and a modeling approach to estimate Aroclor speciation from congener-specific PCB data	10.1021/es010921p	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
267	Schaeffer et al. (2006)	Serum PCB profiles in Native Americans from Wisconsin based on region, diet, age, and gender: Implications for epidemiology studies	10.1016/j.scitotenv.2005.04.030	x	x	x	Humanprobe	314	Nordamerika	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
268	Schilderman et al. (1999)	Use of crayfish in biomonitoring studies of environmental pollution of the river Meuse	10.1006/eesa.1999.1827	x	x	x	Biota	40	Europa	#
							Sediment	4		
							Wasser	4		
269	Schmid et al. (2002)	Levels of polychlorinated dibenzo-p-dioxins and dibenzofurans in food of animal origin. The Swiss dioxin monitoring program	10.1021/jf025669z	/	/	/	Lebensmittel	128	Europa	#
270	Schuster et al. (2010)	Trends in European background air reflect reductions in primary emissions of PCBs and PBDEs	10.1021/es101009x	x	x	x	Immission	66	Europa	#
271	Sezmis, Birch & Covaci (2014)	Relationships between dibenzo-p-dioxins (PCDDs), dibenzofurans (PCDFs) and dioxin-like biphenyls (dl-PCBs) congener concentrations in aquatic organisms from Sydney Estuary, Australia and physiology, spatial, seasonality, trophodynamic and life history traits	10.1016/j.scitotenv.2014.04.093	x	/	/	Biota	365	Australien	#
272	Shaw et al. (2014)	Polychlorinated biphenyls still pose significant health risks to northwest Atlantic harbor seals	10.1016/j.scitotenv.2014.05.011	x	x	x	Biota	154	Ozean	#
273	Shen et al. (2012)	Polychlorinated dibenzo-p-dioxins/furans (PCDD/Fs), polychlorinated biphenyls (PCBs), and polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) in breast milk from Zhejiang, China	10.1016/j.envint.2011.04.004	x	x	x	Humanprobe	74	Asien	#
274	Shi et al. (2013)	Polybrominated diphenyl ethers and polychlorinated biphenyls in road dust from Suzhou, Wuxi and Nantong	<a href="https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/24364326/">https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/24364326/</a>	x	/	/	Deposition	58	Asien	#
275	Skrbić & Durisić-Mladenović (2007)	Distribution of chlorinated organic pollutants in a wide variety of soils from Europe and Asia: a multivariate statistical approach	10.1007/s00244-006-0137-9	x	x	/	Boden	49	Global	#
276	Söderström et al. (2005)	Airborne PCB as a contamination risk on freeze-drying of sediment	10.1016/j.chemosphere.2004.07.042	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
277	Sørmo et al. (2003)	Polychlorinated biphenyls and organochlorine pesticides in Baltic and Atlantic gray seal ( <i>Halichoerus grypus</i> ) pups	10.1897/02-556	x	x	x	Biota	42	Ozean	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
278	Sprovieri et al. (2007)	Heavy metals, polycyclic aromatic hydrocarbons and polychlorinated biphenyls in surface sediments of the Naples harbour (southern Italy)	10.1016/j.chemosphere.2006.10.055	x	/	/	Sediment	189	Europa	#
279	Steinlin et al. (2014)	Polychlorinated biphenyls in glaciers. 2. Model results of deposition and incorporation processes	10.1021/es501793h	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
280	Stemmler & Lammel (2012)	Long-term trends of continental-scale PCB patterns studied using a global atmosphere-ocean general circulation model	10.1007/s11356-012-0943-8	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
281	Straub et al. (2007)	Trophic transfer of polychlorinated biphenyls in great blue heron ( <i>Ardea herodias</i> ) at Crab Orchard National Wildlife Refuge, Illinois, United States	10.1007/s00244-006-0200-6	x	x	/	Biota	135	Nordamerika	#
282	Sun et al. (2009)	Modeling PCB mass transfer and bioaccumulation in a freshwater oligochaete before and after amendment of sediment with activated carbon	10.1021/es801901q	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
283	Takahashi et al. (2020)	Characterization of mono- to deca-chlorinated biphenyls in a well-preserved sediment core from Beppu Bay, Southwestern Japan: Historical profiles, emission sources, and inventory	10.1016/j.scitotenv.2020.140767	x	x	x	Sediment	18	Asien	#
284	Tanabe et al. (2003)	Temporal trends of persistent organochlorine contamination in Russia: a case study of Baikal and Caspian Seal	10.1007/s00244-002-2092-4	x	x	x	Biota	69	Ozean	#
285	Thustos et al. (2012)	The dioxin contamination incident in Ireland, 2008: analytical results and congener patterns	10.1080/19440049.2011.615030	x	x	x	Lebensmittel	427	Europa	#
286	Tolley & Blais (2007)	Polychlorinated dibenzo-p-dioxin, polychlorinated dibenzofuran, and polychlorinated biphenyl accumulation in white-tailed deer ( <i>Odocoileus virginianus</i> ) near a magnesium smelter in Quebec, Canada	10.1897/07-107.1	x	/	/	Biota	76	Nordamerika	#
287	Traglia et al. (2017)	Independent Maternal and Fetal Genetic Effects on Midgestational Circulating Levels of Environmental Pollutants	10.1534/g3.117.039784	x	/	/	Humanprobe	/	Nordamerika	#
288	Traina et al. (2021)	Organochlorines and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons as fingerprint of exposure pathways from marine sediments to biota	10.1016/j.marpolbul.2021.112676	x	x	x	Biota	87	Ozean	#
							Sediment	4		

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
289	Tsuji et al. (2006)	Abandoned Mid-Canada Radar Line sites in the Western James region of Northern Ontario, Canada: a source of organochlorines for First Nations people?	10.1016/j.scitotenv.2006.07.033	x	x	x	Humanprobe	249	Nordamerika	#
290	Turci et al. (2006)	Assessment of dietary intake of polychlorinated biphenyls from a total diet study conducted in Pavia, Northern Italy	10.1080/02652030600699296	x	x	x	Lebensmittel	248	Europa	O
291	Ubl, Scheringer & Hungerbühler (2017)	Relationships between Atmospheric Transport Regimes and PCB Concentrations in the Air at Zeppelin, Spitsbergen	10.1021/acs.est.7b02571	x	/	/	Immission	624	Europa	O
292	Uraki et al. (2004)	Determining sources of atmospheric polychlorinated biphenyls based on their fracturing concentrations and congener compositions	10.1081/LESA-200033689	x	/	/	Immission	23	Asien	#
293	van den Steen et al. (2009a)	Brominated flame retardants and organochlorines in the European environment using great tit eggs as a biomonitoring tool	10.1016/j.envint.2008.08.002	x	/	/	Biota	145	Europa	#
294	van den Steen et al. (2009b)	Maternal transfer of organochlorines and brominated flame retardants in blue tits ( <i>Cyanistes caeruleus</i> )	10.1016/j.envint.2008.08.003	x	/	/	Biota	127	Europa	#
295	van Larebeke et al. (2001)	The Belgian PCB and dioxin incident of January-June 1999: exposure data and potential impact on health	10.1289/ehp.01109265	x	x	x	Lebensmittel	20290	Europa	#
296	van Overmeire et al. (2009)	PCDD/Fs and dioxin-like PCBs in home-produced eggs from Belgium: levels, contamination sources and health risks	10.1016/j.scitotenv.2008.11.058	x	/	/	Abfall	31	Europa	#
							Biota	20		
							Boden	20		
297	Verreault et al. (2005)	Flame retardants and methoxylated and hydroxylated polybrominated diphenyl ethers in two Norwegian Arctic top predators: glaucous gulls and polar bears	10.1021/es050738m	x	/	/	Biota	42	Europa	#
298	Verreault et al. (2009)	Dietary, age and trans-generational effects on the fate of organohalogen contaminants in captive sledge dogs in Greenland	10.1016/j.envint.2008.07.022	x	x	x	Biota	32	Europa	#
299	Viganò, Galassi & Arillo (1994)	Bioconcentration of polychlorinated biphenyls (PCBs) in rainbow trout caged in the River Po	10.1006/eesa.1994.1053	x	/	/	Biota	/	Europa	#



Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
300	Vilanova, Fernandez & Grimalt (2001)	Polychlorinated biphenyl partitioning in the waters of a remote mountain lake	10.1016/s0048-9697(01)00725-2	x	x	x	Wasser	13	Europa	#
301	Vives et al. (2007)	Occurrence of polychlorinated dibenzo-p-dioxins and dibenzofurans (PCDD/Fs), polychlorinated biphenyls (PCBs) and polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) in Lake Maggiore (Italy and Switzerland)	10.1039/b700919d	x	x	x	Sediment	48	Europa	#
302	von Waldow et al. (2010)	Remoteness from emission sources explains the fractionation pattern of polychlorinated biphenyls in the northern hemisphere	10.1021/es101291q	x	x	x	Immission	/	Ozean	#
303	Vrecl et al. (2004)	Excretion pattern of co-planar and non-planar tetra- and hexa-chlorobiphenyls in ovine milk and faeces	10.1016/j.taap.2004.08.017	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
304	Walters et al. (2008)	Influence of trophic position and spatial location on polychlorinated biphenyl (PCB) bioaccumulation in a stream food web	10.1021/es0715849	x	x	x	Biota	435	Nordamerika	#
							Sediment	20		
305	Wang & He (2013)	Phylogenetically distinct bacteria involve extensive dechlorination of aroclor 1260 in sediment-free cultures	10.1371/journal.pone.0059178	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
306	Wang et al. (2009)	Altitude dependence of polychlorinated biphenyls (PCBs) and polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) in surface soil from Tibetan Plateau, China	10.1016/j.chemosphere.2009.06.045	x	x	x	Boden	15	Asien	#
307	Wang et al. (2011)	Characterization and risk assessment of polychlorinated biphenyls in soils and vegetations near an electronic waste recycling site, South China	10.1016/j.chemosphere.2011.06.096	x	x	x	Biota	20	Asien	#
							Boden	40		
308	Wania & Su (2004)	Quantifying the global fractionation of polychlorinated biphenyls	10.1579/0044-7447-33.3.161	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
309	Wiklund et al. (2003)	Dynamics of lipids and polychlorinated biphenyls in a Baltic amphipod ( <i>Monoporeia affinis</i> ): a field study	10.1897/02-454	x	x	x	Biota	/	Ozean	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
310	Winkler (2015)	High levels of dioxin-like PCBs found in organic-farmed eggs caused by coating materials of asbestos-cement fiber plates: A case study	10.1016/j.envint.2015.03.005	x	x	x	Biota	40	Europa	#
311	Wirth et al. (2014)	Distribution and sources of PCBs (Aroclor 1268) in the Sapelo Island National estuarine research reserve	10.1007/s10661-014-4039-4	x	x	x	Biota	64	Nordamerika	#
							Sediment	30		
312	Witczak et al. (2021)	Endocrine-disrupting organochlorine xenobiotics in fish products imported from Asia-an assessment of human health risk	10.1007/s10661-021-08914-5	x	x	x	Lebensmittel	79	Asien	#
313	Wolkers et al. (2004)	Congener-specific accumulation and food chain transfer of polybrominated diphenyl ethers in two arctic food chains	10.1021/es030448a	/	/	/	Biota	32	Ozean	#
314	Wu, Sowers & May (2000)	Establishment of a polychlorinated biphenyl-dechlorinating microbial consortium, specific for doubly flanked chlorines, in a defined, sediment-free medium	10.1128/AEM.66.1.49-53.2000	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
315	Xu et al. (2019)	Congener-specific composition of polychlorinated biphenyls (PCBs) in soil-air partitioning and the associated health risks	10.1016/j.scitotenv.2019.05.334	x	x	x	Boden	110	Asien	#
							Immission	84		
316	Yamamoto et al. (2018)	PCDD/PCDF formation in the chlor-alkali process-laboratory study and comparison with patterns from contaminated sites	10.1007/s11356-017-0777-5	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
317	Yao et al. (2002)	Identification of polychlorinated dibenzo-p-dioxin, dibenzofuran, and coplanar polychlorinated biphenyl sources in Tokyo Bay, Japan	10.1002/etc.5620210514	x	/	/	Sediment	13	Asien	#
318	Yasuhara, Katami & Shibamoto (2014)	Evidence of PCDD/Fs and PCBs contamination in trees grown in forests far from their production and contamination-free areas	10.1007/s00128-014-1322-6	x	/	/	Biota	2	Asien	#
319	Ye et al. (1992)	Anaerobic dechlorination of polychlorobiphenyls (Aroclor 1242) by pasteurized and ethanol-treated microorganisms from sediments	10.1128/aem.58.4.1110-1114.1992	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Komparti- ment	Daten	Region über- geordnet	Verfügbar?
320	Yordy et al. (2010)	Life history as a source of variation for persistent organic pollutant (POP) patterns in a community of common bottlenose dolphins ( <i>Tursiops truncatus</i> ) resident to Sarasota Bay, FL	10.1016/j.scitotenv.2010.01.032	x	x	x	Biota	124	Ozean	#
321	Zajicek et al. (2000)	Comparison of an enzyme-linked immunosorbent assay (ELISA) to gas chromatography (GC)--measurement of polychlorinated biphenyls (PCBs) in selected US fish extracts	10.1016/S0045-6535(99)00310-0	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
322	Zeng et al. (2013)	Using compound-specific stable carbon isotope analysis to trace metabolism and trophic transfer of PCBs and PBDEs in fish from an e-waste site, South China	10.1021/es304558y	x	x	x	Biota	23	Asien	#
323	Zhao et al. (2006)	Evidence for the transfer of polychlorinated biphenyls, polychlorinated dibenzo-p-dioxins, and polychlorinated dibenzofurans from soil into biota	10.1016/j.scitotenv.2006.02.027	x	x	x	Biota	6	Asien	#
							Boden	1		
324	Zhao et al. (2021)	Organochlorine compounds pose health risks to the Qinling Giant Panda ( <i>Ailuropoda melanoleuca qinlingensis</i> )	10.1016/j.envpol.2021.116427	x	x	x	Abfall	18	Asien	#
							Biota	42		
325	Zheng et al. (2014)	Does an analysis of polychlorinated biphenyl (PCB) distribution in mountain soils across China reveal a latitudinal fractionation paradox?	10.1016/j.envpol.2014.08.021	x	x	x	Boden	159	Asien	O
326	Zheng et al. (2015)	Elevated mobility of persistent organic pollutants in the soil of a tropical rainforest	10.1021/es5058677	x	x	x	Boden	12	Asien	#
327	Zhou et al. (2016)	A novel pollution pattern: Highly chlorinated biphenyls retained in Black-crowned night heron ( <i>Nycticorax nycticorax</i> ) and Whiskered tern ( <i>Chlidonias hybrida</i> ) from the Yangtze River Delta	10.1016/j.chemosphere.2015.11.112	x	x	x	Biota	20	Asien	#

**Tabelle 10: Ergebnisse der gezielten Recherche zur themenbezogenen Erweiterung der PDB**

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Kompartiment	Daten	Region übergeordnet	Verfügbar?
1	Bandow et al. (2020)	Polychlorinated biphenyls (PCB) and organochlorine pesticides (OCP) in bloodplasma– ResultsoftheGermanenvironmentalsurveyforchildrenand adolescents 2014–2017 (GerES V)	10.1016/j.ijheh.2019.113426	x	x	x	Humanprobe	1135	Europa	#
2	Doucette & Andren (1988)	Aqueous Solubility of Selected Biphenyl, Furan, and Dioxin Congeners	10.1016/0045-6535(88)90217-2	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
3	Felipe-Sotelo et al. (2008)	Assessment of the environmental and physiological processes determining the accumulation of organochlorine compounds in European mountain lake fish through multivariate analysis (PCA and PLS)	10.1016/j.scitotenv.2008.06.020	x	/	/	Biota	191	Europa	#
4	Grimalt et al. (2001)	Selective Trapping of Organochlorine Compounds in Mountain Lakes of Temperate Areas	10.1021/es000278r	x	x	x	Sediment	8	Europa	#
5	ICES DOME Dataset Biota [1977-2020]	DOME Dataset Biota	<a href="https://dome.ices.dk/views/ContaminantsBiota.aspx">https://dome.ices.dk/views/ContaminantsBiota.aspx</a>	x	/	/	Biota	32525	Ozean	O
6	ICES DOME Dataset Sediments [1977-2020]	DOME Dataset Sediments	<a href="https://dome.ices.dk/views/ContaminantsSediment.aspx">https://dome.ices.dk/views/ContaminantsSediment.aspx</a>	x	/	/	Sediment	8814	Ozean	O
7	ICES DOME Dataset Water [1977-2020]	DOME Dataset Water	<a href="https://dome.ices.dk/views/ContaminantsSeawater.aspx">https://dome.ices.dk/views/ContaminantsSeawater.aspx</a>	x	/	/	Wasser	1218	Ozean	O
8	Prince et al. (2020)	A Global, Cross-System Meta-Analysis of Polychlorinated Biphenyl Biomagnification	10.1021/acs.est.9b07693	x	x	x	Biota	178	Global	O

**Tabelle 11: Ergebnisse der Auswertung von Publikationen von Landesbehörden (bereitgestellt durch das UBA)**

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Kompartiment	Daten	Region übergeordnet	Verfügbar?
1	Bänsch-Baltruschat et al. (2019)	POP-Implement: Beiträge zur Umsetzung der Stockholm-Ziele (Beschränkung und Eliminierung) für relevante Anwendungen bestimmter POP – Umsetzung des Stockholmer Übereinkommens in Deutschland	/	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
2	BUKEA HH (2019)	AAB Neusurenland – Erkundung und technische Machbarkeitsstudie zur Sanierung – Teilbericht 1 - technische Erkundung	<a href="https://www.hamburg.de/contentblob/13688898/65ea416c5511d64bd0ae1f3f88ec1cf6/d-bericht-teil-1-erkundung-anlagen.pdf">https://www.hamburg.de/contentblob/13688898/65ea416c5511d64bd0ae1f3f88ec1cf6/d-bericht-teil-1-erkundung-anlagen.pdf</a>	x	x	x	Boden	1018	Europa	0
3	ELWAS-WEB Datenbank (2022)	ELWAS-WEB Datenbank	<a href="https://www.elwasweb.nrw.de/elwas-web/index.xhtml">https://www.elwasweb.nrw.de/elwas-web/index.xhtml</a>	x	x	/	Wasser	2131	Europa	#
4	Fleig, M. et al. (2006)	Ermittlung von HCB-Quellen am Oberrhein	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/28550-Ermittlung-von-HCB-Quellen-am-Oberrhein.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/28550-Ermittlung-von-HCB-Quellen-am-Oberrhein.pdf</a>	x	x	x	Sediment	66	Europa	0
5	GAA Hildesheim (2010)	Messungen auf polychlorierte Dioxine und Furane sowie polychlorierte Biphenyle in der Außenluft und in der Deposition in Niedersachsen	<a href="https://www.umwelt.niedersachsen.de/download/51604/Messungen-auf-polychlorierte-Dioxine-und-Furane-sowie-polychlorierte-Biphenyle-in-der-Aussenluft-und-in-der-Deposition-in-Niedersachsen-Abschlussbericht-Stand-15.07.2010.pdf">https://www.umwelt.niedersachsen.de/download/51604/Messungen-auf-polychlorierte-Dioxine-und-Furane-sowie-polychlorierte-Biphenyle-in-der-Aussenluft-und-in-der-Deposition-in-Niedersachsen-Abschlussbericht-Stand-15.07.2010.pdf</a>	x	x	x	Deposition	42	Europa	0
							Immission	82		
6	GAA Hildesheim (2020)	PCDD-, PCDF-, und dl- PCB Messungen in Oker und Harlingerode - Abschlußbericht	<a href="https://www.umwelt.niedersachsen.de/download/159804/Abschlussbericht_Oker-Harlingerode.pdf">https://www.umwelt.niedersachsen.de/download/159804/Abschlussbericht_Oker-Harlingerode.pdf</a>	x	x	x	Immission	12	Europa	0
7	Gaßmann, M.; Bücking, M; Kowalczyk, J.; Göckener, B.; Breuer, J. (2019)	Sorptions- und Transferverhalten von PFAA und ausgewählter Präkursoren im Wirkungspfad Boden-Pflanze für die Gefährdungsabschätzung	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/10057-Sorptions-und-Transferverhalten-von-PFAA-und-ausgew%C3%A4hlter-Pr%C3%A4kursoren-im-Wirkungspfad-Boden-Pflanze.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/10057-Sorptions-und-Transferverhalten-von-PFAA-und-ausgew%C3%A4hlter-Pr%C3%A4kursoren-im-Wirkungspfad-Boden-Pflanze.pdf</a>	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Kompartiment	Daten	Region übergeordnet	Verfügbar?
8	HLNUG (2010)	Perfluorierte Chemikalien (PFC) in Hessen Untersuchungsprogramm des HLUg	<a href="https://www.hlnug.de/fileadmin/dokumente/boden/pfc-bericht_web.pdf">https://www.hlnug.de/fileadmin/dokumente/boden/pfc-bericht_web.pdf</a>	x	x	x	Boden	5	Europa	0
9	HLNUG (2014)	Persistente organische Schadstoffe in landwirtschaftlich genutzten Böden Hessens	<a href="https://www.hlnug.de/fileadmin/dokumente/boden/Bodenschutz_-_Heft_11_web.pdf">https://www.hlnug.de/fileadmin/dokumente/boden/Bodenschutz_-_Heft_11_web.pdf</a>	x	x	/	Boden	96	Europa	0
10	IfHU HH (2013)	Umweltbericht Polychlorierte Biphenyle (PCB) in Hamburger Oberböden	<a href="https://www.hamburg.de/contentblob/4076632/aab84737cb58fb3593c4052e0f1d109/d/ata/pcb-boden-2013.pdf">https://www.hamburg.de/contentblob/4076632/aab84737cb58fb3593c4052e0f1d109/d/ata/pcb-boden-2013.pdf</a>	x	x	x	Boden	133	Europa	0
11	IFUA (2007)	Pilotuntersuchungen zu Vorkommen und Auswirkungen von perfluorierten Tensiden (PFT) in Abfällen, die der BioAbfV unterliegen – Abschlussbericht –	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/fileadmin/forschung/wasser/stoff/IFUA_Pilotuntersuchungen_zu_Vorkommen_und_Auswirkungen_PFT_Abschlussbericht.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/fileadmin/forschung/wasser/stoff/IFUA_Pilotuntersuchungen_zu_Vorkommen_und_Auswirkungen_PFT_Abschlussbericht.pdf</a>	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
12	Kuch et al. (2001)	Monitoring von bromierten Flammschutzmitteln in Fließgewässern, Abwässern und Klärschlämmen in Baden-Württemberg	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/18803-Monitoring_von_bromierten_Flammschutzmitteln_in_Flie%C3%9Fgew%C3%A4ssern_Abw%C3%A4ssern_und_Kl%C3%A4rschlamm_in_Baden-W.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/18803-Monitoring_von_bromierten_Flammschutzmitteln_in_Flie%C3%9Fgew%C3%A4ssern_Abw%C3%A4ssern_und_Kl%C3%A4rschlamm_in_Baden-W.pdf</a>	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
13	Kuch, B et al. (2007)	Untersuchung von Komposten und Gärsubstraten auf organische Schadstoffe in Baden-Württemberg	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/52471-Untersuchungen_von_Komposten_und_G%C3%A4rsubstraten_auf_organische_Schadstoffe_in_Baden-W%C3%BCrttemberg.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/52471-Untersuchungen_von_Komposten_und_G%C3%A4rsubstraten_auf_organische_Schadstoffe_in_Baden-W%C3%BCrttemberg.pdf</a>	x	x	/	Abfall	40	Europa	0
14	Landeslabor SH (2019)	Landeslabor Schleswig-Holstein Jahresbericht 2018	<a href="https://www.schleswig-holstein.de/DE/Fachinhalte/L/Lebensmittel/Downloads/Landeslabor_Jahresbericht_2018.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1">https://www.schleswig-holstein.de/DE/Fachinhalte/L/Lebensmittel/Downloads/Landeslabor_Jahresbericht_2018.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1</a>	x	x	/	/	/	Europa	#
15	LANU SH (2001)	Chemische Untersuchungen ausgewählter Seensedimente in Schleswig-Holstein	<a href="http://www.umweltdaten.lanesh.de/nuis/wafis/seen/chemie_sedimente.pdf">http://www.umweltdaten.lanesh.de/nuis/wafis/seen/chemie_sedimente.pdf</a>	x	x	x	Wasser	60	Europa	#
16	LANU SH (o. J.)	Schadstoffgehalte ausgewählter Fließgewässersedimente In Schleswig-Holstein	<a href="http://www.umweltdaten.lanesh.de/nuis/wafis/flies/schadstoffgehalte_fliessgewaesser_sedimente.pdf">http://www.umweltdaten.lanesh.de/nuis/wafis/flies/schadstoffgehalte_fliessgewaesser_sedimente.pdf</a>	x	/	/	Wasser	28	Europa	#



Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Kompartiment	Daten	Region übergeordnet	Verfügbar?
17	LANUV (2010)	Bericht über das Untersuchungsvorhaben „Dioxine und PCB in Böden, Pflanzen, Futter- und Lebensmitteln in Überschwemmungsgebieten in NRW 2009“	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuv/boden/pdf/berichtpcbueberschwemmungsgebiet2009.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuv/boden/pdf/berichtpcbueberschwemmungsgebiet2009.pdf</a>	x	x	/	Biota	/	Europa	#
							Lebensmittel	/		
							Sediment	/		
18	LANUV (2011)	Verbreitung von PFT in der Umwelt, Ursachen – Untersuchungsstrategie – Ergebnisse – Maßnahmen, LANUV-Fachbericht 34	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuvpubl/3_fachberichte/30034.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuvpubl/3_fachberichte/30034.pdf</a>	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
19	LANUV (2012a)	Dioxine und dl-PCB in Fleisch von Rindern aus extensiver Haltung und in Böden der Weideflächen im Rahmen des Bundesweiten Überwachungsplans BÜp 2011 (1.9)	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuv/boden/pdf/berichtpcbodenrinder2011.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuv/boden/pdf/berichtpcbodenrinder2011.pdf</a>	x	x	/	Lebensmittel	30	Europa	#
20	LANUV (2012b)	Schwerpunktinspektionsprogramm PCB, Inspektion von Anlagen, in denen PCB-haltiger Abfall anfällt oder entsorgt wird, LANUV-Fachbericht 39	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuvpubl/3_fachberichte/30039.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuvpubl/3_fachberichte/30039.pdf</a>	x	x	/	Deposition	151	Europa	#
21	LANUV (2015)	Immissionsbedingte Hintergrundbelastung von Pflanzen in NRW Schwermetalle und organische Verbindungen, LANUV-Fachbericht 61	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuvpubl/3_fachberichte/30061.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuvpubl/3_fachberichte/30061.pdf</a>	x	x	/	Lebensmittel	/	Europa	#
22	LANUV (2017a)	Untersuchungen zur Dioxin- und PCB-Belastung im Duisburger Süden	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuv/umwelt/schadensfaelle/andere/2017/08_DuSued_Bericht_2015_2017-02-01.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuv/umwelt/schadensfaelle/andere/2017/08_DuSued_Bericht_2015_2017-02-01.pdf</a>	x	x	/	Lebensmittel	/	Europa	#
23	LANUV (2017b)	PFC in Boden und Grundwasser, Ergebnisbericht des Workshops am 25.09.2017	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuv/altlast/20171214_Ergebnisbericht_PFC_in_Boden_und_Grundwasser.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuv/altlast/20171214_Ergebnisbericht_PFC_in_Boden_und_Grundwasser.pdf</a>	x	x	/	Lebensmittel	/	Europa	#
24	LANUV (2018)	Schwerpunktbericht Polychlorierte Biphenyle (PCB), Überwachung und Maßnahmen in Nordrhein-Westfalen, LANUV-Fachbericht 92	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuvpubl/3_fachberichte/LANUV-Fachbericht_92.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/filadmin/lanuvpubl/3_fachberichte/LANUV-Fachbericht_92.pdf</a>	x	x	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Kompartiment	Daten	Region übergeordnet	Verfügbar?
25	LANUV (2019)	Untersuchungen zum Dioxin- und PCB-Transfer im Pfad Boden-Huhn-Ei bei Hühnern aus Freilandhaltung; LANUV-Fachbericht 89	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/fileadmin/lanuvpubl/3_fachberichte/fabe89.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/fileadmin/lanuvpubl/3_fachberichte/fabe89.pdf</a>	x	x	/	Lebensmittel	/	Europa	#
							Sediment	/		
26	LANUV (2020)	PCB-Belastung im Umfeld einer Schredderanlage in Essen-Kray	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/fileadmin/lanuv/umwelt/schadensfaelle/andere/2020/03_Essen-Kray_Bericht2018_19-06-18.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/fileadmin/lanuv/umwelt/schadensfaelle/andere/2020/03_Essen-Kray_Bericht2018_19-06-18.pdf</a>	x	x	/	Lebensmittel	/	Europa	#
27	LANUV (2020)	Kamp Lintfort Deponie Eyler Berg	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/untersuchungsprogramme/kamp-lintfort">https://www.lanuv.nrw.de/untersuchungsprogramme/kamp-lintfort</a>	x	x	/	Immission	/	Europa	#
28	LANUV (2020)	PCB im Dortmunder Hafengebiet	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/untersuchungsprogramme/dortmund-hafen">https://www.lanuv.nrw.de/untersuchungsprogramme/dortmund-hafen</a>	x	x	/	Immission	/	Europa	#
29	LANUV NRW (2020)	Jahreskenngößen; Dioxine, Furane und polychlorierte Biphenyle (1999-2020)	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/umwelt/luft/immissionen/berichte-und-trends/jahreskenngroessen-und-jahresberichte/">https://www.lanuv.nrw.de/umwelt/luft/immissionen/berichte-und-trends/jahreskenngroessen-und-jahresberichte/</a>	x	x	x	Immission	116	Europa	#
30	LANUV NRW (2021)	Aussenluft-Trend bis 2020-PCDD PCDF PCB	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/fileadmin/lanuv/luft/immissionen/staub/pdf/Aussenluft-Trend_bis_2020-PCDD_PCDF_PCB.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/fileadmin/lanuv/luft/immissionen/staub/pdf/Aussenluft-Trend_bis_2020-PCDD_PCDF_PCB.pdf</a>	x	x	/	Immission	118	Europa	#
31	LANUV NRW (2021)	Deposition-Trend bis 2020-PCDD PCDF PCB	<a href="https://www.lanuv.nrw.de/fileadmin/lanuv/luft/immissionen/ber_trend/Deposition-Trend_bis_2020-PCDD_PCDF_PCB.pdf">https://www.lanuv.nrw.de/fileadmin/lanuv/luft/immissionen/ber_trend/Deposition-Trend_bis_2020-PCDD_PCDF_PCB.pdf</a>	x	x	/	Deposition	217	Europa	#
32	LAU ST (2013)	Untersuchungen zur Emission von Luftschadstoffen aus Kleinf Feuerungsanlagen bei der Verbrennung von Getreide, Stroh und ähnlichen pflanzlichen Stoffen	<a href="https://lau.sachsen-anhalt.de/fileadmin/Bibliothek/Politik_und_Verwaltung/MLU/LAU/Wir_ueber_uns/Publikationen/Berichte_des_LAU/Daten/Berichte_LAU_2013_1.pdf">https://lau.sachsen-anhalt.de/fileadmin/Bibliothek/Politik_und_Verwaltung/MLU/LAU/Wir_ueber_uns/Publikationen/Berichte_des_LAU/Daten/Berichte_LAU_2013_1.pdf</a>	x	x	/	Immission	17	Europa	O

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Kompartiment	Daten	Region übergeordnet	Verfügbar?
33	LAU ST (2017)	Hintergrundwerte organischer Schadstoffe in Oberböden des ländlichen Raumes von Sachsen-Anhalt – überarbeitete Fassung	<a href="https://lau.sachsen-anhalt.de/fileadmin/Bibliothek/Politik_und_Verwaltung/MLU/LAU/Wir_ueber_uns/Publikationen/Berichte_des_LAU/Daten/Berichte_LAU_2016_20170508_HGW.pdf">https://lau.sachsen-anhalt.de/fileadmin/Bibliothek/Politik_und_Verwaltung/MLU/LAU/Wir_ueber_uns/Publikationen/Berichte_des_LAU/Daten/Berichte_LAU_2016_20170508_HGW.pdf</a>	x	x	x	Boden	662	Europa	#
34	LAVES NI (2020)	Ergebnisbericht - Monitoring auf PFAS in Niedersachsen und Bremen	<a href="https://www.laves.niedersachsen.de/download/154493">https://www.laves.niedersachsen.de/download/154493</a>	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
35	LAVES NI (o.J.)	Nicht dioxinähnliche polychlorierte Biphenyle (ndl-PCB) in Hühnereiern aus niedersächsischer Erzeugung	<a href="https://www.niedersachsen.de/download/85782">https://www.niedersachsen.de/download/85782</a>	x	x	/	Lebensmittel	123	Europa	#
36	LAVES NI (o.J.)	Dioxine und PCB in Ölsaaten und Pseudogetreiden	<a href="https://www.laves.niedersachsen.de/startseite/lebensmittel/lebensmittelgruppen/getreide/getreideerzeugnisse/dioxine-und-pcb-in-olsaaten-und-pseudogetreiden-205402.html">https://www.laves.niedersachsen.de/startseite/lebensmittel/lebensmittelgruppen/getreide/getreideerzeugnisse/dioxine-und-pcb-in-olsaaten-und-pseudogetreiden-205402.html</a>	x	/	/	Lebensmittel	110	Europa	#
37	LAVES NI (2020)	Abschlussbericht; Schadstoffmonitoring in Flussfischen aus niedersächsischen Flussabschnitten (Teil I: Schadstoffe)	<a href="https://www.niedersachsen.de/download/155564">https://www.niedersachsen.de/download/155564</a>	x	/	/	Biota	65	Europa	#
38	LBEG Niedersachsen (2012)	Ergebnisse Niedersächsischer Untersuchungsprogramme zur Charakterisierung der Stoffgehalte von Dioxinen (PCDD/F) und dioxinähnlichen (dl-)PCB-Belastungen in Sedimenten, Schwebstoffen, Böden und der Luft	<a href="https://www.lbeg.niedersachsen.de/download/71643/GeoBerichte_25.pdf">https://www.lbeg.niedersachsen.de/download/71643/GeoBerichte_25.pdf</a>	x	x	x	Boden	140	Europa	#
							Deposition	42		
							Immission	70		
							Sediment	71		
							Wasser	5		
39	LfU Bayern (2010)	Bestimmung persistenter, bioakkumulieren Perfluoralkylverbindungen in verschiedenen Umweltmatrices - Bioakkumulierende Perfluoralkylverbindungen	<a href="https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?artnr=lfu_all_00085">https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?artnr=lfu_all_00085</a>	x	x	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Kompartiment	Daten	Region übergeordnet	Verfügbar?
40	LfU Bayern (2014)	Schadstoffmonitoring mit Fischen und Muscheln: Methoden und Ergebnisse	<a href="https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00121">https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00121</a>	x	x	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
41	LfU Bayern (2016a)	Monitoring neuartiger Schadstoffe im Bayerischen Alpenraum (EMPOP)	<a href="https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00126">https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00126</a>	x	x	x	Deposition	29	Europa	#
							Immission	28		
42	LfU Bayern (2016b)	Untersuchungen zur Akkumulation verschiedener persistenter Schadstoffe in terrestrischen Wildtieren	<a href="https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00136">https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00136</a>	x	x	x	Biota	146	Europa	#
43	LfU Bayern (2019a)	Abschlussbericht, Biomonitoring persistenter Schadstoffe, Immissionsökologisches Monitoring persistenter organischer und anorganischer Schadstoffe im Hintergrund und bei quellenspezifischer Belastung	<a href="https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00159">https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00159</a>	x	x	/	Biota	/	Europa	#
							Deposition	/		
							Immission	/		
44	LfU Bayern (2019b)	Per- und polyfluorierte Chemikalien in Bayern - Untersuchungen 2006 - 2018	<a href="https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00153">https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00153</a>	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
45	LfU Bayern (2019c)	PureAlps 2016 -2020 - Monitoring von Schadstoffen in den Alpen	<a href="https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00142">https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00142</a>	x	x	/	Immission	/	Europa	#
46	LfU Bayern (2020)	PureAlps 2016-2020, Monitoring von persistenten organischen Schadstoffen und Quecksilber im Alpenraum (Immission, Deposition und Biota), Abschlussbericht	<a href="https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00166">https://www.lfu.bayern.de/publikationen/get_pdf.htm?art_nr=lfu_all_00166</a>	x	x	/	Immission	/	Europa	#
47	LfU Bayern (o.J.)	Dioxinähnliche PCB in der Umwelt - Quellen, Verbleib, Exposition und gesundheitliche Bewertung	<a href="https://www.bestellen.bayern.de/application/eshop_app000001?SID=586422031&amp;ACTION=SESSxSHOWPIC(BILDxKEY:%27lfu_all_00019%27,BILDxCLASS:%27Artikel%27,BILDxTYPE:%27PDF%27)">https://www.bestellen.bayern.de/application/eshop_app000001?SID=586422031&amp;ACTION=SESSxSHOWPIC(BILDxKEY:%27lfu_all_00019%27,BILDxCLASS:%27Artikel%27,BILDxTYPE:%27PDF%27)</a>	x	x	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Kompartiment	Daten	Region übergeordnet	Verfügbar?
48	LFU Rheinland-Pfalz (o.J.)	PCB-Trendmonitoring in Schwebstoffen von Rhein, Mosel und Saar	<a href="https://ifu.rlp.de/de/wasserwirtschaft/gewaesserschutz/gewaesserschutz/pcb-trendmonitoring-in-schwebstoffen-von-rhein-mosel-und-saar/">https://ifu.rlp.de/de/wasserwirtschaft/gewaesserschutz/gewaesserschutz/pcb-trendmonitoring-in-schwebstoffen-von-rhein-mosel-und-saar/</a>	x	x	x	Wasser	/	Europa	#
49	LfULG (2010)	Luftqualität in Riesa, Ergebnisse der Sondermessung 2008/2009	<a href="https://publikationen.sachsen.de/bdb/artikel/13850">https://publikationen.sachsen.de/bdb/artikel/13850</a>	x	/	/	Deposition	/	Europa	#
50	LfULG (2019)	Dioxine (PCDD/F und dl-PCB) im Wirkungspfad Boden – Grünland – Weiderind	<a href="https://publikationen.sachsen.de/bdb/artikel/32819/documents/49876">https://publikationen.sachsen.de/bdb/artikel/32819/documents/49876</a>	x	x	/	Boden	7	Europa	#
							Lebensmittel	11		
51	LfULG (2020a)	Erfassung der Schadstoffkontamination von Fischen, Jahresbericht 2020	<a href="https://publikationen.sachsen.de/bdb/artikel/36085/documents/55855">https://publikationen.sachsen.de/bdb/artikel/36085/documents/55855</a>	x	x	/	Biota	129	Europa	#
52	LfULG (2020b)	Zusatzbelastung aus Holzheizungen Schriftenreihe, Heft 12/2020	<a href="https://publikationen.sachsen.de/bdb/artikel/36106/documents/55917">https://publikationen.sachsen.de/bdb/artikel/36106/documents/55917</a>	x	/	/	Deposition	12	Europa	#
53	LfULG (2020c)	Anlagenband Schriftenreihe des LfULG, Heft 12/2020	<a href="https://publikationen.sachsen.de/bdb/artikel/36106/documents/55916">https://publikationen.sachsen.de/bdb/artikel/36106/documents/55916</a>	x	x	/	Deposition	12	Europa	#
54	LGA SH (2006)	Schadstoffbelastung der Nahrung: Studie zur Gesamtaufnahme von polychlorierten Biphenylen (PCB) bei jungen Frauen	<a href="https://www.schleswig-holstein.de/DE/Fachinhalte/G/gesundheitschutz_umweltbezogen/Hbm/Downloads/studie_AufnahmePCBFrauen_2006.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1">https://www.schleswig-holstein.de/DE/Fachinhalte/G/gesundheitschutz_umweltbezogen/Hbm/Downloads/studie_AufnahmePCBFrauen_2006.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1</a>	x	x	x	Lebensmittel	55	Europa	#
55	LGA SH (o. J.)	PCB in öffentlichen Gebäuden, Bericht über das landesweite Untersuchungsprogramm zum Vorkommen der Schadstoffe polychlorierte Biphenyle (PCB) in öffentlichen Gebäuden in Schleswig-Holstein	<a href="https://www.schleswig-holstein.de/DE/Fachinhalte/G/gesundheitschutz_umweltbezogen/Luft/Downloads/studie_PcbOeffentlGebaeude.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1">https://www.schleswig-holstein.de/DE/Fachinhalte/G/gesundheitschutz_umweltbezogen/Luft/Downloads/studie_PcbOeffentlGebaeude.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1</a>	x	x	x	Immission	348	Europa	#
56	LLUR SH (2011a)	Stoffgehalte im Boden des Großraums Brunsbüttel	<a href="https://www.schleswig-holstein.de/DE/Fachinhalte/B/boden/Downloads/Bericht_Stoffgehalte.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1">https://www.schleswig-holstein.de/DE/Fachinhalte/B/boden/Downloads/Bericht_Stoffgehalte.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1</a>	x	x	/	Boden	76	Europa	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Kompartiment	Daten	Region übergeordnet	Verfügbar?
57	LLUR SH (2011b)	Hintergrundwerte stofflich gering beeinflusster Böden Schleswig-Holsteins	<a href="https://www.schleswig-holstein.de/DE/Fachinhalte/B/boden/Downloads/Hintergrundwerte.html">https://www.schleswig-holstein.de/DE/Fachinhalte/B/boden/Downloads/Hintergrundwerte.html</a>	x	x	/	Boden	630	Europa	#
58	LUA Saarland (2017a)	Bericht der AG „PCB-Monitoring“ nach Beendigung des Sondermessprogramms 2016-2017, Anhang - Analyseergebnisse	<a href="https://www.saarland.de/SharedDocs/Downloads/DE/muv/wasser/grubenwasser/dl_anlagenenergieergebnisseoekotoxikalanalytik_muv.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=4">https://www.saarland.de/SharedDocs/Downloads/DE/muv/wasser/grubenwasser/dl_anlagenenergieergebnisseoekotoxikalanalytik_muv.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=4</a>	x	x	x	Wasser	53	Europa	#
59	LUA Saarland (2017b)	Bericht der AG „PCB-Monitoring“, Stand Dez. 2016	<a href="https://www.saarland.de/SharedDocs/Downloads/DE/muv/wasser/grubenwasser/dl_zwischenbericht2016pcbmonitoring_muv.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1">https://www.saarland.de/SharedDocs/Downloads/DE/muv/wasser/grubenwasser/dl_zwischenbericht2016pcbmonitoring_muv.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1</a>	x	x	x	Biota	/	Europa	#
							Wasser	/		
60	LUA Saarland (2018a)	Bericht der AG „PCB-Monitoring“ nach Beendigung des Sondermessprogramms 2016-2017, Schwebstoffuntersuchungen an der Rossel bei Großrosseln (Landesgrenze) und Geislautern	<a href="https://www.saarland.de/SharedDocs/Downloads/DE/muv/wasser/grubenwasser/dl_pcbuntersuchunggrossel_muv.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1">https://www.saarland.de/SharedDocs/Downloads/DE/muv/wasser/grubenwasser/dl_pcbuntersuchunggrossel_muv.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1</a>	x	x	x	Wasser	33	Europa	#
61	LUA Saarland (2018b)	Bericht der AG „PCB-Monitoring“, nach Beendigung des Sondermessprogramms 2016-2017, Ergebnisse der chemischen und ökotoxikologischen Analytik von Grubenwässern und von Grubenwasser beaufschlagten kleineren Bächen rechts der Saar	<a href="https://www.saarland.de/SharedDocs/Downloads/DE/muv/wasser/grubenwasser/dl_ergebnissechemoekotoxikalanalytik_muv.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=4">https://www.saarland.de/SharedDocs/Downloads/DE/muv/wasser/grubenwasser/dl_ergebnissechemoekotoxikalanalytik_muv.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=4</a>	x	x	x	Wasser	84	Europa	#
62	LUA Saarland (2018c)	Bericht der AG „PCB-Monitoring“, Stand April 2018	<a href="https://www.saarland.de/SharedDocs/Downloads/DE/muv/wasser/grubenwasser/dl_berichtpcbmonitoring2018_muv.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1">https://www.saarland.de/SharedDocs/Downloads/DE/muv/wasser/grubenwasser/dl_berichtpcbmonitoring2018_muv.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1</a>	x	x	x	Wasser	43	Europa	#
63	LUA Saarland (2020)	Erstellung eines PCB-Verdachtsflächenkatasters für das Saarland	<a href="https://www.saarland.de/SharedDocs/Downloads/DE/muv/bodenundaltlasten/pcbkataster/dl_einleitung_muv.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1">https://www.saarland.de/SharedDocs/Downloads/DE/muv/bodenundaltlasten/pcbkataster/dl_einleitung_muv.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1</a>	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/



Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Kompartiment	Daten	Region übergeordnet	Verfügbar?
64	LUBW (1994)	Dioxine in Böden Baden-Württembergs	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/61371-Dioxine_in_B%C3%B6den_Baden-W%C3%BCrttembergs.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/61371-Dioxine_in_B%C3%B6den_Baden-W%C3%BCrttembergs.pdf</a>	/	/	/	Boden	/	Europa	#
65	LUBW (2001)	Dioxinfall Crailsheim-Maulach	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/22189-Dioxinfall_Crailsheim-Maulach.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/22189-Dioxinfall_Crailsheim-Maulach.pdf</a>	x	/	/	Sediment	/	Europa	#
66	LUBW (2003a)	Belastungen von Vögeleiern mit organischen Schadstoffen, Endbericht	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/48909-Zusammenfassende_Ergebnisdarstellung.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/48909-Zusammenfassende_Ergebnisdarstellung.pdf</a>	x	/	/	Biota	/	Europa	#
67	LUBW (2003b)	Contaminants in arable soils in Baden-Württemberg fertilised with sewage sludge - Consise Report	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/85192-Englische_Fassung_von_Schadstoffen_in_kl%C3%A4rschlammged%C3%BCngten_Ackerb%C3%B6den_Baden-W%C3%BCrttembergs_-_Kurzberi.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/85192-Englische_Fassung_von_Schadstoffen_in_kl%C3%A4rschlammged%C3%BCngten_Ackerb%C3%B6den_Baden-W%C3%BCrttembergs_-_Kurzberi.pdf</a>	x	/	/	Boden	/	Europa	#
68	LUBW (2003c)	Schadstoffe in klärschlammgedüngten Ackerböden Baden-Württembergs	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/72449-Schadstoffe_in_kl%C3%A4rschlammged%C3%BCngten_Ackerb%C3%B6den_Baden-W%C3%BCrttembergs.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/72449-Schadstoffe_in_kl%C3%A4rschlammged%C3%BCngten_Ackerb%C3%B6den_Baden-W%C3%BCrttembergs.pdf</a>	x	x	x	Sediment	/	Europa	#
69	LUBW (2012)	Warndienst Wanderfalke - Vögeleier spiegeln langlebige Umwelt-Gifte	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/74358-Warndienst_Wanderfalke_-_Vögeleier_spiegeln_langlebige_Umwelt-Gifte.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/74358-Warndienst_Wanderfalke_-_Vögeleier_spiegeln_langlebige_Umwelt-Gifte.pdf</a>	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
70	LUBW (2013)	Perfluoroverbindungen (PFC) in Eiern von Wanderfalken aus Baden-Württemberg	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/45198-PFC_in_Wanderfalkeneiern_2008_-_2011.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/45198-PFC_in_Wanderfalkeneiern_2008_-_2011.pdf</a>	/	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
71	LUBW (2015)	Stoffeinträge im Umfeld von Recyclinganlagen, Messungen von 2013 und 2014	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/56480-Stoffeintr%C3%A4ge_im_Umfeld_von_Recyclinganlagen.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/56480-Stoffeintr%C3%A4ge_im_Umfeld_von_Recyclinganlagen.pdf</a>	x	x	/	Deposition	15	Europa	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Kompartiment	Daten	Region übergeordnet	Verfügbar?
72	LUBW (2016)	dl-PCB in den Böden von Baden-Württemberg, Eine orientierende Stichprobenuntersuchung	<a href="https://pudi.lubw.de/detailseite/-/publication/12675-Eine_orientierende_Stichprobenuntersuchung.pdf">https://pudi.lubw.de/detailseite/-/publication/12675-Eine_orientierende_Stichprobenuntersuchung.pdf</a>	x	x	x	Boden	63	Europa	#
73	LUBW (2020)	Schadstoffanreicherung in Wanderfalkeneiern aus Baden-Württemberg	<a href="https://pudi.lubw.de/detailseite/-/publication/10114-Schadstoffe_in_Wanderfalkeneiern_2020.pdf">https://pudi.lubw.de/detailseite/-/publication/10114-Schadstoffe_in_Wanderfalkeneiern_2020.pdf</a>	x	/	/	Methodik / Modellierung	/	Methodik / Modellierung	/
74	LUNG MV (2014)	Schadstoffuntersuchungen in Oberflächengewässern Mecklenburg-Vorpommerns im Zeitraum 2007 – 2011, Teil II: Schadstoffe zur Bewertung des ökologischen Zustands gemäß Oberflächengewässerverordnung (OGewV)	<a href="https://www.lung.mv-regierung.de/dateien/schadstoffbericht_lung_teil_zwei.pdf">https://www.lung.mv-regierung.de/dateien/schadstoffbericht_lung_teil_zwei.pdf</a>	x	x	x	Wasser	154	Europa	#
75	LUNG MV (2018)	Auswertung der Befunde bestimmter Schadstoffe des WRRL Monitorings in Fischen aus Gewässern Mecklenburg-Vorpommerns, Monitoring 2013–2017. - Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie Mecklenburg-Vorpommern (LUNG M-V), Güstrow, Schriftenreihe des Landesamtes für Umwelt, Naturschutz und Geologie Mecklenburg-Vorpommern 2018, Schriftenreihe	<a href="https://www.lung.mv-regierung.de/dateien/bzg_wrrl-monitoring_schadstoffe_fische_2013-2017_lung_2018-4.pdf">https://www.lung.mv-regierung.de/dateien/bzg_wrrl-monitoring_schadstoffe_fische_2013-2017_lung_2018-4.pdf</a>	x	x	x	Biota	43	Europa	#
76	ML NI (2012)	dl-PCB-Geschehen in Niedersachsen	<a href="https://www.ml.niedersachsen.de/startseite/service/archivierte_beitrage/amstperiode_li ndemann/dl-pcb-geschehen-in-niedersachsen-105263.html">https://www.ml.niedersachsen.de/startseite/service/archivierte_beitrage/amstperiode_li ndemann/dl-pcb-geschehen-in-niedersachsen-105263.html</a>	x	/	/	Biota	/	Europa	#
77	MLUR (2007)	Bewertung der (organischen) Schadstoffbelastung kommunaler Klärschlämme in Schleswig-Holstein hinsichtlich der zukünftigen landwirtschaftlichen Klärschlammverwertung	<a href="https://www.schleswig-holstein.de/DE/Fachinhalte/A/abfallwirtschaft/Downloads/Bericht_Bewertung_Schadstoffbelastung.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1">https://www.schleswig-holstein.de/DE/Fachinhalte/A/abfallwirtschaft/Downloads/Bericht_Bewertung_Schadstoffbelastung.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1</a>	x	x	/	Sediment	81	Europa	#
78	MSGJFS (2013)	25 Jahre Muttermilch-Untersuchungsprogramm Schleswig-Holstein	<a href="https://www.schleswig-holstein.de/DE/Landesregierung/LASD/Aufgaben/Gesundheitsschutz/Download/data/Umweltbezogen/25JahreMuttermilchUntersuchungsprogrammSH.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1">https://www.schleswig-holstein.de/DE/Landesregierung/LASD/Aufgaben/Gesundheitsschutz/Download/data/Umweltbezogen/25JahreMuttermilchUntersuchungsprogrammSH.pdf?__blob=publicationFile&amp;v=1</a>	x	x	x	Humanprobe	642	Europa	#

Nr.	Quelle (kurz)	Titel	DOI / Link	PCB	PCB 6	PCB 7	Kompartiment	Daten	Region übergeordnet	Verfügbar?
79	Neuwirth, A.; Volland, G. (2005)	Dioxinähnliche polychlorierte Biphenyle (PCB) und polychlorierte Dioxine/Furane (PCDD/F) im Innenraum – Modelluntersuchungen zum Einfluss PCB-belasteter Bauteile und Baustoffe auf die Innenraumluft in Abhängigkeit von baulichen Einrichtungen und klimatischen Randbedingungen.	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/27059-Dioxin%C3%A4hnliche_polychlorierte_Biphenyle_%28PCB%29_und_polychlorierte_Dioxine_Furane_%28PCDD_F%29_im_Innenraum.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/27059-Dioxin%C3%A4hnliche_polychlorierte_Biphenyle_%28PCB%29_und_polychlorierte_Dioxine_Furane_%28PCDD_F%29_im_Innenraum.pdf</a>	x	x	x	Abfall	17	Europa	#
							Immission	33		
80	NLWKN (2006)	Organische Schadstoffe in Fischen als Endglied der aquatischen Nahrungskette	<a href="https://www.niedersachsen.de/download/119071">https://www.niedersachsen.de/download/119071</a>	x	x	/	Lebensmittel	14	Europa	#
81	NLWKN (2016a)	Biota-Schadstoffuntersuchungen in niedersächsischen Gewässern entsprechend der Europäischen Wasserrahmenrichtlinie 2013/39/EU bzw. Oberflächengewässerverordnung 2016	Bericht: <a href="https://www.niedersachsen.de/download/106310">https://www.niedersachsen.de/download/106310</a>	x	x	x	Biota	10	Europa	#
82	NLWKN (2016b)	Schwermetalle und organische Schadstoffe in Fischen der Elbe, Weser, Aller, Ems und Vechte - Niedersächsische Untersuchungsergebnisse aus den Jahren 2014 und 2015	Bericht: <a href="https://www.niedersachsen.de/download/117544">https://www.niedersachsen.de/download/117544</a> Daten: <a href="https://www.nlwkn.niedersachsen.de/download/117543/Anlage_Detaillierte_Untersuchungsergebnisse_Schwermetalle_und_organische_Schadstoffe_in_Fischen_der_Elbe_Weser_Aller_Ems_und_Vechte_-_Niedersaechsische_Untersuchungsergebnisse_aus_den_Jahren_2014_und_2015_...._Ausgabe_12_2016.pdf">https://www.nlwkn.niedersachsen.de/download/117543/Anlage_Detaillierte_Untersuchungsergebnisse_Schwermetalle_und_organische_Schadstoffe_in_Fischen_der_Elbe_Weser_Aller_Ems_und_Vechte_-_Niedersaechsische_Untersuchungsergebnisse_aus_den_Jahren_2014_und_2015_...._Ausgabe_12_2016.pdf</a>	x	x	x	Sediment	20	Europa	#
83	Schneider, C. et al. (2005)	Polybromierte Diphenylether und Tetrabrombisphenol A: Untersuchungen zum Abbau und Metabolismus, Bestimmung in Nahrungsmitteln	<a href="https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/14116-Polybromierte_Diphenylether_und_Tetrabrombisphenol_A_Untersuchungen_zum_Abbau_und_Metabolismus_Bes.pdf">https://publi.lubw.de/detailseite/-/publication/14116-Polybromierte_Diphenylether_und_Tetrabrombisphenol_A_Untersuchungen_zum_Abbau_und_Metabolismus_Bes.pdf</a>	x	x	x	Biota	18	Europa	#
84	SKUMS Bremen (o.J.)	Verunreinigungen durch Schaumlöschmittel im Bereich Bremer Flughafen und Grolland	<a href="https://www.bauumwelt.bremen.de/detail.php?gsid=bremen213.c.98443.de">https://www.bauumwelt.bremen.de/detail.php?gsid=bremen213.c.98443.de</a>	x	/	/	Wasser	/	Europa	#
85	TLUBN (2017)	Biota-Monitoring in Thüringen 2013-2017	/	x	x	/	Biota	/	Europa	#

**Legende:**

/ : es liegen keine Informationen vor bzw. wurden keine Daten veröffentlicht.

x : In der genannten Quelle sind Daten zu PCBs veröffentlicht; bei PCB 6 zu den Kongeneren CB 28, 52, 101, 138, 153, 180, bei PCB 7 zusätzlich zum Kongener CB 118.

Verfügbar?: Gibt eine Aussagen ob die Daten veröffentlicht bzw. als Open-Access Daten verfügbar sind (O), ob sie ggf. auf Anfrage verfügbar sind (#) oder ob das Dokument keine Daten enthält (/). Unabhängig von der Einstufung sollten die Nutzungsrechte vor Übernahme der Daten geklärt werden.

## A.2 Abkürzungsverzeichnis für Behörden (zur Tabelle 11)

<b>BUKEA HH</b>	Behörde für Umwelt, Klima, Energie und Agrarwirtschaft (Hamburg)
<b>HLNUG</b>	Hessisches Landesamt für Naturschutz, Umwelt und Geologie
<b>HU HH</b>	Institut für Hygiene und Umwelt (Hamburg)
<b>LANU SH</b>	Landesamt für Natur und Umwelt des Landes Schleswig-Holstein
<b>LANUV NRW</b>	Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz (Nordrhein-Westfalen)
<b>LAU SL</b>	Landesamt für Umwelt- und Arbeitsschutz (Saarland)
<b>LAU ST</b>	Landesamt für Umweltschutz (Sachsen-Anhalt)
<b>LAVES NI</b>	Niedersächsisches Landesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit
<b>LBEG NI</b>	Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (Niedersachsen)

<b>LfU BY</b>	Bayrisches Landesamt für Umwelt
<b>LfULG SN</b>	Sächsisches Landesamt für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie
<b>LGA SH</b>	Landesamt für Gesundheit und Arbeitssicherheit des Landes Schleswig-Holstein
<b>LLUR SH</b>	Landesamt für Landwirtschaft, Umwelt und ländliche Räume des Landes Schleswig-Holstein
<b>LUBW</b>	Landesanstalt für Umwelt Baden-Württemberg
<b>LUNG MV</b>	Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie (Mecklenburg-Vorpommern)
<b>MSGJFS</b>	Ministerium für Soziales, Gesundheit, Jugend, Familie und Senioren des Landes Schleswig-Holstein
<b>NLWKN</b>	Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz