

BLOK 1

Práce s US EPA Ecotox databází - prakticky na počítačích Zadání domácího úkolu 1 a 2

Výsledky ekotoxikologického testování chemických látek lze dohledat v recenzovaných vědeckých člancích, veřejných ekotoxikologických databázích či dokumentech vydaných regulačními orgány vlád. Dále existuje mnoho ekotoxikologických dat pořízených v soukromém sektoru, která bohužel nejsou volně přístupná.

Vyhledávání relevantních ekotoxikologických dat jak v odborné literatuře, tak v databázích je klíčovou dovedností, která vám umožní:

1. získat představu o dostupnosti ekotoxikologických dat k dané látce pro jednotlivé taxony
2. získat představu o toxicitě dané látky pro jednotlivé taxony
3. snáze plánovat budoucí experiment/projekty
4. získat data pro tvorbu ekotoxikologických modelů jako např. SSD (Species Sensitivity Distribution models = Modelů rozložení citlivosti druhů) nebo EcoRA (Ecological Risk Assessment = Posouzení ekologického rizika)

Existují různé volně přístupné databáze/zdroje dat o chemických látkách, např.:

ECOTOX (US EPA); <https://cfpub.epa.gov/ecotox/>

IUCLID 5 (ECHA); <http://iuclid.echa.europa.eu/index.php?fuseaction=home.iuclidHome>

ETOX (UBA) <https://webetox.uba.de/webETOX/index.do>

PAN Pesticide Database (PAN North America); <http://www.pesticideinfo.org/>

PPDB (University of Hertfordshire); <http://sitem.herts.ac.uk/aeru/ppdb/en/>

EFSA <https://www.efsa.europa.eu/>

ECHA <https://echa.europa.eu/>

ToxCast https://comptox.epa.gov/dashboard/chemical_lists/toxcast

Práce s databází US-EPA Ecotox Database

1. Otevřete si online databázi <http://cfpub.epa.gov/ecotox/>.
2. Nejprve si otevřete pdf soubor [ECOTOX Code Appendix \(PDF\)](#)
3. Klikněte na [Search](#) v sekci "Getting Started"
4. Proklikajte si všechny záložky a postupně zadejte látku, která vás zajímá (nejlépe dle CAS čísla), endpointy, které vás zajímají (např. EC50, LC50, LOEC, NOEC apod.). Můžete si také filtrovat, od jakého (příp. do jakého) roku chcete údaje vyhledávat.
5. databázi si exportujte do excelu.
6. Po otevření Reportu ve formátu Excel si všechny sloupce prohlédněte. Pro rozšířování zkratk si otevřete a použijete "Code List" ([ECOTOX Code Appendix \(PDF\)](#)).

PRÁCE S ECOTOX DATABÁZÍ V MS EXCEL:

Celou tabulku překopírujte do nového listu, tak aby zůstala zachovaná původní nezměněná varianta, v nově zkopírované tabulce pak provádějte změny

Přidejte k tabulce 4 nové sloupce (např. "Opakovaný údaj", "Podezřelý údaj" a "Čistota" a "Poznámky")

Horní řádek se dá zafixovat pomocí příkazu: "zobrazení → ukotvit příčky → ukotvit horní řádek"

Filtrování se nastaví pomocí: "Data → Filtr"

Pro práci s databází (zjištění významu zkratk) si otevřete: [ECOTOX Code Appendix \(PDF\)](#)

Sloupce, které nás příliš nezajímají a můžeme je skrýt (klikneme pravým tlačítkem na sloupec a z nabídky vybereme "skrýt"):

- Species Common Name
- Chemical Analysis
- Všechny "BCF" sloupce
- Trend
- Všechny "Effect Percent Mean" sloupce
- Všechny "Conc 2 Type" a "Conc 3 Type" sloupce
- Oba "Application Rate" sloupce
- Statistical Significance
- Všechny "Significance Level" sloupce
-

Sloupce, které jsou důležité:

- Chemical Purity: Ukazuje, jak čistá látka byla k testování použita
- Exposure Type: Typ expozice organismu
- Media Type: Typ media, ve kterém byl testovaný organismus umístěn
- test Location: Typ testu – laboratorní, mikrokosmos, mesokosmos apod
- Conc 1 Type (Standardized): Ukazuje, jestli byl test proveden s čistou látkou nebo směsí či komerčním přípravkem
- Conc 1 (Standardized): Samotná hodnota testu
- Conc 1 Units (Standardized): Jednotky hodnoty testu
- Sloupce „Effect“ a „Effect Measurement“: Ukazuje, „co se měřilo“
- Endpoint: Pro odlišení EC50/IC50/LD50/ED50/LC50/NOEC /LOEC....
- Všechny sloupce „Observed Duration (Days)“: Ukazuje délku testu

DOMÁCÍ ÚKOL 1

Vyhledávání ekotoxikologických dat v databázi US-EPA ECOTOX Database

Cíl úkolu 1: Vytvořit soubor dat v MS Excel, který obsahuje relevantní ekotoxikologická data extrahovaná z databáze US-EPA ECOTOX k látce **Diuron; Cas No. 330-54-1**.

Termín odevzdání: Individuálně vypracované tabulky v MS Excel (stejně jako ve vzorovém příkladu) pošlete na mail eliska.rozmankova@recetox.muni.cz do **19.10. 2019** (název souboru ve formátu: Svobodova_DU1)

Přesné zadání úkolu:

S využitím databáze US-EPA ECOTOX (<http://cfpub.epa.gov/ecotox/>) a toho, co jste se naučili ve cvičení, vytvořte sešit v Excelu pro **Diuron; Cas No. 330-54-1**, který bude obsahovat následující 4 listy a informace:

List 1:

Původní netknutá tabulka stažená z US-EPA Ecotox databáze

List 2:

Tabulka z listu 1 filtrovaná a upravená podle následujícího:

- Chemical Purity : Chceme pouze čistou látku (tzn. **alespoň 95%**)
- Endpoint: Chceme **EC50,IC50,LD50,ED50,LC50,NOEC, NOEL a NR-ZERO**
- Sloupce „Observed Duration (Days)“ : Chceme výsledky testů toxicity trvajících **1-7 dní**
- Exposure Type : Chceme environmentálně relevantní expozici (tedy **NE** např. gavální nebo injekční apod.)
- Media Type: Chceme pouze sladkovodní organismy a testy
- Conc 1 Type (Standardized):
Chceme hodnoty získané pouze z testů aktivních látek, **NE** směsí!
- Conc 1 (Standardized): Samotná hodnota testu
- Conc 1 Units (Standardized):
Jednotky hodnoty testu – vše musí být převedeno na **µg/L**
- Sloupce „Effect“ a „Effect Measurement“ :
Zajímají nás pouze efekty, které mají přímý vliv na změnu abundance a složení společenství organismů (**Effect: Population, Mortality, Intoxication a dále vybrané Effect Measurements** z Effect: Biochemistry (fluorescence), Reproduction (gřep u primárních producentů), Growth (u primárních producentů), Physiology(fotosyntéza)

POZOR

!!! Nezapomeňte si přidat k tabulce 4 nové sloupce (např. "Opakovaný údaj", "Podezřelý údaj" a "Čistota" a "Poznámky") ještě před nastavením filtru, jinak se vám pomíchá pořadí řádků

!!! Dejte pozor na hodnoty uvedené jako „<“ či „>“ (např EC50 < 500 µg/l). Tyto hodnoty nejsou příliš vypovídající a můžete je nyní použít pouze pro "osobní dojem ohledně toxicity látky"

!!! Pokud je hodnota uvedena jako rozmezí (min-max), použijte průměr těchto dvou hodnot

!!! Pokud jsou některé z uvedených důležitých údajů neznámé („NR“), dohledejte si je buď v online verzi ECOTOX databáze nebo v originálních článcích (podle vaší potřeby a chutě ;)

List 3:

Tabulka obsahující pouze vyfiltrované a upravené informace z listu 2, která obsahuje ještě jeden sloupec navíc a to s hodnotami "log(conc1)"

List 4:

Výpočet geometrického průměru hodnot EC50 (IC50, LD50, ED50 a LC50) a NOEC pro jednotlivé druhy a za pomoci kontingenční tabulky (nezapomeňte na odlogaritmování hodnot pro získání geometrického průměru)

První dvě výsledné tabulky (jedna pro „EC50“ a druhá pro „NOEC“) budou obsahovat 4 sloupce:

1. sloupec: druhové názvy organismů (latinsky)
2. sloupec: Taxonomická skupina, do kterých patří
3. sloupec: Průměr z hodnot log(conc) pro každý druh
4. sloupec: Geometrický průměr z hodnot EC50(+LD50, IC50 atd.) pro každý druh

Druhé dvě výsledné tabulky (jedna pro „EC50“ a druhá pro „NOEC“) budou obsahovat geometrický průměr pro 3 hlavní taxonomické skupiny – primární producenty, bezobratlé a obratlovce

Povšimněte si také, při jak dlouhých expozičních dobách byly výsledky pro jednotlivé druhy/skupiny získané. Můžete to následně využít pro vysvětlení případných rozdílů mezi vašimi výsledky z laboratoří a údajů z databází...

Pokud při zpracování potřebujete použít další pomocné listy, tak to samozřejmě není problém. Pro pomoc při tvorbě vašich tabulek můžete použít vzorový Excel soubor. Pokud si s něčím nebudete úplně jistí, napište si poznámku do jednoho z nově vytvořených sloupců a zeptejte se na dalším cvičení.

DOMÁCÍ ÚKOL 2

Návrh provedení ekotoxikologických biotestů v podmínkách pro laboratorní cvičení

Cíl úkolu 2: Vytvoření ideálního designu testu včetně použitých organismů pro hodnocení bezpečnosti látky diuron ve vodním prostředí

Termín odevzdání: Po skupinkách vypracovanou prezentaci v MS Power Point/pdf pošlete na mail eliska.rozmankova@recetox.muni.cz do **19.10. 2019** (název souboru ve formátu: Název skupiny_DU2)

Přesné zadání úkolu:

Každá skupina se zaměří na jinou trofickou úroveň: producenti – řasa *Raphidocelis subcapitata* (skupina A), konzumenti 1.řádu – korýš *Daphnia magna* (skupina B), konzumenti 2. či vyššího řádu – ryba *Danio rerio* (skupina C), destruenti – bakterie *Allivibrio fischeri* (skupina D) a vypracuje krátkou prezentaci (5-10 min). Prezentace by měla zahrnovat představení organismu z vybrané trofické úrovně, vybraného testu ekotoxicity a jeho specifika (**délka trvání, sledovaný endpoint, navržené koncentrace + rozpouštědla, použité kontroly, kritéria validity** apod.)

Dne 22.10. 2019 proběhnou prezentace studentů a následná diskuze reálného provedení navržených postupů.