

2. fejezet

KÖRNYEZETI KOCKÁZATBECSLÉS

Tartalomjegyzék

1.1	<i>Előzmények</i>	227
1.2	<i>A környezeti kockázatok becslésének általános alapelvei</i>	229
2	A környezeti expozíció becslése	231
2.1	<i>Bevezető</i>	231
2.1.1	A mért és számított környezeti koncentrációk	232
2.1.2	A PEC _{lokális} és a PEC _{regionális} közötti összefüggés	233
2.2	<i>Mérési adatok</i>	234
2.2.1	Az adekvát mérési adatok kiválasztása	234
2.2.2	A mérési adatok besorolása a lokális vagy a regionális szintre	235
2.3	<i>Modellszámítások</i>	236
2.3.1	Bevezető	236
2.3.2	Az expozíciós modellekhez szükséges adatok	238
2.3.3	A kibocsátás becslése	239
2.3.4	A környezeti elemek jellemzése	248
2.3.5	Megoszlási hányadosok	250
2.3.6	Biotikus és abiotikus bomlási sebességek	254
2.3.7	A környezeti kibocsátás megelőzésére szolgáló eliminációs eljárások	262
2.3.8	A PEC értékek számítása	270
2.4	<i>A meghatározott PEC értékek összefoglalása</i>	291
2.5	<i>A kockázat jellemzéshez alkalmazandó környezeti koncentráció meghatározása</i>	292
3	A hatások értékelése	293
3.1	<i>Bevezető</i>	293
3.2	<i>Az adatok értékelése</i>	294
3.2.1	Az ökotoxikológiai adatok	294
3.2.2	Kvantitatív molekulaszervezet-aktivitás közötti összefüggések	298
3.3	<i>Vízi szervezetekre gyakorolt hatás értékelése</i>	299
3.3.1	A PNEC kiszámítása	299
3.3.2	Időszakosan kibocsátott anyagok hatásának értékelése	304
3.4	<i>Szennyvíztisztítók mikroorganizmusaira végzett hatásértékelés</i>	305
3.5	<i>Hatásértékelés az üledékre vonatkozóan</i>	306
3.5.1	Bevezető	306
3.5.2	A PNEC kiszámítása	306
3.6	<i>Hatásértékelés a szárazföldi környezetre vonatkozóan</i>	308
3.6.1	Bevezető	308
3.6.2	Stratégia a talajban élő organizmusokra gyakorolt hatás értékeléséhez	309
3.7	<i>Hatásértékelés a légkörre vonatkozóan</i>	312
3.7.1	Biotikus hatások	312
3.7.2	Abiotikus hatások	313
3.8	<i>A másodlagos mérgezésekre vonatkozó érték</i>	314
3.8.1	Bevezető	314
3.8.2	Biológiai akkumulációra utaló jelek	315
3.8.3	Hatásértékelés a biológiai akkumulációra és a másodlagos mérgezésre vonatkozóan	317
4	Kockázat jellemzés	324
4.1	<i>Bevezető</i>	324

4.2	<i>A kockázat jellemzés általános előfeltételei</i>	324
4.3	<i>A meglévő anyagok kockázat jellemzése</i>	327
4.4	<i>Az új anyagok kockázat jellemzése</i>	328
4.2	<i>A kockázatok jellemzése, ha a PEC és/vagy a PNEC nem számolható</i>	331
5	Vizsgálati stratégiák	333
5.1	<i>A PEC értékek pontosítása</i>	333
5.1.1	A vizek	333
5.1.2	A talaj	334
5.1.1	A légkör	335
5.2	<i>A PNEC értékek pontosítása: stratégia a további vizsgálatokhoz</i>	335
5.2.1	Bevezető	335
5.2.2	A vizek	336
5.2.3	A talaj	341
6	A környezeti kockázatbecslés c. fejezet hivatkozásai	343

1.1 Előzmények

A 93/67/EGK számú Bizottsági Irányelv és az (EK) 1488/94 számú Bizottsági Rendelet előírja, hogy az újonnan bejelentett és a prioritási listán szereplő meglévő anyagokról környezeti kockázatbecslést kell készíteni. A kockázatbecslés menete a következő:

- Veszély azonosítása;
- Dózis (koncentráció) - válasz (hatás) összefüggés elemzése;
- Expozícióbecslés;
- Kockázat jellemzés.

A kockázatbecslést mind a három környezeti elemre (víz, szárazföldi környezet, levegő) el kell végezni.

Jelen dokumentum célja, hogy segítse a kockázatbecslést végző hatóságok munkáját az újonnan bejelentett és az elsőbbségi (prioritási) listán szereplő meglévő anyagok környezeti kockázatbecslésében. Az útmutató az alábbi témakörökhöz nyújt segítséget:

- a PEC és PNEC értékek kiszámítása (2. és 3. pont), illetve ahol ez nem megoldható, a környezeti koncentrációk és a hatás nélküli (no effect) koncentrációk kvalitatív becslése;
- a 93/67/EGK számú Irányelv 3(4) cikkelye, vagy a 793/93 számú Rendelet 10. cikkelye és a 1488/94 számú Rendelet V. melléklete szerint a kockázatbecslés eredményeképpen melyik adminisztratív döntést kell meghozni;
- amennyiben további vizsgálatokra van szükség, hogyan kell megválasztani a megfelelő vizsgálati stratégiát és hogyan lehet felhasználni az eredményeket a PEC és/vagy a PNEC értékek pontosítására.

A 793/93 számú Rendelet 9(2) cikkelye szerint az elsőbbségi listán szereplő meglévő anyagokra vonatkozó adatszolgáltatási minimum megegyezik az újonnan bejelentett anyagokra vonatkozó alapszintű vizsgálatokkal, ahogy az a 67/548/EGK számú Irányelv VII.A mellékletében szerepel. Ez biztosítja, hogy mind a újonnan bejelentett anyagokra, mind az elsőbbségi listán szereplő meglévő anyagokra legalább a hal, a daphnia és az alga vizsgálatok rövid idejű (short term) toxicitási eredményei rendelkezésre álljanak. Így tehát mind a PNEC kiszámításakor, mind az alapszintet követő vizsgálati stratégia kialakításakor ezt lehet felhasználni kiindulási alapnak. Új anyagok esetében az 1. és a 2. szinten (67/548/EGK számú Irányelv VIII. melléklet) további, de még mindig korlátozott mennyiségű adatszolgáltatás van előírva. Meglévő anyagoknál az alapadatsoron túlmenően is rendelkezésre állhatnak különböző információk, ezek megbízhatósága és mennyisége azonban tág határok között változhat. A hatások értékelése tekintetében számos azonos célú vizsgálat lehet eltérő eredményekkel. Sőt olyan vizsgálatok is rendelkezésre állhatnak - különösen a régebbiek között -, amelyek nem a jelenleg érvényes vizsgálati és minőségi standardoknak megfelelően készültek. Az ilyen adatok használhatóságát szakértői vélemény alapján kell megítélni.

A környezeti kockázatbecslést reprezentatív mérési adatok és/vagy modellszámítások felhasználásával kell elvégezni. Ahol lehet, figyelembe kell venni a felhasználási formát, az expozíciós helyzetet (tipikus mintát), vagy a fizikai-kémiai tulajdonságok szempontjából analóg anyagokkal kapcsolatos adatokat és információkat is. Ugyancsak tág határok között mozoghat a reprezentatív és megbízható mérési adatok és/vagy egy realisztikus expozíció-

modellezéshez szükséges adatok mennyisége és minősége. Szakértői véleményre ezért itt is szükség van.

A kockázatbecslést a rendelkezésre álló összes adatot figyelembe véve az alábbiakban ismertetett módszerek segítségével kell elvégezni.

Az előrejelzett környezeti koncentrációk realiztikusságát biztosítandó, az anyaggal kapcsolatos összes expozíciós adatot fel kell használni. Minél több a használati mintázatokkal, a környezeti kibocsátással és eliminációval, továbbá az anyag további használatával kapcsolatos részletes információ, annál realiztikusabb lesz az expozícióbecslés. Általános szabály, hogy a környezeti koncentrációk előrejelzésekor a legjobb és legvalóságosabb adatokat és információkat kell előnyben részesíteni. Kezdetben azonban hasznos lehet, ha az expozícióbecslést legrosszabb eseti feltételezésekre alapozzuk, illetve az előválasztott értékeket használjuk a modell számításokhoz. Ezt a megközelítést kellően részletes adatok hiányában is alkalmazhatjuk. Amennyiben a legrosszabb eseti feltételezésre alapozott kockázatbecslés eredménye azt mutatja, hogy az anyag "aggodalomra nem ad okot", akkor az adott környezeti elemre be lehet fejezni a kockázatbecslést. Ha azonban ezzel szemben azt az eredményt kapjuk, hogy az anyag "aggodalomra ad okot", akkor a becslést lehetőség szerint egy valóságosabb expozícióbecslés segítségével tovább kell pontosítani.

Ezt az útmutatót nagyrészt az egyes szerves anyagok vizsgálata során szerzett tapasztalatok felhasználásával készítettük el. Ez azt jelenti, hogy az ismertetett kockázatbecslési eljárások bizonyos anyagok, például szerves és fém anyagok esetében csak módosításokkal alkalmazhatók. A VIII., IX. és XI. mellékletekben külön kiemeltük a fémek és fémvegyületek, a kőolaj származékok és az ionképző anyagok kockázatbecsléséhez használható módszereket. Ezekben a mellékletekben lehetőség szerint mindenhol jeleztük, hogy mikor érvényesek az útmutatóban ismertetett általános irányelvek, és mikor nem. Szükség szerint a speciális módszereket is megadtuk.

A meglévő anyagokra vonatkozó 793/93 és 1488/94 számú Rendeletek, illetve az új anyagokra vonatkozó 67/548/EGK és 93/67/EGK számú Irányelvek elvben az Európai Közösség minden országában érvényesek. Tekintetbe kell azonban azt is venni, hogy az expozíciós viszonyok az egyes országokban a helyi földrajzi és klimatikus viszonyoktól függően eltérőek lehetnek. Az útmutatóban tehát az expozícióbecslés első fázisára ahol expozíciós modelleket alkalmazunk, általános érvényű forgatókönyvek érvényesek. Ez azt jelenti, hogy az anyagok emissziója egy nem létező, előre meghatározott tulajdonságokkal rendelkező modellezett környezetbe történik. Ezek a környezeti tulajdonságok az adott paramétertől függően lehetnek átlagértékek vagy legrosszabb eseti értékek. Mind a pontforrásból származó lokális emissziók, mind pedig a nagyobb régiókban jelentkező emisszió esetében kidolgozásra kerültek az általános expozíciós forgatókönyvek. Ezek az általános forgatókönyvek a tavakat és tengereket ért emissziókra nem vonatkoznak, ahogy a helyspecifikus becslésekre sem. Amennyiben az emissziós forgatókönyvvel kapcsolatban részletesebb adatok is rendelkezésre állnak, akkor feltétlenül tovább pontosítható az általános vagy a helyspecifikus becslés.

Míg a vízi és szárazföldi környezetre, továbbá a másodlagos mérgezésekre átfogó, és a kockázatok kvantitatív értékelését is biztosító kockázatbecslési rendszereket adtunk meg, a levegőből eredő kockázatokot csak kvalitatív módszerrel tudjuk felmérni, mivel nem állnak rendelkezésre megfelelő biotikus tesztelési módszerek. Meg kell jegyezni azt is, hogy az üledékekre, a szárazföldi környezetre és a másodlagos mérgezésekre vonatkozó irányelvek alkalmazhatósága nincs olyan jól alátámasztva és bizonyítva, mint a vízi környezet esetében.

A jövőben ezek az irányelvek az újabb tudományos és tapasztalati tények ismeretében mindenképpen felülvizsgálatra szorulnak majd.

Az itt ismertetett vizsgálati és becslési stratégiák alapját a jelenlegi tudományos ismeretek, illetve a Tagállamok illetékes hatóságainak tapasztalatai adják. Ebben a tekintetben mindenképpen a legújabb tudományos eredményeket tükrözik, továbbá jól hasznosítják a gyakran szűkösen rendelkezésre álló adatokat is. Mivel azonban az adatsorok korlátozottak és az akut toxicitást leginkább csak három trófikus szinten vizsgálják, az anyagnak lehetnek olyan hatásai is, amelyeket a becslésben nem megfelelően jellemeztek, pl.:

- olyan káros hatások, amelyekre jelenleg nincsenek adekvát vizsgálati módszerek (pl. neurotoxicitás, viselkedési hatások és az endokrin szekréció zavarai);
- bizonyos taxonokra jellemző olyan hatások, amelyek más taxonok adatainak extrapolálásával nem modellezhetők (pl. a szerves ón vegyületek sajátos hatásai puhatestűekben).

Az ilyen hatások némelyikét olyan anyagok okozzák, amelyek a környezeti körülmények között állandóak és hajlamosak a biológiai akkumulációra. Az ilyen jellegű anyagok kockázatbecslése tehát különösen nagy óvatosságot igényel.

A jelen dokumentumban a vízi ökoszisztémák kockázatbecslése alapvetően édesvízi rendszerekre vonatkozik. Az eddig rendelkezésre álló tapasztalatok még nem elégségesek a tengeri ökoszisztémák becslésével kapcsolatos gyakorlati irányelvek kidolgozásához többek között az olyan tényezők miatt, mint a rendkívül nagy hígulás, az alacsony biológiai degradációs sebességek, a hosszú idejű expozíció és a sósvízben élő szervezetekre gyakorolt hatások. Egyes anyagoknál ezen kívül az életciklus bizonyos szakaszaiban amikor az anyag például valamilyen készítményben van jelen, a környezeti kibocsátásra vonatkozó információk annyira szűkösek, hogy a PEC is nagyon bizonytalanná válik, esetleg nem is lehet kvantitatívan megadni. Utóbbi esetben kvalitatív kockázatbecslést kell végezni (ld. a 4.5 pont alatt).

1.2 A környezeti kockázatok becslésének általános alapelvei

A környezeti kockázatbecslés lényegében azt jelenti, hogy összehasonlítjuk az egyes környezeti elemekben lévő koncentrációkat (előrejelzett környezeti koncentráció, PEC (predicted environmental concentration)) azzal a koncentráció értékkel, amely alatt az anyag valószínűleg nem gyakorol elfogadhatatlanul súlyos hatásokat az ott élő organizmusokra (előrejelzett hatás nélküli koncentráció, PNEC (predicted no effect concentration)). Elvben mind az embereket, mind pedig a vízi, szárazföldi és atmoszférikus környezetben lévő ökoszisztémákat védeni kell. A környezettel kapcsolatban a védelmi célkitűzések jelenleg a következőkre korlátozódnak:

- vízi ökoszisztémák,
- szárazföldi ökoszisztémák,
- csúcsragadozók,
- a szennyvíztisztítók mikroorganizmusai,
- a légkör.

A három elsődleges környezeti elemen kívül a tápláléklánckra vonatkozó, de nem az egyes elemekhez kötődő hatásokat (másodlagos mérgezés), illetve a szennyvíztisztítóban élő mikroorganizmusok aktivitására gyakorolt hatásokat is mérlegelni kell. Ez utóbbi értékelésére

azért van szükség, mert a vízi környezet expozíciója szempontjából igen nagy jelentősége van a szennyvíztisztítók megfelelő működésének.

A PEC értékeket a rendelkezésre álló mérési adatokból és/vagy modell számítások alapján lehet meghatározni. A PNEC értékeket általában monospecifikus laboratóriumi vizsgálatok eredményei, vagy néhány esetben modell ökoszisztémák vizsgálatával meghatározott koncentrációk és az adekvát biztonsági faktorok alapján szokták meghatározni. A PNEC definíció szerint az a koncentráció, amely alatt a kérdéses anyag valószínűleg nem okoz elfogadhatatlan hatásokat.

A PEC/PNEC aránytól függően kell megítélni, hogy az anyag veszélyt jelent-e az adott környezetben élő szervezetekre, avagy sem. Amennyiben a PEC vagy a PNEC nem határozható meg, és ezért nincs lehetőség kvantitatív kockázatbecslésre, kvalitatív vizsgálatot kell végezni annak eldöntésére, hogy mennyire valószínű valamely káros hatás megjelenése.

Ahogy azt majd az expozícióbecslésről szóló részben részletesebben is tárgyaljuk, a PEC értékeket a lokális és regionális szintre is meg kell határozni, és ezt mindkét esetben számos, az időre és a nagyságrendre vonatkozó specifikus emissziós tulajdonság alapján kell elvégezni. Ennek következtében a különböző expozíciós forgatókönyvekre (szcenáriókra) különböző PEC értékekkel (vagy expozíciós koncentrációkkal a szennyvíztisztítók mikrobiológiai aktivitására) rendelkező környezeti elemekre és védelmi célkitűzésekre vonatkozó PNEC értékek több különböző PEC/PNEC arányt eredményezhetnek.

Az 1. táblázatban bemutatjuk a kockázat jellemzés különböző területeit, továbbá azokat az expozíciós forgatókönyveket (szcenáriókat), amelyekre vonatkoznak. Az 1. táblázatban megadott PEC értékeken kívül a 2. pont alatt számos további expozíciós szintet is meghatározunk. Ezeket az értékeket a környezeten keresztüli közvetett humán expozíció becslésére használják fel, ahogy az az útmutató 1. fejezetében (Humán egészségügyi kockázatbecslés) szerepel. A közvetett expozíció becslése céljából meghatározott PEC értékek a 2. táblázatban találhatóak.

1. táblázat. *A különböző expozíciós közegekre vonatkozó kockázat jellemzés különböző területei között fennálló összefüggések*

célszervezetek	expozíciós közeg (PEC_{lokális}/ PEC_{regionális})	alfejezet	PNEC	alfejezet
Vízben élő szervezetek	felszíni vizek	2.3.8.3 2.3.8.7	PNEC _{víz}	3.3
Bentoszlakó élőlények	üledék	2.3.8.4 2.3.8.7	PNEC _{üledék}	3.5
Szárazföldi élőlények	mezőgazdasági talaj	2.3.8.5 2.3.8.7	PNEC _{talaj}	3.6
Halevő ragadozók	halak	3.8	PNEC _{orális} (NOAEL _{madár/emlős} -értékből)	3.8
Férgeket evő ragadozók	földigiliszták	3.8	PNEC _{orális} (NOAEL _{madár/emlős} -értékből)	3.8
Mikro-organizmusok	a szennyvíztisztító levegőztető medencéje	2.3.7	PNEC _{mikroorganizmusok}	3.4

2. táblázat. A közvetett humán expozícióhoz használt expozíciós szintek

Célterület	Expozíciós közeg (PEC _{lokális} / PEC _{regionális})	alfejezet
Ivóvíz előállítás	Felszíni vizek (éves átlag) Talajvíz	2.3.8.3 és 2.3.8.7 2.3.8.6 és 2.3.8.7
Belégzés	Levegő (éves átlag)	2.3.8.2
Élelmiszeripari növénytermesztés	Mezőgazdasági talaj (180 napra átlagolva)	2.3.8.5 és 2.3.8.7
Tej és hús termelés	Legelők (180 napra átlagolva)	2.3.8.5 és 2.3.8.7
Hal humán fogyasztásra	Felszíni vizek (éves átlag)	2.3.8.3. és 2.3.8.7

2 A környezeti expozíció becslése

2.1 Bevezető

Az anyag a gyártástól a hulladékká válásig vagy újra hasznosításig az életciklus minden szakaszában hatással lehet a környezetre. Az expozíciós koncentrációt minden potenciális érintett környezeti elemre meg kell határozni. A felmérés során elvben az életciklus alábbi szakaszait kell figyelembe venni:

- gyártás;
- feldolgozás;
- szállítás és tárolás;
- további feldolgozás, formulálás (készítményekbe való bekeverés);
- használat:
 - nagy volumenű professzionális (ipari) felhasználás és/vagy,
 - kis volumenű professzionális (kereskedelmi) felhasználás és/vagy,
 - magáncélú vagy lakossági felhasználás,

ártalmatlanítás és hulladékkezelés (pl. elégetés vagy újrahasznosítás).

A környezet expozíciójának becslésekor figyelembe kell venni a korábbi kibocsátásokat is. Ez ugyanis kumulatív hatásokat okozhat, amelynek nyomán a környezetben kialakul egy "háttér koncentráció".

A környezet expozíciójának becsléséhez társuló bizonytalanságok miatt az expozíciós szintek meghatározásakor mind az esetlegesen rendelkezésre álló mérési adatokat, mind pedig a modellszámításokat fel kell használni. A modellszámítások alkalmazásánál a hasonló használati körbe tartozó és hasonló tulajdonságokkal rendelkező anyagokkal kapcsolatos információkat is figyelembe kell venni. Amennyiben vannak reprezentatív és megfelelően mért expozíciós adatok, akkor ezeket kell előnyben részesíteni (2.2.1 és 2.5 pontok).

Mérlegelni kell ezen kívül azt is, hogy a kérdéses anyagból biológiai vagy abiotikus úton keletkezhetnek-e stabil és/vagy toxikus bomlástermékek. Ha fennáll a lehetősége az ilyen jellegű degradációnak, a becslés során megfelelő módon mérlegelni kell ennek hatásait is.

Új anyagok esetében nem valószínű, hogy lesznek adatok ilyen jellegű bomlástermékekről, úgyhogy ezt a kérdést csak kvalitatív módon lehet vizsgálni. A nagy mennyiségben előállított anyagok esetében azonban az ismert fontosabb bomlástermékeket is alá kell vetni a kockázatbecslésnek. Ahol semmilyen információ nem áll rendelkezésre, ott kvalitatív leírás adható a degradációs útvonalakról. Néhány példát erre a X. mellékletben találhatunk.

Sok esetben csak aerob körülményekre állnak rendelkezésre biológiai degradációs adatok, pedig bizonyos szituációkban, pl. az üledékek vagy a talajvíz esetében az anaerob körülményeket is figyelembe kell venni.

A környezeti sótartalom és pH is nagyban befolyásolhatja az anyagok lebontását.

2.1.1 A mért és számított környezeti koncentrációk

Új anyagok esetében általában nincs semmilyen releváns mérési adat, a környezeti koncentrációkat tehát becsléssel kell meghatározni. A meglévő anyagoknál ezzel szemben az expozícióbecsléshez nem mindig kellene a modellszámítások. Sok anyagra gyűjtöttek már adatokat az egyes környezeti elemekben kialakuló koncentrációkról. Ezek alapján jobb betekintést nyerhetünk az expozíció vizsgálat egyes lépéseibe (pl. koncentráció ipari kibocsátóknál, háttér-koncentrációk a különböző környezeti elemekben, a terjedési viselkedés jellemzése).

A mérési adatokból vagy a modellszámításokból sok esetben csak koncentráció tartományokat lehet meghatározni. Ezek a tartományok részben a gyártás és a használat során jelentkező különféle körülményeket, vagy a modellezések és mérési módszerek korlátait vagy az ezekhez szükséges hipotéziseket tükrözik. Úgy tűnhet, hogy a mérések mindig megbízhatóbb eredményeket adnak, mint a modellszámítások. Pedig az idő- és térbeli ingadozások miatt jelentős lehet a mért koncentrációk saját bizonytalansága is. Az adatok komplex értelmezése és integrációja során tehát egymást kiegészítve kell használni a kétféle megközelítést. Ez azt jelenti, hogy a megfelelően megmért adatok sem zárják ki feltétlenül a PEC számítások szükségességét.

A mért adatok esetében a megbízhatóság vizsgálata az első lépés. Ezt követően azt is meg kell határozni, hogy az adatok mennyire reprezentálják a valós általános emissziós szituációt. A 2.2 pont alatt ismertetjük, hogy hogyan kell elvégezni a mért adatok kritikai értékelését. A modell számítások esetében teljesen átláthatóvá kell tenni az expozíciós szintek meghatározásának folyamatát, és dokumentálni kell a számításokhoz felhasznált paramétereket és előválasztott értékeket. Amennyiben egy adott expozíciós szituáció leírására több modell is használható, az adott anyag és forgatókönyv (szcenárió) szempontjából legjobbnak tekintett modellt kell alkalmazni, továbbá indokolni is kell, hogy miért az adott modellt választottuk. Ha olyan modellt választunk, amely ebben az útmutatóban nem szerepel, a választás indoklása mellett a modellt is ismertetni kell. A modellezéssel részletesebben a 2.3 pont alatt foglalkozunk. A 2.5 pont alatt pedig a mért és számított PEC értékek összehasonlításával kapcsolatban adunk részletesebb tájékoztatást.

2.1.2 A $PEC_{\text{lokális}}$ és a $PEC_{\text{regionális}}$ közötti összefüggés

Az anyagok kibocsátásának becslésekor általában különbséget teszünk a pontforrásokból emittált, és így adott helyhez rendelhető, illetve és a diffúzan kibocsátott anyagok között.

A pontforrások nagy hatást gyakorolnak a lokális koncentrációra ($PEC_{\text{lokális}}$), de a regionális koncentrációkhoz ($PEC_{\text{regionális}}$) is hozzájárulnak.

Amikor új anyagokra határozzunk meg alapszinten vagy 10 t/év szinten a PEC értékeket, a 93/67/EGK számú Irányelv III. mellékletének 3.4 pontja alapján a becsléseket legtöbbször csak arra az általános lokális környezetre kell elvégezni, ahová a kibocsátás történik. Stabil és/vagy nagyon toxikus anyagok esetében azonban a regionális becslés is hasznos lehet az alacsonyabb forgalmazási szinteknél is. Ilyen esetben tehát a $PEC_{\text{regionális}}$ -t is meg kell határozni kivéve, ha bizonyítható, hogy a regionális becslés nem releváns ilyen alacsony tonna-értékeknél.

$PEC_{\text{lokális}}$

A pontforrásokból kibocsátott anyagokra az általános lokális környezetben kell elvégezni a kockázatbecslést. Ez nem egy tényleges helyre vonatkozik, hanem egy előre meghatározott környezeti tulajdonságokkal rendelkező hipotetikus helyet jelöl, az ún. "standard környezet". Ezek a környezeti tulajdonságok az adott paramétertől függően lehetnek átlagértékek vagy legrosszabb eseti értékek. A dimenziók általában kicsik, és feltételezés szerint az érintett célobjektumok a területen belül vagy annak határán vannak. Egy emissziós esemény során jelentkező koncentrációkat általában mérik vagy számolják. Ez azt jelenti, hogy a $PEC_{\text{lokális}}$ -t a napi kibocsátás alapján számolják függetlenül attól, hogy a kibocsátás időszakos vagy folyamatos. A $PEC_{\text{lokális}}$ azt a várt koncentrációt fejezi ki, amely a forrástól bizonyos távolságban egy olyan napon kialakul, amikor kibocsátás történik. Csak a talajra vonatkozóan kell (mivel ez kevésbé dinamikus környezet, mint a levegő, vagy a felszíni vizek) hosszabb távú átlagokat alkalmazni. Egyes esetekben azonban időfüggő koncentrációkat is meg lehet határozni, például olyankor, ha a kibocsátás időszakos. A degradációs és disztribúciós folyamatokat elvben a $PEC_{\text{lokális}}$ veszi figyelembe. A viszonylag kis térdimenziók miatt azonban az egyes környezeti elemekben kialakuló koncentrációkat tipikusan csak egy vagy két folyamat befolyásolja.

$PEC_{\text{regionális}}$

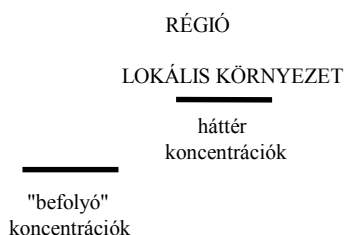
A nagyobb területen elhelyezkedő pont- vagy diffúz forrásokból kibocsátott anyagok koncentrációját az általános regionális környezetre kell meghatározni. A $PEC_{\text{regionális}}$ -ban figyelembe vesszük a kibocsátott anyag további eloszlását és sorsát is. A $PEC_{\text{regionális}}$ ezenkívül megadja a $PEC_{\text{lokális}}$ -ba beleépítendő háttér koncentrációt is, ugyanúgy mint a lokális modellek esetében, itt is meg kell határozni egy általános standard környezetet. A hipotézis szerint a $PEC_{\text{regionális}}$ steady-state koncentrációt fejez ki.

Ez az jelenti, hogy a kontinentális, a regionális és a lokális számításokat egymás után kell elvégezni. Felhívjuk a figyelmet, hogy a regionális adatok felhasználása a lokális környezet háttér koncentrációjának meghatározásához nem mindig tekinthető megfelelő eljárásnak. Abban a különleges esetekben ugyanis, ha csak egyetlen forrásból történik a kibocsátás, a lokális szinten ezt kétszer számítanánk be: egyszer a lokális emisszióként, másodszer pedig a regionális háttér koncentrációként, mivel ezért is ez az egyetlen forrás felelős.

A léghőben és víz környezetben várható koncentrációkat az egész kontinensre (Európára) vonatkozóan is meg kell határozni, hogy megállapíthassuk a regionális környezetbe "befolyó" koncentrációkat. Ezeket a koncentrációkat azonban nem használjuk fel expozícióbecslési eredményként.

Az 1. ábrán bemutatjuk a három térrész között fennálló összefüggéseket. A lokális térrész a regionálisból kapja a háttér koncentrációt, a regionálisba pedig a kontinentálisból érkezik a "befolyó" víz és levegő.

KONTINENS



1. ábra. A kontinentális, regionális és lokális expozícióbecslések között összefüggések

2.2 Mérési adatok

Számos meglévő anyag esetében vannak mérési adataink a levegőre, a vízre és/vagy a talajra. Az ilyen adatok értékelése során meg kell vizsgálni, hogy az alábbi kritériumok alapján ezek milyen mértékben adekvátak, illetve reprezentatívak. Ezeket a számolt környezeti koncentrációkkal az expozíciós adatok értelmezésére használjuk fel.

Az értékelés során az alábbiak szerint kell eljárni:

- Az alkalmazott mintavételi és analitikai módszerek, továbbá a mérések földrajzi és időbeli kiterjedésének értékelésével ki kell válogatni a megbízható és reprezentatív adatokat (2.2.1 pont);
- Az expozíciós források és az anyag környezeti sorsának figyelembe vételével az adatokat meg kell feleltetni a lokális vagy regionális forgatókönyvnek (2.2.2 pont);
- A mérési adatokat össze kell hasonlítani a számolt PEC értékekkel. A kockázat jellemzés során választani kell a mérési adatok vagy a számolt PEC értékek alkalmazása között (2.5 pont).

2.2.1 Az adekvát mérési adatok kiválasztása

Először a rendelkezésre álló mért környezeti koncentrációkat kell ellenőrizni. Hogy képesek legyünk megítélni, hogy az adatok mennyire adekvátak az expozícióbecsléshez illetve, hogy mekkora jelentőséget kell tulajdonítani nekik, az alábbi szempontokat kell figyelembe venni:

Az alkalmazott mérési technikák megbízhatóságának ellenőrzése

A minták vételéhez, szállításához és tárolásához, továbbá előkészítéséhez és vizsgálatához alkalmazott módszereknél figyelembe kell venni az anyag fizikai-kémiai tulajdonságait is. Az expozícióbecslés során nem szabad felhasználni azokat a mérési adatokat, amelyek a mintavétel szempontjából nem reprezentatívak, vagy minőségük nem kielégítő.

Az alkalmazott analitikai módszer érzékenységét is vizsgálni kell, továbbá mérlegelni kell a mért adatok összehasonlíthatóságát is. A vízben mért koncentrációk például a mintavételi és előkészítési módszerek függvényében tükrözhetik az összkoncentrációt vagy az oldott koncentrációt is. Az üledékben mért koncentrációt pedig nagymértékben befolyásolhatja az üledék szerves széntartalma és részecskemérete.

Az adott környezeti elemre reprezentatív adatok kiválasztása

Ellenőrizni kell, hogy az adatok sporadikus vizsgálatokból származnak-e, vagy a mérés bizonyos ideig mindig ugyanazon helyen történt. A balesetszerű kiömléseket/kibocsátásokat vagy üzemhibákat az expozícióbecslés során nem szabad figyelembe venni. Gyakran jól használhatók a hosszabb ideig tartó (monitoring) mérések adatai, mert ezeknél az esetleges évszakos ingadozások is látszanak. A mérési adatok esetlegesen rendelkezésre álló 90 percentilis értékei tarthatnak számot a legnagyobb érdeklődésre. Ha csak a maximális koncentrációk ismertek, akkor ezek tekintendők a legrosszabb eseti hipotézisnek, az átlag értékek alkalmazásával azonban alábecsülhetjük a valós kockázatokat, mivel a tér- és/vagy időbeli átlag koncentrációk nem tükrözik jól a nagy expozíciójú időszakokat és/vagy helyeket. Időszakos jellegű expozíciós forgatókönyvek (scenáriók) esetében még a 90 percentilis értékek sem tudják megfelelően jellemezni a rövid ideig tartó, de jelentős mennyiségű anyagot kijuttató emissziós fázisokat. Ilyen esetekben, főleg a $PEC_{\text{lokális}}$ számításakor, valóságosabb emissziós mintázatot kaphatunk az emissziós események során tapasztalt átlag koncentrációk legmagasabb értékeinek figyelembe vételével.

2.2.2 A mérési adatok besorolása a lokális vagy a regionális szintre

Másodszor, a kapott környezeti koncentrációk jellegének meghatározásához a mérési adatokat hozzá kell rendelni a lokális vagy a regionális szinthez. Ez teszi lehetővé azután a megfelelő számított PEC értékekkel való összehasonlítást, ami alapján el lehet dönteni, hogy melyik PEC értéket használjuk a kockázat jellemzéshez (2.5 pont).

Az emissziós források és a mintavételi helyek közötti földrajzi összefüggések vizsgálata

Amennyiben a (pl. külterületi) mintavételi helyek térben nincsenek közel a pontforrásokhoz, akkor a kapott adatok a háttér koncentrációt ($PEC_{\text{regionális}}$) adják meg, amelyet hozzá kell adni a számított $PEC_{\text{lokális}}$ -hoz. Ha a mért koncentrációk pontforrások kibocsátását tükrözik (pl. egy ipari körzetben végzett mérések esetén), akkor ezek $PEC_{\text{lokális}}$ típusú adatok lesznek. A mérési adatok alapján kapott $PEC_{\text{lokális}}$ értékekben már benne van a háttér koncentráció is.

Az anyag speciális tulajdonságaival kapcsolatos szempontok

A mérési adatok értékelésekor figyelembe kell venni azt is, hogy az anyagok az egyes környezeti elemekben fizikai-kémiai tulajdonságaik alapján különbözőképpen viselkednek.

2.3 Modellszámítások

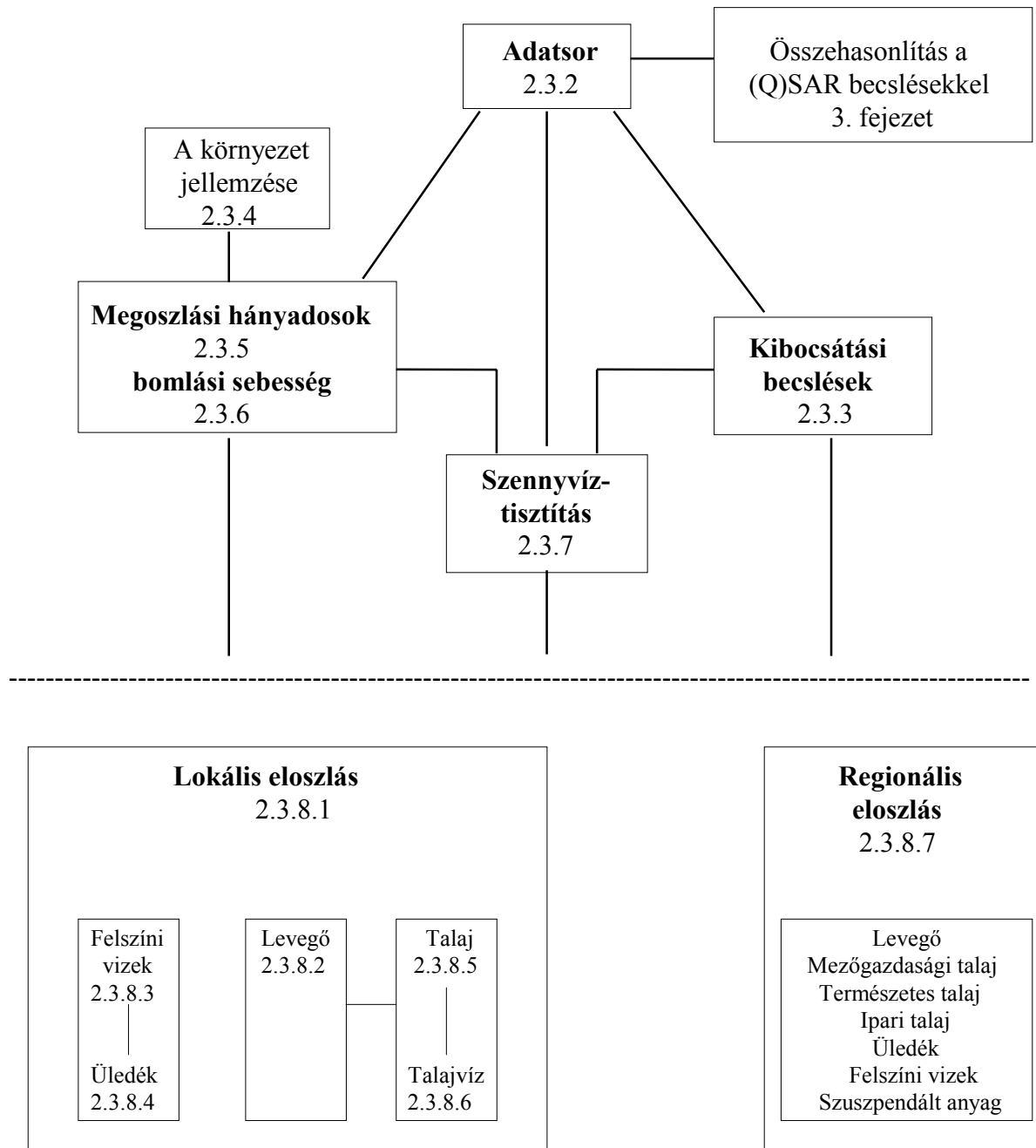
2.3.1 Bevezető

A PEC számításakor az első lépés a primér adatok értékelése. Ezt követi a felhasználási formákon (tipikus mintákon) alapuló kibocsátás becslése. Az összes potenciális emissziós forrást ki kell elemezni, továbbá meg kell határozni a kibocsátásokat és a befogadó környezeti elem(ek)et. A kibocsátások meghatározását követően meg kell vizsgálni a környezetbe kibocsátott anyag további sorsát. Ezt a becslést az expozíció legvalószínűbb útvonalainak, továbbá a biotikus és abiotikus átalakítási folyamatok figyelembe vételével kell elvégezni. Ezt követően a primér adatokból meg kell határozni a szekunder adatokat (pl. megoszlási hányadosok). Az anyag disztribúciójának és degradációjának számszerűsítésével (az idő és a hely függvényében) kapjuk meg a $PEC_{\text{lokális}}$ -t és a $PEC_{\text{regionális}}$ -t. A PEC értékek számítása nem korlátozódik csak az elsődleges környezeti elemekre (felszíni vizek (2.3.8.3 pont), talaj (2.3.8.5 pont) és a levegő (2.3.8.2)), hanem a másodlagos környezeti elemek (pl. üledékek (2.3.8.4 pont) és a talajvíz (2.3.8.6 pont)) vonatkozásában is meg kell határozni. Lehetőség szerint az egyes környezeti elemek közötti anyagtranszportot is figyelembe kell venni.

A továbbiakban az alábbi témákat tárgyaljuk:

- A következőkben ismertetésre kerülő disztribúciós modellekhez szükséges minimális adatok;
- A környezeti kibocsátások becslése;
- A lokális és regionális PEC értékeke becsléséhez használt standard környezet jellemzése;
- A szekunder adatok meghatározása: közegek közötti megoszlási hányadosok és bomlási sebességek. Ezek az adatok képezhetik az adatszolgáltatás részét is, máskülönben az elsődleges adatokból kell meghatározni őket becslések segítségével;
- Az anyagok sorsa a szennyvíztisztítás során;
- A környezetbe kibocsátott anyagok disztribúciója és sorsa, a (lokális és regionális) PEC értékek becslése.

A 2. ábrán a 2.3 pont felépítésének sematikus ábrázolása és a számítások egyes lépései közötti adatáramlások láthatók.



2. ábra. A 2.3 pont felépítése és az egyes részek közötti adatáramlás

Minden egyes részben megadjuk a szükséges modell számításokat. Az egyenletekben szereplő jelölések meghatározásához pedig az alábbi táblázat formátumot használjuk majd:

Jelölések:

[jelölés]	[a szükséges paraméter leírása] [mértékegység]	[előválasztott érték, vagy az egyenlet száma, amelyből ez a paraméter számolható, vagy hivatkozás az előválasztott értékeket tartalmazó táblázatra]
-----------	---	---

[jelölés]	[a számított paraméter leírása] [mértékegység]
-----------	---

A jelöléseket, ahol lehetett, az alábbi konvenciók betartásával alakítottuk ki:

- A paramétereket általában nagy betűvel jelöltük;
- A *paraméterek* specifikációit kis betűvel jelöltük;
- Az adott *környezeti elemre* vonatkozó specifikációt alsó indexbe tettük.

Néhány általánosan előforduló jelölés:

E	emisszió (közvetlen és közvetett)	[kg.nap ⁻¹]
F	dimenzió nélküli frakciók	[kg.kg ⁻¹] vagy [m ³ .m ⁻³]
C	az anyag koncentrációja	[kg.kg ⁻¹] vagy [m ³ .m ⁻³]
RHO	a környezeti elemek vagy fázisok sűrűsége	[kg.m ⁻³]
K	közegek közötti megoszlási hányadosok	[sokféle mértékegység]
k	(pszeudo) elsőrendű sebességi állandók	[nap ⁻¹]
T	Idő	[nap]

Az $F_{oc,talaj}$ jelölés például a szerves szénnek (oc) azt a frakcióját (F) jelöli, amelyik a talajban ($talaj$) van. Az egyéb paraméterek esetében is könnyen értelmezhető jelöléseket választottunk. Meg kell említeni, hogy számos egyenletben alkalmaztunk fix faktorokat (pl. 1000 vagy 10^6), hogy az egyenletek az egyes paraméterek mértékegységeinek tekintetében következetesek legyenek.

2.3.2 Az expozíciós modellekhez szükséges adatok

A szolgáltatott adatok közül, a rendelkezésre álló alapadatsorból az alábbi paramétereket közvetlenül használjuk fel az expozíciós modellekben, ahogy azt az alábbiakban részletesen ismertetjük:

Fizikai-kémiai tulajdonságok:

MOLW	molekulasúly	[g.mol ⁻¹]
Kow ¹	oktanol-víz megoszlási hányados	[-]
SOL	vízoldékonyság	[mg.l ⁻¹]
VP	gőznyomás	[Pa]
BOILPT	forráspont (csak bizonyos kibocsátás becslésekhez)	[°C]

¹ Jelen dokumentumban a Kow jelölést használjuk, amely egyébként megegyezik a Pow-vel.

Az anyag felhasználási formái (mintái):

PRODVOL	megtermelt mennyiség	[tonna.év ⁻¹]
IMPORT	importált mennyiség	[tonna.év ⁻¹]
EXPORT	exportált mennyiség	[tonna.év ⁻¹]
INDCAT	ipari kategória	[-]
USECAT	felhasználási kategória	[-]
MAINCAT	fő kategória (meglévő anyagokra)	[-]
Az anyag felhasználási formáival kapcsolatos speciális információk		

A 2.3.5 és a 2.3.6 pont alatt ismertetjük, hogy hogyan kell a minimális adatokból kiszámolni a szekunder adatokat (megoszlási hányadosok és bomlási ráták). Ha vannak megfelelően mért adatok is, akkor a becslések helyett ezeket kell használni.

Meg kell jegyezni, hogy az expozíciós modellek fent megadott adatigénye csak semleges, szerves és ionokat nem képező anyagokra érvényes. Más típusú anyagok esetében részletesebb adatokra is szükség lehet (pl. megoszlási hányadosok, vagy ionképző anyagoknál a pKa/pKb). Ionképző anyagok esetében a Kow és a vízdoldékonyság pH-függését is ismerni kell. A megoszlási hányadosokat pedig lehetőleg a környezet pH-jára kell korrigálni (ld. XI. melléklet).

Felületaktív anyagok esetében nem ajánlott a mért vagy számolt Kow alapján becsülni például a Koc-t (talaj, üledék, szuszpendált szerves anyag és iszap) és a BCF-et (hal, férgek), mivel a log Kow prediktív értéke az ilyen becslésekhez túl alacsony lehet. A felületaktív anyagokra ehelyett inkább a Koc- és BCF-értékek mérését kell fontolóra venni.

Ha a kísérletesen mért fizikai-kémiai adatok olyan hőmérsékletre vonatkoznak, amely az adott anyag esetében jelentősen változna, ha az alkalmazott expozíciós modell (pl. 13°C-ra a regionális modellhez) szempontjából releváns hőmérsékletre extrapolálnánk, akkor mérlegelni kell az extrapoláció lehetőségét. Legtöbb esetben ez nem szükséges. Egyes anyagoknál azonban jelentős mértékben változhat a gőznyomás a hőmérséklet függvényében, még 10°C-os hőmérsékleti tartományon belül is. Ilyen esetekben a releváns hőmérsékletre becsült gőznyomást vagy a 10 illetve 20°C-on mért gőznyomás értékek interpolálásával, vagy extrapolációs módszerek segítségével kell meghatározni (Schwartenbach et al., 1993).

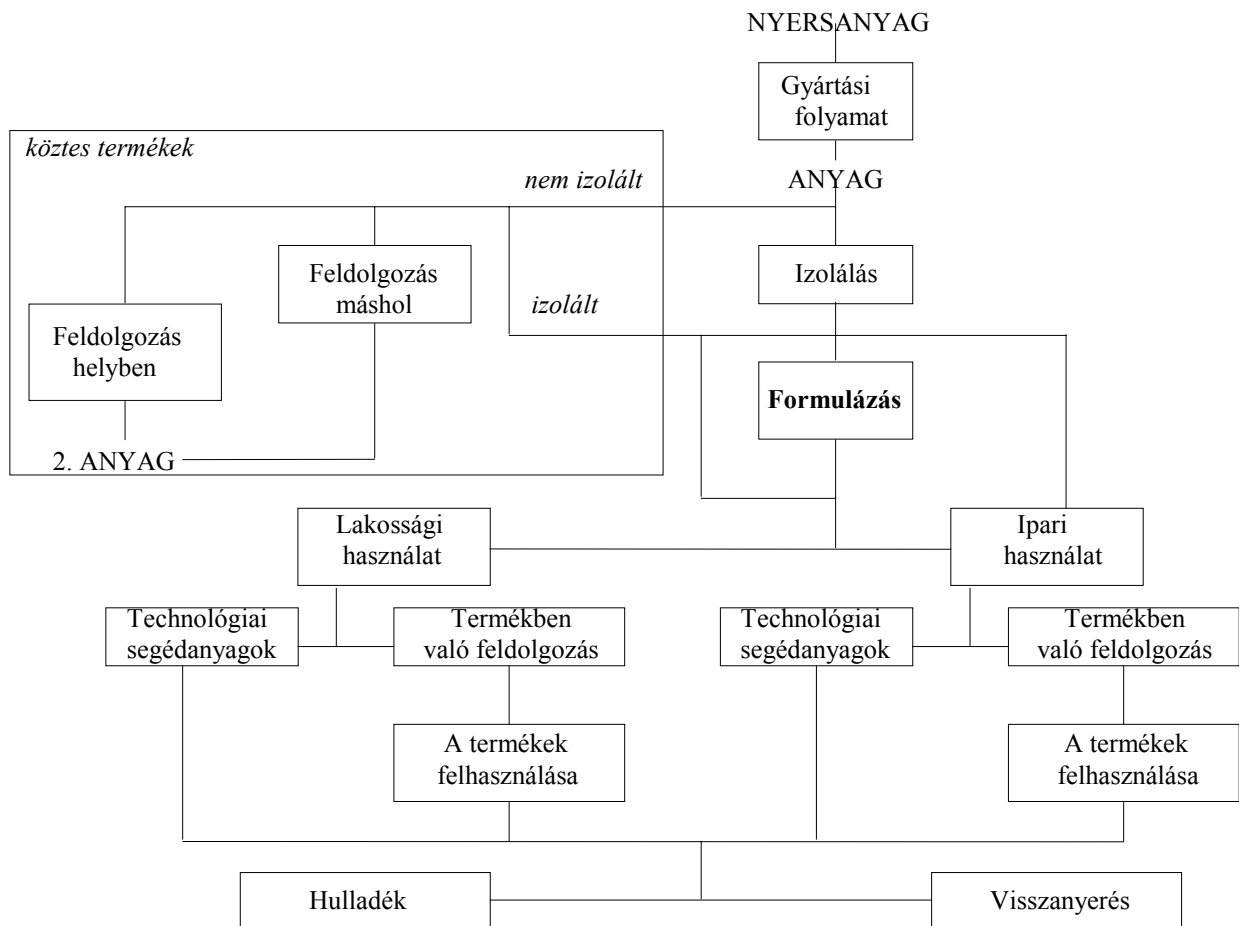
2.3.3 A kibocsátás becslése

Ebben a részben az alábbi paramétereket határozzuk meg:

- egy emissziós eseményre jellemző lokális emissziós ráták levegőbe és szennyvízbe
- regionális kibocsátások levegőbe, szennyvízbe és ipari talajokba (éves átlagok)

2.3.3.1 Az anyagok életciklusa

Környezeti kibocsátások az anyag életciklusának bármely szakaszában történhetnek (3. ábra). Az alábbiakban összefoglalóan tárgyaljuk ezeket a szakaszokat.



3. ábra Az anyagok életciklusának sematikus ábrázolása

Előállítás

A gyártás, termelés az a szakasz, amelynek során az anyagot előállítják, azaz kémiai reakció(k) segítségével előállítják, majd izolálják, tisztítják és hordókban vagy zsákokban, stb. kiszerezik. A köztes termékek (más anyagok előállítására használt alapanyagok) esetében meg kell különböztetni az izolált és a nem izolált köztes termékeket, a korlátozott, a helyi felhasználású és egyéb köztes termékeket, ahogy az a 3. ábrán szerepel. A "nem izolált" itt azt jelenti, hogy az anyagot a reakcióelegyből nem izolálják, hanem ugyanabban a berendezésben egy következő reakciólépésben közvetlenül egy másik anyaggá alakítják át. A "korlátozott" pedig azt jelenti, hogy az anyagot ugyanazon a helyen állítják elő, majd használják fel.

Ez azt jelzi, hogy az előállítás/gyártás és feldolgozás (a következő anyaggá történő átalakítás) ugyanott történik. A "helyi felhasználású" viszont azt jelenti, hogy a köztes terméket a

vállalaton belül egy másik üzemben használják fel, de külső vevőknek nem adják el. Így tehát a helyi felhasználású és egyéb köztes termékek kibocsátása nem ugyanazon a helyen történik, mint ahol a másik anyaggá történő átalakítás.

Formulázás

A formulázás során az anyagokat összekeverik, és egyéb módon kezelik, hogy előállítsanak valamely terméket vagy készítményt. A termék lehet például egy festék, vagy fotófilm. Az így kialakított készítményeket azután az életciklus következő szakaszában (feldolgozás) alkalmazzák vagy használják fel.

Feldolgozás

A feldolgozási szakasz sokféle folyamatot foglalhat magába, amelynek során az anyagot önmagában, vagy a kialakított készítményben, vagy egy a vizsgált anyagot tartalmazó árucikk formájában alkalmazzák, vagy felhasználják. Az anyag lehet technológiai segédanyag, vagy beépülhet a termékbe. Technológiai segédanyag például a filmelőhívó, amelyet használat után eldobnak. Meg kell jegyezni, hogy a fotófilmek és papírok gyártása is felfogható úgy, mint összetevőik feldolgozása. Ezeket az anyagokat azonban az expozíciót követően tovább kezeli (előhívás, fixálás). Ezért tehát a fotófilm és fotópapír gyártást formulázásnak tekintjük. Az olyan jellegű árucikkeket, mint például egy műanyag játék vagy egy, a vizsgált anyagot tartalmazó réteggel bevont terméket több éven át is használhatunk. A migrációval, kioldódással vagy kipárolgással létrejövő környezeti kibocsátás ez alatt az idő alatt az anyag bekerülését követően először nő, majd egy maximum elérése után csökkenni kezd. A feldolgozás lehet egyrészt nagyon nagy volumenű (azaz történhet egy vagy csak néhány ipari üzemben), vagy lehet kis volumenű is, de még mindig kereskedelmi/ipari jellegű.

Lakossági használat

Az anyag (önmagában, vagy készítményekben, mint például kozmetikumok, vagy irtószerek) alkalmazása vagy felhasználása háztartási (fogyasztói) méretekben történik.

Ártalmatlanítás

Az ártalmatlanítás szakaszában az anyag (vagy az anyagot tartalmazó termékek) a szilárd vagy folyékony hulladékká válnak. A hulladékkezelés módja lehet lerakás vagy elégetés. Az ekkor jelentkező kibocsátást eddig nem vettük figyelembe, mivel nincsen elegendő adat a lerakókból való kioldódásra, illetve az égetéskor kiszabaduló el nem bomlott anyag mennyiségére. Ebben a szakaszban anyagvisszanyerés is történhet. A visszanyerésnél kétféle helyzettel számolhatunk. Az első esetben a vizsgált anyagot visszanyerik és újra hasznosítják. Ilyen esetben csak korlátozott kibocsátással kell számolni. A második esetben egy másik anyag vagy termék kerül újra hasznosításra, és a vizsgált anyag ebben a termékben lehet jelen. A kibocsátás ilyenkor általában nagyobb lesz, mivel nem a vizsgált anyag reciklálása áll az elsődleges figyelem középpontjában, hanem a másik anyag vagy termék visszanyerése.

Ha egy olyan anyagot veszünk, amely valamilyen előhívó vagy fixír oldat összetevője, akkor a kibocsátás az ezüst visszanyerést követő ártalmatlanításkor keletkezik. A nyomdafestékek összetevői pedig a papír reciklálás tintamentesítési fázisában távoznak a szennyvízzel.

2.3.3.2 Az emisszió típusai és forrásai

Az emissziós helyzetek a jól definiálható (egyedi vagy csoportos) pontforrásoktól kezdve a diffúz jellegű, sok apró pontforráson (mint például a háztartások) át a vonalas forrásokig (pl. az autópályák mentén jelentkező közlekedési emisszió), illetve a folyamatos és időszakos kibocsátásokig igen sokfélék lehetnek. A folyamatos kibocsátásokra viszonylag hosszú időn át közel állandó kibocsátási ráta jellemző (ilyen lehet például egy olyan folyamatos technológiából származó kibocsátás, mint az olajfinomítás). Az időszakos emissziók lehetnek csúcs, vagy tömbös jellegűek (ld. 2.3.4.4 pont). A csúcs típusú emissziók esetében viszonylag rövid idő alatti nagy mennyiségű kibocsátás történik, a csúcsok közötti idő hossza illetve a csúcs magassága viszont igen változatos lehet (ilyen például amikor szakaszos szintéziseknél az anyag izolálását követően leengedik az elhasznált folyadékokat, reakcióelegyeket). A tömbös jellegű emissziók esetében a kibocsátás bizonyos ideig viszonylag állandó rátával történik, majd rendszeres időközönként szünetel, amikor is a háttér emisszió lecsökken, vagy akár meg is szűnhet (ilyen pl. a napközbeni forgalomból származó emisszió; a csúcsforgalmi időszakokban pedig különösen nagy lehet a kibocsátás). Az egyes folyamatok során kibocsátott anyag mennyisége elérheti a 100%-ot is (például a háztartási vegyszerek, vagy a festékekben lévő szerves oldószerek esetében), de lehet akár 1%-nál is kisebb (például zárt rendszerekben keletkező anyagok és köztes termékek esetében).

2.3.3.3 A kibocsátás becslése

Nyilvánvaló, hogy a kibocsátás a használati mintázatoktól függ. Ezen belül három kategóriát különböztetünk meg, ezek a fő kategóriák, az ipari kategóriák és a funkcionális vagy felhasználási kategóriák. A kategóriákkal kapcsolatosan részletesebb tájékoztatást a 4. fejezetben adunk. A fő kategóriák célja az anyag használatával kapcsolatos expozíciós relevancia általános meghatározása. A környezeti kockázatbecslés keretében a fő kategóriákat az anyag életciklusának egyes meghatározott szakaszaiban (gyártás, formulázás és feldolgozás) jelentkező emissziók becsléséhez a kibocsátási scenáriók jellemzésére is felhasználhatjuk. A fő kategóriák tehát hozzárendelhetők azokhoz a kibocsátási frakciókhoz, amelyeket specifikus információk hiányában előválasztott értéként szoktak alkalmazni. A "zárt rendszerben történő alkalmazás", mint olyan, egy olyan feldolgozási fázist jelöl, ahol az anyagot egy átalakítóban vagy egy hűtő keringési rendszerében használják; másrészt olyan gyártási fázisra is utalhat, ahol az anyag, mint egy köztes termék, zárt berendezésben kerül előállításra. A "mátrixba zárással járó használat" egy olyan formulázási lépést jelölhet, mint például amikor egy anyagot emulziós réteg formájában felvisznek a fotófilmre. Emellett utalhat egy olyan feldolgozási lépésre is, mint például amikor a festékhez adott UV-stabilizáló végül a felvitt festékrétegben marad.

A "nem elterjedt használat" és a "széles körben elterjedt használat" az emisszió források számával (és méretével) kapcsolatos.

Az ipari kategóriák megadják azt az ágazatot (beleértve a háztartási vagy személyi, illetve közösségi használatot is), ahol az anyag vagy az anyagot tartalmazó készítmények vagy termékek használata jelentős emissziót okoz. Ebben a rendszerben néhány fontosabb kibocsátó forráshoz nem tartozik megfelelő kategória, ezért ezeket az "Egyéb kategóriába"

(kategória szám: 15/0) kell sorolni. Ilyenek például - az üzemanyagok és üzemanyag adalékok kivételével - a gépjárművekben felhasznált anyagokból származó kibocsátások.

A felhasználási vagy funkcionális kategóriák az anyagra jellemző funkciót vagy alkalmazási területet adják meg. 55 használati kategória létezik, amelyek részletezettsége igen változó. A fotózáshoz használt anyagokra például csak egy kategória létezik, a 42. (fotóvegyszerek). A különböző típusú fotózási vegyszerek emissziója azonban nagy mértékben eltérő lehet; a filmek gyártásakor az ezüst-vegyületek kristálynövekedését befolyásoló adalékok kibocsátása például meghaladhatja akár az 50%-ot is, míg a többi anyag kibocsátása ebben a szakaszban nagyon alacsony. Nincs például általános kategória a "műanyag adalékokra" sem, sőt számos további specifikus kategória is hiányzik; kivételt képez például a 47. "Képlékenyítők" (= plasztikálók) és a 49. "Stabilizálók" (hő- és UV-stabilizálók) kategória.

Az életciklus egyes szakaszaiban jelentkező kibocsátás becslése az alábbi fontossági sorrendben történik:

- (1) az adott anyaggal kapcsolatos specifikus információk (pl. a gyártótól, a termék jegyzékekből vagy a szakirodalomból);
- (2) specifikus információk az sokféle ipari kategóriához megadott és a 7. fejezetben ismertetett kibocsátási forгатókönyvek (szcenáriók) dokumentumaiból (felhasználási kategóriára vonatkozó dokumentumok);
- (3) az I. melléklet kibocsátási táblázataiban szereplő emissziós faktorok.

Meg kell jegyezni, hogy más kategóriákban is keletkezhet jelentős emisszió, mint ahova az anyag eredetileg besorolásra került. A festékek összetevői például a 14. kategóriába tartoznak ("Festékek, lakkok és fényezőanyagok"). Bár a lokális oldószer emisszió jelentős lehet egy adott pontforrásnál (a festékgyárban) a formulázás (festékgyártás) során, az oldószerek legnagyobb részben a felhasználás során kerül kibocsátásra. A festék típusától függően az alkalmazás sokféle ipari kategóriába sorolható. A barkácsfestékeket például az 5. kategóriába ("Személyi vagy háztartási alkalmazás"), a gépjárművek újrafényezéséhez használt, illetve a hivatásos festők által alkalmazott festékeket viszont a 15/0. "Egyéb" kategóriába (széles körben elterjedő használat, ami diffúz kibocsátást jelent) soroljuk. A gépjárműgyártásban használt festékek a 16. kategóriába tartoznak ("Gépgyártás: építőmérnöki és mechanikus"), amely nem elterjedő használatnak tekintendő, mivel olyan kevés a nagy pontforrás.

Zavart okozhat, ha a meghatározott ipari kategóriába tartozó anyagokat más ágazatok is használják. Ilyen eset az például, ha az elektronikai ágazatban egy epoxigyanta adalékot az elektronikai alkatrészek beágyazására alkalmaznak. Bár ez a folyamat a 4. kategóriához tartozik ("Elektromos és elektronikai gépgyártás"), az epoxigyanták feldolgozása a 11. kategóriába tartozik ("Polimer vegyipar"). A folyamat során keletkező kibocsátás az utóbbi kategóriához tartozó táblázatban található majd.

A vegyipar esetében két különálló ipari kategóriát különböztetünk meg, az egyikbe az alapvegyszerek gyártása tartozik, míg a másik a szintézisekhez használt vegyszerek kategóriája. Az alapvegyszerek közé olyan általános felhasználású vegyszerek tartoznak, mint például az oldószerek, és a pH-szabályozó reagensek (azaz savak és lúgok). Az olajfinomításból származó primér vegyületek is az alapvegyszerek közé tartoznak.

A vegyipari szintézisekhez használt anyagok két csoportba tartoznak, az egyik a köztes termékek (a kiindulási anyagokból előállított olyan termék, amelyet egy következő reakció során egy másik anyaggá alakítanak át) csoportja és az egyéb anyagok. Ez utóbbiak túlnyomó részben 'reakció szabályozók' (pl. gyorsítók, inhibitorok, indikátorok). Az 5. ipari kategória (személyes és háztartási használat) az anyag (tisztán, vagy valamilyen készítményben való) alkalmazása vagy használata definíció szerint háztartási méretekben történik. Az alkalmazás típusa szerint lehetnek pl. ragasztók, kozmetikumok, tisztítószerek, illetve gyógyszerek. Egyes alkalmazásokat már más ipari kategóriákban soroltak a lakossági felhasználási szakaszra vonatkozóan. Ide tartoznak például az üzemanyagok és üzemanyag adalékok (ásványolaj és üzemanyag ipar), a különböző festékek (festék-, lakk- és fényezőanyag ipar) és a fotóvegyeszerkek (fotóipar). A 6. ipari kategóriába (közösségi felhasználás) középületekben, közutakon, parkokban, irodákban, stb. történő használatok és alkalmazások tartoznak

Az I. melléklet "A" táblázatai megadják a megfelelő ipari kategóriában előállított mennyiség levegő-, (szenny)víz- és (ipari) talaj emisszióját (emissziós faktorok) a gyártási, formulázási, feldolgozási, lakossági használati és visszanyerési szakaszban. A megtermelt mennyiség egyenlő az egy év alatt az EK országaiban forgalomba hozott összes mennyiséggel (azaz az unión belül előállított, vagy a tagországokba importált mennyiségek összege, mínusz az exporttal kikerülő mennyiség, kivéve azokat a mennyiségeket, amelyek az importált/exportált termékekben vannak jelen). A teljes kibocsátott mennyiséget éves átlagban adjuk meg, majd ezt használjuk fel a $PEC_{\text{regionális}}$ kiszámításához.

Az I. melléklet "B" táblázatait a pontforrásokból történő kibocsátások meghatározásához, és ezen keresztül a $PEC_{\text{lokális}}$ értékeléséhez használjuk. A táblázatokban megadjuk az összes kibocsátásnak azt a részét, ami feltehetőleg egyetlen pontforrásokból származik, továbbá azoknak a napoknak a számát, amelyek alatt a kibocsátás történt, ami lehetővé teszi a fő pontforrás napi kibocsátási rátájának meghatározását. A további részletek az I. mellékletben találhatóak. Az új anyagok esetében a becslések a meglévő anyagoknál rendelkezésre álló információk hiányában inkább konzervatív jellegűek. Ha azonban a gyártó megfelelő adatokat közöl, akkor a kibocsátási táblázatokban megadott előválasztott értékek helyett ezeket kell felhasználni.

Annak elősegítésére, hogy az emissziós táblázatokban könnyen megtaláljuk a lehető legjobb címszót, az I. mellékletben található egy lista is, amelyik tartalmazza az anyagok használatára vonatkozó szinonimákat. A szinonimákat és a hozzájuk tartozó definíciókat az US-EPA ChemUSES listájából (US-EPA, 1980) vettük át.

Általánosságban a gyártók által közölt adatok is segítik a pontos címszó megtalálását a táblázatokban, kivéve az 5. fejezetben megadott klasszifikációnál.

A megtermelt mennyiséget az adatsorban tonna/év mértékegységben fejezzük ki, jelölése "PRODVOL". A "TONNAGE" jelölés azt a mennyiséget jelzi, amit az életciklus következő szakaszaiban felhasználnak. Az I.B melléklet emissziós táblázataiban a gyártási kibocsátás becslésekor a T helyén a PRODVOL-t kell használni, a TONNAGE-t pedig az életciklus további szakaszainál kell alkalmazni.

$$TONNAGE = PRODVOL + IMPORT - EXPORT \quad (1)$$

Jelölések:

PRODVOL	megtermelt mennyiség	[tonna.év ⁻¹]	szolgáltatott adat
IMPORT	az importált mennyiség	[tonna.év ⁻¹]	szolgáltatott adat
EXPORT	az exportált mennyiség	[tonna.év ⁻¹]	szolgáltatott adat
TONNAGE	az összes tonna	[tonna.év ⁻¹]	

Az életciklus egyes szakaszaiban történő kibocsátást (tonna/év-ben) az egyes környezeti elemek esetében az I.A mellékletben megadott egyenletekkel lehet kiszámolni, jelölése KIBOCSÁTÁS_{i,j} (ahol *i* az életciklus megfelelő szakasza, *j* pedig az adott környezeti elem):

<i>i</i>	az életciklus szakasza	<i>j</i>	a környezeti elem
1	gyártás	l	levegő
2	formulázás	v	víz
3	feldolgozás	t	ipari talaj
4	lakossági felhasználás		
5	visszanyerés		

A következő táblázatban az I. mellékletben található emissziós táblázatok input változóit adjuk meg, továbbá ugyanezen táblázatok eredményeként kapott kibocsátásokat és az I. melléklet számítási módszereit.

Input:

MAINCAT	fő kategória	[-]	szolgáltatott adat
INDCAT	ipari kategória	[-]	szolgáltatott adat
USECAT	használati kategória	[-]	szolgáltatott adat
TONNAGE	az összes tonna (megtermelt mennyiség + import – export)	[tonna.év ⁻¹]	1. egyenlet
PRODVOL	a megtermelt mennyiség	[tonna.év ⁻¹]	szolgáltatott adat
SOL	vízoldékonyság	[mg.l]	szolgáltatott adat
VP	gőznyomás	[Pa]	szolgáltatott adat
BOILPT	forráspont (csak bizonyos becslésekhez)	[°C]	szolgáltatott adat

Az anyag felhasználási formájával kapcsolatos speciális információk

Output:

KIBOCSÁTÁS _i	az életciklus <i>i</i> szakaszban a <i>j</i> elembe kibocsátott mennyiség	[-]	I.A melléklet
Főforrás _j	a kibocsátásnak a lokális fő forrásra eső része az életciklus <i>i</i> szakaszában	[-]	I.B melléklet
Temisszió _i	az életciklus <i>i</i> szakaszában az emissziós napok száma	[nap]	I. B melléklet

Minden egyes szakaszban figyelembe kell venni az előző szakasz veszteségét (a számolást ld. az I. mellékletben). Felhívjuk a figyelmet, hogy a gyártáskor/előállításkor jelentkező kibocsátást a többi szakasznál nem vesszük figyelembe, mivel ezek a kibocsátások általában már figyelembe lettek véve a megtermelt mennyiségben. Bizonyos esetekben ez azt eredményezheti, hogy az összes kibocsátás nagyobb lesz, mint 100%. Ilyenkor a referensnek kell eldöntenie, hogy az egyes fázisokhoz tartozó kibocsátások megfelelőek-e, avagy sem. Amennyiben egy adott szakaszra a vonatkozó kibocsátás nem releváns, a kibocsátási frakciót itt nullának kell venni.

Miután figyelembe vettük az öt különböző szakaszban jelentkező veszteségeket, a megmaradó mennyiségről feltesszük, hogy valamilyen formában hulladékká válik. Az ártalmatlanítási (= hulladékká válási) szakaszban jelentkező emissziók becsléséhez jelenleg nem állnak rendelkezésre kvantitatív módszerek. Sőt, a vizsgált anyagot tartalmazó termékek (II. fő kategória), pl. a televízió és rádió készülékekben használt műanyagokban lévő égésgátló adalékok, élettartama során jelentkező kibocsátás becsléséhez sincs megfelelő kvantitatív eljárás. Annak ellenére azonban, hogy az ilyen jellegű emissziók becsléséhez hiányoznak a megfelelő kvantitatív módszerek, eseti megítélés alapján lehet készíteni előzetes kvantitatív kockázatbecslést.

Az egyes környezeti elemekbe történő lokális emissziók esetében az életciklus minden egyes szakaszában meg kell vizsgálni a fő pontforrást. Az emissziós rátát napi (24 órás) átlagban adjuk meg. Ez azt is jelenti, hogy még akkor is, ha a kibocsátás csak napi néhány órában folyik, az emissziót 24 órára átlagolni kell. A levegőbe és vízbe való kibocsátást az emissziós események során jelentkező emissziós rátával jellemezzük. A lokális emisszió az életciklus minden egyes szakaszára és minden egyes környezeti elemre vonatkozóan:

$$E_{\text{lokális}_{i,j}} = F_{\text{főforrás}_i} \cdot \frac{1000}{T_{\text{emisszió}_i}} \cdot K_{\text{IBOCSÁTÁS}_{i,j}} \quad (2)$$

Jelölések:

KIBOCSÁTÁS _{i,j}	az életciklus <i>i</i> szakaszban a <i>j</i> elembe kibocsátott mennyiség	[tonna.év ⁻¹]	I.A melléklet
Ffőforrás _i	a kibocsátásnak a lokális fő forrásra eső része az életciklus <i>i</i> szakaszában	[-]	I.B melléklet
Temisszió _i	az életciklus <i>i</i> szakaszában az emissziós napok száma	[nap.év ⁻¹]	I. B melléklet
Elokális _{i,j}	az életciklus <i>i</i> szakaszában a <i>j</i> környezeti elembe történő kibocsátás egy emissziós esemény során	[tonna.év ⁻¹]	

A lokális kibocsátások becsléséhez először meg kell határozni a pontforrásokat (és feltehetőleg az életciklus egyes szakaszait is). Általában az életciklus mindegyik szakaszára el kell végezni a becslést és meg kell állapítani, hogy fellépnek-e káros hatások, mert az életciklus egyes szakaszaiban meghatározott kockázatok tisztázása vagy csökkentése érdekében meg kell hozni a megfelelő döntéseket. Erre csak azokban a szakaszokban nincs szükség, ahol a kibocsátás nyilvánvalóan elhanyagolható. A regionális szintű felméréshez mindegyik környezeti elemnél össze kell adni az életciklus egyes szakaszaiban jelentkező kibocsátásokat. Az emissziókat konstansnak és az év során folyamatosnak feltételezzük. A regionális emisszió tehát:

$$E_{\text{regionális}_j} = \frac{1000}{365} \cdot \sum_{i=1}^5 KIBOCSÁTÁS_{i,j} \quad (3)$$

Jelölések:

$KIBOCSÁTÁS_{i,j}$	az élelciklus i szakaszban a j elembe kibocsátott mennyiség	[tonna.év ⁻¹]	I.A melléklet
$E_{\text{regionális}_j}$	a j környezeti elembe történő összes kibocsátás (éves átlag)	[kg.nap ⁻¹]	

A lokális és regionális szintű kockázatbecslések során az alábbi szempontokat kell figyelembe venni:

- Különösen a nagy mennyiségben termelt anyagok esetében létezhet időnként különböző ipari kategóriákba tartozó többféle használat. Az ilyen anyagoknál a kockázatbecslés során a gyártók által megadott adatok alapján a megtermelt mennyiséget le kell bontani az egyes alkalmazásokra. A lokális szinten elvben minden alkalmazásnál fel kell mérni az élelciklus összes szakaszát. Ahol egy helyszínen az élelciklus több szakasza is zajlik, a $PEC_{\text{lokális}}$ számításakor össze kell adni a helyszínen történő emissziókat. A szennyvízzel történő kibocsátás esetében a lokális szennyvíztisztítót egyetlen pontforrásként kell kezelni. A regionális kockázatbecslésnél minden egyes környezeti elembe történő kibocsátást össze kell adni az élelciklus minden egyes szakaszára és minden egyes alkalmazásra. A regionális környezeti koncentrációkat a lokális szinten háttér koncentrációként kell felhasználni;
- Ha az anyagot egy olyan termékben alkalmazzák, amelynek átlagos élettartama években mérhető, ez alatt az idő alatt nő az emisszió (pl. egy műanyag cikk, vagy egy festékbevonat, amelyhez a vizsgált anyagot plasztikálóként alkalmazzák). A közeljövőben ezzel kapcsolatosan további útmutatás várható;
- Az I.A melléklet táblázataiban az emisszió-csökkentő technológiákat nem vettük figyelembe, mivel mind az alkalmazott technológiák (amelyek hatékonysága valószínűleg igen különböző lehet) és az áteresztés mértéke az egyes tagállamok vagy ipari ágazatok között nagyon eltérhet. Csak olyan esetekben számoltunk az emisszió csökkentő technológiákkal, ahol ez egy adott folyamatnál bevett gyakorlat. Minden egyéb esetben az ésszerű legrosszabb eseti feltételezéssel éltünk.

2.3.3.4 Időszakos kibocsátások

Sok anyag kerül a környezetbe olyan ipari forrásokból, ahol a technológia inkább szakaszos, mint folyamatos jellegű. Szélsőséges esetekben az anyag csak évente néhány alkalommal kerül kibocsátásra. Mivel az ipari kibocsátásokhoz tartozó PEC értékek figyelembe veszik mind az összes kibocsátást, mint pedig az emissziós napok számát, a kockázatok jellemzéséhez használt PEC értékeket ez elvben nem érinti. A $PEC_{\text{lokális}}$ -t mindig a napi kibocsátási ráta alapján határozzuk meg függetlenül attól, hogy a kibocsátás folyamatos, vagy időszakos. A $PEC_{\text{lokális}}$ a pontforrástól adott távolságban kialakuló koncentrációt adja meg egy olyan napra, amikor van emisszió. A kibocsátásról mindig feltételezzük, hogy egy 24 órás időszakot tekintve folyamatos. A $PEC_{\text{regionális}}$ -t viszont az éves kibocsátási ráta alapján számoljuk.

Ez a várható steady-state koncentrációt adja meg, függetlenül attól, hogy történik-e kibocsátás, avagy sem.

Az időszakos kibocsátást definiálni kell, habár a referensnek minden egyes esetben indokolnia kell, ha ezt a forgatókönyvet választja. Az időszakos kibocsátás a következőképpen definiálható:

- időszakos, de csak viszonylag ritkán - havi egynél kevesebb alkalommal, és akkor is maximum 24 órán át - fellépő kibocsátás.

Ez valószínűleg megfelel egy olyan tipikus szakaszos technológiának, amit az év során csak rövid ideig működtetnek (azaz a környezetbe történő kibocsátás is csak korlátozott ideig tart). A vízi környezet esetében tehát a transzport mechanizmusok biztosítják, hogy a vízben élő szervezetek expozíciója csak rövid ideig tartson. Az expozíciós időszak várható hosszának számításakor figyelembe kell venni azt is, hogy az anyag nem kerülhet-e jelentős mértékben az üledékbe. Egy ilyen jellegű megoszlás esetében egyrészt csökken a $PEC_{lokális,víz}$, másrészt viszont nőhet az expozíció időtartama, mivel az üledékből folyamatosan visszakerülhet az anyag a vízbe. Az időszakos vízbe történő kibocsátások esetében a kockázatok jellemzéséhez egy megfelelő PNEC értéket kell használni (ld. 3.2.2 pont).

Ahol a szakaszos technológiát a fent megadottnál gyakrabban, vagy hosszabb ideig kerül alkalmazásra, a rövid idejű hatások kivédése nem garantálható, mivel a halak, a gyökeres növények és a nagyobb gerinctelenek expozíciója nőhet a második, vagy következő emissziók idején. Amennyiben egy anyagnál megállapítják az időszakos kibocsátást, ez nem feltétlenül érvényes az életciklus összes szakaszára.

2.3.4 A környezeti elemek jellemzése

Ebben a részben az alábbi paramétereket határozzuk meg:

- a standard környezet jellemzői (3. táblázat)
- a talajok, üledékek és szuszpendált anyagok sűrűsége

A lokális és regionális PEC-ek számításakor meg kell határozni egy általános standardizált környezetet, mivel célunk, hogy az egész EU-ra egyetlen kockázat jellemzést készítsünk. A valós környezet jellemzői térben is időben nyilvánvalóan ingadoznak. A 3. táblázatban soroltuk fel az egyes környezeti elemekre jellemző átlagos vagy tipikus előválasztott értékeket (ezek az értékek egyenlőnek tekintendők minden területnagyságra). A standard felmérést a 3. táblázatban megadott előválasztott értékek segítségével kell elvégezni. Amennyiben vannak részletesebb adataink is az emisszió források helyéről, akkor a PEC értékek pontosítása érdekében el lehet térni a 3. táblázatban megadott értékektől.

A 2.3.8.7 pont alatt (10., 11. és 12. táblázatok) megadjuk az általános környezet számos egyéb jellemzőjét (pl. a környezeti elemek mérete, tömeg transzfer együtthatók) is, amelyek főleg a $PEC_{regionális}$ számítása szempontjából relevánsak.

3. táblázat. A standard környezeti jellemzők meghatározásai

Paraméter	Jelölés	Mértékegység	Érték
Általános paraméterek			
A szilárd fázis sűrűsége	RHOszilárd	$[\text{kg}_{\text{szilárd}} \cdot \text{m}_{\text{szilárd}}^{-3}]$	2500
A víz sűrűsége	RHOvíz	$[\text{kg}_{\text{víz}} \cdot \text{m}_{\text{víz}}^{-3}]$	1000
A levegő sűrűsége	RHOlevegő	$[\text{kg}_{\text{levegő}} \cdot \text{m}_{\text{levegő}}^{-3}]$	1,3
Hőmérséklet (12°C)	TEMP	[K]	285
Felszíni vizek			
Szuszpendált koncentráció (száraz súly)	SZUSZP _{víz}	$[\text{mg}_{\text{szilárd}} \cdot \text{l}_{\text{víz}}^{-1}]$	15
Szuszpendált anyag			
A szuszpendált anyagban lévő szilárd frakció térfogata	Fszilárd _{szuszp}	$[\text{m}_{\text{szilárd}}^3 \cdot \text{m}_{\text{szuszp}}^{-3}]$	0,1
A szuszpendált anyagban lévő víz térfogata	Fvíz _{szuszp}	$[\text{m}_{\text{víz}}^3 \cdot \text{m}_{\text{szuszp}}^{-3}]$	0,9
A szuszpendált szilárd anyagban lévő szerves szén súlya	FSZSZ _{szuszp}	$[\text{kg}_{\text{szsz}} \cdot \text{kg}_{\text{szilárd}}^{-1}]$	0,1
Üledék			
Az üledékben lévő szilárd anyag térfogata	Fszilárd _{üledék}	$[\text{m}_{\text{szilárd}}^3 \cdot \text{m}_{\text{üledék}}^{-3}]$	0,2
Az üledékben lévő víz térfogata	Fvíz _{üledék}	$[\text{m}_{\text{víz}}^3 \cdot \text{m}_{\text{üledék}}^{-3}]$	0,8
Az üledékben lévő szilárd anyag szerves szén tartalma	FSZSZ _{üledék}	$[\text{kg}_{\text{szsz}} \cdot \text{kg}_{\text{üledék}}^{-1}]$	0,05
Talaj			
A talajban lévő szilárd anyag térfogata	Fszilárd _{talaj}	$[\text{m}_{\text{szilárd}}^3 \cdot \text{m}_{\text{talaj}}^{-3}]$	0,6
A talajban lévő víz térfogata	Fvíz _{talaj}	$[\text{m}_{\text{víz}}^3 \cdot \text{m}_{\text{talaj}}^{-3}]$	0,2
A talajban lévő levegő térfogata	Flevegő _{talaj}	$[\text{m}_{\text{levegő}}^3 \cdot \text{m}_{\text{talaj}}^{-3}]$	0,2
A talajban lévő szilárd anyag szerves szén tartalma	FSZSZ _{talaj}	$[\text{kg}_{\text{szsz}} \cdot \text{kg}_{\text{talaj}}^{-1}]$	0,02
A talajban lévő szilárd anyag szerves anyag tartalma	Fsza _{talaj}	$[\text{kg}_{\text{sza}} \cdot \text{kg}_{\text{talaj}}^{-1}]$	0,034

A talaj, az üledék és a szuszpendált anyag három fázisból áll: levegő (csak a talaj esetében releváns), szilárd anyag és víz. Az egyes környezeti elemek sűrűségét tehát az egyes fázisok térfogataránya és sűrűsége határozza meg. Mind a szilárd és a víz frakció, mind pedig a sűrűség a további számításokhoz kell. Ez azt is jelenti, hogy az egyes környezeti elemek sűrűségében bekövetkező változások nem függetlenek az egyes fázisok arányától és fordítva.

A talaj, az üledék és a szuszpendált anyag sűrűségét a három különálló fázis aránya határozza meg az alábbiak szerint:

$$RHO_{elem} = F_{szilárd_{elem}} \cdot RHO_{szilárd} + F_{víz_{elem}} \cdot RHO_{víz} + F_{levegő_{elem}} \cdot RHO_{levegő} \quad (4)$$

ahol az elem \in {talaj, üledék, szuszpendált anyag}

Jelölések:

$F_{x_{elem}}$	az x fázis aránya az adott <i>elem</i> ben	$[m^3 \cdot m^{-3}]$	3. táblázat
RHO_x	az x fázis sűrűsége	$[kg \cdot m^{-3}]$	3. táblázat
RHO_{elem}	az <i>elem</i> nedves sűrűsége	$[kg \cdot m^{-3}]$	

Ha a fenti egyenletekbe behelyettesítjük a megadott értékeket, az egyes elemek (kompart-mentek) sűrűségére az alábbi értékeket kapjuk:

A környezeti elemre jellemző teljes sűrűség:

RHO_{szuszp}	A (nedves) szuszpendált anyag sűrűsége	$[kg \cdot m^{-3}]$	1150
$RHO_{üledék}$	A (nedves) üledék sűrűsége	$[kg \cdot m^{-3}]$	1300
RHO_{talaj}	A (nedves) talaj sűrűsége	$[kg \cdot m^{-3}]$	1700

2.3.5 Megoszlási hányadosok

Ebben a részben az alábbi paramétereket/folyamatokat határozzuk meg:

- a levegőben jelenlévő anyag aeroszolhoz kötött része,
- megoszlás a levegő és a víz között,
- megoszlás a talajban, üledékben és szuszpendált anyagban lévő szilárd anyagok és víz között.

A transzport és az átalakulás ("sors") adja meg az anyag megoszlását a környezetben illetve az élő szervezetekben, továbbá ennek (koncentráció, forma, stb.) változásait az idő során. Mivel az egyes környezeti elemekben megvalósuló sorsfolyamatokkal kapcsolatban általában nincsenek mérési adatok, ezeket a 2.3.2 pontban megadott primér adatok extrapolálásával lehet meghatározni. Ebben a részben ismertetjük, hogy az egyes környezeti elemekben milyen megoszlások vannak a levegő-aeroszol, a levegő-víz és a szilárd anyag-víz fázisok között.

Meg kell jegyezni, hogy az ionképző anyagok esetében a környezet pH-jától függ a levegő-víz és a szilárd anyag-víz megoszlás. Az ilyen anyagok kockázatbecslésével kapcsolatosan útmutatás a XI. mellékletben található.

Megkötődés aeroszol részecskéken

Az aeroszol részecskékhöz kötött frakciót az anyag gőznyomása alapján Junge (1977) módszerével számíthatjuk ki. Ebben az egyenletben az aláhűtött folyadék gőznyomását kell alkalmazni.

$$Fköt_{aeroszol} = \frac{KONjunge \cdot FELSZ_{aeroszol}}{VP + KONjunge \cdot FELSZ_{aeroszol}} \quad (5)$$

Jelölések:

KONjunge	a Junge egyenlet konstansa	[Pa.m]	*
FELSZ _{aeroszol}	az aeroszol részecskék felszíne	[m ² .m ⁻³]	*
VP	gőznyomás	[Pa]	szolgáltatott adat
Fköt _{aeroszol}	az aeroszol részecskékhez kötött frakció	[-]	

* a KONjunge és a FELSZ_{aeroszol} szorzatának előválasztott értéke 10⁻⁴ Pa (Van de Meent, 1993; Heijna-Merkus & Hof, 1993)

Szilárd anyagok esetében a gőznyomást korrigálni kell ahhoz, hogy megkapjuk az aláhűtött folyadék gőznyomását (Mackay, 1991):

$$VPL = \frac{VP}{e^{6,79 \cdot \left(1 - \frac{TEMP_{olvadás}}{TEMP}\right)}} \quad (6)$$

Jelölések:

TEMP	a környezet hőmérséklete	[K]	285
TEMP _{olvadás}	az anyag olvadáspontja	[K]	szolgáltatott adat
VPL	az aláhűtött folyadék gőznyomása	[Pa]	
VP	gőznyomás	[Pa]	szolgáltatott adat

Párolgás

Az anyag vízfázisból gázfázisba kerülését (pl. kigőzölés a szennyvíztisztító levegőztető medencéjéből, elpárolgás a felszíni vizekből) a Henry-féle állandó alapján számoljuk. Amennyiben ez az adat, nincs meg az adatsorban, akkora Henry-féle állandót és a K_{levegő-víz}-et (más néven a "dimenzió nélküli" Henry-féle állandó) a gőznyomás és a vízdékonyság arányából számolhatjuk ki.

Amennyiben az érvényes OECD irányelvek alapján nem határozható meg megbízhatóan a gőznyomás és/vagy az oldékonyság, a QSAR-okat lehet felhasználni, ezekkel a 3. fejezet nem foglalkozik. Ilyenkor a szerkezeti fragmentumok hozzájárulása megközelítési módszert (Meylan & Howard, 1991; Hine & Mookerjee, 1975) vagy egyéb (Q)SAR módszereket (OECD, 1993a) lehet alkalmazni.

$$HENRY = \frac{VP \cdot MOLW}{SOL} \quad (7)$$

$$K_{\text{levegő-víz}} = \frac{HENRY}{R \cdot TEMP} \quad (8)$$

Jelölések:

VP	gőznyomás	[Pa]	szolgáltatott adat
MOLW	molekulatömeg	[g.mol ⁻¹]	szolgáltatott adat
SOL	oldékonyság	[mg.l ⁻¹]	szolgáltatott adat
R	egyetemes gázállandó	[Pa.m ³ .mol ⁻¹ .k ⁻¹]	8,314
TEMP	a levegő-víz határfelület hőmérséklete	[K]	285
HENRY	Henry-féle állandó	[Pa.m ³ .mol ⁻¹]	
K _{levegő-víz}	levegő-víz megoszlási hányados	[-]	szolgáltatott adat

Adszorpció/deszorpció

A párolgáson kívül a szilárd felületekre történő adszorpció jelenti a megoszlás másik fő mechanizmusát, amellyel az anyag bekerül a talajba, a felszíni vizekbe és az üledékbe. Az anyagok adszorpciója a talajhoz, üledékhez vagy szuszpendált anyagokhoz az alábbiak szerint mérhető vagy számolható:

- Közvetlen mérés;
- Szimulációs tesztelés;
- Adszorpciós vizsgálatokban mért Koc (106. sz. OECD Tesztelési Irányelv);
- HPLC-vel mért Koc (a módszert jelenleg fejlesztik);
- Inherens biológiai degradálhatósági tesztek adszorpció ellenőrzése;
- Ha a Koc nem áll rendelkezésre, akkor a Kow-ból számolható (a megfelelő (Q)SAR-ok a 3. fejezetben található).

Meg kell jegyezni, hogy a felületaktív anyagok esetében az oktanol-víz megoszlási hányadost (Kow) nehéz kísérletesen meghatározni, illetve ez a paraméter amúgy sem tükrözné megfelelően felületi aktivitást, vagy az adszorpciót/deszorpciót (a felületaktív viselkedést).

Amennyiben egy adott adszorbensre nincsenek megfelelő mérési adatok, azt kell feltételezni, hogy az összes adszorpció a közeg szerves anyag tartalmával hozható összefüggésbe, ugyanis a Koc-re való standardizálás (ez csak a nemionos anyagok esetében igaz) az egyes közegek (pl. talaj, üledék, szuszpendált anyag, szennyvíz iszap) különböző szerves szén tartalmán alapszik. A szerves nemionos anyagok esetében, a Koc-t a Kow-ból a 3. fejezetben leírtak szerint lehet meghatározni. Alapvetően az "elsődlegesen hidrofób" osztályra vonatkozó egyenleteket kell alkalmazni. Az anyagok meghatározott csoportjaira egyéb QSAR-okat kell alkalmazni.

A szilárd és a víz fázis közötti megoszlási hányados (K_p) minden környezeti elemben (talaj, üledék, szuszpendált anyag) a K_{oc} -ból és az adott környezeti elemre (kompartmentre) jellemző szerves szén arányból számolható. Először a 3. táblázatban megadott, a standard környezetre vonatkozó előválasztott értéket kell alkalmazni a szerves szén arányra.

$$K_p = F_{szsz_{elem}} \cdot K_{oc} \quad \text{ahol az elem} \in \{\text{talaj, üledék, szuszpendált anyag}\} \quad (9)$$

Jelölések:

K_{oc}	megoszlási hányados a víz és a szerves szén között	$[1.kg^{-1}]$	szolgáltatott adat 3. fejezet
$F_{szsz_{elem}}$	az adott <i>elem</i> ben jellemző szerves szén arány	$[kg.kg^{-1}]$	3. táblázat
$K_{p_{szuszp}}$	szilárd-folyékony megoszlási hányados a szuszpendált anyagban	$[1.kg^{-1}]$	
$K_{p_{üledék}}$	szilárd-folyékony megoszlási hányados az üledékben	$[1.kg^{-1}]$	
$K_{p_{talaj}}$	szilárd-folyékony megoszlási hányados a talajban	$[1.kg^{-1}]$	

A K_p egyenlő a szilárd anyaghoz kötött koncentráció ($mg_{anyag} \cdot kg_{szilárd}^{-1}$ -ban kifejezve) per a pórusvízben oldott koncentráció ($mg_{anyag} \cdot l_{víz}^{-1}$ -ban kifejezve). A K_p dimenzió nélküli formája, vagyis a totál elem-víz megoszlási hányados $/(mg \cdot m_{elem}^{-3})$ ($mg \cdot m_{víz}^{-3}$)-ban/ a talaj három fázisának meghatározásából számolható:

$$K_{elem-víz} = \frac{C_{totál_{elem}}}{C_{pórusvíz_{elem}}}$$

$$K_{elem-víz} = F_{levegő_{elem}} \cdot K_{levegő-víz} + F_{víz_{elem}} + F_{szilárd_{elem}} \cdot \frac{K_{p_{elem}}}{1000} \cdot RHO_{szilárd}$$

$$\text{ahol az elem} \in \{\text{talaj, üledék, szuszpendált anyag}\}$$

(10)

Jelölések:

$F_{víz_{elem}}$	az adott <i>elem</i> ben lévő víz aránya	$[m^3 \cdot m^{-3}]$	3. táblázat
$F_{szilárd_{elem}}$	az adott <i>elem</i> ben lévő szilárd anyag aránya	$[m^3 \cdot m^{-3}]$	3. táblázat
$F_{levegő_{elem}}$	az adott <i>elem</i> ben lévő levegő aránya (csak a talajnál)	$[m^3 \cdot m^{-3}]$	3. táblázat
$RHO_{szilárd}$	a szilárd fázis sűrűsége	$[kg \cdot m^{-3}]$	2500
$K_{p_{elem}}$	az adott <i>elem</i> ben a szilárd és a folyékony fázis közötti megoszlási hányados	$[1.kg^{-1}]$	8. egyenlet
$K_{levegő-víz}$	levegő-víz megoszlási hányados	$[-]$	7. egyenlet
$K_{talaj-víz}$	talaj-víz megoszlási hányados	$[m^3 \cdot m^{-3}]$	
$K_{szuszp-víz}$	a szuszpendált anyag és a víz közötti megoszlási hányados	$[m^3 \cdot m^{-3}]$	
$K_{üledék-víz}$	üledék-víz megoszlási hányados	$[m^3 \cdot m^{-3}]$	

2.3.6 Biotikus és abiotikus bomlási sebességek

Ebben a részben az alábbi folyamatokat ismertetjük:

- hidrolízis a felszíni vizekben,
- fotolízis a felszíni vizekben és a légkörben,
- biológiai bomlás a szennyvíztisztítóban,
- biológiai bomlás az egyes környezeti elemekben (felszíni víz, talaj, üledék).

A transzport és az átalakulás (a vegyi anyag "viselkedése, sorsa") adja meg az anyag megoszlását a környezetben illetve az élő szervezetekben, továbbá ennek (koncentráció, forma, stb.) változásait az idő során és így idetartoznak a biotikus és abiotikus átalakulási folyamatok is. Mivel az egyes környezeti elemekben megvalósuló bomlási folyamatokkal kapcsolatban általában nincsenek mérési adatok, ezeket standardizált laboratóriumi vizsgálat eredményeinek extrapolálásával lehet meghatározni. Ebben a részben meghatározzuk az abiotikus (hidrolízis és fotolízis) és biotikus (a talajban, üledékben, vízben és a szennyvíztisztítás során) lebontási folyamatok sebességi állandóit. A hidrolízis és a fotolízis esetében csak az elsődleges bomlást mérjük. A kockázatbecslés általában a kiindulási anyagra koncentrált, ha azonban stabil bomlástermékek keletkeznek, akkor ezeket is vizsgálni kell.

Hidrolízis

A hidrolizálható anyagok fél-életidejéből (DT50) ki lehet számolni a bomlás sebességi állandóját, amit azután fel lehet használni a $PEC_{\text{lokális}}$ és különösen a $PEC_{\text{regionális}}$ számítására szolgáló modellekben. Egy már elkészült biológiai degradációs vizsgálat eredmény mutatják meg, hogy a hidrolízis termékek maguk is tovább bonthatók-e biológiai úton. Hasonló módon, ha a DT50 kevesebb, mint 12 óra, a környezeti hatásokat valószínűleg inkább a hidrolízis termékeknek kell tulajdonítani, mint magának a kiindulási anyagnak. Ezeket a hatásokat ugyancsak vizsgálni kell. Hasonló alapelvek érvényesek az olyan anyagok esetében is, ahol bizonyított a gyors fotolízis. Bizonyos anyag típusok esetében QSAR módszerek is alkalmazhatók (3. fejezet).

Sok anyag esetében a hidrolízis sebessége nagy mértékben függ a környezet pH-jától és hőmérsékletétől. A kockázatbecslés keretében a 3. táblázatban megadott standard környezeti jellemzőknek megfelelően általában 7-es pH-val és 285 K hőmérséklettel számolunk. Egyes anyagok esetében azonban előfordulhat, hogy más pH-t és hőmérsékletet kell feltételezni ahhoz, hogy az anyag összes potenciális káros hatását fel tudjuk mérni. Ez különösen akkor lehet fontos, ha a hidrolízis profil alapján a pH 4-9 tartományon belül nagy eltérések vannak a hidrolízis sebességében és ismeretes, hogy a releváns toxicitás vagy a stabil kiindulási anyag, vagy egy stabil bomlástermék okozza.

Ahol a 7-estől eltérő pH alkalmazása az oldékony formák jellegének megváltozása miatt (például az ionképző anyagok esetében) nagy mértékben befolyásolja az anyag környezeti eloszlását és toxicitását, mindenképpen biztosítani kell, hogy ezt a végeleges PEC-PNEC összehasonlításkor figyelembe vegyünk.

A hidrolízis fél-életidejéből (ha ismert) az alábbiak szerint számolható a pszeudo elsőrendű sebességi állandó:

$$k_{hidr_{v\acute{z}}} = \frac{\ln 2}{DT50_{hidr_{v\acute{z}}}} \quad (11)$$

Jelölések:

$DT50_{hidr_{v\acute{z}}}$	az anyag hidrolízis fél-életideje a felszíni vizekben	[nap]	szolgáltatott adat
$K_{hidr_{v\acute{z}}}$	a felszíni vizekben folyó hidrolízis elsőrendű sebesség állandója	[nap ⁻¹]	

Fotolízis vízben

A felszíni víztömegek túlnyomó részében az oldott szerves anyagok miatt fény nagy része elnyelődik. Fotolízis tehát csak a legfelső vízrétegekben folyhat. Az olyan közvetett folyamatok mint például a foto-szenzibilizáció vagy az oxigén-tranziensekkel (¹O₂, OH-gyökök, ROO-gyökök) való reakciók nagy mértékben hozzájárulhatnak a bomlás sebességéhez. A fotokémiai degradációs folyamatok a vízben csak akkor válhatnak jelentős tényezővé, ha az anyagok az egyéb degradáló hatásoknak (pl. biológiai bontás és hidrolízis) ellenállnak. Mivel a kvantumhasznosítás számítására nincs megfelelő módszer (ld. 3. fejezet), a felszíni vizekben jelentkező fotodegradáció becsléséhez elengedhetetlen a kvantumhasznosítás kísérletes meghatározása (OECD, 1992c) és az anyag UV-spektrumának felvétele. A fényáram nagyfokú szezonális ingadozása miatt a fotokémiai folyamatokat csak átlagoltan szabad alkalmazni. A PEC_{regionális} modell számításához szükséges átlagos bomlási sebességek meghatározásának módszereit Zepp & Cline (1977), valamint Frank & Klöppfer (1989) írta le.

A természetes víztömegekben megvalósuló fotokémiai átalakulások vizsgálatakor az alábbi szempontokat kell figyelembe venni:

- A beeső fény intenzitása az évszakos és földrajzi körülményektől függően tág határok között változhat. Hosszú távú felmérés esetén lehet átlagértékeket is használni, rövid idejű felmérések esetében azonban kedvezőtlen (téli) napsugárzási viszonyokat kell venni;
- A természetes víztömegekben a fotoreakciók sebességét legtöbbször befolyásolja az oldott és szuszpendált anyagok mennyisége is. Mivel a vizsgált anyag koncentrációja általában elég alacsony például az oldott huminsavak mennyiségéhez képest, a víztömegekbe beható fény sugárzás messze legnagyobb részét a természetes összetevők adszorbeálják.

A regionális modell standard paramétereinek (víz mélység, a szuszpendált szilárd anyagok koncentrációja) felhasználásával a csökkenés akár a 98%-ot is elérheti.

A víztömegek átfogó bomlási sebességébe csak akkor kell bevenni a közvetett (érzékenyített) fotokémiai reakciókat, ha bizonyítható, hogy a többi mechanizmussal összehasonlítva jelentős mértékű bomlás megy végbe ezen az útvonalon, továbbá az ilyen folyamatok eredménye számszerűsíthető. A természetes vizekben végbemenő fotokémiai átalakulás folyamatokkal kapcsolatos komplex számítások megkönnyítésére különböző számítógépes programokat dolgoztak ki (ilyen pl. az AWIBAS (Frank & Klöppfer, 1989); és a GC-SOLAR (Zepp & Cline)).

A vízben végbemenő fotolízishez tartozó fél-életidőből (ha ismert) a látszólagos elsőrendű sebességi állandó a következőképpen számolható:

$$k_{\text{foto}_{\text{v}i\text{z}}} = \frac{\ln 2}{DT50_{\text{foto}_{\text{v}i\text{z}}}} \quad (12)$$

Jelölések:

$DT50_{\text{foto}_{\text{v}i\text{z}}}$	az anyag fotolízis fél-életideje a felszíni vizekben	[nap]	szolgáltatott adat
$k_{\text{foto}_{\text{v}i\text{z}}}$	a felszíni vizekben folyó fotolízis elsőrendű sebesség állandója	[nap ⁻¹]	

Légköri fotokémiai reakciók

Egyes anyagoknál jelentős lehet a közvetlen fotokémiai bomlás, azonban az anyagok túlnyomó többsége esetében a leghatékonyabb troposzférikus eliminációs mechanizmus a fotokémiai úton létrejövő reaktív vegyületekkel, például OH-gyökökkel, ózonnal és nitrátgyökökkel való reakciók. Az OH-gyökökkel való reakciók specifikus elsőrendű sebességi állandóit (k_{OH} , mértékegysége: $\text{cm}^3 \cdot \text{molekula}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$) vagy kísérletesen lehet meghatározni (OECD, 1992c) vagy a (Q)SAR módszerek segítségével lehet számítani (ld. 4. fejezet). A k_{OH} és az atmoszférikus OH-gyök koncentráció segítségével az alábbiak szerint határozhatjuk meg a levegőre vonatkozó látszólagos elsőrendű sebességi állandót:

$$k_{\text{deg}_{\text{levegő}}} = k_{\text{OH}} \cdot \text{OHKONC}_{\text{levegő}} \cdot 24 \cdot 3600 \quad (13)$$

Jelölések:

k_{OH}	az OH-gyökös bomlás specifikus sebességi állandója	$[\text{cm}^3 \cdot \text{molekula}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}]$	szolgáltatott adat/3. fejt.
$\text{OHKONC}_{\text{levegő}}$	atmoszférikus OH-gyök koncentráció	$[\text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3}]$	$5 \cdot 10^5 *$
$k_{\text{deg}_{\text{levegő}}}$	a levegőben történő bomlás látszólagos elsőrendű sebesség állandója	[nap ⁻¹]	

* Nyugat-Európában az OH-gyökök 24 órás átlag koncentrációja körülbelül $5 \cdot 10^5$ molekula. cm^{-3} (BUA, 1992)

Biológiai degradáció a szennyvíztisztítóknban

A legtöbb jelenleg használt biológiai degradációs tesztben az adott anyag mineralizációját mérjük. Ezek a vizsgálatok tehát használható adatokat szolgáltatnak az anyagok mineralizációjával és a lehetséges bomlástermékekkel kapcsolatban. Nem adnak azonban felvilágosítást a kiindulási anyagok elsődleges bomlásának sebességéről, sem pedig a eliminációs százalék mértékéről egy szennyvíztisztító esetében. Ahhoz tehát, hogy fel tudjuk használni a rendelkezésre álló, illetve az érvényes rendelkezésekben előírt biológiai degradációs tesztek eredményeit, a standard tesztek eredményeihez olyan sebességi állandókat kell rendelni, amelyeket fel tudunk használni a szennyvíztisztítók modellezéséhez. Az állandók viszonylag kevés empirikus adatra épülnek, de mivel a bomlási sebességek közvetlen mérése környezetileg jelentős koncentrációkban legtöbbször nem lehetséges, a problémára pragmatikus megoldást kell találni. A szennyvíztisztítók modellezésének céljára biológiai degradációs vizsgálatok eredményei alapján meghatározásra kerültek sebességi állandók, amelyeket a 4. táblázatban soroltunk fel. A 4. táblázatban található összes sebességi állandóra az alábbi előfeltételek vonatkoznak:

- A sebességi állandók csak az anyag vízben oldott részére vonatkoznak. A víz és az iszap fázis közötti megoszlás számítása még a sebességi állandók alkalmazása előtt megtörtént;
- Előnyben kell részesíteni a nemzetközi szabványoknak megfelelő és kellőképpen alátámasztott adatokat;
- Bizonyos anyagok (pl. egyes tisztítószer) esetében magasabb lehet a biológiai degradáció sebessége, ha ezt a kísérleti adatok is alátámasztják.

A nem standard és/vagy a GLP irányelveinek nem megfelelő vizsgálatok eredményeit akkor lehet felhasználni, ha szakvélemény alapján az olyan standard degradációs tesztekkel egyenértékű eredményeket adnak, mint amelyekre a számítási modelleket (pl. SimpleTreat) is alapozzák. Ugyanez vonatkozik a szennyvíztisztítóknban végzett mérésekre, azaz a befolyó és kifolyó szennyvíz in-situ mérési adataira.

4. táblázat. *Elimináció a szennyvíztisztítóknban: A teszt eredmények extrapolációja a szennyvíztisztító modellekben (SimpleTreat) alkalmazott sebességi állandókra*

Teszt eredmények	Sebességi állandó k (óra⁻¹)
Gyors biológiai degradáció ^(a)	1
Gyors, de a 10 napos vizsgálatban negatív ^(a)	0,3
Inherens biológiai bonthatóság, megfelelő a specifikus kritériumoknak is ^(b)	0,1
Inherens biológiai bonthatóság, de nem felel meg a specifikus kritériumoknak ^(b)	0
Biológiailag nem bontható	0

MEGJEGYZÉSEK a 4. táblázathoz:

- (a)** Gyors biológiai bonthatósági teszt (28 napos) (92/69/EGK C.4 A-F, illetve OECD 301 A-F (1992) vagy egyéb ezzel egyenértékű módszer szakvélemény alapján)

A gyors biológiai degradációs tesztben használt körülmények nem kedveznek a biológiai bomlásnak, mivel a vizsgálandó anyag és a mikroorganizmusok aránya túl nagy, továbbá előfordulhat, hogy a kompetens mikrobák száma és/vagy típusa nem elegendő az anyag metabolizmusához.

A degradáció mértékét az alábbi paraméterek mérésével követhetjük: az oldott szerves szén (DOC) fogyása, széndioxid termelés vagy oxigén fogyasztás. Általánosan elfogadott, hogy az anyagot akkor tekintjük biológiailag könnyen lebonthatónak, ha megfelel valamely gyors biológiai degradációs teszt kritériumainak (vö. OECD Tesztelési Irányelvek, vagy az V. melléklet), amelynél egyszerű kinetikai kritériumként például a 10 napos időablak koncepcióját alkalmazzák. A százalékos biológiai bomlási adatok mind a tényleges degradációt tükrözik, azaz az abiotikus eliminációs folyamatokat (pl. párolgás, adszorpció) nem tartalmazó mineralizációt. Ez azt jelenti, hogy a biológiai bontási kísérleteknél megfelelő kontrollokat is be kell állítani. A kísérleteket akár 28 napon túl is lehet folytatni, ha a biológiai bomlás ugyan megkezdődött, de az adott időablakon belül mégsem felel meg a fent említett teljes mineralizációs kritériumoknak: ilyen esetben az anyag nem tekintendő biológiailag könnyen bonthatónak. Amennyiben az adott anyagnál a biológiai bomlás 10 napos időablakon belül nem, de 28 napon belül megfelel a kritériumoknak, a biológiai bontás sebességi állandóját $0,3 \text{ órá}^{-1}$ -nek kell venni. Ha a rendelkezésre álló gyors biológiai degradációs tesztek régebben készültek (vagyis még a 10 napos időablak bevezetése előtt, és csak azt megadva, hogy a kísérletekben az anyag megfelelt-e kritériumoknak), akkor megint csak a $0,3 \text{ órá}^{-1}$ -es sebességi állandót kell elfogadni, feltéve hogy az anyag a kritériumoknak megfelelt. Ha szakvélemény szerint elegendő a bizonyíték (pl. sok régebben elvégzett kísérletek adatai alapján ez indokolt), akkor 1 órá^{-1} -es sebességi állandót is el lehet fogadni.

Amennyiben a vizsgálatok alapján az anyag nem tekintendő biológiailag könnyen bonthatónak, ellenőrizni kell azt is, hogy a teszteléshez használt koncentrációban nem volt-e az anyagnak gátló hatása a mikroorganizmusok aktivitására. Ha kiderül, hogy igen, akkor lehetőség szerint meg kell ismételni a gyors biológiai bomlási tesztet egy olyan koncentrációnál, ahol az anyag nem fejt ilyen jellegű gátló hatást.

- (b)** Inherens biológiai bonthatósági teszt (28 napos) (87/302/EGK, illetve OECD 302 B-C (1981-1992) vagy szakvélemény alapján ezzel egyenértékű módszer)

Az inherens biológiai bonthatósági tesztekben a kísérleti körülmények jobban kedveznek a mikrobiológiai aktivitásnak, mivel alacsonyabb az anyag-sejt arány, mint a gyors tesztekben, és az sincs előírva, hogy a bomlás egy adott időgörbét kövessen, ahogy az a gyors tesztekben szerepel. Ezen kívül megengedett az inokulum előkezelése, ami a mikroorganizmusok adaptációját eredményezheti. A kísérlet időtartama általában legfeljebb 28 nap, de bizonyos esetekben tovább is folytatható. Az ajánlott maximális időtartam 6 hónap. A 28 napnál hosszabb ideig végzett kísérletek eredményei azonban az ennél rövidebb vizsgálatokban kapott adatokkal nem hasonlíthatók össze.

Általában akkor tekintendő egy anyag biológiailag inherensen bonthatónak, ha 28 napon belül 70%-nál magasabb (biológiai) bontást észlelünk. Az inherens tesztek eredményeinek extrapolálásakor azonban nagy körültekintéssel kell eljárni, mivel az ilyen kísérletekben nagyon kedvezőek a biológiai bontás körülményei. Az ebben a kísérletben pozitív eredményt adó anyagokra tehát a sebességi állandót elvben nullának kell venni. A szennyvíztisztító modellhez akkor lehet a sebességi állandót $0,1 \text{ óra}^{-1}$ -nek venni, ha igazolható, hogy:

- a kísérletekben megfigyelt elimináció valóban a biológiai bomlás következménye,
- nem keletkeznek nehezen bontható anyagcsere termékek, és
- az adaptációs idő korlátozott.

A fenti kvalitatív kritériumok átalakításával kaptuk az alábbiakban felsorolt specifikus kritériumokat, amelyeknek a különböző inherens tesztekben meg kell felelni:

Zahn-Wellens teszt: A pozitív eredményt 7 napon belül kell elérni, a log-fázis nem lehet hosszabb, mint 3 nap, a biológiai bontási teszt megkezdése előtti elimináció legyen 15% alatt.

MITI-II teszt: A pozitív eredményt 14 napon belül kell elérni, a log-fázis nem lehet hosszabb, mint 3 nap.

*SCAS tesztek*nél a pozitív eredményekre nincsenek ilyen specifikus kritériumok. Ezeknél akár pozitív, akár negatív eredményt kapunk, a sebességi állandó mindenképpen 0 óra^{-1} .

Biológiai bomlás a felszíni vizekben, az üledékekben és a talajban

A biológiai bomlás sebessége a felszíni vizekben, a talajban és az üledékekben az anyag szerkezetétől, a mikrobák számától, a szerves szén tartalomtól és a hőmérséklettől függ. Ezeknek a paramétereknek nagy a térbeli ingadozása, úgyhogy a biológiai degradáció sebességének pontos becslése még akkor is nagyon nehéz, ha sok laboratóriumi, vagy helyszíni kísérletes adat áll rendelkezésre. A sors-modellekben és expozíciós modellekben általában az alábbi egyszerűsítésekkel élünk:

- A biológiai bomlás kinetikailag látszólag elsőrendű;
- Az anyagnak csak az oldott frakciója hozzáférhető a biológiai bontás számára.

A biológiai bonthatósággal kapcsolatosan az üledékre és a talajra általában nincsenek specifikus adatok. Ebben a két elemben tehát a standardizált tesztek eredményei alapján becsülni kell a sebességi állandót.

Az üledék mélyebb rétegeiben általában anaerob körülmények uralkodnak. Az aerob biológiai bonthatóság alapján azonban nem lehet következtetéseket levonni az anaerob degradációval kapcsolatban. Az anaerob vizsgálatokkal kapcsolatban már van egy irányelv tervezet (ISO Draft 11734). Ez a szűrési tesztelési módszer a szennyvíztisztítók emésztőiben folyó anaerob degradációs potenciál vizsgálatát célozza.

Az 5. táblázatban néhány, a felszíni vizekre ajánlott elsőrendű sebességi állandót szerepel, amelyeket a lokális és különösen a regionális modellekben használhatunk, és amelyek a biológiai bonthatósági tesztek eredményein alapszanak. Az inherens tesztek eredményeinek értelmezését és felhasználását a szennyvíztisztítóban történő elimináció sebességi állandójának meghatározásához olyan kinetikai kritériumok befolyásolják, amelyeket az inherens tesztekben alkalmazott végtelen iszap retenciós időknek a szennyvíztisztításban

alkalmazott korlátozott növekedési időkre (5-20 nap SRT) történő extrapolálása által okozott problémák megoldására dolgoztak ki. A kritériumok alkalmazására azonban nincsen szükség az inherens biológiai bonthatósági tesztben pozitív anyagoknál, ha a degradációs sebességeket a talajra, az üledékre vagy a felszíni vizekre kell megállapítani. A megállapított tartózkodási idő ezekben a környezeti elemekben (40 nap - ∞) hosszabb, mint az inherens tesztek időtartama, úgyhogy az eredmények értelmezéséhez használandó kinetikai kritériumok itt nem relevánsak. Egy biológiailag inherensen bontható anyagra megállapított bomlási fél-életidő a felszíni vizekben 150 nap (5. táblázat) a talajban és az üledékben pedig 300-3000 nap (6. táblázat), ami csak az előrejelzett regionális koncentrációt befolyásolja, feltéve hogy az anyag tartózkodási ideje jóval hosszabb, mint a megállapított fél-életidő (a talajban és az üledékben lévő anyagokra).

5. táblázat. *Látszólagos elsőrendű sebességi állandók és fél-életidők felszíni vizekben a biológiai bonthatósági szűrővizsgálatok eredményei alapján*

Vizsgálati eredmények	Sebességi állandó k (nap ⁻¹)	Fél-életidő (nap)
Biológiailag gyorsan bontható	$4,7 \cdot 10^{-2}$	15
Gyors, de nem a 10 napos időablakon belül	$1,4 \cdot 10^{-2}$	50
Biológiailag inherensen bontható	$4,7 \cdot 10^{-3}$	150
Biológiailag nem bontható	0	∞

A disztribúciós modellekben a számításokat homogén környezeti elemekre végzik, azaz pórúsvizet és szilárd fázist tartalmazó üledékre, és levegőt, pórúsvizet és szilárd fázist tartalmazó talajra. Mivel feltételezzük, hogy a kötött fázisban nem folyik degradáció, az üledék vagy a talaj egészére vonatkozó sebességi állandó az üledék és a víz, valamint a talaj és a víz közötti megoszlási hányadosoktól függ. Ahogy nő az anyag hidrofobicitása (szorpciója), csökken a pórúsvízben lévő és a bontási folyamatok számára hozzáférhető frakció, úgyhogy a környezeti elemre vonatkozó teljes sebesség ugyancsak csökken. Felismerték azonban azt is, hogy az alacsony K_p értékű anyagokra jelenleg még nincs elegendő empirikus adat ahhoz a feltételezéséhez, hogy a talajban folyó biológiai degradációs fél-életidő valamilyen módon függene a szilárd és a víz fázis közötti megoszlási hányadostól. Arra azonban vannak bizonyítékok, hogy a magas K_p értékkel rendelkező anyagoknál van valamiféle K_p -függés. Így aztán a talaj egészére meghatározásra kerültek a degradációs fél-életidők, részben a K_p érték alapján. A 6. táblázat tartalmazza a talajra vonatkozó és a K_p értékek alapján megállapított fél-életidőket.

6. táblázat. A talaj egészére vonatkozó fél-életidők a standardizált biológiai degradációs tesztek eredményei alapján

K_p_{talaj} [l.kg⁻¹]	Fél-életidő a talajra (nap)*		
	Gyors	Gyors, de nem a 10 napos időablakon belül	Inherens
≤ 100	30	90	300
> 100, ≤ 1000	300	900	3000
> 1000, ≤ 10000	3000	9000	30000
stb.	stb.	stb.	stb.

* biológiailag nem bontható anyagok esetében végtelen fél-életidőt feltételezünk.

A talajban bekövetkező biológiai bontás sebességi állandóját a DT50-ből a következő egyenlet segítségével számolhatjuk ki:

$$k_{bio_{talaj}} = \frac{\ln 2}{DT50_{bio_{talaj}}} \quad (14)$$

Jelölések:

DT50 _{bio_{talaj}}	az anyag biológiai bomlási fél-életideje a talajban	[nap]	6. táblázat
k _{bio_{talaj}}	a talajban folyó biológiai bomlás elsőfokú sebességi állandója	[nap ⁻¹]	

Az üledékre vonatkozó sebességi állandók meghatározása a biológiai degradációs tesztek eredményeinek extrapolálásával több problémát is felvet, mivel az üledéken általában a viszonylag vékony felső oxigént tartalmazó réteg alatt a mélyebb rétegek anoxikusak. Ezekben a rétegekben feltételezés szerint a sebességi állandó nulla (a fél-életidő pedig végtelen), hacsak nincsenek azt bizonyító adatok, hogy anaerob degradáció is végbemehet. A jelenlegi regionális modellben egy 3 cm vastag üledék esetében a feltételezett felső aerob réteg mindössze 3 mm vastag. A koncentráció szempontjából az üledéket jól keveredő környezeti elemnek tekintjük. Ez azt is jelenti, hogy az üledék egészére vonatkozó fél-életidő egy tízes faktossal magasabb lesz, mint a talajra vonatkozó fél-életidő. Az üledékre vonatkozó bomlási fél-életidő:

$$k_{bio_{\text{üledék}}} = \frac{\ln 2}{DT50_{bio_{talaj}}} \cdot Fa_{er_{\text{üledék}}} \quad (14)$$

Jelölések:

DT50 _{bio_{talaj}}	az anyag biológiai bomlási fél-életideje a talajban	[nap]	6. táblázat
Fa _{er_{üledék}}	az üledék aerob része	[m ³ .m ⁻³]	0,10
k _{bio_{talaj}}	a talajban folyó biológiai bomlás elsőrendű sebesség állandója	[nap ⁻¹]	

A BBA (BBA, 1986; BBA, 1990a) és az US EPA kezdetben növényvédő szerekre kidolgozott irányelvei keretében több különböző szimulációs teszt is rendelkezésre áll. Az esetlegesen elvégzett ilyen jellegű vizsgálatok eredményeinek figyelembe vételét minden esetben egyedileg kell mérlegelni.

Átfogó degradációs sebességi állandó a felszíni vizekben

A felszíni vizekben az anyag átalakulhat hidrolízissel, fotolízissel vagy biológiai degradációval. A $PEC_{\text{regionális}}$ számításához a fenti folyamatok sebességi állandóit egy átfogó bomlási állandóvá kell átalakítani. Meg kell jegyezni, hogy a különböző típusú bomlási mechanizmusokat (elsődleges, másodlagos, stb. degradáció) is össze kell adni. Erre csak a modellhez van szükség. Az alábbi egyenlet az elsődleges degradációt írja le. Amennyiben nem ez a meghatározó lépés, és bomlástermékek akkumulálódnak, akkor az adott folyamatban (pl. hidrolízis során) keletkező bomlástermékekkel kapcsolatosan is el kell végezni az értékelést. Amennyiben ez nem lehetséges vagy nem célszerű, az adott folyamat sebességi állandóját nullának kell venni.

$$kdeg_{\text{vöz}} = khidr_{\text{vöz}} + kfoto_{\text{vöz}} + kbio_{\text{vöz}} \quad (16)$$

Jelölések:

$khidr_{\text{vöz}}$	a felszíni vizekben folyó hidrolízis elsőrendű sebesség állandója	[nap ⁻¹]	10. egyenlet
$kfoto_{\text{vöz}}$	a felszíni vizekben folyó fotolízis elsőrendű sebesség állandója	[nap ⁻¹]	11. egyenlet
$kbio_{\text{vöz}}$	a felszíni vizekben folyó biológiai bomlás elsőrendű sebesség állandója	[nap ⁻¹]	5. táblázat
$kdeg_{\text{vöz}}$	a felszíni vizekben folyó összes bomlási folyamat együttes elsőrendű sebesség állandója	[nap ⁻¹]	

2.3.7 A környezeti kibocsátás megelőzésére szolgáló eliminációs eljárások

Ebben a részben az alábbi paramétereket határozzuk meg:

- a szennyvíztisztítókból a légkörbe történő kibocsátás
- koncentrációk a szennyvíziszapban
- koncentráció a szennyvíztisztítókból kibocsátott tisztított szennyvízben
- a mikroorganizmusokra vonatkozó PEC a szennyvíztisztítóiban

Az elimináció itt a vizsgált anyag koncentrációjának csökkentését jelenti a környezetbe kibocsátott gáznemű anyagokban és tisztított szennyvizekben. Az elimináció a vízfázisból megvalósulhat fizikai, kémiai vagy biokémiai úton is. A szennyvíztisztítóiban az egyik legfontosabb fizikai folyamat a szuszpendált anyagok ülepítése, amellyel egyben az adszorbeálódott anyagokat is eltávolítjuk. A fizikai folyamatok során az anyag nem bomlik el, hanem az egyik fázisból a másikba kerül, pl. a vizes fázisból a szilárd fázisba. Az átlevégőztetés során, amely az illékony anyagok jobb eltávolítását szolgálja, az anyag a sztrippelésnek nevezett folyamatban a folyadék felszínéről a levegőbe kerül. A keletkező gázokból az anyagokat pl. gázmosással lehet eltávolítani, ami azt jelenti, hogy a gázokat vagy egy megfelelő szilárd anyaghoz kötjük ki, vagy átnyomjuk egy gázleköltő oldaton.

Szennyvíztisztítás

A vízi környezetre vonatkozó PEC meghatározása során az egyik legfontosabb kérdés, hogy az anyag a környezeti kibocsátást megelőzően átmegy-e szennyvíztisztításon, és ha igen akkor milyen típusú technológiákon. Jelen útmutató megírása idején a tagállamok csatornázottságának helyzete meglehetősen eltérő volt (ld. XII. melléklet). Az egész Európai Közösséget véve a (lakossági és ipari szennyvizekkel terhelt) kommunális szennyvizek körülbelül 70%-a biológiai szennyvíztisztításra kerül. A 91/1271/EGK számú Európa Tanácsi Irányelv 4. cikkelye előírja, hogy 2000. december 31-től a tagállamokban a 15 ezer főnél nagyobb népességgel rendelkező agglomerátumok esetében a kommunális szennyvizet a környezetbe való kibocsátás előtt biológiai (másodlagos) tisztításnak kell alávetni. A 6. cikkely ezzel szemben lehetővé teszi a tagállamok számára, hogy meghatározzanak olyan környezetileg nem érzékeny területeket, ahol a 10-150 ezer lakosú tengerparti agglomerációkból, valamint a 2-10 ezer lakosú folyótorkolatok mentén elhelyezkedő agglomerációkból származó szennyvizet biológiailag nem, csak mechanikailag (elsődlegesen) kell tisztítani. Hosszú távon a nem tisztított szennyvíz aránya az EU-ban 15 és 30 % között lesz.

Az ipari üzemekhez tartozó szennyvíztisztítók helyzete kevésbé tisztázott. Feltételezhető, hogy a nagyobb ipari üzemek nagy része vagy rá van csatlakoztatva a helyi kommunális szennyvíztisztítókra, vagy saját tisztító üzemmel rendelkezik. A saját szennyvíztisztítóiban sok esetben nem alkalmaznak biológiai tisztítást, csak fizikai és kémiai technológiákat, amelyek során a szerves anyagokat segédanyagok, pl. vas-sók segítségével flokkulálják, majd üleptik, amelynek eredményeképpen a szerves anyagok mennyisége a KOI alapján 25-50%-kal csökken.

A fent ismertetett helyzetet itt az alábbiak szerint vesszük figyelembe:

- Lokális szinten feltételezzük, hogy a környezetbe történő kibocsátás előtt a szennyvizet tisztítóüzemekben kezelik. Mindazonáltal a felszíni vizekre vonatkozó legnagyobb $PEC_{\text{lokális}}$ esetében meg kell határozni egy olyan vízi $PEC_{\text{lokális}}$ -t is, ahol feltételezzük, hogy nincs szennyvíztisztítás. A normál PEC mellett, amely feltételezi, hogy van szennyvíztisztítás, ezt az értéket is meg kell határozni, hogy előtérbe helyezhessük a potenciális lokális problémákat (ezt a PEC/PNEC arányt a kockázat jellemzésben általában nem vesszük figyelembe). Ezt az alternatív PEC értéket inkább arra használhatjuk, hogy feltárjuk a környezeti hatások lehetőségét az olyan régiókban vagy ipari ágazatokban, ahol jelenleg alacsony a csatornázottság aránya és megismertessük az illetékes hatóságokat a helyi kockázatesökkentés lehetséges eszközeivel. A szennyvíztisztítást kizáró PEC értéket az expozícióbecsléshez sem használjuk fel, kivéve, ha a vizsgált anyag egy olyan specifikus használati kategóriába tartozik, amelynél a vízbe való közvetlen kibocsátás széles körben elterjedt gyakorlat;
- A standard regionális környezetre (definíciót ld. a 2.3.8.1 pont alatt) feltételezzük, hogy a szennyvizek 70%-át biológiai szennyvíztisztításnak vetik alá, a fennmaradó 30%-ot viszont közvetlenül a felszíni vizekbe engedik (habár a bizonyos mértékben a mechanikai tisztítás is hozzájárul a szerves anyagok eltávolításához, ezt itt elhanyagoljuk mivel a csapadékvizek túlfolyása miatt általában a biológiai tisztítás esetében is történik közvetlen kibocsátás a felszíni vizekbe. Feltételezzük, hogy a környezetszennyezés tekintetében ez a két káros hatás többé-kevésbé kikompenzálja egymást).

A szennyvíztisztítóban történő elimináció mértékét az anyag fizikai-kémiai és biológiai tulajdonságai szabják meg (biológiai degradáció, adszorpció az iszaprézecskekhez, az oldhatatlan anyagok kiülepedése, illékonyság, stb.) illetve az tisztítómű üzemeltetési körülményei. Mivel különböző anyagok esetében igen eltérő lehet az elimináció hatékonyságával kapcsolatban rendelkezésre álló adatok mennyisége, az alábbi sorrendet kell alkalmazni:

1. Szennyvíztisztítóknban mért adatok

Az eliminációs arányt lehetőleg a befolyó tisztítatlan és a kifolyó tisztított szennyvízben mért koncentrációk alapján kell meghatározni. Ugyanúgy, ahogy a mért környezeti adatoknál, itt is meg kell vizsgálni az adatok megfelelőségét és reprezentativitását.

Mérlegelni kell továbbá azt is, hogy az elimináció hatékonysága a szennyvíztisztító üzemekben igen eltérő lehet és nagyban függ az üzemeltetés körülményeitől, így például az átlevegőztető tartály retenciós idejétől, az átlevegőztetés intenzitásától, a befolyó tisztítatlan szennyvízben mérhető koncentrációtól, az iszap korától és adaptációjától, a hasznosítás mértékétől és az esővíz visszatartási kapacitástól, stb. A mérési adatok csak akkor használhatók fel, ha eleget tesznek bizonyos minimális kritériumoknak, pl. annak, hogy a méréseket viszonylag hosszabb ideig végezték. Figyelembe kell venni azt is, hogy az eliminációt okozhatja a "sztrippelés" vagy adszorpció is (tehát nem degradáló folyamatok). Amennyiben nem készült anyagmérleg, meg kell becsülni a levegőbe, illetve az iszapba távozó anyagmennyiséget például úgy, hogy a II. mellékletben található táblázatokban található levegő- és iszapfrakciókat a mért eliminációval arányosítjuk.

A speciális szennyvíztisztítókból származó adatokat óvatosan kell kezelni. Ha a mért adatok például "korlátozott" köztes termékeket nagy mennyiségben előállító ipari üzemek nagy mértékben adaptált szennyvíztisztítóiból származnak, akkor ezeket csak ennek a specifikus használati kategóriának a felméréséhez lehet felhasználni.

2. Szimulációs tesztek eredményei

A szimulációs tesztelések során azt vizsgáljuk, hogy a kérdéses anyag egy vagy a szennyvíztisztító üzemek eleveniszapos aerob tisztítási fázisát, vagy egyéb környezeti helyzeteket, például egy folyót szimuláló laboratóriumi rendszerben biológiailag milyen mértékben bontható. Az eddigiekben csak a szennyvíztisztítókat szimuláló laboratóriumi rendszerekre sikerült standard technikákat kidolgozni. Ilyen például a "Coupled Units" Teszt ("Csatolt Egységek Teszt" OECD, 1991). Az eliminálhatóságot a DOC (oldott szerves széntartalom) és/vagy a KOI (kémiai oxigénigény) mérésével követhetjük.

A "Coupled Units" Teszt (Csatolt Egységek Teszt) nem alkalmas adszorptív, vízben rosszul oldódó és illékony anyagok vizsgálatára, mivel ez egy nyitott rendszer, amelyben csak a DOC-t mérik. Mivel az is előfordulhat, hogy a biológiai bontás során adszorptív vagy illékony anyagsere termékek keletkeznek, ez a teszt nem tud különbséget tenni a biológiai degradáció és az egyéb eliminációs folyamatok között. A "Coupled Units" Teszt (Csatolt Egységek Teszt) zárt rendszerű verziója, amelyben radioaktívan jelölt anyagokat használnak, alkalmas a teljes anyagmérleg vizsgálatára, és adszorptív, vagy illékony anyagok esetében is használható. Meg kell azonban jegyezni, hogy egyelőre nem létezik nemzetközileg standardizált módszer ehhez a teszthez.

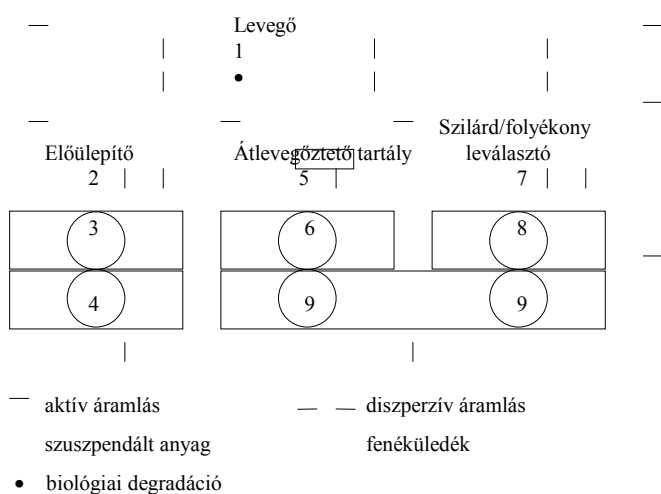
Ugyancsak kevés az információ a laboratóriumi tesztek eredményeinek a szennyvíztisztítóknban végbemenő valós folyamatokra vonatkozó alkalmazhatóságával

kapcsolatosan. Az eredmény csak akkor lehet a valós környezetben végbemenő bontási folyamatokra extrapolálni, ha a tesztekben használt koncentrációk egy nagyságrendbe esnek a valóságban várható környezeti koncentrációkkal. Ha ez nincs így, akkor az extrapoláció komoly mértékben túlbecsülheti a degradációs folyamatok sebességét, különösen, ha az extrapolálás a magasabb koncentrációk felől történik az alacsonyabbak felé. Ha azonban a vizsgálatokban alkalmazott koncentrációk azonos nagyságrendbe esnek a valós értékekkel, akkor a teszteredményeket fel lehet használni a mechanikus/biológiai szennyvíztisztítók eliminációs hatékonyságának kvantitatív becsléséhez.

Amennyiben a teljes anyagmérleg meghatározásra került, az adszorpcióval és "sztrippeléssel" eltávolított frakciókat kell felhasználni a levegőre és az iszapra jellemző koncentrációk kiszámításához. Amennyiben egyáltalán nem készült anyagmérleg, az iszapba és a levegőbe kerülő mennyiségeket pl. a II. mellékletben szereplő táblázatok alkalmazásával becsülni kell.

3. A szennyvíztisztítók modellezése

Amennyiben nem áll rendelkezésre mért adat, az elimináció hatékonyságát a log Kow-n (a Koc, vagy ennél specifikusabb megoszlási hányadosok is felhasználhatók; ld. 2.3.5), a Henry-féle állandón és a biológiai degradációs tesztek eredményein alapuló szennyvíztisztítási modellek felhasználásával lehet elvégezni. Nem szabad azonban megfelekedezni arról sem, hogy az átalakulási termékek disztribúciós viselkedését az a módszer nem veszi figyelembe: Ennek alapján tehát azt javasoljuk, hogy expozícióbecslés előzetes fázisában a SimpleTreat nevű szennyvíztisztítási modell (Struijs et al., 1991) javított verzióját alkalmazzuk.



4. ábra. A SimpleTreat szennyvíztisztítási modell sematikus ábrázolása

A SimpleTreat-tel modellezett szennyvíztisztító telep átlagos méretű, az eleveniszapos aerob degradáción alapuló üzem, amely 9 kompartmentből áll (ld. a 4. ábrán). Ez tehát egy sok-kompartmentes box modell (multi-compartment model), amellyel egy előülepítőből, átlevégoztető tartályból és szilárd/folyékony leválasztóból álló szennyvíztisztító üzemben kialakuló jellemző steady-state koncentrációkat lehet kiszámítani. A gyors és/vagy az inherens biológiai bonthatósági tesztek eredményeitől függően, meg lehet határozni az anyagra jellemző specifikus elsőrendű sebességi állandókat. A modell javított változatában már az átlevégoztető tartályban történő elpárologást is jobban figyelembe lehet venni, sőt a félig illékony anyagok esetében is alkalmazható (Mikkelsen, 1995).

A szennyvíztisztító telepek modellezésének céljára a 4. táblázatban megadott sebességi állandókat biológiai degradációs tesztek segítségével határoztuk meg. A SimpleTreat modellnek a megadott elsőrendű sebességi állandók felhasználásával (0, 0,1, 0,3 és 1 óra⁻¹) kapott eredményei a II. melléklet táblázataiban találhatóak. A melléklet a 4. táblázat alapján a modell a Henry-féle állandó és a Kow függvényében adja meg a levegőre, a vízre és az iszapra vonatkozó relatív emissziós adatokat a különböző biológiai degradációs kategóriákra. Amennyiben valamely anyagra hiányoznak a specifikus biológiai degradációs mérési adatok, akkor a II. melléklet táblázataiban megadott értékeket kell felhasználni.

A standard szennyvíztisztító telep jellemző paramétereit a 7. táblázat tartalmazza. A többlet iszap lakos-egyenértékre számított mennyiségét, valamint a befolyó tisztítatlan szennyvízben lévő szuszpendált anyagok koncentrációját a SimpleTreat modellből vettük (a modellt alacsony terhelésre futtattuk). Az értékek megegyeznek a II. melléklet értékeivel. A kockázatbecslés későbbi szakaszaiban az anyag biológiai degradációs viselkedésével kapcsolatban specifikusabb információk is rendelkezésre állhatnak, amelyeknek a figyelembe vételére a SimpleTreat módosított verzióját alkalmazhatjuk. Ebben a verzióban az alábbi forgatókönyvek választhatók:

- a biológiai degradációs folyamatok hőmérséklet-függése;
- a Monod egyenlet szerinti degradációs kinetikák;
- az anyag degradációja az adszorbeált fázisban;
- az iszap retenciós idők ingadozásai;
- az előüleptető elhagyása.

7. táblázat. Egy kommunális szennyvíztisztító standard paramétereit

Paraméterek	Jelölés	Mértékegység	Érték
A helyi szennyvíztisztító kapacitása	KAPACITÁS _{szt}	[ekv]	10000
A regionális szennyvíztisztító kapacitása	KAPACITÁS _{reg,szt}	[ekv]	2,0 · 10 ⁷
A kontinentális szennyvíztisztító kapacitása	KAPACITÁS _{kon,szt}	[ekv]	3,7 · 10 ⁸
Az egy lakosra eső szennyvíz mennyisége	SZENNYVÍZ _{lakos}	[l.nap ⁻¹ .ekv ⁻¹]	200
Az egy lakosra jutó többlet iszap	TÖBBLET _{iszap}	[kg.d ⁻¹ ekv ⁻¹]	0,011
A tisztítatlan szennyvíz lebegőanyag koncentrációja	SZUSZPKONC _{be}	[kg.m ⁻³]	0,45

A II. melléklet táblázataiból az alábbi input-output paraméterek nyerhetők:

Input:

HENRY	Henry-féle állandó	[Pa.m ³ .mol ⁻¹]	6. egyenlet
Kow	oktanol-víz megoszlási hányados	[-]	szolgáltatott adat
kbio _{szt}	a biológiai bontás elsőrendű sebességi állandója a szennyvíztisztítóban	[nap ⁻¹]	4. táblázat

Output:

Fsz _{levegő}	a szennyvíztisztítóból a levegőbe kibocsátott mennyiség	[-]
Fsz _{víz}	a szennyvíztisztítóból a tisztított szennyvízbe kibocsátott mennyiség	[-]
Fsz _{iszap}	a szennyvíztisztítóból az iszapba kibocsátott mennyiség	[-]

A befolyó tisztítatlan szennyvízben lévő vegyi anyag koncentrációjának kiszámítása

A lokális szintű kockázatbecslések esetében feltételezzük, hogy egy pontforrás a szennyvizét egy szennyvíztisztítóba engedi. A szennyvíztisztítóra kerülő tisztítatlan szennyvízre jellemző koncentrációkat a lokális szennyvíz emissziók és a szennyvíztisztító üzem terhelése alapján számíthatjuk ki. A befolyó mennyiség pedig egyenlő a kiengedett tisztított szennyvíz mennyiségével.

$$C_{lokális_{be}} = \frac{E_{lokális_{vz}} \cdot 10^6}{KIFOLYÓ_{szt}} \quad (17)$$

Jelölések:

$E_{lokális_{vz}}$	egy emissziós esemény alkalmával a (szenny)vízbe való lokális kibocsátás	[kg.nap ⁻¹]	2. egyenlet
$KIFOLYÓ_{szt}$	a szennyvíztisztítóból kiengedett összes tisztított szennyvíz	[l.nap ⁻¹]	18. egyenlet
$C_{lokális_{be}}$	a befolyó tisztítatlan szennyvízben mérhető koncentráció	[mg.l ⁻¹]	

A szennyvíztisztítóból kiengedett tisztított szennyvízben mérhető koncentráció kiszámítása

A szennyvíztisztítóból kibocsátott tisztított szennyvízre eső arányt a II. melléklet táblázatai tartalmazzák. A kibocsátott szennyvízre jellemző koncentráció a fenti arány és a tisztítatlan szennyvízben mérhető koncentrációból a következőképpen számolható:

$$C_{lokális_{ki}} = C_{lokális_{be}} \cdot F_{szt_{vz}} \quad (18)$$

Jelölések:

$C_{lokális_{be}}$	a befolyó tisztítatlan szennyvízben mérhető koncentráció	[mg.l ⁻¹]	16. egyenlet
$F_{szt_{vz}}$	az anyagnak a tisztított szennyvízzel kibocsátott frakciója	[-]	II. melléklet
$C_{lokális_{ki}}$	a kifolyó tisztított szennyvízben mérhető koncentráció	[mg.l ⁻¹]	

Ha a specifikus adatok nem ismertek, a $KIFOLYÓ_{szt}$ -t egy 10000 lakosú helyiség napi egy főre eső átlagos szennyvíz mennyiségére (200 l) kell alapozni (ld. 7. táblázat):

$$KIFOLYÓ_{szt} = KAPACITÁS_{szt} \cdot SZENNYV_{lakos} \quad (19)$$

Jelölések:

$KAPACITÁS_{szt}$	a szennyvíztisztító kapacitása	[ekv]	7. táblázat
$SZENNYV_{lakos}$	egy főre eső szennyvíz kibocsátás	[l.nap ⁻¹ .ekv ⁻¹]	7. táblázat
$KIFOLYÓ_{szt}$	a szennyvíztisztítóból kiengedett összes tisztított szennyvíz	[l.nap ⁻¹]	

A szennyvíztisztítást nem feltételező és felszíni vizekre vonatkozó PEC kiszámításához, a tisztított szennyvízzel együtt kibocsátott anyaghányadot ($F_{szt_{vz}}$) 1-nek kell venni, a levegőbe és az iszapba kerülő hányadokat ($F_{szt_{levegő}}$ és $F_{szt_{iszap}}$) pedig nullának.

A szennyvíztisztítóból a levegőbe történő emisszió kiszámítása

A szennyvíztisztítóból közvetve a levegőbe emittált anyag mennyiségét a szennyvíz emisszióinak a levegőre eső hányada adja:

$$Esz_{t_{\text{levegő}}} = Fsz_{t_{\text{levegő}}} \cdot Elok_{\text{ális}_{\text{víz}}} \quad (20)$$

Jelölések:

$Fsz_{t_{\text{levegő}}}$	a szennyvíztisztítóból a levegőbe kibocsátott frakció	[-]	II. melléklet
$Elok_{\text{ális}_{\text{víz}}}$	a vízbe történő lokális emisszió sebessége egy emissziós esemény során	[kg.nap ⁻¹]	2. egyenlet
$Esz_{t_{\text{levegő}}}$	a szennyvíztisztítóból a levegőbe történő lokális emisszió egy emissziós esemény során	[kg.nap ⁻¹]	

A szennyvíztisztító iszapjában mérhető koncentráció kiszámítása

A száraz szennyvíziszapra jellemző koncentrációt a vízbe történő emisszió sebességéből, az iszapba kerülő hányadból és a szennyvíziszap keletkezés sebességéből számolhatjuk ki az alábbi egyenlet segítségével:

$$C_{\text{iszap}} = \frac{Fsz_{t_{\text{iszap}}} \cdot Elok_{\text{ális}_{\text{víz}}} \cdot 10^6}{\text{ISZAPSEB}} \quad (21)$$

Jelölések:

$Elok_{\text{ális}_{\text{víz}}}$	egy emissziós esemény alkalmával a (szenny)vízbe való lokális kibocsátás	[kg.nap ⁻¹]	2. egyenlet
$Fsz_{t_{\text{iszap}}}$	a szennyvíztisztítóból az iszapba kerülő frakció	[-]	II. melléklet
ISZAPSEB	a szennyvíziszap keletkezésének sebessége	[kg.nap ⁻¹]	21. egyenlet
C_{iszap}	a száraz szennyvíziszapban mérhető koncentráció	[mg.kg ⁻¹]	

A szennyvíziszap keletkezésének sebességét az elsődleges és másodlagos iszap kifolyásokból az alábbiak szerint lehet kiszámítani:

$$\text{ISZAP} = 2/3 \cdot \text{SZUSZPKONC}_{\text{be}} \cdot \text{KIFOLYÓ}_{\text{sz}} + \text{TÖBBLET}_{\text{iszap}} \cdot \text{KAPACITÁS}_{\text{sz}} \quad (22)$$

Jelölések:

$\text{SZUSZPKONC}_{\text{be}}$	a tisztítatlan szennyvíz lebegő anyag koncentrációja	[kg.m ⁻³]	7. táblázat
$\text{KIFOLYÓ}_{\text{sz}}$	a szennyvíztisztítóból kiengedett összes tisztított szennyvíz	[l.nap ⁻¹]	18. egyenlet
$\text{TÖBBLET}_{\text{iszap}}$	egy lakos-ekvivalensre eső többlet iszap	[kg.nap ⁻¹ .ekv ⁻¹]	7. táblázat
$\text{KAPACITÁS}_{\text{sz}}$	a szennyvíztisztító kapacitása	[ekv]	7. táblázat
ISZAPSEB	a szennyvíziszap keletkezésének sebessége	[kg.nap ⁻¹]	

Az emésztőben anaerob degradáció is csökkentheti az anyagnak a szennyvíziszapban mérhető koncentrációját. Ezt jelenleg még nem tudjuk figyelembe venni.

A szennyvíztisztítóban mérhető koncentrációk kiszámítása a mikroorganizmusok gátlásának vizsgálatához

Bizonyos anyagok káros hatással lehetnek a mikrobiális aktivitásra. A szennyvíztisztítóknak működő mikroorganizmusokra vonatkozó kockázat jellemzéshez ideális esetben az átlevégőztető tartályban mérhető koncentrációt kell felhasználni. Feltéve, hogy a tartályban az anyagok homogén módon keverednek, az itt mérhető oldott koncentráció megegyezik a kifolyó, tisztított szennyvízre jellemző koncentrációval:

$$PEC_{szt} = Clokális_{ki} \quad (23)$$

Jelölések:

$Clokális_{ki}$	az anyag összesített koncentrációja a tisztított szennyvízben	[mg.l ⁻¹]	17. egyenlet
PEC_{szt}	a szennyvíztisztítóban működő mikroorganizmusokra vonatkozó PEC	[mg.l ⁻¹]	

Ha azonban a kibocsátás időszakos, akkor a tisztítatlan szennyvízre jellemző koncentrációt kell reprezentatívnak tekinteni:

$$PEC_{szt} = Clokális_{be} \quad (24)$$

Jelölések:

$Clokális_{be}$	az anyag összesített koncentrációja a tisztítatlan szennyvízben	[mg.l ⁻¹]	16. egyenlet
PEC_{szt}	a szennyvíztisztítóban működő mikroorganizmusokra vonatkozó PEC	[mg.l ⁻¹]	

Ha a tisztított szennyvíz koncentrációjának alkalmazását választjuk, akkor ez megmutatkozik a szennyvíztisztítók mikroorganizmusaira vonatkozó PNEC kiszámításához használt kockázatbecslési faktorok megválasztásában is. A modern szennyvíztisztító telepeken, ahol denitrifikációs technológiát is használnak, a biológiai technológia bevezetésénél általában egy további tartály is helyet kap. Mivel a főbb biológiai degradációs folyamatok a második tartályban mennek végbe, a denitrifikációs tartályban élő mikroba populáció a tisztított szennyvízre jellemző koncentrációnál nyilvánvalóan magasabb koncentrációnak van kitéve. Mivel a szennyvíztisztító üzemek általános műszaki színvonala egyre jobban fejlődik, a közeljövőben ezzel a kérdéssel is foglalkozni kell majd.

2.3.8 A PEC értékek számítása

Ebben a részben az alábbi paramétereket határozzuk meg:

- lokális PEC értékek az összes környezeti elemre
- regionális PEC értékek az összes környezeti elemre

2.3.8.1 Bevezető

Az alábbiakban ismertetjük az egyes környezeti elemekre vonatkozó $PEC_{\text{lokális}}$ értékek kiszámításának módját. A 2.3.8.7 pont alatt pedig az egyes környezeti elemekre vonatkozó regionális steady-state koncentrációk ($PEC_{\text{regionális}}$) számítását mutatjuk be. A 8. táblázatban soroltuk fel mindazokat a PEC értékeket, amelyeket ki kell számítani.

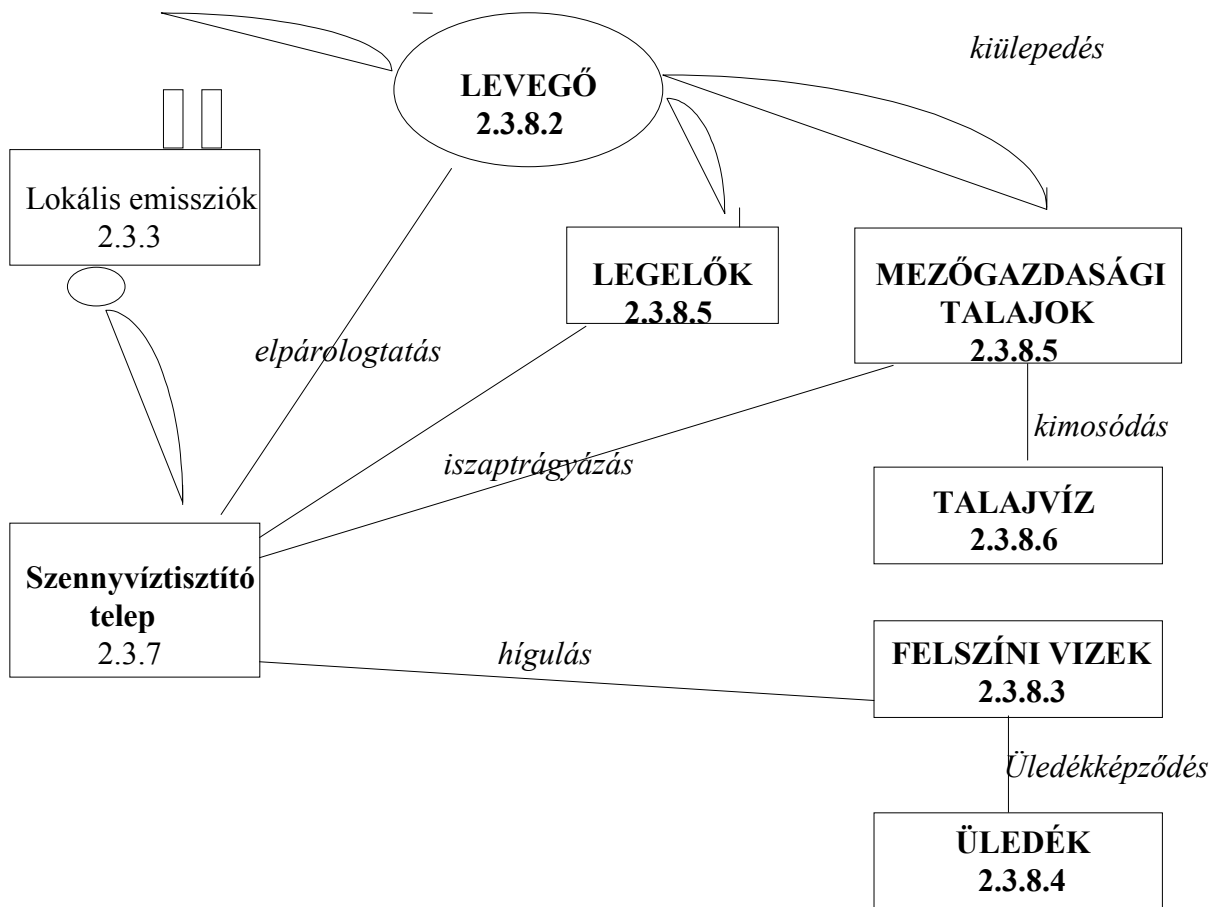
A standard környezet meghatározásakor a az idő- és térbeli kiterjedéssel kapcsolatban számos feltételezéssel kell élnünk, amelyeket az alábbiakban röviden ismertetünk. További részletek az idevonatkozó részek alatt találhatóak.

- A felszíni vizekre jellemző koncentrációk ($PEC_{\text{lokális,víz}}$) elvben a tisztított szennyvíz befolyásánál történő teljes körű összekeveredés után számolható. Mivel annyira kevés idő telik el a tisztított szennyvíz kibocsátása és az expozíció helyének elérése között, a hígulás lesz majd a legfontosabb "eliminációs" tényező. A felszíni vizekben lejátszódó degradáció, elpárolgás és ülepedés tehát általában nem kerül beszámításra, mint eliminációs mechanizmus. Itt egy standard hígulási faktort alkalmazunk. A szorpció figyelembe vételéhez, az értéket a szuszpendált anyaghoz adszorbeálódó frakcióval korrigálni kell. Az így kialakuló oldott koncentrációt használjuk a $PNEC_{\text{víz}}$ -zel való összehasonlításhoz (2.3.8.3. pont alatt). Az üledékre jellemző koncentrációt ugyanerre a helyre vonatkozóan kell kiszámítani. A vízben élő szervezetek expozíciójához - mivel ezen organizmusok élettartama viszonylag rövid - az adott emissziós esemény során jelentkező koncentrációt számoljuk. Az embereket és a ragadozó madarakat és emlősöket érintő közvetett expozíció esetében az éves átlagokkal kell számolni, mivel ezek a krónikus expozíció szempontjából jobban megfelelnek;
- A talaj koncentrációt ($PEC_{\text{lokális,talaj}}$) egy olyan mezőgazdasági talajra kell bizonyos időszakra kiátlagolt értéként meghatározni, amely szennyvíztisztítóból származó iszappal trágyázott, és egy közeli pontforrásból (2.3.8.5 pont) (előállító/feldolgozó üzem és a szennyvíztisztító átlevégőztető tartálya) a levegőbe kibocsátott és onnan folyamatosan kiülepedő szennyezésnek van kitéve. Két különböző talajtípust kell megkülönböztetni: a szántóföldeket és a legelőket, amelyek lényegében az alkalmazott iszaptrágya mennyiségében, illetve az átkeveredési mélységben térnek el egymástól. A szárazföldi ökoszisztémák esetében a koncentrációkat egy 30 napos, a közvetett humán expozíció esetében pedig egy 180 napos időszakra kell kiátlagolni. A talajvízre jellemző koncentrációt a vizsgált mezőgazdasági terület alatti talajvízre kell megadni;
- A levegőben lévő anyag koncentrációt ($PEC_{\text{lokális,levegő}}$) a pontforrástól 100 méteres távolságban kell kiátlagolni. Ebben benne van az a feltételezés, hogy egy átlagos méretű ipari üzem esetében ez a távolság reprezentatív. A kiülepedés számításakor a forrás körül 1000 méter sugarú körben átlagolunk, feltételezve, hogy ez már reprezentálja a lokális mezőgazdasági területeket (2.3.8.2 pont). A kiülepedést a talaj modulhoz használjuk input

adatként, éves átlag kiülepedési fluxusként. A humán expozíció esetében a levegőre jellemző koncentrációt használjuk, tehát éves átlag koncentrációt kell számolni;

- A regionális standard környezet feltételezés szerint nagy mértékben iparosított, viszonylag kicsi, de sűrűn lakott; mérete 200×200 km, lakossága 20 millió, továbbá az európai termelés 10%-a ezen a területen zajlik (2.3.8.7. pont). A feltételezések szerint a környezeti emissziók folyamatosak és diffúz jellegűek.

Olyan útvonalak is szóba jöhetnek, mint például a hulladéklerakók kibocsátása a levegőbe, a felszíni vizekbe és a talajba, továbbá a levegőből való kiülepedés a felszíni vizekbe. Ezen útvonalakra azonban jelenleg még nem tudunk iránymutatással szolgálni. A tengerekbe és a torkolati vizekbe való kibocsátást sem tárgyaljuk külön.



5. ábra. A lokális emissziók és megoszlási útvonalak

Az 5. ábra a lokális emissziós utak és az azt követő, a különböző környezeti elemekre esetlegesen releváns disztribúciós folyamatok közötti összefüggéseket mutatja be. Minden egyes környezeti elemre specifikus sors és disztribúciós modelleket alkalmazunk.

Regionális szinten a vizsgált régiót egy doboznak tekintjük, ami több homogén környezeti elemet tartalmaz. Az egyes elemek közötti (illetve a külvilágból érkező, illetve oda kibocsátott) össze anyagáramlást számszerűsíteni kell.

Ennél részletesebb adatok a 2.3.8.7. pont alatt találhatóak.

8. táblázat. A különböző expozíciós forgatókönyvek (szcenáriók) és a hozzájuk tartozó PEC értékek áttekintése

Célterület	Expozíciós közeg	Expozíciós forgatókönyv (szcenárió)			
		Regionális	Fejezet	Lokális	fejezet
Vízi	felszíni vizek	steady-state koncentráció a felszíni vizekben	2.3.8.7	koncentráció az emissziós időszak alatt figyelembe véve a hígulást, a szorpciót, és ha kell, a üledékképződést, elpárolgást és degradációt	2.3.8.3
	üledék	steady-state koncentráció az üledékben		egyensúlyi koncentráció a frissen leülepedett üledékben, a lokális vízben mért koncentrációhoz viszonyítva	2.3.8.4
Szárzföldi környezet	mezőgazdasági talaj	steady-state koncentráció a mezőgazdasági talajban		10 éven át szennyvíziszappal trágyázott és a levegőből való folyamatos kiülepedéssel is terhelt mezőgazdasági talajra számított koncentráció 30 nap átlagában	2.3.8.5
	talajvíz	steady-state koncentráció a mezőgazdasági talaj alatti talajvízben		koncentráció a mezőgazdasági talaj alatti talajvízben	2.3.8.6
Levegő	levegő	steady-state koncentráció a levegőben		koncentráció a levegőben a forrástól vagy a szennyvíztisztítótól 100 méter távolságban	2.3.8.2
Mikro-organizmusok	a szennyvíz-tisztító átlegeőztető tartálya	-	-	koncentráció egy emissziós esemény idején	2.3.7

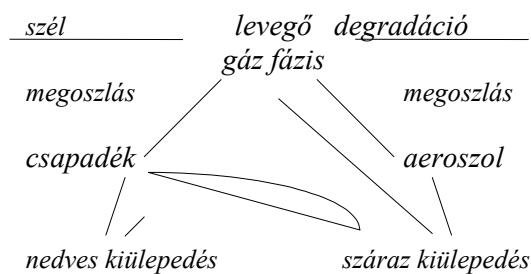
2.3.8.2 A légrére vonatkozó $PEC_{\text{lokális}}$ kiszámítása

Ebben a részben az alábbi paramétereket határozzuk meg:

- lokális koncentráció a levegőben egy emissziós esemény idején
- éves átlagos koncentráció a levegőben
- összes kiülepedés a levegőből (éves átlag)

A levegőbe az inputot a közvetlen emisszió és a szennyvíztisztítóban történő kipárolgás jelenti. A levegőre jellemző sorsfolyamatokat a 6. ábrán mutatjuk be.

A levegőre vonatkozó $PEC_{\text{lokális}}$ -t nem lehet összehasonlítani a levegőre vonatkozó PNEC értékkel, mivel ez utóbbi nem áll rendelkezésre. A levegőre vonatkozó $PEC_{\text{lokális}}$ a közvetett humán expozíció vonatkozásában megvalósuló inhalációs anyagfelvétel kiszámításához használjuk fel.



6. ábra. A vegyi anyag lehetséges sorsát leíró folyamatok a levegőben

A kiülepedési folyamatokat a talajra vonatkozó $PEC_{\text{lokális}}$ kiszámításához használjuk fel. Tehát mind a kiülepedést, mind pedig a koncentrációt éves átlagban adjuk meg.

Számos, a levegőre vonatkozó modell nagymértékben rugalmas és alkalmas arra is, hogy a méretekkal, az emisszió forrásokkal, az időjárási viszonyokkal, stb. kapcsolatos specifikus adatokat figyelembe vegye. Új anyagok, de sokszor meglévő anyagok esetében is, ilyen jellegű adatok általában nem állnak rendelkezésre. Ezért egy standardizált expozícióbecslést kell végezni, amelyhez számos explicit feltételezést és rögzített előválasztott paramétert kell felhasználni. Ehhez a Van Jaarsveld által leírt (Van Jaarsveld, 1990) Gauss-féle szennyezés terjedési modellt (OPS) alkalmazásukat javasoljuk Toet és Leeuw (1992) standard paramétereinek felhasználásával. Ez utóbbi szerzők az OPS modellt felhasználásával igen sok alapszámítást végeztek annak érdekében, hogy leírják az anyag alapvető tulajdonságai (gőznyomás, Henry-féle állandó) és egy pontforrás közelében jelentkező levegőbeli koncentrációja, illetve a talajra való kiülepedése közötti összefüggéseket. Ennek során az alábbi feltételezésekkel (modell beállításokkal) éltek:

- Valóság-hű átlagos légréri viszonyokat használtak, amelyeket Hollandia 10 évre visszamenő időjárási adatai alapján állítottak össze;
- Az elpárolgott vagy aeroszolhoz kötött anyag frakciókat külön kezelték. A gázfázis és az aeroszol frakció közötti megoszlást a Junge-egyenlet (ld. 5. egyenlet) segítségével határozták meg;

- A légköri reakció sebességet 5%-nak vették. Azonban az adott térbeli dimenziók esetében az atmoszférikus reakciók nem játszanak szerepet az anyag eliminációjában (még nagyon magas reakció sebességek esetében sem) (Toet és De Leeuw, 1992);
- A kiülepedési veszteséget a koncentráció, illetve a forrástól ilyen kis távolságban folyó kiülepedés becslésekor elhanyagolták;
- A forrás az alábbi feltételezett tulajdonságokkal rendelkezett:
 - a forrás magassága: 10 méter, ami azokat az épületeket reprezentálja, ahol a gyártás és feldolgozás folyik;
 - a kibocsátott gáz hőtartalma: 0; ez azt feltételezi, hogy a gőzöknek a kinti hőmérséklethez képesti többlet hője nem hoz létre további szennyező frakciókat;
 - a forrás mérete: 0 méter; ami egy ideális pontforrás megfelelője, ami nyilvánvalóan nem mindig korrekt, de elfogadható;
- A számított koncentrációk hosszabb időszakra vett átlagértékek.

A levegőre jellemző koncentrációt a pontforrástól 100 méteres távolságban kell meghatározni. Ez a távolság az emisszió forrás és az ipari üzemek területének határa közötti átlagos távolságot reprezentálja. A gáznemű és aeroszolhoz kötött anyagok kiülepedésének mértékét az atmoszférikus koncentráció becslésével analóg módon becsüljük, azaz az OPS modell segítségével egy számítási séma alapján. A talajra történő kiülepedést egy a pontforrás körüli 1000 méter sugarú körre átlagoljuk, amely a lokális mezőgazdasági területeket reprezentálja. A kiülepedési sebességeket az alábbi három kategóriára alkalmazzuk:

- A gázok/gőzök száraz kiülepedése: a becsült sebesség 0,01 cm/s;
- A gázok/gőzök nedves kiülepedése: meghatározás az OPS modell segítségével;
- Az aeroszol részecskék száraz és nedves kiülepedése; meghatározása az OPS modellen belül átlagos részecskeméret eloszlás felhasználásával.

A fenti modell beállításokra és feltételezésekre alapozva mind a gáznemű, mind pedig az aeroszolos anyagokra elvégezték a számításokat az eredeti OPS modellel (Toet és de Leeuw, 1992). Ezeket a számításokat csak egy olyan forrásra végezték el, amelynek kibocsátása 1 g/s volt, mivel belátható hogy a koncentrációk és a kiülepedési sebességek arányosak a kibocsátással. A számítások alapján a szerzők arra a következtetésre jutottak, hogy a lokális atmoszférikus koncentrációk nagymértékben függetlenek az anyagok fizikai-kémiai tulajdonságaitól. Ha tehát tudjuk egy adott forrás kibocsátását, a 100 méter távolságban mérhető koncentrációt egy egyszerű lineáris összefüggés segítségével könnyen meghatározhatjuk.

A levegőre jellemző $PEC_{\text{lokális}}$ számításakor figyelembe kell venni a pontforrásokból és a szennyvíztisztítókból eredő emissziókat is. A regionális koncentrációt ($PEC_{\text{regionális}}$), mint háttér koncentráció használjuk, tehát hozzá kell adni a lokális koncentrációhoz. A szennyvíztisztítókat, mint pontforrásokat tekintjük, és a kibocsátott anyag koncentrációját ettől 100 méteres távolságra határozzuk meg. A kettő (közvetlen, és a szennyvíztisztítón keresztüli) koncentrációk közül azt vesszük a $PEC_{\text{lokális}}$ -nak, amelyik a nagyobb.

$$Clokalis_{levegő} = \max (Elokalis_{levegő}, Eszt_{levegő}) \cdot Cstd_{levegő} \quad (25)$$

$$Clokalis_{levegő, éves} = Clokalis_{levegő} \cdot \frac{Temisszió}{365} \quad (26)$$

Jelölések:

$Elokalis_{levegő}$	a lokális közvetlen légköri emisszió mértéke az esemény során	[kg.nap ⁻¹]	2. egyenlet
$Eszt_{levegő}$	lokális közvetett légköri emisszió a szennyvíztisztítókból az esemény során	[kg.nap ⁻¹]	19. egyenlet
$Cstd_{levegő}$	légköri koncentráció 1 kg.nap ⁻¹ kibocsátású forrás esetében	[mg.m ⁻³]	2,78 · 10 ⁻⁴
Temisszió	az emissziós napok száma évente	[nap.év ⁻¹]	I.B melléklet
$Clokalis_{levegő}$	egy emissziós esemény során kialakuló atmoszférikus koncentráció	[mg.m ⁻³]	
$Clokalis_{levegő, éves}$	éves átlagos légköri koncentráció a pontforrástól 100 méter távolságban	[mg.m ⁻³]	

$$PEClokalis_{levegő, éves} = Clokalis_{levegő, éves} + PECregionális_{levegő} \quad (27)$$

Jelölések:

$Clokalis_{levegő, éves}$	éves átlagos légköri koncentráció	[mg.m ⁻³]	25. egyenlet
$PECregionális_{levegő}$	regionális atmoszférikus koncentráció	[mg.m ⁻³]	2.3.8.7
$PEClokalis_{levegő, éves}$	az előrejelzett éves átlagos koncentráció a levegőben	[mg.m ⁻³]	

A kiülepedés számítása némileg bonyolultabb ennél, mivel ez az aeroszolhoz kötött anyaghányadtól függ. A kiülepedés számításánál a két forrásból (közvetlen, illetve a szennyvíztisztítókból) származó emissziókat össze kell adni:

$$KIÜLösszes = (Elokalis_{levegő} + Eszt_{levegő}) \cdot (Fköt_{aer} \cdot KIÜLstd_{aer} + (1-Fköt_{aer}) \cdot KIÜLstd_{gáz}) \quad (28)$$

$$KIÜLösszes_{éves} = KIÜLösszes \cdot \frac{Temisszió}{365} \quad (29)$$

Jelölések:

$E_{lokális}_{levegő}$	egy emissziós esemény során a lokális közvetlen atmoszférikus emisszió sebessége	[kg.nap ⁻¹]	2. egyenlet
$E_{szl}_{levegő}$	egy emissziós esemény során lokális közvetett atmoszférikus emisszió a szennyvíztisztítókból	[kg.nap ⁻¹]	19. egyenlet
$F_{köt}_{aer}$	az aeroszolhoz kötött frakció	[-]	5. egyenlet
$KIÜL_{std}_{aer}$	az aeroszolhoz kötött anyag standard kiülepedési rátája 1 kg.nap ⁻¹ erősségű kibocsátásnál	[mg.m ⁻² .nap ⁻¹]	1 . 10 ⁻²
$KIÜL_{std}_{gáz}$	a gáznemű anyagok kiülepedési rátája a Henry-féle állandó függvényében, 1 kg.nap ⁻¹ erősségű kibocsátásnál	[mg.m ⁻² .nap ⁻¹]	
	$^{10}\log HENRY \leq -2$:		5 . 10 ⁻⁴
	$-2 < ^{10}\log HENRY \leq 2$:		4 . 10 ⁻⁴
	$^{10}\log HENRY > 2$:		3 . 10 ⁻⁴
Temisszió	az emissziós napok száma évente	[nap.év ⁻¹]	I.B melléklet
$KIÜL_{összes}$	összes kiülepedés egy emissziós esemény során	[mg.m ⁻² .nap ⁻¹]	
$KIÜL_{összes}_{éves}$	éves átlagos összes kiülepedés	[mg.m ⁻² .nap ⁻¹]	

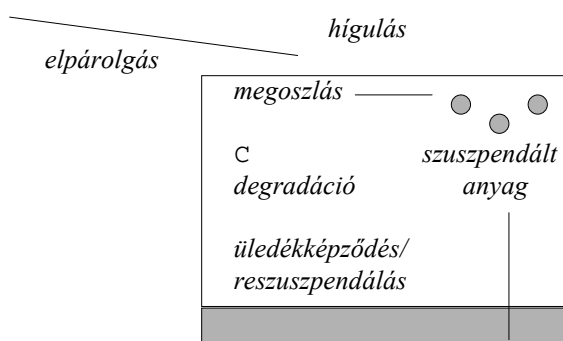
2.3.8.3 A vizekre vonatkozó $PEC_{lokális}$ kiszámítása

Ebben a részben az alábbi paramétereket határozzuk meg:

- lokális koncentráció a felszíni vizekben egy emissziós esemény során
- éves átlagos lokális koncentráció a felszíni vizekben

A szennyvíztisztítóból kibocsátott tisztított szennyvíz a felszíni vizekben kihígul. A felszíni vizekben lehetséges különböző sorsfolyamatokat a 7. ábrán mutatjuk be. A számításokhoz a következőket kell feltételezni:

- A kibocsátott tisztított szennyvíz a felszíni vizekben teljesen elkeveredik, és ez megfelelően reprezentálja a vízi ökoszisztémák expozíciós helyzetét;
- A lokális expozícióbecsléshez első közelítésben az elpárolgotatást, a degradációt és az üledékképződést nem vesszük figyelembe, mivel nagyon kicsi a távolság a tisztított szennyvíz kibocsátási helye és az expozíció helye között.



7. ábra. A vegyi anyagok lehetséges sorsát alakító folyamatok a felszíni vizekben

A vízi környezetre vonatkozó $PEC_{\text{lokális}}$ számítása számos egymás utáni lépésből áll (ld. az 5. ábrát is). Ki kell számolni többek között a szennyvíztisztítóból szennyvíz kibocsátását, a hígulás hatását és szuszpendált anyagokon történő adszorpció révén megvalósuló eliminációt is.

Hígulás a befogadó felszíni vizekben, illetve adszorpció a szuszpendált anyagokhoz

A szennyvíz kibocsátás és az a hely távolsága, ahol már teljes keveredés feltételezhető, igen eltérő lehet. Mindazonáltal egy fix hígulási tényezővel számolunk. A hígulási tényező függ a folyási sebességtől, és az adott üzemre jellemző kibocsátási rátától. Mivel a tagállamok évszakos, éghajlati és földrajzi viszonyaiban nagy különbségek találhatóak, a hígulási faktorok is viszonylag széles tartományban, körülbelül 1 (pl. nyáron egy száraz folyómederben) és 100 ezer (de Greef & de Nijs, 1990) között változhat. A hígulási tényező általában a használati kategóriára jellemző kibocsátási forgatókönyvhöz (scenárióhoz) kötődik. Fogyasztói termékek esetében például a kommunális szennyvíztisztítókból kibocsátott szennyvizekre vonatkozó átlagos javasolt hígulási tényező 10. Ez tekintendő egyben a hígulási tényező előválasztott értékének is, ha a vizsgált anyaggal kapcsolatban specifikus adatok nem állnak rendelkezésre.

Bizonyos körülmények között lehetőség nyílik specifikus emisszió pontok meghatározására is, amelynek segítségével azután pontosabb adataink lesznek a potenciális disztribúciós és sors folyamatokról. Az ilyen jellegű "hely-specifikus" becslést csak akkor szabad alkalmazni, ha bizonyított, hogy az életciklus egy adott pontján - pl. az előállítás során - jelentkező emisszió kevés számú, specifikus és azonosítható forrásból származik. Ilyen körülmények között a minden egyes kibocsátási pontra külön-külön kell elvégezni a kockázatbecslést. Ha azonban ilyen döntés nem hozható, az alapfeltételezéseket kell alkalmazni. A "hely-specifikus" kockázatbecsléseknél a PEC meghatározásakor megfelelően figyelembe lehet venni az adott emisszióra vonatkozó valóságos hígulást, továbbá a degradáció, az elpárolgás, stb. hatását. Általában csak a hígulást és a szuszpendált üledékhez történő adszorpciót kell figyelembe venni, de a hely-specifikus feltételek alapján lehetséges, hogy a lokális disztribúciós modellt kell alkalmazni.

Amennyiben a szuszpendált anyag és a vízfázis közötti megoszlási hányados ($K_{p_{\text{szuszp}}}$) tekintetében mérési adatok nem állnak rendelkezésre, akkor az egyéb adszorbensekre (pl. talaj vagy üledék) vonatkozó Koc érték alapján kell a kockázatbecslést elvégezni, figyelembe véve a különböző közegek eltérő szerves szén tartalmát is.

Bizonyos anyagok esetében, hogy olyan PEC értéket határozzunk meg a vízre, amely meghaladja az anyag vízzoldékonyságát. Az ilyen jellegű eredményeket óvatosan, és minden esetben egyedileg kell értelmezni. A felszíni vizekre vonatkozó koncentrációt nem korrigáljuk, de az eredményeket is hangsúlyozni kell. A PEC értéket az alapján kell értelmezni, hogy milyen hatásokat lehetett megfigyelni a vízi toxicitási vizsgálatokban.

Olyan helyzetekben, ahol az anyagot ugyanabba a folyóba számos pontforrásból bocsátják ki, a kialakuló halmozott koncentrációt első közelítésben úgy becsülhetjük meg, ha feltesszük, hogy csak egyetlen pontforrásból történik a kibocsátás. Amennyiben az így kapott PEC "aggodalomra való okot" jelez, akkor egy pontosabb becslést is készíteni kell folyóáramlási modellek (pl. OECD, 1992a) segítségével, amelyekben a specifikus emisszió formák mellett a folyók egyéb paramétereit is taglalni tudjuk.

A felszíni vizekben kialakuló lokális koncentráció:

$$C_{\text{lokális víz}} = \frac{C_{\text{lokális kifolyó}}}{(1 + K_{p_{\text{szuszp}}} \cdot SZUSZP_{\text{víz}} \cdot 10^{-6}) \cdot HÍGULÁS} \quad (30)$$

Jelölések:

$Clokális_{kifolyó}$	az anyag koncentrációja a szennyvíztisztítóból kifolyó tisztított szennyvízben	[mg.l ⁻¹]	17. egyenlet
Kp_{szuszp}	a szuszpendált anyag szilárd-víz megoszlási hányadosa	[l.kg ⁻¹]	8. egyenlet
$SZUSZP_{vz}$	a szuszpendált anyag koncentrációja a folyóban	[mg.l ⁻¹]	15
HÍGULÁS	hígulási tényező	[-]	10
$Clokális_{vz}$	a lokális koncentráció a felszíni vizekben egy emissziós esemény idején	[mg.l ⁻¹]	

Amikor a potenciális hígulást mérlegeljük, figyelembe kell venni a tipikus befogadók vízhozam ingadozásait is. Mindig az alacsony (vagy 10 percentilis) vízhozamot kell használni. Ha csak az átlagos vízhozam ismert, a hígulás vizsgálata céljára ennek az értéknek az egyharmadával kell számolni. Ha a körülmények alapján "hely-specifikus" kockázatbecslést kell és lehet végezni, a teljes keveredés követő tényleges hígulási tényezőt a folyó vízhozamából és a tisztított szennyvíz kibocsátásból számolhatjuk (ezt a módszert csak folyókra lehet alkalmazni, torkolati területekre, vagy tavakra nem):

$$HÍGULÁS = \frac{KIFOLYÓ_{szt} + VÍZHOZAM}{KIFOLYÓ_{szt}} \quad (31)$$

Jelölések:

$KIFOLYÓ_{szt}$	a szennyvíztisztító tisztított szennyvíz kibocsátása	[l.nap ⁻¹]	18. egyenlet
VÍZHOZAM	a folyó vízhozama	[l.nap ⁻¹]	szolgáltatott adat
HÍGULÁS	hígulási tényező	[-]	10

A közvetett humán expozíció és a másodlagos mérgezés vizsgálatára a felszíni vizekre éves átlagos koncentrációt számolunk:

$$Clokális_{vz, éves} = Clokális_{vz} \cdot \frac{Temisszió}{365} \quad (32)$$

Jelölések:

$Clokális_{vz}$	a lokális koncentráció a felszíni vizekben egy emissziós esemény idején	[mg.l ⁻¹]	29. egyenlet
Temisszió	Az emissziós napok száma évente	[nap.év ⁻¹]	I.B melléklet
$Clokális_{vz, éves}$	Éves átlagos koncentráció a felszíni vizekben	[mg.l ⁻¹]	

A regionális koncentrációt ($PEC_{regionális_{vz}}$) a lokális szinthez tartozó háttér koncentrációnak tekintjük, tehát ezeket a koncentrációkat össze kell adni:

$$PEC_{Clokális_{vz}} = Clokális_{vz} + PEC_{regionális_{vz}} \quad (33)$$

$$PEC_{Clokális_{vz, éves}} = Clokális_{vz, éves} + PEC_{regionális_{vz}} \quad (34)$$

Jelölések:

$PEC_{lokális,víz}$	a lokális koncentráció a felszíni vizekben egy emissziós esemény idején	[mg.l ⁻¹]	29. egyenlet
$PEC_{lokális,víz, éves}$	éves átlagos koncentráció a felszíni vizekben	[mg.l ⁻¹]	31. egyenlet
$PEC_{regionális,víz}$	regionális koncentráció a felszíni vizekben	[mg.l ⁻¹]	2.3.8.7
$PEC_{lokális,víz}$	előrejelzett környezeti koncentráció egy emissziós esemény idején	[mg.l ⁻¹]	
$PEC_{lokális,víz, éves}$	éves átlagos előrejelzett környezeti koncentráció	[mg.l ⁻¹]	

2.3.8.4 Az üledékre vonatkozó $PEC_{lokális}$ kiszámítása

Ebben a részben az alábbi paramétereket határozzuk meg:
- lokális koncentráció az üledékben egy emissziós esemény során

Az üledékre vonatkozó $PEC_{lokális}$ -t az üledéklakó élőlényekre vonatkozó PNEC értékkel lehet összehasonlítani. A frissen lerakódott üledékben kialakuló koncentrációt vesszük az üledékre vonatkozó PEC-nek, tehát a szuszpendált anyagok tulajdonságait használjuk. Az üledék összességére vonatkozó koncentrációt a hozzátartozó víztömeg jellemző koncentrációjából határozhatjuk meg, ha feltesszük, hogy a termodinamikai megoszlási egyensúly beállt (ld. még Di Toro et al., 1991):

$$PEC_{lokális,üledék} = \frac{K_{szuszp-víz}}{RHO_{szuszp}} PEC_{lokális,víz} \cdot 1000 \quad (35)$$

Jelölések:

$PEC_{lokális,víz}$	koncentráció a felszíni vizekben egy emissziós esemény idején	[mg.l ⁻¹]	32. egyenlet
$K_{szuszp-víz}$	a szuszpendált anyag és a víz közötti megoszlási hányados	[m ³ .m ⁻³]	9. egyenlet
RHO_{szuszp}	a szuszpendált anyag sűrűsége	[kg.m ⁻³]	4. egyenlet
$PEC_{lokális,üledék}$	előrejelzett környezeti koncentráció az üledékben	[mg.kg ⁻¹]	

Az erősen adszorbeálódó anyagokat a fenti módszerrel nem mindig lehet megfelelően jellemezni, mivel sok esetben nincs egyensúly a víz és a szuszpendált anyag frakció között az utóbbira jellemző erős kohézió miatt; a bentosban vagy a talajban élő szervezetek emésztő hatása azonban elősegítheti az deszorpciót.

2.3.8.5 A talajra vonatkozó $PEC_{lokális}$ kiszámítása

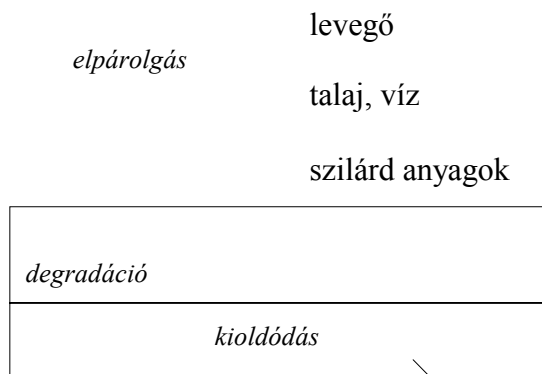
Ebben a részben az alábbi paramétereket határozzuk meg:
- a mezőgazdasági talajokban kialakuló lokális koncentrációt (adott időszakra kiátlagolva)
- a legelők talajában kialakuló lokális koncentrációt (adott időszakra kiátlagolva)
- a steady-state állapotok arányát (a stabilitás indikálására)

A talaj expozícióbecslése a szárazföldi szervezetek expozíciója szempontjából igen fontos. Emellett a humán fogyasztásra szánt élelmiszeripari növényeket a mezőgazdasági talajokon termelik, illetve a tejet és húst szolgáltató szarvasmarhák a legelőn veszik fel élelmüket. A 8. ábrán mutatjuk be a talajra jellemző lehetséges sors folyamatokat:

A talajra vonatkozó $PEC_{\text{lokális}}$ számításához az alábbi expozíciós kapukra adunk az alábbiakban útmutatást:

- A szennyvíziszap alkalmazása a mezőgazdaságban;
- Száraz és nedves kiülepedés a levegőből.

Az anyagok közvetlen alkalmazását (pl. növényvédő szerként, vagy trágyaként az ajánlott maximális mennyiségben) nem vesszük figyelembe. A közeljövőben azonban erre is ki kell majd dolgozni a megfelelő irányelveket.



8. ábra. A vegyi anyagok lehetséges sorsát jellemző folyamatok a talajban

A mezőgazdasági talajon a szennyvíziszap elhelyezés (iszaptrágyázás) tekintetében az éves alkalmazására a feltételezett mennyiség 5000 kg/ha szárazanyaggal egyenértékű, az legelőknél ugyanez az érték csak 1000 kg/ha/év. Az iszaptrágyázást úgy tekintjük, mint évente egy alkalommal bekövetkező eseményt. A száraz és nedves kiülepedés hozzájárulása a teljes hatáshoz a pontforrások emisszió számításán (ld. 2.3.8.2) alapszik és a forrás körül 1000 méteren belüli területtel áll összefüggésben.

A légkörből való kiülepedést az év során folyamatosnak tekintjük. Meg kell azonban jegyezni, hogy a kiülepedési rátát egy évre átlagoljuk. Ez nyilvánvalóan nem korrekt, hiszen a kiülepedési rátát az emissziós eseményhez kapcsoljuk. Az átlagolást azért végezzük, hogy megkönnyítsük a steady-state koncentráció kiszámítását. Ezenkívül lehetetlen meghatározni, hogy az emissziós esemény egy év során pontosan mikor történik: a növekedési szezon kezdetén az expozíciós szintekre gyakorolt hatás nagy lesz, a szezon befejeztével azonban a hatás már elhanyagolható. Összességében tehát az átlagolás megfelelő módszernek tekinthető.

A mezőgazdasági talajokra vonatkozó PEC értéket az alábbi két célra használjuk fel:

- A szárazföldi ökoszisztémák kockázatainak jellemzése (3. fejezet);
- Az élelmiszeripari növényeken és a szarvasmarhákból készített élelmiszereken keresztüli közvetett humán expozíció számításának kiinduló pontja (ld. 2. fejezet: Humán egészség kockázat becslése).

A talajra és a talajvízre (ezen belül is főleg a növényvédőszer hatását vizsgálata) számos numerikus modell használható. Ezekhez a modellekhez azonban a talaj és környezet jellemzőit megfelelően definiálni kell. Emiatt az ilyen fajta modellek kevésbé alkalmasak egy EU-szintű, általános jellegű kockázatbecslésre. A kezdeti becslés céljára egy egyszerűsített modellt használhatunk. A talaj legfelsőbb rétegét tekintjük egy környezeti elemnek, amelybe a

bemenetet a levegőből történő kiülepedés jelenti, a dobozból való kimenetet pedig a degradáció, az elpárolgás, a kioldódás és esetleges tovább releváns folyamatok. Ebben a talaj kompartmentben az aktuális koncentrációt egy egyszerű differenciál egyenlettel írhatjuk le. A kezdeti koncentrációt, $C_{talaj}(0)$, az iszaptrágyázáson keresztüli input határozza meg:

$$\frac{dC_{talaj}}{dt} = -k \cdot C_{talaj} + K\ddot{U}_{leveg\ddot{o}} \quad (36)$$

Jelölések:

$K\ddot{U}_{leveg\ddot{o}}$	egy kg talajra jutó kiülepedési ráta	[mg.kg ⁻¹ .nap ⁻¹]	36. egyenlet
t	idő	[nap]	
k	a talaj felső rétegéből történő elimináció elsőrendű sebességi állandója	[nap ⁻¹]	40. egyenlet
C_{talaj}	koncentráció a talajban	[mg.kg ⁻¹]	

A fenti képletben a levegőből történő kiülepedés rátáját mg anyag per kg talajban per nap mértékegységben fejezzük ki. A $K\ddot{U}_{leveg\ddot{o}}$ -t a totál kiülepedési rátából (KIÜLösszes^{éves}) a következőképpen határozhatjuk meg:

$$K\ddot{U}_{leveg\ddot{o}} = \frac{KI\ddot{U}L\ddot{o}sszes\ddot{e}ves}{M\acute{E}LY_{talaj} \cdot RHO_{talaj}} \quad (37)$$

Jelölések:

KIÜLösszes ^{éves}	az éves átlagos totál kiülepedési ráta	[mg.kg ⁻¹ .nap ⁻¹]	28. egyenlet
^s MÉLY _{talaj}	a talaj keveredési mélysége	[m]	9. táblázat
RHO _{talaj}	a talaj sűrűsége	[kg.m ⁻³]	4. egyenlet
$K\ddot{U}_{leveg\ddot{o}}$	egy kg talajra jutó kiülepedési ráta	[mg.kg ⁻¹ .nap ⁻¹]	

A 35. számú differenciál egyenletnek van analitikus megoldása is:

$$C_{talaj}(t) = \frac{K\ddot{U}_{leveg\ddot{o}}}{k} - \left[\frac{K\ddot{U}_{leveg\ddot{o}}}{k} - C_{talaj}(0) \right] \times e^{-kt} \quad (38)$$

Ezzel az egyenlettel a koncentráció minden időpillanatban kiszámolható, ha ismerjük az adott évre a kiindulási koncentrációt.

Ha a szennyvíziszap elhelyezés egymást követő években történik, akkumuláció is felléphet. Mint ésszerű legrosszabb eseti expozíciós forgatókönyvet (scenáriót), azt is feltehetjük, hogy az iszaptrágyázást 10 egymást követő évben alkalmazzák. Az anyag stabilitásának indikálására ki kell számolni a steady-state állapotok arányát is.

Az iszaptrágyázást közvetlenül követő időszakban a koncentráció magas (a növekedési szezon elején), az év végére pedig az eliminációs folyamatoknak köszönhetően lecsökken. Így tehát az egyes hatásokhoz vett expozíciókhoz tartozó koncentrációkat bizonyos időszakra átlagolni

kell. Ezen egyes hatásokra különböző átlagolási időszakokat lehet meghatározni: az ökoszisztéma esetében ez az iszaptrágyázást követő 30 napos időszak. A biológiai feldúsulás ("biomagnifikációs" hatások) és a közvetett humán expozíció esetében azonban egy hosszabb, 180 napos időszakot kell vizsgálni.

A talajban a lokális koncentrációt egy bizonyos (T) időszakra átlagolt koncentrációként határozzuk meg. A T napra átlagolt koncentráció:

$$C_{\text{lokális talaj}} = \frac{1}{T} \int_0^T C_{\text{talaj}}(t) dt \quad (39)$$

Az egyenlet 0-tól T-ig való megoldása adja az erre az időszakra vonatkozó átlagos koncentráció kiszámításához szükséges egyenletet:

$$(40) \quad C_{\text{lokális talaj}} = \frac{K\ddot{U}_{\text{levegő}}}{k} + \frac{1}{kT} \left[C_{\text{talaj}}(0) - \frac{K\ddot{U}_{\text{levegő}}}{k} \right] \cdot [1 - e^{-kT}]$$

Jelölések:

$K\ddot{U}_{\text{levegő}}$	egy kg talajra jutó kiülepedési ráta	[mg.kg ⁻¹ .nap ⁻¹]	36. egyenlet
T	átlagolási időszak	[nap]	9. táblázat
k	a talaj felső rétegéből történő elimináció elsőrendű sebességi állandója	[nap ⁻¹]	40. egyenlet
$C_{\text{talaj}}(0)$	kiindulási koncentráció (az iszaptrágyázás után)	[mg.kg ⁻¹]	47. egyenlet
$C_{\text{lokális talaj}}$	átlagos koncentráció a talajban T időszakra	[mg.kg ⁻¹]	

Az elimináció sebességi állandóinak meghatározása

A teljes elimináció sebességi állandója több különböző részből tevődik össze:

- biológiai degradációs sebességi állandó;
- az anyag kipárolgása a talajból;
- kimosódás a mélyebb rétegek felé.

Bizonyos esetekben további eliminációs mechanizmusok is szóba kerülhetnek (pl. növényi felvétel). Ha ismerjük a fenti folyamatok sebességi állandóit, a teljes elimináció kiszámításához össze kell adni őket. A teljes eliminációra vonatkozó sebességi állandó tehát:

$$k = k_{\text{elpár}} + k_{\text{kiold}} + k_{\text{bio talaj}} \quad (41)$$

Jelölések:

$k_{\text{elpár}}$	a talajból történő elpárolgás látszólagos elsőrendű sebességi állandója	[nap ⁻¹]	41. egyenlet
k_{kiold}	a felső talajrétegből történő kioldódás látszólagos elsőrendű sebességi állandója	[nap ⁻¹]	42. egyenlet
$k_{\text{bio talaj}}$	a talajban történő biológiai degradáció látszólagos elsőrendű sebességi állandója	[nap ⁻¹]	6. táblázat
k	a felső talajrétegből történő elimináció elsőrendű sebességi állandója	[nap ⁻¹]	

A talajból a levegőbe történő diffúziós transzfer a klasszikus két-filmes ellenállási modell segítségével lehet megbecsülni. A határfelület talaj oldalát egy pár párhuzamos ellenállásnak tekintjük (a talaj levegő és vizes fázisa) (Mackay et al., 1992).

A talajból való elpárolgás sebességi állandója tehát:

$$\frac{1}{k_{\text{elpár}}} = \left(\frac{1}{k_{\text{asl}_{\text{levegő}}} \cdot K_{\text{levegő-víz}}} + \frac{1}{k_{\text{asl}_{\text{talajlevegő}}} \cdot K_{\text{levegő-víz}} + k_{\text{asl}_{\text{talaj víz}}}} \right) \cdot K_{\text{talaj-víz}} \cdot \text{MÉLY}_{\text{talaj}} \quad (42)$$

Jelölések:

$k_{\text{asl}_{\text{levegő}}}$	részleges tömeg transzfer coeff. a levegő-talaj határfelület levegő oldalán	[m.nap ⁻¹]	120
$k_{\text{asl}_{\text{talajlevegő}}}$	részleges tömeg transzfer coeff. a levegő-talaj határfelület talajlevegő oldalán	[m.nap ⁻¹]	0,48
$k_{\text{asl}_{\text{talaj víz}}}$	részleges tömeg transzfer coeff. a levegő-talaj határfelület talaj víz oldalán	[m.nap ⁻¹]	$4,8 \cdot 10^{-5}$
$K_{\text{levegő-víz}}$	a levegő és a víz között egyensúlyi disztribúciós állandó	[m ³ .m ⁻³]	7. egyenlet
$K_{\text{talaj-víz}}$	talaj-víz megoszlási hányados	[m ³ .m ⁻³]	9. egyenlet
$\text{MÉLY}_{\text{talaj}}$	a talaj keveredési mélysége	[m]	9. táblázat
$k_{\text{elpár}}$	látszólagos elsőrendű sebességi állandó a talajból történő elpárolgásra	[nap ⁻¹]	

A kimosódásra vonatkozó látszólagos elsőrendű sebességi állandót a talaj folyékony fázisát átmosó csapadék mennyiségéből számolhatjuk ki.

$$k_{\text{kiold}} = \frac{F_{\text{sziv}_{\text{talaj}}} \cdot \text{CSAPráta}}{K_{\text{talaj-víz}} \cdot \text{MÉLY}_{\text{talaj}}} \quad (43)$$

Jelölések:

$F_{\text{sziv}_{\text{talaj}}}$	a csapadékvíz talajba szivárgó frakciója	[-]	0,25
CSAPráta	csapadék mennyisége (700 mm/év)	[m.nap ⁻¹]	$1,92 \cdot 10^{-3}$
$K_{\text{talaj-víz}}$	talaj-víz megoszlási hányados	[m ³ .m ⁻³]	9. egyenlet
$\text{MÉLY}_{\text{talaj}}$	a talaj keveredési mélysége	[m]	9. táblázat
k_{kiold}	látszólagos elsőrendű sebességi állandó a talajrétegből történő kimosódásra	[nap ⁻¹]	

A kiindulási koncentráció meghatározása 10 éves szennyvíziszap elhelyezés után

Az expozícióra vonatkozó valóságghű legrosszabb eseti feltételezés, ha az iszaptrágyázást 10 egymást követő évben megismétlik. Ahhoz, hogy ki tudjuk számolni az ezután következő évben a T időszakra kiátlagolt koncentrációt (39. egyenlet), először meg kell határozni az adott évre jellemző kiindulási koncentrációt. Ehhez a kiülepedést és az iszaptrágyázást külön-külön kell figyelembe venni.

A 10 éves folyamatos kiülepedés következtében kialakuló koncentrációt a 37. egyenlet alkalmazásával kaphatjuk meg, a kiindulási koncentrációt nullának véve, és hozzá adva a 10 éves inputot:

$$C_{\text{kiül}_{\text{talaj}10}(0)} = \frac{K\ddot{U}_{\text{levegő}}}{K\ddot{U}_{\text{levegő}}} \cdot e^{-365 \cdot 10 \cdot k} \quad (44)$$

$k \quad k$

Az iszaptrágyázásnál a helyzet bonyolultabb, mivel ez nem egy folyamatos esemény. Az iszaptrágyázás első éve után a koncentráció:

$$(45) \quad C_{iszap_{talaj1}}(0) = \frac{C_{iszap} \cdot TRÁGY_{iszap}}{MÉLY_{talaj} \cdot RHO_{talaj}}$$

Jelölések:

C_{iszap}	koncentráció a száraz szennyvíziszapban	[mg.kg ⁻¹]	20. egyenlet
$TRÁGY_{iszap}$	az iszaptrágyázás mennyisége	[kg.m ² .év ⁻¹]	9. táblázat
$MÉLY_{talaj}$	a talaj keveredési mélysége	[m]	9. táblázat
RHO_{talaj}	a talaj sűrűsége	[kg.m ⁻³]	4. egyenlet
$C_{iszap_{talaj1}}(0)$	koncentráció a talajban az első évben folytatott iszaptrágyázás hatására, t=0 időpillanatban	[mg.kg ⁻¹]	

Az év végén a talaj felső rétegében maradt anyag koncentrációja:

$$Fakk = e^{-365k} \quad (46)$$

Jelölések:

kapu	a felső talajrétegből történő elimináció elsőrendű sebességi állandója	[nap ⁻¹]	40. egyenlet
Fakk	Egy év alatt akkumulálódott frakció	[-]	

Minden év végén a kiindulási koncentráció Fakk része a felső talajrétegben marad. A 10 éves iszaptrágyázást követően tehát a kiindulási koncentráció:

$$C_{iszap_{talaj10}}(0) = C_{iszap_{talaj1}}(0) \cdot \left[1 + \sum_{n=1}^9 Facc^n \right] \quad (47)$$

A 10. évben a kiindulási koncentrációt a kiülepedésből és az iszaptrágyázásból származó koncentrációk összege adja:

$$C_{talaj10}(0) = C_{iszap_{talaj10}}(0) + C_{kiül_{talaj10}}(0) \quad (48)$$

Ez a kiindulási koncentráció helyettesíthető be a 39. egyenletbe, és ebből kapható meg az adott időszakra kiátlagolt koncentráció.

Az anyag stabilitása a talajban

Bizonyos anyagok esetében még a 10 egymást követő évben történt akkumuláció sem elégséges a steady-state állapot kialakulásához. Az ilyen jellegű anyagok akár több száz éven át akkumulálódhatnak. A talajban kialakult stabilitás okozta problémák jelzésére meg kell határozni a steady-state koncentráció arányát:

$$Fst-st = \frac{C_{talaj10}(0)}{\quad} \quad (49)$$

$$C_{talaj\infty}(0)$$

Jelölések:

$C_{talaj10}(0)$	kiindulási koncentráció 10 év után	[mg.kg ⁻¹]	47. egyenlet
$C_{talaj\infty}(0)$	kiindulási koncentráció steady-state állapotban	[mg.kg ⁻¹]	49. egyenlet
Fst-st	a talajban elért steady-state állapot aránya	[-]	

A steady-state állapottal jellemezhető évben a kiindulási koncentráció:

$$C_{talaj\infty}(0) = \frac{K\ddot{U}_{leveg\ddot{o}}}{k} + C_{iszap_{talaj1}}(0) \cdot \frac{1}{1 - F_{akk}} \quad (50)$$

Jelölések:

$K\ddot{U}_{leveg\ddot{o}}$	egy kg talajra jutó kiülepedési ráta	[mg.kg ⁻¹ .nap ⁻¹]	36. egyenlet
k	a felső talajrétegből történő elimináció elsőrendű sebességi állandója	[nap ⁻¹]	40. egyenlet
F _{akk}	egy év alatt akkumulálódott frakció	[-]	45. egyenlet
$C_{iszap_{talaj1}}(0)$	koncentráció a talajban az első évben folytatott iszaptrágyázás hatására, t=0 időpillanatban	[mg.kg ⁻¹]	44. egyenlet
$C_{talaj\infty}(0)$	kiindulási koncentráció steady-state állapotban	[mg.kg ⁻¹]	

A PEC_{lokális talaj} kiszámítása

A talajra három különböző hatásra három különböző PEC értéket számolunk ki (9 táblázat).

9. táblázat. A talaj és a talajhasználat jellemzői a három különböző hatás tekintetében

	A talaj mélysége [m]	Az átlagolási időszak [napok]	Az iszaptrágyázás mértéke [kg _{szrs} .m ⁻² .év ⁻¹]	Hatás
PEC _{lokális talaj}	0,20	30	0,5	szárazföldi ökoszisztémák
PEC _{lokális mezg. talaj}	0,20	180	0,5	élelmiszeripari növények
PEC _{lokális legelő}	0,10	180	0,1	szarvasmarha takarmány (fű)

A "talaj mélysége" itt az érdeklődésre számot tartó felső talajréteg vastagsági tartományt jelenti. A 20 cm-es mélység azért lehet megfelelő, mert itt még általában sűrű a növények gyökérzete, más részről pedig ez szokott a szántási mélység is lenni. A legelők esetében ez a mélység kisebb, mivel az ilyen területeket nem szántják fel. Az élelmiszeripari növények esetében azért alkalmazzuk a 180 napos átlagolási időszakot, mert ez jól reprezentálja a növények növekedési időszakát. A legelők esetében az átlagolási időszak feltételezés szerint azt a periódust reprezentálja, amelynek során a szarvasmarhák a réten legelnek. Az ökoszisztéma vonatkozásában a talajorganizmusok krónikus expozíciója szempontjából 30 napos időszakot tekintünk relevánsnak.

A regionális koncentrációt a lokális koncentrációhoz kapcsolódó háttér-értéknek tekintjük. Meg kell jegyezni, hogy e célra a nem szennyezett talajra jellemző koncentrációt kell alkalmazni ("természetes talaj", csak kiülepedés történik). Máskülönben az iszaptrágyázást kétszer vennék figyelembe.

$$PEC_{lokális,talaj} = C_{lokális,talaj} + PEC_{regionális,természetes\ talaj} \quad (51)$$

Jelölések:

$C_{lokális,talaj}$	lokális koncentráció a talajban	[mg.kg ⁻¹]	39. egyenlet
$PEC_{regionális,természetes,talaj}$	regionális koncentráció a természetes talajban	[mg.kg ⁻¹]	2.3.8.7
$PEC_{lokális,talaj}$	előrejelzett környezeti koncentráció a talajban	[mg.kg ⁻¹]	

A pórusvízre jellemző koncentrációt az alábbi egyenlet segítségével határozhatjuk meg:

$$PEC_{lokális,talaj,pórusv} = \frac{PEC_{lokális,talaj} \cdot RHO_{talaj}}{K_{talaj-víz} \cdot 1000} \quad (52)$$

Jelölések:

$PEC_{lokális,talaj}$	előrejelzett környezeti koncentráció a talajban	[mg.kg ⁻¹]	50. egyenlet
$K_{talaj-víz}$	a talaj és a víz közötti megoszlási hányados	[m ³ .m ⁻³]	9. egyenlet
RHO_{talaj}	a talaj sűrűsége	[-]	4 egyenlet
$PEC_{lokális,talaj,pórusv}$	előrejelzett környezeti koncentráció a pórusvízben	[mg.kg ⁻¹]	4. egyenlet

2.3.8.6 A talajra/talajvízre vonatkozó koncentráció kiszámítása

Ebben a részben az alábbi paramétereket határozzuk meg:
- lokális koncentráció a talajvízben

A talajvízben kialakuló koncentrációra az ivóvízen keresztüli közvetett humán expozíció számításához van szükség. A talajvíz szintek számításához több különféle numerikus modell is rendelkezésre áll (főleg növényvédő szerekre). Ezekhez a modellekhez azonban a talaj paramétereket nagyon részletesen kell ismerni, ezért a kezdeti becslés céljára ezek kevésbé alkalmazhatók. Így tehát a potenciális talajvíz szintek indikálására a mezőgazdasági talajok pórusvizében kialakuló koncentrációt vesszük. Meg kell jegyezni, hogy ez egy legrosszabb eseti feltételezés, amelynek során elhanyagoljuk az átalakulást és a mélyebb talajrétegekben történő hígulást.

$$PEC_{lokális,tlv} = PEC_{lokális,mezg,talaj,pórusv} \quad (53)$$

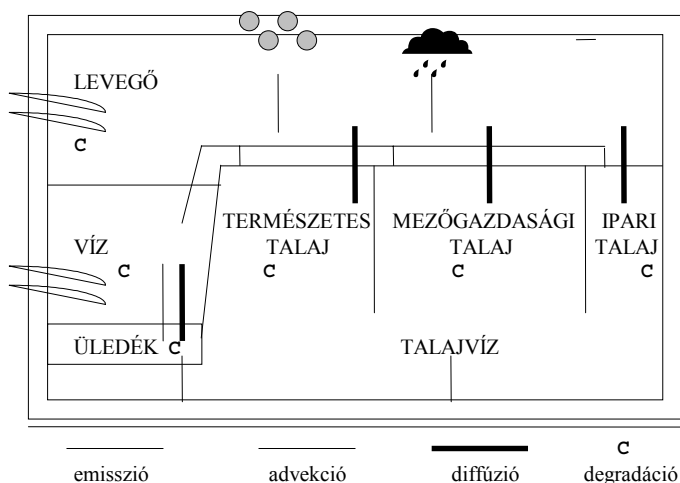
Jelölések:

2.3.8.7 A PEC_{regionális} kiszámítása

Ebben a részben az alábbi paramétereket határozzuk meg:
 - regionális expozíciós koncentrációk az összes környezeti elemben

A regionális számításokat sok-közeges, a diffúz emissziós koncepción alapuló sorsmodellek segítségével végezzük. A közelmúltban modelleket Mackay et al., (1992) és Van de Meent (1993) (SimpleBox) írtak le.

Ezek dobozmodellek, amelyek számos, homogénnek és jól keveredőnek tekintett környezeti elemből állnak (9. ábra). A modellben a kibocsátott anyagok az anyag illetve a modell környezet tulajdonságai alapján oszlanak meg az egyes környezeti elemek között.



9. ábra. A releváns regionális emissziós és disztribúciós útvonalak

A 9. ábrán a regionális becslésben megkülönböztetett sorstípusokat vázoltuk fel:

- Emisszió, közvetlen és (a szennyvíztisztítón keresztül) közvetett a levegőbe, a vizekbe, az ipari talajokba és a mezőgazdasági talajokba;
- Degradáció, biotikus és abiotikus, az összes környezeti elemben;
- Diffúziós transzport pl. gáz-abszorpció vagy elpárolgás formájában. A diffúziós tömeg transzfer két környezeti elem között mindkét irányban folyik, és a két oldalon kialakuló koncentráció függvényében a nettó áramlás bármelyik irányba történhet;
- Szél okozta (advekción) transzport pl. kiülepedés, elfolyás, erózió, stb. formájában. A szél okozta (advekción) transzport esetében az anyag az egyik környezeti elemből a másikba valamilyen hordozó segítségével kerül át, amely hordozó fizikailag áramlik egyik környezeti elemből a másikba. A szél okozta (advekción) transzport tehát szigorúan egyirányú.

A modell szerint az anyag inputot folyamatosnak kell tekinteni, amely megegyezik a folyamatos diffúz emisszióval. A modell eredményei azok steady-state koncentrációk,

amelyek a hosszú idejű átlagos expozíció becslésének tekinthetők. Az a tény, hogy két környezeti elem között steady-state-et számolunk, nem jelenti azt, hogy az az elem, amelyben az emisszió történik nem fontos. A Mackay-féle III. szintű modellben a disztribúció és az abszolút koncentrációk nagyban függhetnek a belépést reprezentáló környezeti elemtől.

Az advekciónak import és export (definíció szerint a modellen kívülről befelé áramlás, illetve a modell környezetből kifelé áramlás) igen fontos lehet mind a regionális, mind pedig a lokális modell számítások eredménye szempontjából. Figyelembe kell tehát venni a régió "határ"-án kialakuló koncentrációt is. Ezt tekintjük háttér koncentrációnak. A lokális modellhez a háttér koncentrációt a regionális modell számítás eredménye adja. Olyan anyagok esetében, ahol sok viszonylag kis pontforrás működik, ez a háttér koncentráció jelentősen hozzájárulhat a lokális forrásból származó koncentrációhoz. A regionális modellhez tartozó háttér koncentrációt egy hasonló, de nagyobb méretű - pl. az egész európai kontinenst magában foglaló - doboz modell segítségével számolhatjuk ki. Ebben a kontinentális modellben azonban a feltételezés alapján a határokon át se levegő beáramlás, se víz beáramlás nem történik. Feltételezzük továbbá azt is, hogy az összes kibocsátott anyag bekerül ebbe az egész kontinensre kiterjedő környezetbe. Az így kialakuló steady-state koncentrációkat használjuk azután a regionális modell háttér vagy országhatárokon áttérjedő koncentrációjaként. A kontinentális és regionális szintű számításokat meghatározott sorrendben kell elvégezni. Az 1. ábra mutatja a különböző szintű modellekre kiszámolt koncentrációk közötti összefüggéseket. Mind regionális, mind pedig kontinentális szinten az összesített emissziókat (a diffúz és a pontforrásokból származó emissziókat minden egyes életciklusban össze kell adni) kell alkalmazni.

A $PEC_{\text{lokális}}$ -sal ellentétben a $PEC_{\text{regionális}}$ számításakor figyelembe kell venni az átlagos szennyvíz-csatornázottság arányát. Ez a várható regionális háttér koncentráció valóságosabb becslését eredményezi. Az általános jellegű regionális modell céljára a csatornázottság arányát 70%-nak vesszük (a XII. melléklet alapján ez az uniós átlag).

A regionális modell eredményeinek értelmezésekor nagy körültekintéssel kell eljárni. A meghatározott környezeti koncentrációk a teljes regionális szintű (és definíció szerint jól keveredő) elemre vett átlagértékek. Lokálisan a koncentrációk jóval meghaladhatják ezeket az értékeket. Azonkívül figyelembe kell venni az input paraméterek (pl. degradációs sebességek, megoszlási hányadosok, stb.) bizonytalanságából származó általános bizonytalanságokat is.

A $PEC_{\text{regionális}}$ modell paraméterei

A $PEC_{\text{regionális}}$ számításakor fontos, hogy milyen modell paramétereket választunk, és hogy a regionális emisszióhoz a teljes emisszió mekkora hányadát tekintjük. Két lehetőség közül választhatunk:

- A $PEC_{\text{regionális}}$ -t a standardizált regionális környezet elfogadott modell paraméterei alapján számoljuk ki;
- A $PEC_{\text{regionális}}$ -t az adott országra jellemző modell paraméterek alapján számítjuk ki.

A $PEC_{\text{regionális}}$ kiszámításakor első közelítésben a standardizált regionális környezetet kell alkalmazni. Amennyiben a termelő/kibocsátó források helyével kapcsolatosan részletes adatok is rendelkezésre állnak, ezek segítségével tovább pontosítható a regionális expozícióbecslés. A második módszer adott esetekben pontosabb becsléseket eredményezhet egy adott ország tekintetében. Azonban a termelőüzemek helyével kapcsolatos információk függvényében ez több különböző PEC értéket is eredményezhet, ami megnehezítheti az EU-szintű kockázat jellemzést.

A számításokat egy sűrűn lakott, 200×200 km-es, 20 millió lakosú területre végezzük el. Ha nincs specifikus adat az egy főre jutó használat vagy emisszió tekintetében, akkor azzal a feltételezéssel élünk, hogy ezen a területen Európa össztermelésének 10%-a folyik, vagyis a

becsült emisszió 10%-át alkalmazzuk a regionális modell input értékeként. Az erre a standard környezetre vonatkozó javasolt modell paramétereket a 10. táblázatban foglaltuk össze. Meg kell jegyezni, hogy borzasztóan nehéz tipikus vagy standard értékeket választani egy standard európai régióra. Így tehát a 10. táblázatban megadott értékeket is fenntartásokkal kell kezelni. Mindazonáltal ezek az értékek képviselik a regionális szintű expozícióbecslés kiindulási pontját. A regionális modellhez a környezeti elemek jellemzését a 3. táblázatban megadott értékeknek megfelelően kell elvégezni. A víz, illetve a természetes, mezőgazdasági és városi/ipari talajok területhányadai az ECETOC-ból (1994b) vett átlagértékek, kiegészítve a Svédországból és Finnországból kapott adatokkal. A Norvégiára és Ausztriára vonatkozó adatokat a FAO-ból (Agrostat adatbázis) vettük. A levegő tartózkodási ideje (definíció szerint az az idő, ami az adott légtömegnek a régióba való belépése és onnan való kilépése között eltelik) 0,7 nap, amelyet a 3 m/s-os szélességi érték és a régió nagysága alapján kalkuláltunk. A víz tartózkodási ideje 40 nap, ami az Európai helyzetet ésszerűen reprezentáló átlagérték. A rendszeren keresztül folyó víz a csapadék mennyiség (elfolyó és közvetlenül a felszíni vizekbe kerülő csapadék), a szennyvíz kibocsátások, és a folyók által beszállított víz összege. Ha az évi átlagos csapadékmennyiséget 700 mm-nek vesszük és az elfolyó frakció az egész 25%-a, akkor a modell környezetén átfolyó vízmennyiség, ami a fenti tartózkodási időnek megfelel, $6,9 \cdot 10^7 \text{ m}^3 \cdot \text{nap}^{-1}$.

10. táblázat. A regionális modellhez javasolt paraméterek

Paraméter	A paraméter értéke a regionális modellhez
a regionális rendszer területe	$4 \cdot 10^4 \text{ km}^2$
a víz részaránya a területen	0,03
a természetes talaj aránya a területen	0,60
a mezőgazdasági talaj aránya a területen	0,27
a városi/ipar talaj aránya a területen	0,10
a természetes talaj keveredési mélysége	0,05 méter
a mezőgazdasági talaj keveredési mélysége	0,2 méter
a városi/ipari talaj keveredési mélysége	0,05 méter
a légkör keveredési magassága	1000 méter
a víz mélysége	3 méter
az üledék mélysége	0,03 méter
az üledék aerob frakciója	0,10
éves átlagos csapadék mennyiség	$700 \text{ mm} \cdot \text{év}^{-1}$
szélesség	$3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
a levegő tartózkodási ideje	0,7 nap
a víz tartózkodási ideje	40 nap

a csapadékból a talajba szivárgó hányad	0,25
a csapadék elfolyó hányada	0,25
átlagos szennyvíz-csatornázottság az EU-ban	70%

A kibocsátott szennyvíz mennyiségét az egy lakosra jutó szennyvíz kibocsátás és a rendszerben lakók számának szorzata adja. Ha az egy főre eső napi szennyvízkibocsátást 200 l-nek vesszük (ez megegyezik a SimpleTreat-ben használt értékkel), és a populáció nagysága 20 millió, akkor a modell környezetén átfolyó vízmennyiséget ez további $4,0 \cdot 10^6 \text{ m}^3 \cdot \text{nap}^{-1}$ mennyiséggel növeli. A vízhozam tehát amit a folyók vize képvisel $6,5 \cdot 10^7 \text{ m}^3 \cdot \text{nap}^{-1}$.

A régió környezeti paramétereinek mellett, a sok-közeges diffúz emissziós modellhez az egyes közegek közötti tömegtranszfer együtthatókat is meg kell határozni a modellek eredményeinek összehasonlíthatósága érdekében. Ezeket a transzfer együtthatókat a 11. táblázatban foglaltuk össze.

11. táblázat. Közegek közötti tömegtranszfer-együtthatók

Paraméter	A paraméter értéke
levegő-víz határfelület: levegőoldali parciális tömegtranszfer-együttható	$1,39 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
levegő-víz határfelület: vízoldali parciális tömegtranszfer-együttható	$1,39 \cdot 10^{-5} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
aeroszol kiülepedési ráta	$0,001 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
levegő-talaj határfelület: levegőoldali parciális tömegtranszfer-együttható	$1,39 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
levegő-talaj határfelület: talajoldali parciális tömegtranszfer-együttható	$5,56 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
levegő-talaj határfelület: talajban lévő vízoldali parciális tömegtranszfer-együttható	$5,56 \cdot 10^{-10} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
üledék-víz határfelület: vízoldali parciális tömegtranszfer-együttható	$2,78 \cdot 10^{-6} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
üledék-víz határfelület: pórus vízoldali parciális tömegtranszfer-együttható	$2,78 \cdot 10^{-8} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
nettó üledékképződési ráta	$3 \text{ mm} \cdot \text{év}^{-1}$

A kontinentális koncentráció becsléséhez szükséges modell paraméterek

A kontinentális doboz területe megegyezik az összes EU tagállam (Norvégia is) területének összegével, és erre is a 10. táblázatban megadott értékekhez hasonló víz, illetve természetes, mezőgazdasági és város/ipari talaj arányok vonatkoznak. Ezeket az értékeket a 12. táblázatban foglaltuk össze. Az összes egyéb paraméter hasonló a korábbi táblázatokban megadottakhoz. A kontinentális dobozban az emisszióbecslést az unióban előállított összmennyiségre kell alapozni. A meghatározott vízi és atmoszférikus koncentrációt a regionális modellben háttér koncentrációként kell felhasználni (azaz a rendszerbe belépő vízi és atmoszférikus koncentrációk). Feltételezzük, hogy a kontinentális rendszerbe kívülről nem érkezik anyag.

12. táblázat. A kontinentális modellben használt paraméterek

Paraméter	A paraméter értéke a kontinentális modellben
a kontinentális rendszer területe	$3,56 \cdot 10^6 \text{ km}^2$
a víz aránya a területen	0,03
a természetes talaj aránya a területen	0,60
a mezőgazdasági talaj aránya a területen	0,27
a városi/ipari talaj aránya a területen	0,10

2.4 A meghatározott PEC értékek összefoglalása

A lokális becslések összefoglalóan az alábbi input és output információkat eredményezik:

Input:

Fizikai-kémiai tulajdonságok	2.3.2
A környezet jellemzése	3. táblázat
Emisszió adatok	2.3.3.3
Megoszlási hányadosok	2.3.5
Bomlási sebességek	2.3.6
Az anyagok sorsa a szennyvíztisztítóknban	2.3.7

Output:

$PEC_{\text{mikroorganizmusok}}$	a mikroorganizmusok lokális PEC-je a szennyvíztisztítóban	$[\text{mg.l}^{-1}]$	22-23. egyenlet
$PEC_{\text{lokális víz}}$	lokális PEC a felszíni vizekre (oldott frakció) egy emissziós esemény során	$[\text{mg.l}^{-1}]$	32. egyenlet
$PEC_{\text{lokális víz, éves}}$	éves átlagos PEC a felszíni vizekben (oldott frakció)	$[\text{mg.l}^{-1}]$	33. egyenlet
$PEC_{\text{lokális üledék}}$	lokális PEC az üledékben (összes)	$[\text{mg.kg}^{-1}]$	34. egyenlet
$PEC_{\text{lokális levegő, éves}}$	éves átlagos PEC a levegőben (összes)	$[\text{mg.m}^{-3}]$	26. egyenlet
$PEC_{\text{lokális talaj}}$	lokális PEC a mezőgazdasági talajokban (összes), 30 napra átlagolva	$[\text{mg.kg}^{-1}]$	50. egyenlet
$PEC_{\text{lokális mzg. talaj}}$	lokális PEC a mezőgazdasági talajokban (összes), 180 napra átlagolva	$[\text{mg.kg}^{-1}]$	50. egyenlet
$PEC_{\text{lokális legelő}}$	lokális PEC a legelőkön (összes), 180 napra átlagolva	$[\text{mg.kg}^{-1}]$	50. egyenlet
$PEC_{\text{lokális mzg. tl. pórusv}}$	lokális PEC a mezőgazdasági talajok pórusvizében	$[\text{mg.l}^{-1}]$	51. egyenlet
$PEC_{\text{lokális legelő, pórusv}}$	lokális PEC a legelők pórusvizében	$[\text{mg.l}^{-1}]$	51. egyenlet
$PEC_{\text{lokális tl.v}}$	lokális PEC a mezőgazdasági talajok alatti talajvízben	$[\text{mg.l}^{-1}]$	52. egyenlet

A regionális becslések összefoglalóan az alábbi input és output információkat eredményezik:

Input:

Fizikai-kémiai tulajdonságok	2.3.2
------------------------------	-------

A környezet jellemzése	3. táblázat
A környezeti elemek regionális paraméterei	10., 11. és 12. táblázat
Emisszió adatok	2.3.3.3
Megoszlási hányadosok	2.3.5
Bomlási sebességek	2.3.6
Az anyagok sorsa a szennyvíztisztítóknban	2.3.7

Output:

PEC _{regionális,víz}	regionális PEC a felszíni vizekre (oldott frakció)	[mg.l ⁻¹]	2.3.8.7
PEC _{regionális,levegő}	regionális PEC a levegőben (összes)	[mg.m ⁻³]	2.3.8.7
PEC _{regionális,mzg.talaj}	regionális PEC a mezőgazdasági talajokban (összes)	[mg.kg ⁻¹]	2.3.8.7
PEC _{regionális,term.talaj}	regionális PEC a természetes talajokban (összes)	[mg.kg ⁻¹]	2.3.8.7
PEC _{regionális,mzg.tl.pórusv}	regionális PEC a mezőgazdasági talajok pórusvizében	[mg.l ⁻¹]	2.3.8.7
PEC _{regionális,Süledék}	lokális PEC a legelők pórusvizében	[mg.l ⁻¹]	2.3.8.7.

2.5 A kockázat jellemzéshez alkalmazandó környezeti koncentráció meghatározása

Amennyiben mérési adatok és számítások alapján is meghatároztak PEC értékeket, akkor ezeket össze kell hasonlítani. Amennyiben a két PEC érték nem esik egy nagyságrendbe (számított PEC \approx mérési adatok alapján meghatározott PEC), akkor a meglévő anyagok környezeti kockázat becsülésének egyik nagyon fontos eleme lesz az eltérés elemzése és kritikai értékelése. Ennek során az alábbi eseteket különböztetjük meg:

- A számított PEC \approx mérési adatok alapján meghatározott PEC
Ez az eredmény azt jelzi, hogy figyelembe vettük a legfontosabb expozíciós forrásokat. A kockázat jellemzéshez a nagyobb konfidenciájú értéket kell alkalmazni;
- A számított PEC > mérési adatok alapján meghatározott PEC
Ez az eredmény azt jelezheti, hogy a releváns eliminációs folyamatokat nem vettük figyelembe a PEC számításánál, vagy hogy a használt modell nem volt alkalmas a valós környezeti viszonyok megfelelő szimulálására az adott anyag tekintetében. Másrészt előfordulhat, hogy mérési adatok az adott környezeti elemekben a háttér koncentrációt vagy a PEC_{regionális}-t reprezentálják. Ha a számított PEC nagyobb, mint a detektálási küszöb, a mérési adatok viszont ez alatt vannak, akkor a kockázat jellemzéshez a fenti érvek figyelembe vételével a detektálási küszöböt kell felhasználni;
- A számított PEC < mérési adatok alapján meghatározott PEC
A számított és a mérési adatok alapján meghatározott PEC értékek közötti ilyen jellegű összefüggést az okozhatja, hogy a PEC számításakor nem minden releváns emisszió forrást vettünk figyelembe. További ok lehet, ha a használati mintázatokban vagy az emisszió csökkentő eljárásokban nemrégiben olyan változások következtek be, amelyeket a PEC mérési adatok alapján történő meghatározásakor nem vettünk figyelembe.

Amennyiben bizonyítható, hogy a mérési adatok alapján meghatározott PEC még mindig jól reprezentálja az expozíciós helyzetet, akkor további munka szükséges a helyzet tisztázásához. A fenti eltérések mögött további okok is lehetnek, pl.:

- a környezeti közegek között lévő határokon átterjedő áramlások léteznek;
- van természetes szennyezőforrás is;
- az anyag valamilyen másik vegyület stabil anyagcsere terméke;

- a többi környezeti elembe felhalmozódott különböző forrásokból (pool-okból) késleltetett remobilizáció történhet (pl. maradékokból, hulladékokból, vagy korábbi alkalmazásokból).

Amennyiben a mérési adatok a kritikai statisztikai és földrajzi értékelés alapján megfelelőnek bizonyultak, akkor ezeket az adatokat magas konfidenciájúnak kell tekinteni és előnyben kell részesíteni a számított PEC értékekkel szemben.

3 A hatások értékelése

3.1 Bevezető

A hatásértékelés a kockázatbecslés alábbi lépéseit tartalmazza:

- Veszély azonosítás: a veszélyazonosítás célja a potenciálisan veszélyes hatások meghatározása. Meglévő anyagok esetében cél továbbá az is, hogy újraértékeljük az anyagra vonatkozó klasszifikációt, új anyagok esetében viszont éppen hogy javaslatot kell tenni az osztályozásra;
- Dózis (koncentráció) - válasz (hatás) összefüggés elemzése: e lépés során lehetőség szerint meg kell határozni azt az előrejelzett koncentrációt is, ahol hatás nem várható (PNEC).

A hatásértékelés mindkét lépésében nagy fontosságú az adatok adekvátságának és hiánytalanságának értékelése. Az adekvátság értékelésénél az adatok minőségét és relevanciáját kell vizsgálni (ld. 3.2 pont). Az adatok értékelése különösen a meglévő anyagok esetében fontos, mivel a meglévő vizsgálatok egy részét esetleg nem standard előírások szerinti fajon és/vagy nem standard módszerekkel végezték. A hatásértékelést érdemes a rendelkezésre álló ökotoxikológiai adatok értékelésével kezdeni.

Ahogy azt már az 1.2 pont alatt említettük, a környezetvédelmi célkitűzések a vízi ökoszisztémákat, a szárazföldi ökoszisztémákat, a csúcsragadozókat, a szennyvíztisztítók mikroorganizmusait és az atmoszférát érintik, amely területekre külön-külön meg kell határozni a PNEC értékeket. A PNEC az a koncentráció, amely alatt elfogadhatatlan hatások valószínűleg nem lépnek fel. A PNEC-et elvben úgy számolják, hogy a legalacsonyabb rövid idejű $L(E)C_{50}$ -et vagy a hosszú idejű NOEC-et elosztják egy megfelelő értékelési tényezővel. Az értékelési tényezők a néhány fajon elvégzett laboratóriumi toxicitási vizsgálatok eredményeinek a valós környezetre extrapolálásakor jelentkező bizonytalanságokat tükrözik. A hosszabb időtartamú vizsgálatok értékelési tényezője alacsonyabb, mivel ilyenkor a laboratóriumi eredmények természetes környezetre történő extrapolálása is kevésbé bizonytalan. Ezért a hosszabb időtartamú vizsgálatokat előnyben kell részesíteni a rövid időtartamú vizsgálatokkal szemben.

A részletes környezeti kockázatbecslést sok esetben csak a vízi környezetre lehet megoldani: új anyagok esetében az alapszolgáltatott adat csak a vízben élő szervezetekre gyakorolt hatásadatokat tartalmazza, és a meglévő anyagok esetében is legtöbbször csak vízi szervezetekkel kapcsolatos adatok állnak rendelkezésre. A $PNEC_{\text{víz}}$ meghatározásával kapcsolatban tehát részletes útmutatást adunk a 3.3 pont alatt. Mivel a vízben élő szervezeteknél csak rövid idejű, és időszakos kibocsátási formával jellemzett expozíció lép

fel, a $PNEC_{\text{víz}}$ meghatározásához rövid idejű L(E)C50 értékeket alkalmazunk. További részleteket ezzel kapcsolatban a 3.3.2 pont alatt közlünk.

A szennyezőanyagok a települési szennyvíztisztítók mikroorganizmusainak aktivitását is befolyásolhatják. A $PNEC_{\text{mikroorganizmusok}}$ meghatározásához használatos értékelési tényezők a 3.4 pont alatt találhatók.

A legtöbb anyag esetében valószínűleg semmilyen adat nem áll majd rendelkezésre az üledéklakó szervezetekkel kapcsolatban. A megfelelő vizsgálati módszerek kidolgozása jelenleg is tart, de standardizált irányelvek egyelőre nem állnak rendelkezésre. Az ilyen jellegű toxicitási adatok hiányának kompenzálására a $PNEC_{\text{üledék}}$ meghatározásához egy speciális módszert alkalmazunk, az egyensúlyi megoszlás módszerét (ld. 3.5 pont).

Általában a talajra is kevés a toxicitási adat. Ha azonban mégis rendelkezésre állnak ilyen jellegű eredmények, ezek is általában rövid időtartamú vizsgálatokból származnak. Ha nincs semmilyen adat, a $PNEC_{\text{talaj}}$ meghatározásához az egyensúlyi megoszlás módszerét használhatjuk. Máskülönb az értékelési tényezőket kell alkalmazni (ld. 3.6 pont).

A légkörben mind a biotikus, mind pedig az abiotikus hatásokat (pl. elsavanyodás) is vizsgálni kell. Figyelembe véve, hogy általában nem áll rendelkezésre megfelelő adat és hogy a megfelelő módszer sincs még kidolgozva mindkét hatás felmérésére, a 3.7 pont alatt csak egy ideiglenes jellegű stratégiát tudunk bemutatni.

Az ökotoxikológiai hatások vizsgálatához használt standard tesztek általában az anyag közvetlen toxikus hatásairól nyújtanak információt. Olyan anyagok esetében, ahol bioakkumuláció és feldúsulás ("biomagnifikáció") lép fel, ez további veszélyt jelenthet a tápláléklánc magasabb szintjein lévő szervezetek, pl. csúcsragadozók számára. Ezt a jelenséget nevezzük 'másodlagos mérgezés'-nek, amellyel ugyancsak részletesen foglalkozni kell, amennyiben a vizsgált anyag bizonyos kritériumoknak megfelel (pl. a biológiai akkumulációra vonatkozó kritériumoknak). Ilyen esetekben az anyag halakkal vagy férgekkel, szájon keresztül történő felvételét ($PEC_{\text{orális, hal}}$ és $PEC_{\text{orális, férgek}}$) kell összehasonlítani a hal- vagy férgekkel táplálkozó emlősökre vonatkozó $PNEC$ értékkel. Ezt az eljárást a 3.8. részben ismertetjük.

El kell ismerni, hogy a megadott hatásértékelési módszerek többségénél hiányzik a megfelelő gyakorlati tapasztalat, így az ilyen jellegű értékelések meglehetősen bizonytalanok. Mindazonáltal az itt ismertetett módszerek mindenképpen lehetővé teszik annak meghatározását, hogy a vizsgált környezeti elem esetében van-e potenciális "aggodalomra való ok, veszély", illetve, hogy össze kell- gyűjteni további adatokat, pl. az adott környezeti elemekben élő szervezetek vizsgálatának segítségével.

3.2 Az adatok értékelése

3.2.1 Az ökotoxikológiai adatok

A hatásértékelés mindkét lépésében nagy fontosságú az adatok adekvátságának és hiánytalanságának értékelése. Különösen a sokat vizsgált meglévő anyagok esetében nagyon fontos az ilyen jellegű értékelés, mivel itt az alapadatsor mellett számos további eredmény is

rendelkezésre állhat. Ebben a részben ismertetjük az ökotoxikológiai adatok értékelésének általános irányelveit. Az adekvátság alatt itt a rendelkezésre álló adatok megbízhatóságát és a környezeti veszély és kockázatbecslésben való relevanciáját értjük.

3.2.1.1 Az adatok hiánytalansága

Új anyagok

Új anyagok esetében a 67/548/EGK számú Irányelv VII.A mellékletében megadott alapadatsor az irányadó. Az alapadatsorba beletartoznak az alga, a Daphnia és hal vizsgálatokból kapott, a vízi környezetre vonatkozó rövid idejű toxicitási adatok. A bakteriális vizsgálatok (légzés inhibíciós tesztek) eredményei ugyancsak az alapszintű műszaki dosszié részét képezik. A szennyvíztisztítóknál élő mikroorganizmusok aktivitására a hatásértékelést ezen adatok alapján végezzük el (ld. 3.4 pont). Az alapszintű vizsgálatokból viszonylag kevés olyan adat származik, amelyek a szárazföldi és atmoszférikus környezet szempontjából relevánsak lennének: további, de még mindig korlátozott mennyiségű adat beszerzése az 1. és 2. szinten történik majd.

Meglévő anyagok

A meglévő anyagokkal kapcsolatban rendelkezésre álló adatok mennyisége igen változó lehet. A 793/93 számú Rendelet előírja, hogy az elsőbbségi listán szereplő meglévő anyagok esetében minimálisan a 67/548/EGK számú Irányelv VII.A mellékletében megadott alapadatoknak rendelkezésre kell állniuk még a kockázatbecslés megkezdése előtt. Sok anyag esetében azonban jóval több információ is rendelkezésre állhat, amelyeket mind fel lehet használni az értékelés során.

Az alapadatok biztosítják, hogy a rövid idejű hatásadatok rendelkezésre álljanak a halak, a Daphnia, az algák és a baktériumok tekintetében. Egy trófikus szinten belül számos rövid időtartamú vizsgálat állhat rendelkezésre sokféle nem-standard élőlény tekintetében. Sőt, több faj esetében - legyen az standard vagy nem-standard szervezet - hosszabb időtartamú vizsgálatok is lehetnek. A PNEC értékek meghatározásához az ilyen élőlényeket be kell sorolni a megfelelő trófikus szintekre (ld. IV. melléklet és 3.3.1 pont). A legtöbb anyag esetében a modell-ökoszisztémákon több fajon végzett vizsgálatok és fél-terepi adatok igen ritkák, habár az elmúlt években egyre több ilyen jellegű tanulmány készült (Hill et al., 1994; Knacker és Morgan, 1994).

3.2.1.2 Az adatok adekvátsága

Egy adott vizsgálat adekvátságát két alapvető elem határozza meg:

- a megbízhatóság: amibe beletartozik a vizsgálati módszer inherens megbízhatósága, továbbá az a mód, ahogy a vizsgálatokat és az eredményeket ismertetik; és
- a relevancia: ami azt jelenti, hogy egy adott veszély vagy kockázatbecslés szempontjából a kérdéses vizsgálat milyen mértékben megfelelő.

A kockázatbecsléshez csak megbízható és releváns adatokat szabad felhasználni.

Az adatok megfelelőségi szintjének felmérésekor tehát el kell végezni az egyes adatelemek individuális értékelését az abból a szempontból, hogy hogyan végezték a vizsgálatot és hogyan értelmezték az eredményeket, továbbá kritikusan ki kell választani a megfelelő adatokat (illetve el kell tekinteni a nem megfelelőktől) a megfelelően kontextusban és az értékelés céljának is megfelelően.

Új anyagok

Az új anyagok vizsgálatait a 67/548/EGK számú Irányelv V. mellékletében megadott EU-irányelveknek megfelelően kell elvégezni. Ha nincs használható EU-ajánlás, akkor a vizsgálatokat a nemzetközi gyakorlatnak megfelelően, és lehetőleg az OECD vizsgálati irányelvei (OECD, 1993a) alapján kell elvégezni. A vizsgálatoknak továbbá meg kell felelniük a 87/18/EGK számú Európa Tanácsi Irányelvben megfogalmazott, a "Helyes Laboratóriumi Gyakorlat"-ra vonatkozó előírásainak is.

Meglévő anyagok

A meglévő anyagok kockázatbecslése azzal kezdődik, hogy a gyártók, az importőrök és a referensek összegyűjtik az összes rendelkezésre álló adatot és információt. A kockázatbecsléshez a 793/93 számú Rendelet alapján elvégzett összes újabb vizsgálatot és tesztet a 67/548/EGK számú Irányelv V, mellékletében megadott módszerek alkalmazásával kell elvégezni. Ha nincs használható EU-ajánlás, akkor a vizsgálatokat a nemzetközi gyakorlatnak megfelelően, és lehetőleg az OECD vizsgálati irányelvei (OECD, 1993a) alapján kell elvégezni. A vizsgálatoknak továbbá meg kell felelniük a 87/18/EGK számú Európa Tanácsi Irányelvben megfogalmazott, a "Helyes Laboratóriumi Gyakorlat"-ra vonatkozó előírásainak is.

Az így összegyűjtött adatok között valószínűleg lesznek olyanok is, amelyeket a GLP megfogalmazása és a vizsgálati módszerek standardizálása előtt végzett vizsgálatokból származnak. Ezek az adatok azonban alkalmasak lehetnek a kockázatbecslésben való felhasználásra, feltéve, hogy érvényes következtetéseket lehet levonni belőlük. Ez azt jelenti, hogy mind az adatok maguk, mind pedig az alkalmazott vizsgálati módszerek esetében meg kell határozni, hogy minőségük megfelel-e a kockázatbecsléshez. Egy ilyen jellegű felülvizsgálathoz szakértői véleményezés szükséges, továbbá az adatok minőségéről hozott döntéshez (megfelelő - nem megfelelő) indoklást kell adni és biztosítani kell a döntés átvilágíthatóságát is. A rendelkezésre álló adatok értékelésekor referenciának a standardizált vizsgálati módszerek és GLP előírásait kell tekinteni. Valamely vizsgálat megbízhatóságának megítéléséhez elegendő információnak kell rendelkezésre állni.

A jelenlegi (pl. EC, OECD vagy EPA) irányelveknek megfelelően végzett vizsgálatok eredményeit általában súlyozottabban kell figyelembe venni (Ahars et al., 1992; Vízminőségi Intézet, Dánia). Ilyen háttér mellett, egy vizsgálatok megbízhatóságának kritériumait arra a kérdésre kell összpontosítani, hogy van-e elegendő információ a vizsgálattal kapcsolatban és hogy a vizsgálatokat általánosan elfogadott előírások szerint végezték-e. E tekintetében a következő lehetőségek merülhetnek fel:

- Az adott vizsgálatról egy komplett jelentés készült, vagy a vizsgálatot elég nagy részletességgel ismertették, és a tesztelési eljárások megfelelnek az általánosan elfogadott tudományos kritériumoknak.

Az ilyen vizsgálatokból kapott adatokat fel lehet használni a kockázatbecsléshez;

- Az adatok megbízhatóságát nem lehet teljes mértékben megítélni, vagy a vizsgálatok bizonyos szempontból különböznek az érvényes vizsgálati irányelvektől vagy az általánosan elfogadott tudományos standardoktól.

Ilyen esetekben szakértőre vár annak eldöntése, hogy ezek az adatok felhasználhatók-e a kockázatbecslésben, avagy sem;

- Nyilvánvaló, hogy az adatok nem megbízhatóak, mivel lényeges információk hiányoznak (pl. nem lehet meghatározni a tesztanyag identitását).

Az ilyen adatokat nem megbízhatónak kell tekinteni, és nem szabad felhasználni a kockázatbecslésben. Felhasználhatók azonban egy megfelelő vizsgálat megtervezéséhez.

A szakirodalomban található cikkekre elvben ugyanezek a kritériumok vonatkoznak. A közölt információk mennyisége képezi a szakcikk minősítésének alapját. Általában azokat a cikkeket kell előnyben részesíteni, amelyeket a megjelenés előtt lektoráltak. A jó minőségű összefoglaló cikkeket pedig mint kiegészítő információkat lehet figyelembe venni. Az absztraktok vagy kivonatos anyagok is számos segédinformáció szolgáltathatnak.

Olyan esetekben, ahol hasonló vizsgálatok eltérő eredményeket produkáltak, vagy ahol egy fajra vagy rendszertani csoportra nagyon sok adat áll rendelkezésre, az adott fajra vonatkozó toxicitás tekintetében az általános konklúziók levonásához alkalmazhatjuk az adatok (statistikai) eloszlását is.

Terep vizsgálatokból is rendelkezésre állhatnak eredmények. Az ilyen vizsgálatok a beltéri mikrokozmosz vizsgálatától a kültéri makrokozmosz vizsgálatáig a kísérletek felépítése tekintetében igen eltérőek lehetnek (Hill et al., 1994). A terepi vizsgálatok jobb betekintést nyújthatnak a lehetséges hatásokba (ideértve a közvetett hatásokat is) és az expozíciós kapukba is (pl. biológiai hozzáférhetőség és biológiai degradáció). A terepi vizsgálatok tekintetében még nem dolgozták ki a nemzetközileg elfogadott irányelveket. Egyes helyeken azonban (SETAC, 1991; SETAC, 1992) a vízi ökoszisztémákkal kapcsolatban megadtak már általános irányelveket.

Az adatok relevanciája

A rendelkezésre álló adatok relevanciájának meghatározásához többek között meg kell ítélni, hogy a megfelelő hatások vizsgálata történt-e és a vizsgálati körülmények is relevánsak voltak-e, továbbá hogy a tesztekben használt anyag reprezentatív-e a forgalomba hozott anyag tekintetében. Ez utóbbi megítéléséhez szükséges, hogy az anyagot megfelelően azonosítsák, és ismertessenek minden jelentősebb szennyezettséget.

Az adatok értelmezése

Bizonyos esetekben a dózis (koncentráció) - válasz (hatás) összefüggésekkel kapcsolatos információk nem ismertek, mivel az idetartozó adatok nem voltak feltüntetve a vizsgálati módszer leírásokban, vagy a cikkekben. A vizsgálatok időtartama is eltérhet a standard vizsgálatoknál megadottaktól. Néha előfordulhat, hogy a vizsgálati paramétereket nem lehet összehasonlítani a standard módszerekben alkalmazott paraméterekkel, ilyenek lehetnek például a fotoszintézis vizsgálatok, a viselkedési vizsgálatok, továbbá a sejtszintű és szubcelluláris vizsgálatok. Szakértő véleményére lesz tehát szükség annak eldöntéséhez, hogy az adatok értelmezhető-e a kockázatbecslés szempontjából.

A hatásértékelésben a rövid idejű $L(E)C_{50}$ és a hosszú idejű NOEC értékeket használjuk. Előfordulhat azonban, hogy ökotoxikológiai vizsgálatok eredményeit más formában közlik. A $L(E)C_{50}$ és a NOEC értékek meghatározásához segítséget a 13. táblázatban közöltünk.

A nagyon hidrofób szerves anyagok (pl. PCB-k) hosszú idejű vízi toxicitásának meghatározásához érdemes lehet a QSAR módszereket alkalmazni. Mivel az ilyen anyagok vízben igen rosszul oldódnak, nehéz hosszú idejű vizsgálatokat végezni, mivel nehéz stabil koncentrációkat fenntartani. Emellett sok időt vehet igénybe az is, hogy a tesztszervezetekben kialakuljon a steady-state állapot, mivel alacsony lehet az eliminációs ráta is. Az adott vizsgálat megbízhatósága tekintetében megfelelő betekintést nyújthat a vizsgálati eredmények összehasonlítása a log Kow értékén alapuló "minimum toxicitással" (ld. 3 fejezet, "A QSAR-ok felhasználása")

Az adatok adekvátságának megítélésével kapcsolatosan további részletek találhatóak a III. mellékletben. A fémekkel és fémvegyületekkel, továbbá a kőolaj származékokkal és az ionképző anyagokkal kapcsolatos irányelvek a VIII., a IX. és a XI. mellékletekben találhatóak.

3.2.2 Kvantitatív molekulaszervezet-aktivitás közötti összefüggések

A halakra, a Daphniára és az algákra vonatkozó toxicitás megbízható QSAR becslései olyan anyagok esetében állnak rendelkezésre, ahol a hatásmechanizmus nem specifikus. Ezeket a becsléseket fel lehet használni az adatok értékeléséhez és/vagy hozzájárulhatnak ahhoz a folyamathoz, amelynek során eldöntik, hogy egy adott potenciálisan "veszélyes" hatás tisztázása érdekében van-e szükség további tesztekre, és ha igen, a tesztelési stratégia optimalizálásához is. A nem specifikus hatásmechanizmussal jellemezhető anyagokra és a tesztelési stratégián belül a hosszú idejű hal toxicitásra vonatkozó QSAR becslésekkel minden részletre kiterjedően a 3. fejezetben (A QSAR-ok felhasználása) foglalkozunk.

13. táblázat. Különböző vizsgálatok

Rövid időtartamú vizsgálatok:

- Amennyiben egy vizsgálati jelentésben nincsenek benne az $L(E)C_{50}$ értékek, de a nyers adatokat közli, akkor ebből például a probit analízis segítségével ki lehet számolni az $L(E)C_{50}$ -t. Ha a $L(E)C_0$ és a $L(E)C_{100}$ között három pontnál kevesebb van, akkor a $L(E)C_{50}$ -t csak becsülni lehet.
- Amennyiben az eredményeket $>L(E)C_{10}$ és $<L(E)C_{50}$ formában közlik, akkor ezt $L(E)C_{50}$ -nek lehet tekinteni, de az $L(E)C_{50}$ -et egyértelműen meghaladó eredményeket az anyag rövid idejű toxicitása tekintetében csak mint indikátorokat lehet felhasználni.

Hosszú időtartamú vizsgálatok:

- A NOEC (no observed effect concentration - az a koncentráció, ahol az adott hatást nem lehet megfigyelni) definíció szerint az a legmagasabb teszt koncentráció, ahol megfigyelhető hatások nem lépnek fel. Ilyenkor kell lennie egy koncentráció-hatás összefüggésnek. A múltban a NOEC értéket kontroll devianciájának figyelembe vételével (pl. 10%) közvetlenül a koncentráció-hatás görbéből, vagy ANOVA (variancia analízis) alapján és egy alsóbb rendű teszt (pl. Dunett-féle teszt) segítségével határozták meg. Az ANOVA alkalmazásához azonban bizonyos előfeltételeknek (normál eloszlás, homogén varianciák) meg kell felelni. Az ANOVA alkalmazását a NOEC meghatározásához többen is kritizálták (Pack, 1993 (az OECD megbízásából)). Az OECD jelentés szerint az EC_x pont számítása az előnyben részesített alternatíva (ld. a lábjegyzetben*). A korábbi vizsgálatokból időnként nem könnyű kideríteni, hogy pontosan hogyan számolták ki a NOEC értéket, kivéve ha részletes vizsgálati jelentés is készült, vagy a nyers adatokat is közölték.
- A LOEC (lowest observed effect concentration - az a legalacsonyabb koncentráció, ahol a hatás még megfigyelhető) az a legalacsonyabb koncentráció, ahol az adott hatást még meg lehetett figyelni. Ezt az értéket tehát nem lehet a NOEC helyett alkalmazni. Ha a vizsgálati jelentésben csak a LOEC érték szerepel, akkor ebből az alábbi módszerrel lehet meghatározni a NOEC-et:
- $LOEC > 10$ és $< 20\%$: a NOEC egyenlő $LOEC/2$.
- $LOEC \geq 20\%$ hatás és egy adott hatás összefüggés áll fenn: a kiszámolt, vagy extrapolált EC_{10} -et tekintjük NOEC-nek. Amennyiben a LOEC-hez tartozó hatás százalék nem ismert, a NOEC-et nem lehet meghatározni.
- MATC (maximal acceptable toxicant concentration - a maximálisan elfogadható toxikus anyag koncentráció): A vízi toxicitási vizsgálatokban gyakran kerül meghatározásra a MATC. Ez a NOEC és a LOEC mértani átlaga. Ha a vizsgálati jelentésben csak a MATC értéket közölték, ebből a NOEC-et $\sqrt{2}$ -vel való osztással kaphatjuk meg.
- NOEC-ként lehet értelmezni egy hosszú időtartamú vizsgálat eredményeiből megfelelő statisztikai módszerekkel (pl. probit analízis) történő extrapolálással kapott EC_{10} -et is. Ezt az eljárást akkor lehet alkalmazni, ha nincs megadva NOEC.
- Meg kell jegyezni, hogy az alga tesztek esetében, amelyek ténylegesen többgenerációs

vizsgálatok, általános elfogadott, hogy egy minimum 72 órás EC₅₀ érték rövid idejű eredménynek számít, míg egy legalább 72 órás NOEC hosszú idejű eredménynek.

- "Amennyiben egy vizsgálat megbízhatósága viszonylag magas, a statisztikai analízisek megfelelő érzékenysége viszonylag alacsony lesz. Csak a kontrolltól való nagyobb eltéréseket lehet kimutatni. Ez így kapott NOEC értékek tehát nagy és potenciálisan jelentős biológiai hatásoknak felelnek meg." (Pack, 1993). Olyan koncentrációt, ahol egyértelműen megfigyelhető a hatás, nem lehet NOEC-nek elfogadni. Emellett a NOEC szintje függ majd a teszt koncentrációk számától, az alkalmazott koncentráció tartománytól és a hígítási faktoroktól is. Mára már számos alternatíva megjelent a NOEC helyett (Pack, 1993; Hoekstra et al., 1993). Az ilyen modellek legnagyobb előnye, hogy a koncentráció-hatás összefüggésből származó összes információt figyelembe veszik. A módszerek alkalmazásával egy EC_x értéket határozzunk meg, ahol x egy alacsony hatás percentilisnek felel meg (pl. 5-20%). Ezzel a megoldással a különböző kísérletek eredményei sokkal inkább összehasonlíthatók, mint a NOEC alapján. A NOEC vagy az EC_x pont becslések alkalmazásával kapcsolatban jelenleg is folyik a vita.

3.3 Vízi szervezetekre gyakorolt hatás értékelése

3.3.1 A PNEC kiszámítása

A kockázatbecslés általános célja a környezet védelme. A vízi környezettel kapcsolatosan több feltételezéssel is élünk, amelyek még ha bizonytalanok is, lehetővé teszik, hogy a rövid időtartamú és egy fajon végzett vizsgálatok eredményből extrapolálással következtetéseket vonhassunk le az ökoszisztémákra gyakorolt hatásokkal kapcsolatban. Ilyen feltételezés például, hogy:

- az ökoszisztémák érzékenységét a legérzékenyebb faj határozza meg, és;
- az ökoszisztéma szerkezetének védelme védi a közösség működését.

E két feltételezésnek számos fontos következménye van. Ha a laboratóriumban meghatározzuk, hogy melyik faj a legérzékenyebb a toxikus hatásokra, akkor az extrapolációt az erről a fajról kapott adatokra lehet alapozni. Ezen kívül, ha egy bármely, a kérdéses fajt is tartalmazó ökoszisztéma szerkezet nem torzul el olyan mértékben, hogy az egyensúly felboruljon, akkor az adott ökoszisztémát védettnek tekinthetjük. Általánosan elfogadott nézet, hogy a legérzékenyebb faj védelme megvédi az ökoszisztéma szerkezetét, és ezen keresztül működését is.

Új anyagok esetében a ökoszisztémás hatások előrejelzésére alkalmas adatok mennyisége igen korlátozott: az alapadatok között csak rövid időtartamú vizsgálatok eredményei szerepelnek. A helyzet a legtöbb meglévő anyag esetében is hasonló: a legtöbb esetben csak rövid időtartamú vizsgálatok eredmény állnak rendelkezésre. Ilyen körülmények között mindenképpen szükséges, hogy értékelési tényezőket alkalmazzunk, még akkor is, ha ezek tudományos megalapozottsága nem túl jó. Az értékelési tényezők alkalmazását az EPA és az OECD (OECD, 1992d) irányelvek is támogatják. Az ilyen jellegű faktorok alkalmazásával az a cél, hogy meg tudjuk becsülni azt a koncentrációt, amely alatt valószínűleg nem várhatók elfogadhatatlan hatások. Ezt tehát nem azt jelenti, hogy olyan koncentrációt kell venni, amely alatt az anyag biztonságos, hanem, ahol igen valószínű, hogy semmilyen elfogadhatatlan hatás nem lép fel.

Az értékelési tényezők meghatározásával az egyetlen fajon végzett laboratóriumi vizsgálatoknak a sok fajból összeálló ökoszisztémákra való extrapolálásakor jelentkező

sokféle bizonytalanságot kell kompenzálni. Ezeket a kérdéseket más helyeken már kellő részletességgel tárgyalták, így itt csak röviden összefoglaljuk az érintett területeket:

- Laboratóriumokon belüli és laboratóriumok közötti varianciák a toxicitási adatok tekintetében;
- Fajon belüli és fajok közötti varianciák (biológiai varianciák);
- A rövid idejű toxicitási adatok hosszú távra extrapolálása;
- Laboratóriumi adatok extrapolációja a terepen észlelt hatáshoz; (Extrapolációra az egyetlen fajt vizsgáló kísérletekből az ökoszisztémák felé van szükség. Az egyéb anyagok jelenlétéből adódó additív, szinergikus vagy az antagonisztikus hatások is szerepet játszhatnak).

Az értékelési tényező nagysága attól függ, hogy a rendelkezésre álló adatokból milyen konfidenciával határozható meg a $PNEC_{viz}$. A megbízhatóságot növeli, ha több, különböző trófikus szinten álló, vagy külön rendszertani csoportba tartozó, vagy különböző táplálkozási stratégiát alkalmazó szervezet esetében is rendelkezésre állnak toxicitási adatok. Tehát az alapadatsornál nagyobb és relevánsabb adatbázisok esetében kisebb értékelési tényezőt kell alkalmazni.

Új anyagok esetében az alapadatokban feltüntetett legalacsonyabb L(E)C₅₀-re alkalmazzuk az értékelési tényezőt, amelynek értéke itt 1000. Meglévő anyagok is általában a legalacsonyabb releváns toxicitási adatra alkalmazzuk az értékelési tényezőt, függetlenül attól, hogy a vizsgált faj standard szervezetnek számít-e, avagy sem (ld. a 14. táblázathoz fűzött megjegyzéseket). A rövid időtartamú vizsgálatok esetében a L(E)C₅₀-et használjuk, a hosszú időtartamú vizsgálatok esetében viszont a NOEC-et. Bizonyos anyagok esetében számos megalapozott rövid időtartamú L(E)C₅₀ állhat rendelkezésre. Ezért tehát ajánlott az azonos fajra meghatározott különböző L(E)C₅₀ értékek számtani közepét venni. A számtani közép kiszámítása előtt azonban elemzést kell készíteni az egyes vizsgálatokban alkalmazott kísérleti körülményekről, hogy kiderítsük az eltérések okait.

Az alapszintű vizsgálatok közé tartozó alganövekedés-gátlási teszt elvben többgenerációs vizsgálat, azonban a megfelelő értékelési tényező alkalmazása céljára az EC₅₀ értéket rövid idejű toxicitási adatnak kell tekinteni. Az ilyen vizsgálatból származó NOEC-et, ha hosszú idejű vizsgálati adatok egyébként rendelkezésre állnak, csak mint kiegészítő adatot lehet figyelembe venni. Az alga NOEC értékeket általában nem szabad anélkül felhasználni, hogy egy más trófikus szinthez tartozó élőlényen végzett hosszú időtartamú vizsgálat NOEC adatai ezt alátámasztanák. Ha azonban az anyag az algák esetében specifikus toxikus hatásokat produkál, az alapvizsgálatból kapott NOEC értéket egy második alga vizsgálat adataival is alá kell támasztani.

A következő trófikus szintet képviselő mikroorganizmusok csak akkor használhatók, ha nem adaptált és tiszta kultúrákat használunk. A bakteriális vizsgálatokat (pl. növekedési teszteket) rövid időtartamú vizsgálatnak tekintjük. Emellett autotróf táplálkozásuk miatt a kék-zöld algákat is az elsődleges producensek közé kell sorolni.

14. táblázat. A PNEC meghatározásához használt értékelési tényezők

	Értékelési tényező
Az alapadat szolgáltatásban meghatározott három trófikus szint mindegyikéről (hal, Daphnia, alga) legalább egy rövid idejű L(E)C ₅₀	1000 ^(a)
Egy hosszú idejű NOEC (vagy hal, vagy Daphnia)	100 ^(b)
Két hosszú idejű NOEC két különböző trófikus szintet képviselő fajból (hal és/vagy Daphnia és/vagy alga)	50 ^(c)
Hosszú idejű NOEC legalább három különböző trófikus szintet képviselő fajból (általában hal, Daphnia és alga)	10 ^(d)
Terep vizsgálati adatok vagy modell-ökoszisztémák	Minden esetben egyedileg meghatározandó ^(e)

MEGJEGYZÉSEK:

- (a) A rövid idejű toxicitási adatokhoz használt 1000-es értékelési tényező egy konzervatív és protektív jellegű faktor, amely arra szolgál, hogy a káros hatások okozására képes anyagokat a hatásértékelés során mindenképpen be lehessen azonosítani. Ezzel a faktorról azt feltételezzük, hogy a fent említett bizonytalanságok mindegyike jelentősen hozzájárul az összbizonytalansághoz.
- Bármely anyagnál lehet bizonyíték arra, hogy ez a feltételezés nem igaz, vagy hogy valamelyik bizonytalansági elem mindegyik másikonál fontosabb. Ilyen körülmények között az értékelési tényezőt módosítani kell. A rendelkezésre álló bizonyítékok függvényében ez jelentheti az értékelési tényező emelését vagy csökkentését is. Az időszakos kibocsátású anyagok kivételével (ld. 3.3.2 pont) a rövid idejű toxicitási adatokból való PNEC_{víz} meghatározáshoz semmilyen körülmények között nem alkalmazható 100-nál kisebb értékelési tényező. Az értékelési tényező módosítása többek között az alábbi típusú bizonyítékok hatására történhet:
- Molekulaszerkezetükben hasonló anyagokkal kapcsolatos bizonyítékok (A nagyon hasonló anyagok azt mutathatják, hogy alacsonyabb, vagy magasabb értékelési tényezőt kell alkalmazni);
 - A hatásmechanizmussal kapcsolatos adatok. (Bizonyos anyagokról ismert, hogy szerkezetüknél fogva nem specifikus módon hatnak. Ilyen esetben alacsonyabb faktor alkalmazását kell megfontolni. Az ismert specifikus hatásmechanizmus pedig éppen hogy emelheti az értékelési tényezőt);
 - Az alapadatokban megadottaktól eltérő rendszertani csoportokba tartozó sokféle faj vizsgálatából meghatározott adatok létezése esetén;
 - Az alapadatokban megadottaktól rendszertani csoportokba tartozó és legalább három különböző trófikus szintet képviselő sokféle faj vizsgálatából meghatározott adatok létezése esetén.
- Ilyen esetekben az értékelési tényező csak akkor csökkenthető, ha ez a sok adatpont a legérzékenyebb rendszertani csoportra vonatkozik.

Lehetnek olyan esetek is, amikor az alapadatok hiányosak: pl. olyan anyagoknál, ahol a forgalmazási szint < 1 t/év (bejelentés a 92/32/EGK számú Irányelv VII.B mellékletének megfelelően). A legrosszabb esetben legalább a Daphnián elvégzett akut toxicitási vizsgálatnak meg kell lennie. Ilyen kivételes helyzetekben a PNEC meghatározásához 1000-es értékelési tényezőt kell alkalmazni.

- (b) Ha csak egy hosszú idejű NOEC van (halra vagy Daphniára) és ezt a rövid időtartamú vizsgálatokban legalacsonyabb $L(E)C_{50}$ értéket mutató trófikus szintre határozták meg, akkor az alkalmazandó értékelési tényező 100.
Ha az egyetlen rendelkezésre álló NOEC-et olyan fajra határozták meg, amelyik a rövid időtartamú vizsgálatokban nem a legalacsonyabb $L(E)C_{50}$ -t adta, akkor ez az érték nem tekinthető a hozzáférhető értékelési tényezők alkalmazása mellett az érzékenyebb fajok szempontjából nem tekinthető protektív értéknek. A hatásértékelést tehát ilyenkor a rövid időtartamú vizsgálatokra kell alapozni, és az 1000-es értékelési tényezőt kell alkalmazni. Az így kapott, rövid idejű adatokra alapozott PNEC érték azonban nem lehet magasabb, mint a hosszú idejű NOEC-re alapozott PNEC.
A két különböző trófikus szintet képviselő vizsgálatokból előállított két hosszú idejű NOEC közül az alacsonyabb esetében ugyancsak 100-as értékelési tényezővel kell számolni, feltéve, hogy a NOEC-eket nem a rövid időtartamú vizsgálatokban legalacsonyabb $L(E)C_{50}$ -et adó trófikus szintre végezték.
- (c) A két különböző trófikus szintet képviselő vizsgálatokból előállított két NOEC közül az alacsonyabb esetében az alkalmazandó értékelési tényező 50, feltéve, hogy a NOEC-eket a rövid időtartamú vizsgálatokban legalacsonyabb $L(E)C_{50}$ -et adó trófikus szintre végezték. Ugyanez vonatkozik a három különböző trófikus szintet képviselő vizsgálatokból előállított három hosszú idejű NOEC közül az alacsonyabbra, feltéve, hogy a NOEC-eket nem a rövid időtartamú vizsgálatokban legalacsonyabb $L(E)C_{50}$ -et adó trófikus szintre végezték.
- (d) A 10-es értékelési tényezőt általában csak akkor lehet alkalmazni, ha hosszú idejű NOEC értékek legalább három különböző trófikus szintet képviselő fajból (pl. hal, Daphnia és alga, vagy valamilyen nem standard organizmus az egyik standard organizmus helyett) is rendelkezésre állnak.
A hosszú időtartamú toxicitási vizsgálatok eredményeinek értékelésekor a $PNEC_{viz}$ -et a legalacsonyabb rendelkezésre álló, hatást nem mutató koncentráció (NOEC) alapján kell kiszámolni. Az ökoszisztémás hatásokra történő extrapolációt nagyobb biztonsággal lehet elvégezni, így az értékelési tényezőt 10-re lehet csökkenteni. Ez azonban csak akkor elegendő, ha a vizsgált faj a legérzékenyebbnek tekinthető. Ennek meghatározására általában csak akkor van lehetőség, ha legalább három különböző trófikus szintet képviselő fajról vannak adatok.
Időnként nagy valószínűséggel meg lehet határozni, hogy a legérzékenyebb fajt vizsgáltuk-e, azaz hogy egy másik rendszertani csoportra meghatározott további hosszú idejű NOEC érték sem lenne alacsonyabb a meglévő adatoknál. Ilyen körülmények között a csak két fajra meghatározott NOEC közül az alacsonyabbra alkalmazott 10-es értékelési tényező is megfelelő. Ez különösen akkor fontos, ha az anyag feltehetően nem hajlamos a biológiai akkumulációra. Amennyiben ezt nem lehet megfelelően megítélni, akkor az érzékenység fajok közötti varianciájának figyelembe vétele érdekében 50-es értékelési tényezőt kell alkalmazni. Laboratóriumi vizsgálatok eredményei alapján az értékelési tényező 10 alá nem csökkenthető.

- (e) A mezokozmosz vizsgálatokhoz és a (fél-)terepi vizsgálatokhoz alkalmazandó értékelési tényezőt minden esetben egyedileg kell meghatározni.

A magas log Kow-vel jellemzett anyagok esetében rövid idejű toxicitás nem lép fel. Ez még hosszú idejű vizsgálatoknál is előfordulhat, vagy az is lehet, hogy a steady-state állapotot még mindig nem lehet elérni. A nem poláros narkotikum esetében a halakon végzett vizsgálatoknál ez utóbbi állapot hosszú idejű QSAR-ok alkalmazásával is bizonyítható (ld. 3.3.1.2 és 4. fejezet, "A QSAR-ok felhasználása"). Magasabb értékelési tényező alkalmazását is érdemes megfontolás tárgyává tenni olyan esetekben, ahol a steady-state állapotot nem sikerült elérni.

Olyan anyagok esetében, ahol a rövid időtartamú vizsgálatokban semmiféle toxicitás nem figyelhető meg, hosszú időtartamú vizsgálatokat kell végezni, feltéve, hogy a $\log Kow > 3$ (vagy a $BCF > 100$) és ha a $PEC_{\text{lokális/regionális}} >$ a vízdékonyság 1/100-ad részénél (ld. 4.5 pont). A hosszú időtartamú toxicitási teszt általában a Daphnia-teszt, hogy ezzel is elkerüljük a gerinceseken való szükségtelen kísérletezést. Az ebből a tesztből meghatározott NOEC-et azután a 100-as értékelési tényezővel alkalmazhatjuk. Ha az előírt hosszú időtartamú vizsgálatokon kívül az alapsomag valamelyik algatesztjéből is van NOEC, akkor 50-es értékelési tényezőt kell alkalmazni.

Az értékelési tényezők felhasználásával elvégzett hatásértékelést statisztikai extrapolációs módszerek is alátámaszthatják, feltéve, hogy van elegendő mennyiségű adat az ilyen jellegű elemzések elvégzésére (ld. V. melléklet).

3.3.2 Időszakosan kibocsátott anyagok hatásának értékelése

Az időszakos kibocsátású anyagok esetében (az időszakos kibocsátás definícióját ld. 2.3.3.4 pont alatt) előfordulhat, hogy az expozíció csak igen rövid ideig tart. A dinamikus rendszerek (pl. folyók) esetében legalábbis eléggé valószínűtlen, hogy az ilyen jellegű expozíció nyomán hosszú idejű hatások jelentkeznek, a fő kockázatot tehát a rövid idejű toxicitási hatások jelentik. A $PNEC_{\text{víz}}$ extrapolálásakor tehát általában csak a rövid idejű hatásokat kell figyelembe venni. Javasolt tehát, hogy ilyen esetekben a $PNEC_{\text{víz}}$ meghatározásához a legalább három különböző trófikus szintet képviselő fajból meghatározott $L(E)C_{50}$ értékek közül a legalacsonyabbra egy 100-as értékelési tényezőt alkalmazzunk. Az értékelési tényező alkalmazása azt a célt szolgálja, hogy a rövid időtartamú laboratóriumi vizsgálatok eredményeit extrapolálni lehessen az ökoszisztémákban fellépő hosszú idejű hatásokra.

Az ilyen jellegű extrapolációk elvégzéséhez a fajon belüli és fajok közötti, a toxicitásban jelentkező biológiai eltéréseket és a laboratóriumi adatokból az ökoszisztémás hatásokra történő jóslások általános bizonytalanságát is megfelelően figyelembe kell venni.

Az extrapolációt nagy körültekintéssel kell elvégezni. Bizonyos anyagokat a vízben élő szervezetek igen gyorsan felvehetnek, ami késleltetett hatásokat idézhet elő, amikor az emisszió már megszűnt. Ezt általában egy 100-as értékelési tényező alkalmazásával vesszük figyelembe, de előfordulhatnak olyan helyzetek is, ahol ennél magasabb vagy alacsonyabb értékeket kell használni. A biológiai akkumulációra hajlamos anyagok esetében a 100-asra csökkentett értékelési tényező alkalmazása nem mindig indokolható megfelelően.

Olyan anyagok esetében, ahol ismert, hogy a hatásmechanizmus nem specifikus, a fajok közötti eltérések csökkenhetnek. Ilyen esetekben az alkalmazott értékelési tényező is alacsonyabb. Rövid távú $L(E)C_{50}$ értékek esetében azonban semmiképpen sem szabad 10-esnél alacsonyabb értékelési tényezőt használni.

3.4 Szennyvíztisztítók mikroorganizmusaira végzett hatásértékelés

Mivel egyes anyagok károsan befolyásolhatják a szennyvíztisztítók mikroorganizmusainak aktivitását, a $PNEC_{\text{mikroorganizmusok}}$ -t is meg kell határozni (ld. 2.3.7). A $PNEC_{\text{mikroorganizmusok}}$ -t a szennyvíztisztítók mikroorganizmusaira vonatkozó PEC/PNEC arány kiszámításához használjuk majd fel. A mikrobiális aktivitást befolyásoló hatások mérésére jelenleg alkalmazott vizsgálatok konkrét módja és érzékenysége igen eltérő lehet. Ma még igen kevés a nemzetközileg is elfogadott teszt rendszer (ilyen például az OECD 209 (az eleveniszap légzés gátlása) és az ISO 9509 (a nitrifikáció gátlása)). A rendelkezésre álló adatok alapján (pl. Umweltbundesamt, 1993; Reynolds et al., 1987) a vizsgálati módszerek növekvő érzékenység szerint a következő sorrendet adják: légzés gátlási teszt (OECD 209) < gátlás kontroll az alapvizsgálatokban < növekedés gátlási teszt *P. putidá*-ban < nitrifikáció gátlás.

A szennyvíztisztítóra jellemző retenciós időnek megfelelően általában a rövid időtartamú (pl. 10 órás) vizsgálatokat részesítik előnyben. A mikroorganizmusokra vonatkozó toxicitási adatoknak is relevánsnak kell lenniük az adott hatás, pl. a szennyvíztisztítóban folyó mikrobiális degradációs aktivitás vizsgálata tekintetében. Itt nyilvánvalóan a légzés gátlási vagy a nitrifikációs teszt rendszerek alkalmazhatók. A kevert inokulumos légzési tesztek relevánsabbnak kell tekinteni, mint az egyéb inokulumot alkalmazó légzés gátlási tesztek. Gyakran az is előfordulhat, hogy individuális baktérium populációkra, pl. MICROTOX-ra, *Pseudomonas putidá*-ra, *Pseudomonas fluorescens*-re, sőt még *Escherichia coli*-ra is vannak egyedi adatok. Az ilyen tesztek azonban kevésbé relevánsnak tekintjük. A *P. fluorescens*-szel és az *E. coli*-val végzett vizsgálatok (Bringmann és Kühn, 1960) eredményeit nem lehet felhasználni a $PNEC_{\text{mikroorganizmusok}}$ meghatározására, mivel ezekben a vizsgálatokban glükózt használtak szubsztrátként. A MICROTOX vizsgálatok sem használhatók, mivel ezekben egy sósvízben élő fajt vizsgáltak. A *P. putidá*-val végzett sejtosztódás gátlási tesztek (Bringmann és Kühn, 1980) eredményeit fel lehet használni, de csak nagy körültekintéssel.

A szennyvíztisztítóban élő mikroorganizmusokra vonatkozó toxicitás értékeléséhez a kifolyó tisztított szennyvízben mérhető koncentrációt kell összehasonlítani a mikrobiális hatásadatokkal. A $PNEC_{\text{mikroorganizmusok}}$ meghatározása a következőképpen történik:

- a $PNEC_{\text{mikroorganizmusok}}$ egyenlő a 'specifikus baktérium populációk', pl. nitrifikáló baktériumok vagy *P. putida* alkalmazásával végzett vizsgálatok eredményeiből meghatározott NOEC értékkel. Az ilyen vizsgálatokból kapott EC50 értékeket a 10-es értékelési tényezővel kell elosztani;
- egyéb tesztrendszerekből, pl. a légzés gátlási tesztből (OECD 209) származó NOEC vagy EC10 értékeket ugyancsak a 10-es értékelési tényezővel kell elosztani. Az ilyen jellegű vizsgálatokból kapott EC50 értékeknél az alkalmazandó értékelési tényező - amivel az EC50 értéket el kell osztani - 100. Meg kell jegyezni, hogy a kifolyó tisztított szennyvízben mérhető koncentrációt kell használni, bár az átlevegőztető tartályban élő heterotróf mikroorganizmusok valószínűleg egy olyan koncentrációnak lehetnek kitéve, ami inkább a befolyó tisztítatlan szennyvízben mérhető koncentrációval áll összefüggésben. A nitrifikáló baktériumokhoz használt értékelési tényezővel összehasonlítva itt tehát egy nagyobb értékelési tényezőt kell alkalmazni. A nitrifikáló baktériumok esetében az expozíciós koncentráció inkább kapcsolódik a kifolyó tisztított szennyvízben mérhető koncentrációhoz, mivel a nitrifikáció a legutolsó technológiai lépés a szennyvíztisztítóban;
- a legalacsonyabb értéket kell a $PNEC_{\text{mikroorganizmusok}}$ -nek venni.

3.5 Hatásértékelés az üledékre vonatkozóan

3.5.1 Bevezető

Az üledék egyfajta 'ülepítő'-ként (sink), de (a reszuszpendálódás miatt) egyben emissziós forrásként is viselkedik, mivel a szennyező anyagok adszorpcióval az üledékszennyezőkhez kötődnek. Az üledék időben és térben integrálja a felszíni vizek szennyezésének hatásait, így olyan veszélyt jelenthet a vízi életközösségekre (mind a pelágikus mint pedig a bentoszlakó szervezetekre), amelyeket a vízoszlopban lévő koncentrációk alapján közvetlenül nem lehet megjósolni. A bentoszlakó szervezetekre kifejtett hatás azért jelent veszélyt, mivel sok élőhely esetében a bentosz fontos szerepet játszik a törmelék anyagának reciklálásában.

Új anyagokra nem lesznek adatok az üledéklakó szervezetekre kifejtett hatással kapcsolatban. Európában mindeközéig csak igen kis számú vizsgálat készült a meglévő anyagok üledéklakó élőlényekre kifejtett hatásaival kapcsolatban. Az ezzel kapcsolatos kutatás azonban jelenleg is folyik, még hozzá több országban is. Folyik továbbá a reprezentatív fajok és standardizált rendszerek kiválasztása is. Az üledékre és az ott élő szervezetekre kifejtett hatások vizsgálatára sokféle módszer (pl. egyensúlyi megoszlás, az intersticiális víz minősége, "hegyes" üledék toxicitás, szövet maradvány, eredő üledék minőségi kritériumok és standardok) kidolgozása van folyamatban (OECD, 1992b). Amennyiben a standard vizsgálatokat elvégezték, és konszenzus született az alkalmazandó értékelési tényezővel kapcsolatban is, a kiszámolt $PNEC_{\text{üledék}}$ -t össze kell hasonlítani az üledékre előrejelzett ($PEC_{\text{üledék}}$) vagy mért koncentrációval. A tesztelési eljárások leírása megtalálható az alábbi hivatkozások alatt: ASTM-ben (1990 a-e), ASTM (1991) és Burton (1991 és 1992). Ezen kívül OECD-ben jelenleg készül egy részletes cikk a vízi ökotoxicitási vizsgálatokról, és ezen belül az üledék tesztelésére alkalmas módszerekről is (Vízminőségi Intézet és RIVM, végső tervezet, 1995). A VI. mellékletben az Egyesült Államokban használt üledék toxicitási vizsgálati módszereket ismertetjük (Burton, 1991).

3.5.2 A PNEC kiszámítása

Amennyiben semmilyen ökotoxikológiai adat nem áll rendelkezésre az üledéklakó szervezetekkel kapcsolatosan, a $PNEC_{\text{üledék}}$ -t átmeneti jelleggel az egyensúlyi megoszlás elve alapján is ki lehet számítani. Ehhez a módszerhez a vízben élő szervezetekre vonatkozó $PNEC_{\text{víz}}$ -t és az üledék és a víz közötti megoszlási hányadost használjuk fel (OECD, 1992b; Di Toro, 1991).

A megoszlási módszer alkalmazásakor az alábbi feltételezésekkel élünk:

- Az üledéklakó szervezetek és a vízoszlopban élő szervezetek egyformán érzékenyek az adott vegyi anyaggal szemben;
- Az üledékben, az intersticiális vízben és a bentoszlakó szervezetekben a koncentrációk termodinamikai egyensúlyban vannak: azaz a koncentráció e három fázis bármelyikében megjósolható a megfelelő megoszlási hányadosok segítségével;
- Az üledék és a víz közötti megoszlási hányadosokat vagy mérni kell, vagy egy általános megoszlási módszer segítségével számításokkal is meghatározhatók az üledék és az anyag külön-külön megmért különböző tulajdonságai alapján. (Az üledék és a víz közötti megoszlási hányados meghatározása és a számítások korlátai tekintetében ld. a 2.3.5 pontot).

Az egyensúlyi megoszlás alapján a következő képletet alkalmazhatjuk:

$$PNEC_{\text{üledék}} = \frac{K_{\text{üledék-víz}}}{RHO_{\text{üledék}}} \cdot PNEC_{\text{víz}} \cdot 1000 \quad (54)$$

Jelölések:

$PNEC_{\text{víz}}$	előrejelzett hatás nélküli (no effect) koncentráció a vízben	[mg.l ⁻¹]	
$RHO_{\text{üledék}}$	az üledék sűrűsége	[kg.m ⁻³]	4 egyenlet
$K_{\text{üledék-víz}}$	az üledék és a víz közötti megoszlási hányados	[m ³ .m ⁻³]	9. egyenlet
$PNEC_{\text{üledék}}$	előrejelzett hatás nélküli koncentráció az üledékben	[mg.kg ⁻¹]	

Függetlenül attól, hogy a $K_{\text{üledék-víz}}$ mérésrel vagy számítással került meghatározásra, a $PNEC_{\text{üledék}}$ -nek az egyensúlyi megoszlás alapján történő számításával kapcsolatosan a következő megjegyzést kell tenni. E fenti képletben csak a vízfázison keresztüli felvételt vesszük figyelembe. Ez azonban megvalósulhat az üledék anyagának felvételén keresztül is. Ez különösen a jól adszorbeálódó és a 3-nál (ami ekvivalens azzal, hogy a $K_{p_{\text{üledék}}}$ 20, az F_{oc} pedig 5%) magasabb log K_{ow} -vel rendelkező anyagok esetében válhat jelentőssé. Ilyen esetekben tehát könnyen alábecsülhetjük a felvétel mértékét. Talaj vizsgálatok (Belfroid et al., 1995) alapján bizonyítékok vannak arra is, hogy a teljes dózis aránya viszonylag alacsony marad mindaddig, amíg a log K_{ow} nem haladja meg az 5-öt. Habár el kell ismerni, hogy a talajra vonatkozó adatokat elvben nem lehet az üledékre extrapolálni, mégis úgy tartják, hogy az egyensúlyi megoszlási módszernél az expozíció potenciális alulbecslése elfogadható, ha az anyag log K_{ow} értéke 3 és 5 között van. Ahol a log K_{ow} (vagy a megfelelő $K_{p_{\text{üledék}}}$) nagyobb, mint 5, az egyensúlyi megoszlási módszert csak módosított formában lehet alkalmazni. Ahhoz, hogy figyelembe tudjuk venni az üledéken keresztüli felvételt is, a $PEC_{\text{üledék}}$ értékét egy 10-es faktorial meg kell szorozni. Azt is szem előtt kell tartani, hogy ez az eljárás inkább csak szűrő módszernek tekintendő az üledéklakó élőlényeket érintő kockázatok becslésében. Az itt ismertetett értékelési módszert a jövőben mindenképpen tovább kell fejleszteni.

Amennyiben semmilyen adat nem áll rendelkezésre az üledékekkel vagy az üledéklakó szervezetekkel kapcsolatban, a vízi környezetre vonatkozó értékelésbe bele kell foglalni az üledékre értékelést is, feltéve hogy a vizsgált anyag log K_{ow} értéke nagyobb, mint 5. Ha ismert az üledékre átfogóan jellemző koncentráció, akkor alkalmazható a fenti képlet és a $PNEC_{\text{üledék}}$ -t össze lehet hasonlítani a mért koncentrációkkal. Ezt tekintjük az alaphelyzetnek, de természetesen sokféle egyéb szituáció is szóba jöhet. A 15. táblázatban foglaltuk össze az összes lehetőséget, illetve, hogy az adott esetekben hogyan kell elvégezni a felmérést. A táblázatban különböző adat konfigurációk szerepelnek, továbbá utasításokat is adtunk arra nézve, hogy hogyan kell ezeket az üledéket érintő kockázatok jellemzéséhez. Amennyiben semmilyen mérési adat nem áll rendelkezésre sem a $PEC_{\text{üledék}}$, sem pedig a $PNEC_{\text{üledék}}$ meghatározásához, akkor nem lehet kvantitatív kockázat jellemzést készíteni az üledékre.

15. táblázat. Az üledék kockázat jellemzéséhez szükséges adatok

A rendelkezésre álló mérési adat: PEC _{üledék}	A rendelkezésre álló mérési adat: PEC _{üledék}	Kockázat jellemzés
C _{pórusvíz}	-	$\frac{C_{\text{pórusvíz}}}{\text{PNEC}_{\text{víz}}}$
C _{összes}	-	$\frac{C_{\text{összes}} \cdot \text{RHO}_{\text{üledék}}}{K_{\text{üledék-víz}} \cdot \text{PNEC}_{\text{víz}} \cdot 1000}$
-	PNEC _{üledék}	$\frac{K_{\text{üledék-víz}} \cdot \text{PEC}_{\text{víz}} \cdot 1000}{\text{PNEC}_{\text{üledék}} \cdot \text{RHO}_{\text{üledék}}}$
C _{pórusvíz}	PNEC _{üledék}	$\frac{K_{\text{üledék-víz}} \cdot C_{\text{pórusvíz}} \cdot 1000}{\text{PNEC}_{\text{üledék}} \cdot \text{RHO}_{\text{üledék}}}$
C _{összes}	PNEC _{üledék}	$\frac{C_{\text{összes}}}{\text{PNEC}_{\text{üledék}}}$
ahol: C _{pórusvíz} koncentráció az üledék pórusvizében [mg.l ⁻¹] C _{összes} koncentráció az egész üledékben [mg.kg _{üledék} ⁻¹] K _{üledék-víz} az üledék és a víz közötti megoszlási hányados [m ³ .m ⁻³] RHO _{üledék} a nedves üledék sűrűsége [kg.m ⁻³] 9. egyenlet 4. egyenlet		

3.6 Hatásértékelés a szárazföldi környezetre vonatkozóan

3.6.1 Bevezető

A vegyi anyagok sokféle módon kerülhetnek a talajba, pl. a mezőgazdaságban az iszaptrágyázással, vegyszerek közvetlen alkalmazásával, illetve az atmoszférából történő kiülepedéssel. Ez azt jelenti, hogy itt is értékelni kell az esetleges káros hatásokat. Az alábbiakban ismertetésre kerülő javasolt stratégia az anyagoknak a talajlakó szervezetekre kifejtett hatásain alapul. Jelenleg még nincs megfelelő stratégia a talajfunkciókra, pl. a filtrálásra, puffer kapacitásra vagy a metabolikus kapacitásra gyakorolt esetleges hatások értékelésére.

Ahogy azt a bevezetőben már említettük, a talajba kibocsátott anyagok nem csak a talajlakó élőlényekre, hanem a talaj egyéb funkcióira is befolyást gyakorolhatnak. A hidrofil és így az esővel könnyen a talajvízbe mosódó, továbbá a geológiai akkumulációra hajlamos vagy a talajban kevésbé bontható anyagok külön figyelmet érdemelnek.

A szárazföldi ökoszisztémák magukba foglalják a föld felett, a talajban, illetve a talajvízben élő közösségeket. Ebben a részben azonban csak a pórusvízen és/vagy a talajon keresztül közvetlenül érintett talajlakó szervezetekkel foglalkozunk. Meg kell tehát érteni, hogy az itt vázolt stratégia csak ideiglenes jellegű. Mindazonáltal kitérünk a légkörrel (3.7 pont), a biológiai akkumulációval és a madarakban és emlősökben jelentkező másodlagos mérgezéssel

(3.8 pont) kapcsolatos kérdésekre is. Mindeztáig nem dolgoztak ki megfelelő módszert a talajvízben élő szervezetekre vonatkozó hatásértékeléshez, mivel semmilyen toxicitási adat nem áll rendelkezésre. A talajvízben élő fauna és mikroflóra ökotoxikológiai tesztelési lehetőségeivel kapcsolatosan azonban már jelentek meg különböző tudományos tanulmányok (Notenboom és Boessenkool, 1992; Van Beelen et al., 1990).

Az itt vázolt stratégiát számos, a szárazföldi környezetre gyakorolt hatással foglalkozó publikáció alapján dolgoztuk ki (OECD, 1989; Stavola, 1990; Pedersen és Samsoe-Petersen, 1944; Umweltbundesamt, 1993 és Römbke et al., 1993).

3.6.2 Stratégia a talajban élő organizmusokra gyakorolt hatás értékeléséhez

A legtöbb anyag esetében a talajlakó élőlényekkel kapcsolatos toxicitás adatok mennyisége általában igen korlátozott. Az alapszinten sem az új, sem pedig a meglévő anyagok esetében nem kötelező a talajlakókra vonatkozó toxicitás vizsgálata. Új anyagok esetében az 1. szinten már előírás a növényekre és földigilisztára gyakorolt toxicitás vizsgálata. A 2. szinten egyelőre nem létezik specifikus előírás a talajlakók további vizsgálatával kapcsolatban. Meglévő anyagok esetében valószínűleg igen korlátozott számban állnak majd rendelkezésre adatok: a legtöbb anyag esetében várhatóan csak rövid időtartamú, növényeken és földigilisztaikon végzett vizsgálatokra számíthatunk. Hosszú időtartamú tesztek léteznek pl. mikroorganizmusokra, a *Podura aquatica*-ra és földigilisztára, de ilyen jellegű eredményekkel általában csak ritkán találkozhatunk a meglévő anyagokkal kapcsolatosan rendelkezésre álló adatok között. Az ilyen jellegű toxicitási adatok hiányának kompenzálása érdekében tehát stratégiát javasolunk, amelynek lényege, hogy az üledékhez alkalmazható egyensúlyi megoszlási módszert használjuk (ld. 3.5).

Az ökotoxikológiai tesztekben használt talajok jellemző tulajdonságaik - pl. szerves anyag és agyag tartalom, talaj pH, és talajnedvesség tartalom - tekintetében igen eltérőek lehetnek. A vizsgált anyag biológiai hozzáférhetőségét és így a tényleges toxicitást is, a fenti tulajdonságok nagy mértékben befolyásolhatják. Ez azt jelenti, hogy a különböző talajtípusokkal végzett vizsgálatok eredményei önmagukban nem hasonlíthatók össze. Az adatokat ezt követően különböző, pl. a talajra jellemző biológiai hozzáférhetőséget leíró összefüggések segítségével normalizálni kell. Az eredményeket végső soron egy standard talajra vonatkozólag kell átkonvertálni (a standard talaj szerves anyag tartalma definíció szerint 3,4%, ld. 2.3.4). A nemionos anyagok esetében feltételezzük, hogy a biológiai hozzáférhetőséget csak a szerves anyag tartalom határozza meg. A NOEC és a L(E)C₅₀ értékeket az alábbi képlet segítségével lehet korrigálni:

$$NOEC \text{ vagy } L(E)C_{50(standard)} = NOEC \text{ vagy } L(E)C_{50(kísérl)} \cdot \frac{Fsz_{a_{talaj(standard)}}}{Fsz_{a_{talaj(kísérl)}}} \quad (55)$$

Jelölések:

NOEC vagy L(E)C ₅₀ _{kísérl}	NOEC vagy L(E)C ₅₀ a kísérletben	[mg.kg ⁻¹]	
Fsz _a _{talaj(standard)}	a szerves anyag aránya a standard talajban	[kg.kg ⁻¹]	3. táblázat
Fsz _a _{talaj(kísérl)}	a szerves anyag aránya a kísérleti talajban	[kg.kg ⁻¹]	
NOEC vagy L(E)C ₅₀ _{standard}	NOEC vagy L(E)C ₅₀ a standard talajban	[mg.kg ⁻¹]	

A $PNEC_{\text{talaj}}$ meghatározása során az alábbi három lehetőséget kell megkülönböztetni:

- ha a talajlakó szervezetekkel kapcsolatosan nincsenek toxicitási adatok, a potenciális kockázatok meghatározásához az egyensúlyi megoszlási módszert kell alkalmazni. Ezt a módszert "szűrő módszernek" tekintjük, ahogy az a 3.6.2.1 pont alatt szerepel (az üledékkel kapcsolatosan ld. még a 3.5.2 pontot);
- amennyiben valamely producens (energiatermelő), konzumens (fogyasztó), és/vagy lebontó szervezettel kapcsolatban vannak toxicitási adatok, a $PNEC_{\text{talaj}}$ -t az értékelési tényezők alkalmazásával lehet kiszámolni. Az értékelési tényezőket a 3.6.2.2 pont alatt soroltuk fel;
- ha a talajlakó szervezetekkel kapcsolatban csak egy vizsgálatból állnak rendelkezésre eredmények, a kockázatbecslést a tesztadatokra (az értékelési tényezők alkalmazása mellett) és az egyensúlyi megoszlási módszerekre alapozva is el kell végezni. Az így kapott kétféle $PEC_{\text{talaj}}/PNEC_{\text{talaj}}$ arányok közül a kockázat jellemzéshez a magasabbat kell elfogadni.

3.6.2.1 A $PNEC$ kiszámítása egyensúlyi megoszlási módszerrel

Ha az egyensúlyi megoszlás módszerét alkalmazzuk az üledékhez hasonlóan a talajnál is fel kell tételezni, hogy az anyag biológiai hozzáférhetőségét, és ezen keresztül a tényleges toxicitást csak a talaj pórusvizében mérhető koncentráció szabja meg. Ennél a módszernél a talajrészecskékhez adszorbeálódott anyagok felvétele által okozott hatásokkal nem foglalkozunk. A $PNEC_{\text{talaj}}$ -t a következőképpen kell kiszámolni:

$$PNEC_{\text{talaj}} = \frac{K_{\text{talaj-víz}}}{RHO_{\text{talaj}}} \cdot PNEC_{\text{víz}} \cdot 1000 \quad (54)$$

Jelölések:

$PNEC_{\text{víz}}$	előrejelzett hatás nélküli koncentráció a vízben	$[\text{mg} \cdot \text{l}^{-1}]$	
RHO_{talaj}	a talaj sűrűsége	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$	4 egyenlet
$K_{\text{talaj-víz}}$	a talaj és a víz közötti megoszlási hányados	$[\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}]$	9. egyenlet
$PNEC_{\text{talaj}}$	előrejelzett hatás nélküli koncentráció a talajban	$[\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}]$	

Az egyensúlyi megoszlási módszerek alkalmazhatóságát a talaj esetében kevésbé vizsgálták, mint az üledéklakó szervezetek esetében. Van Gestel és Ma (1993) kimutatta, hogy ez a modell jól alkalmazható számos kloro-fenol, kloro-benzol és kloro-anilin földigilisztákban megfigyelt rövid idejű toxicitásának vizsgálatára. Mint ahogy azt az üledéknél is láttuk, az egyensúlyi megoszlási módszerek itt sem alkalmazhatók lipofil anyagok, illetve olyan szervezetek esetében, ahol az expozíció elsősorban a felvett táplálékon keresztül valósul meg (Van Gestel, 1992). Így tehát ugyanazt a megközelítést kell alkalmazni itt is, mint a $PNEC_{\text{üledék}}$ meghatározásakor: ahhoz hogy a talaj felvételén keresztül megvalósuló expozícióját figyelembe tudjuk venni, a PEC_{talaj} -t az 5-nél nagyobb log Kow-vel rendelkező anyagok esetében egy 10-es faktorral meg kell szorozni.

A vízben élő szervezetekre vonatkozó toxicitási adatok elvben nem helyettesíthetik a talajlakó szervezetekre vonatkozó adatokat, mivel a vízben élő fajoknál megfigyelt hatásokat csak azokra a talajlakókra lehet elfogadni, amelyek expozíciója kizárólag a pórusvízen keresztül valósul meg (Pedersen és Samsoe-Petersen, 1993). Ha tehát az egyensúlyi megoszlási módszerrel meghatározott $PEC_{\text{talaj}}/PNEC_{\text{talaj}}$ arány nagyobb, mint 1, akkor a talaj környezetre vonatkozó hatásértékelés során elengedhetetlen a talajlakó szervezetek vizsgálata.

3.6.2.2 A PNEC kiszámítása az értékelési tényezők segítségével

A vizsgálat típusától (rövid vagy hosszú időtartamú vizsgálat), a vizsgált trófikus szintek számától és a laboratóriumi eredmények valós ökoszisztémákra történő extrapolálásának bizonytalanságaitól függően a szárazföldi környezetre (ld. 16. táblázat) ugyanazokat az értékelési tényezőket kell alkalmazni, mint a vízi környezetre (ld. 14 táblázat). A talajhoz ajánlott értékelési tényezőket nem támasztja alá széles körű alkalmazási tapasztalat. Ahogy azt már említettük, a talajlakó szervezetekkel kapcsolatban csak bizonyos anyagok esetében állnak majd rendelkezésre adatok. A legtöbb esetben ezek az adatok földigilisztákon végzett rövid időtartamú vizsgálatokból származnak. Ez azt jelenti, hogy számos rendszertani csoport esetében részletesebben meg kell ismerni a rövid és hosszú idejű toxicitást, valamint a terep- és a laboratóriumi adatok közötti különbségeket. Vita tárgyát képezi emellett, hogy milyen rendszertani csoportokat (amelyek egyben összhangban vannak a vízi környezet esetében vizsgált alga-Daphnia-hal hármassal) kell toxikológiai vizsgálatoknak alávetni. A legjobb az, ha vannak toxicitási adatok mind az elsődleges termelőkre, mind a konzumensekre, mind pedig a lebontókra. Mindezidáig azonban nem dolgozták ki a talaj ökotoxikológiai vizsgálatára vonatkozó nemzetközileg elfogadott és standardizált módszereket.

Hivatkozunk itt az 5.2.3 pontra valamint egy folyamatban lévő OECD programra, amely a szárazföldi ökoszisztémák vizsgálati stratégiájának kidolgozását célozza (Léon és Van Gestel, 1994). Mindent összevetve a 16. táblázatban megadott értékelési tényezőket indikatív értékeknek kell tekinteni. Ahogy egyre több új adat lát napvilágot a talajlakó szervezetek érzékenységevel kapcsolatban, a megadott faktorokat majd valószínűleg módosítani kell.

16. táblázat. A PNEC meghatározásához használt értékelési tényezők

Rendelkezésre álló adatok	Értékelési tényező
rövid időtartamú (pl. növényeken, földigilisztán vagy mikroorganizmusokon végzett) toxicitási vizsgálatokból meghatározott $L(E)C_{50}$	1000
Hosszú idejű NOEC (pl. növényekre)	100
Két különböző trófikus szinten elvégzett további vizsgálatokból származó hosszú idejű NOEC-ek	50
Három különböző trófikus szintet képviselő fajon elvégzett további vizsgálatokból származó hosszú idejű NOEC-ek	10
Terepvizsgálati adatok vagy modell ökoszisztémák	egyedileg meghatározandó

A $PNEC_{\text{talaj}}$ -t a mért legalacsonyabb hatásérték alapján kell meghatározni. Ha egy producens, egy konzumens és/vagy egy reducens szervezetre is vannak rövid időtartamú vizsgálatokból

származó adatok, a $PNEC_{\text{talaj}}$ kiszámításához az eredményeket egy 1000-es faktoriala le kell osztani. Amennyiben csak egy (földigilisztán, vagy növényeken elvégzett) talaj vizsgálat létezik, a kockázatbecslést mind a kétféleképpen el kell végezni, azaz a vizsgálati adatok alapján és a vízi toxicitás adatok alapján is (ez utóbbi adatok a talajlakókat érintő kockázatok tekintetében csak indikatív jellegűek). Elővigyázatossági okokból a nagyobb $PEC_{\text{talaj}}/PNEC_{\text{talaj}}$ arány alapján kell meghatározni, hogy a vizsgálati stratégia keretében melyek a további feladatok. A 16. táblázatban megadott többi értékelési tényezőt csak akkor lehet alkalmazni, ha a rövid időtartamú vizsgálatok mellett egyéb tesztek is elvégeztek.

3.7 Hatásértékelés a légkörre vonatkozóan

A légkörre vonatkozó kockázatbecslés során biotikus és abiotikus hatásokat egyaránt vizsgálni kell.

3.7.1 Biotikus hatások

A vizekre és a talajra vonatkozó hatásértékeléshez (és így a kockázatok jellemzéséhez is) használt módszereket nem lehet ugyanilyen módon alkalmazni az atmoszféra esetében. Az emlősök inhalációs vizsgálati módszereinek kivételével az atmoszférikus szennyezések hatásainak vizsgálatára szolgáló módszerek kidolgozása még nem fejeződött be egészen.

Nyilvánvaló, hogy a kockázatok kvantitatív jellemzése a $PEC_{\text{levegő}}$ és a $PNEC_{\text{levegő}}$ összehasonlításával jelenleg még nem lehetséges: az atmoszféra esetében tehát csakis kvalitatív értékelésre van lehetőség.

Nem emlős fajokra vonatkozó toxikológiai adatok az atmoszféra esetében általában nem vagy csak alig állnak rendelkezésre. Új vagy meglévő illékony anyagok esetében általában akut vagy rövid időtartamú inhalációs tesztek eredményeivel számolhatunk. Az ilyen jellegű adatok alapján káros hatásokra utaló jeleket észlelhetünk. A rövid idejű LC_{50} adatok segítségével az állatokat érintő potenciális kockázatokkal kapcsolatban megadható egy durva becslés. A legtöbb esetben azonban nem valószínű, hogy az atmoszférikus koncentráció elég nagy lesz ahhoz, hogy rövid idejű toxikus hatásokat okozzon a környezetben, úgyhogy inkább a hosszú távú, krónikus adatokat kell figyelembe venni. Egy anyag például alacsony koncentrációban is veszélyes lehet az atmoszférára, ha pl. R 48-as klasszifikációjú ("komoly egészségkárosodást okozhat, ha az expozíció hosszabb ideig fennáll"). A mutagén és reprodukív toxicitási hatások is utalhatnak arra, hogy a földi gerincesekre az anyag esetleg toxikus.

Gerincteleneken végzett gőzképzést / kipárolgást szimuláló vizsgálatok általában nem állnak rendelkezésre sem új, sem pedig meglévő anyagok esetében. Bizonyos meglévő anyagok esetében házi méheken (*Apis mellifera*) a növényvédő szerek tesztelésére vonatkozó irányelveknek megfelelően végzett toxicitási vizsgálatok adatai azonban rendelkezésre állhatnak. Az ilyen jellegű tesztekben időnként nem könnyű meghatározni a hatásos koncentrációt, úgyhogy a $PNEC_{\text{levegő}}$ sem lehet megállapítani.

A növényi toxicitási adatokat illetően majdnem semmilyen adatot nem találunk majd olyan vizsgálatokból, ahol az anyagot (gáz formában vagy kiülepedő formában) közvetlenül az atmoszférán keresztül adagolták volna. Általában a fűszerű növényfajokon végzett vizsgálatokat tartják kívánatosnak, mégis igen kevés az ilyen tanulmány. Az ilyen jellegű tesztekre vonatkozó általános irányelvek még nem kerültek elfogadásra.

3.7.2 Abiotikus hatások

A légköri kockázatok becslése során az alábbi abiotikus hatásokat kell figyelembe venni:

- globális felmelegedés;
- ózoncsökkenés a sztratoszférában;
- ózonképződés a troposzférában;
- elsavanyodás.

Ha valamely anyagnál arra utaló jeleket látunk, hogy a fenti hatásokat előidézhetsé, szakvéleményt kell kérni. Az első közelítésben alkalmazott kvantitatív módszert De Leeuw (1993) írta le:

Globális felmelegedés

Valamely anyagnak a globális felmelegedésre gyakorolt hatását az IR-elnyelés és az atmoszférikus élettartam szabja meg. A potenciális üvegház gázok adszorpciós sávja az úgynevezett atmoszférikus ablakban (800-1200 nm) található.

Sztratoszférikus ózon

Egy anyag akkor lehet hatással a sztratoszférikus ózonra, ha

- atmoszférikus élettartama elég hosszú ahhoz, hogy feljuthasson a sztratoszférába, és;
- egy vagy több Cl vagy Br szubsztituenszt tartalmaz.

Általánosságban elmondható, hogy az 1 évnél rövidebb élettartamú anyagoknál a sztratoszférikus ózoncsökkentő potenciál a nullához tart.

Troposzférikus ózon

A troposzférikus ózonképződés számos tényezőtől függ, úgy mint:

- az anyag reaktivitása és lebontási útvonalai;
- meteorológiai viszonyok. A legnagyobb ózon koncentráció akkor alakul ki, ha magas a hőmérséklet, sok a napsugárzás és kicsi a szélsébség;
- az egyéb légszennyezők koncentrációja. A nitrogén-oxidok koncentrációjának meg kell haladnia bizonyos ppb-ben mért mennyiséget.

Az erősen reaktív anyagok (pl. xilén, olefinek vagy aldehidek) jelentősen hozzájárulnak az ózon csúcsok kialakulásához. A kevésbé reaktív anyagok (pl. CO, metán) a szabad troposzférában játszanak fontosabb szerepet az ózonképződésben, így tehát a hosszú idejű ózonszennyezést segítik elő. Azonban a szerves anyagok troposzférikus ózonképző potenciáljának meghatározására végzett összes vizsgálat az értékek nagyfokú variabilitását mutatta. Következésképpen azt kell mondanunk, hogy jelenleg még nincs megfelelő eljárás, amivel akkor is meghatározhatók a troposzférikus ózonkoncentrációra gyakorolt hatások, ha az anyagnak csak az alapvető tulajdonságai ismertek.

Elsavanyodás

A Cl-, F-, N- vagy S-tartalmú anyagok oxidálódása során savanyodást okozó vegyületek (pl. HCl, HF, NO₂ és HNO₃, SO₂ és H₂SO₄) keletkezhetnek. A kiülepedés után ezek az oxidációs termékek a befogadó talaj vagy felszíni vizek elsavanyodásához vezethetnek.

3.8 A másodlagos mérgezésekre vonatkozó érték

3.8.1 Bevezető

A biokoncentráció és a biológiai akkumuláció a lipofil szerves anyagok, illetve egyes fémvegyületek esetében jöhet szóba, mivel a hosszú idejű expozíció nyomán közvetlen és közvetett toxikus hatások is megfigyelhetők. A fémekkel kapcsolatban további útmutatás a VIII. mellékletben található. A biokoncentráció definíció szerint a felvételi, a disztribúciós és az eliminációs folyamatok eredőjeként a szervezetben kialakuló koncentrációt jelenti, de csak a vízben keresztüli expozíció esetén, míg a biológiai akkumuláció esetében az összes expozíciós kaput figyelembe vesszük. A biológiai feldúsulás ("biomagnifikáció") az anyagnak a táplálékláncon keresztüli akkumulációját és transzferét jelenti, amelynek eredményeként a táplálékláncon magasabb szinten elhelyezkedő élőlényekben a koncentráció megnő. Másodlagos mérgezés alatt azt értjük, ha a táplálékláncon magasabb szinten lévő, vízben élő vagy szárazföldi szervezetekre a más szinteket képviselő élőlények elfogyasztása a bennük felgyülemlett toxikus anyagok miatt káros hatást gyakorol.

Sok hidrofób anyag esetében a táplálékláncon keresztüli akkumuláció a különböző trófikus szinteken sokféle útvonalon át valósul meg. E komplex folyamatok megfelelő kockázatbecslését nagy mértékben gátolja, ha csak kis számú laboratóriumi adat áll rendelkezésre. Vízben élő fajoknál a biológiai akkumuláció kockázatbecslésének egyik lehetséges módja a biokoncentrációs együtthatók (BCF) mérése. A statikus biológiai koncentrációs együttható egyenlő az adott élőlényben illetve a vízben mérhető koncentráció arányával, ha a steady-state (vagy másképp egyensúlyi) állapot kialakult. Ha megmérjük a felvételi és leadási kinetikákat, a felvétel és a leadás sebességi állandójának hányadosából kiszámolható a dinamikus biológiai koncentrációs együttható is:

$$BCF_{hal} = \frac{C_{hal}}{C_{v\acute{z}}} \quad \text{vagy} \quad \frac{k_1}{k_2} \quad (57)$$

Jelölések:

C_{hal}	koncentráció a halban	[mg.kg ⁻¹]
$C_{v\acute{z}}$	koncentráció a vízben	[mg.l ⁻¹]
k_1	a vízből való felvétel sebességi állandója	[l.kg ⁻¹ .nap ⁻¹]
k_2	a leadás sebességi állandója	[nap ⁻¹]
BCF_{hal}	biokoncentrációs együttható	[l.kg ⁻¹]

Ahogy egyre több új információ lát napvilágot az expozícióval illetve a toxikológiai és ökotoxikológiai hatásokkal kapcsolatban mind az új, mind pedig a meglévő anyagokra, mindenképpen felül kell vizsgálni a fenti folyamatok értékelésének módszereit. Alapszinten az anyag ismert fizikai-kémiai és (öko)toxikológiai tulajdonságai alapján lehet megítélni, hogy van-e lehetőség biológiai akkumulációra és/vagy közvetett hatásokra. A biológiai akkumuláció és a másodlagos mérgezéshez használt vizsgálati stratégiának ez a becslés az első lépése, ahogy azt majd a 3.8.3 pont alatt részletesebben is elmagyarázzuk. A szárazföldi ökoszisztémákhoz is hasonló stratégiát kell alkalmazni, amelynek részletes ismertetése a 3.8.3.8 pont alatt található.

3.8.2 Biológiai akkumulációra utaló jelek

Vízben élő szervezetek esetében a biológiai akkumulációra való hajlam értékelésének legegyszerűbb módja, ha a BCF-et kísérletesen megmérjük. A BCF meghatározás azonban önmagában csak részlegesen világítja meg a biológiai akkumulációs potenciált, tehát további adatokra lesz szükség a felvételi és leadási folyamatok kinetikájával, az anyagcsere folyamatokkal, a szerv-specifikus akkumulációval és a megkötött anyagmennyiséggel kapcsolatban. Ilyen adatok azonban csak a legritkább esetben állnak rendelkezésre, úgyhogy a biológiai akkumulációra való hajlamot egyszerűbb fizikai-kémiai és vagy szerkezeti tulajdonságok alapján kell meghatározni.

A biológiai akkumulációs hajlamot jelző tulajdonságok közül a legfontosabb és a leginkább elfogadott, ha az anyag n-oktanol-víz megoszlási hányadosa magas. Emellett ha az anyag egy olyan csoportba tartozik, amelyről tudott, hogy élő szervezetekben felhalmozódhat, akkor ugyancsak felmerülhet a biológiai akkumulációra való hajlam. Bizonyos tulajdonságok viszont éppen hogy kizárják a felhalmozódás lehetőségét még akkor is, ha magas a log Kow értéke, vagy ha a vizsgált anyag valamely szerkezeti analógjáról tudjuk, hogy hajlamos a biológiai akkumulációra. Vannak azután olyan tulajdonságok, amelyek az alacsony log Kow ellenére is azt jelezhetik, hogy a vizsgált anyag hajlamos a biológiai akkumulációra. Az előbbieken felsorolt tulajdonságokat az alábbiakban részletesebben is ismertetjük.

n-oktanol-víz megoszlási hányados

Az alapszinten a biológiai akkumulációs potenciált az n-oktanol-víz megoszlási hányados (log Kow) alapján becsülhetjük. Amennyiben ez kísérletesen nem határozható meg, akkor a kémiai szerkezet alapján is számolható.

Általánosan elfogadott, hogy a 3-nál nagyobb log Kow biológiai akkumulációs hajlamra utal. Bizonyos típusú, pl. felületaktív, illetve a vízben ionokat képező anyagok esetében a log Kow nem alkalmazható a BCF kiszámításához. Számos olyan tényező van azonban, amit nem veszünk figyelembe, ha a BCF-et csak a log Kow alapján számoljuk, ilyenek például:

- az aktív transzport jelenségek;
- a sejtmembránon át történő diffúziós viselkedés megváltozása;
- anyagcsere folyamatok a felvevő szervezetben, illetve a keletkező anyagcseretermékek akkumulációs hajlama;
- a szövet komponensekkel való specifikus kölcsönhatások miatti affinitás;
- speciális szerkezeti tulajdonságok (pl. amfipatikus vagy disszociáló anyagok, amelyeknél összetett egyensúlyok alakulnak ki);
- a felvételi és leadási folyamatok kinetikái (ami miatt pl. a leadást követően is megmarad egy koncentráció plató).

Az n-oktanol csak az élő szervezetek lipid frakcióját szimulálja, úgyhogy az anyag vagy metabolitjai tárolását vagy akkumulációját eredményező egyéb mechanizmusok tekintetében irreleváns.

Adszorpció

A biológiai felületeken, pl. a kopoltyún vagy a bőrön történő adszorpció ugyancsak vezethet biológiai akkumulációhoz és a táplálékláncon keresztül történő felvételhez. Az adszorpcióra hajlamos anyagok esetében tehát fennállhat a biológiai akkumuláció és nagyítás veszélye is.

Bizonyos anyagok esetében, ahol az oktanol-víz megoszlási hányados nem mérhető megfelelő módon, a nagyfokú adszorpciós hajlam (amelyet a $\log K_p > 3$ jelez) további bizonyítékot jelenthet a biológiai akkumulációs hajlam lehetőségére.

Hidrolízis

A hidrolízis hatása a főleg vízbe kibocsátott anyagok esetében lehet jelentős tényező, mivel a hidrolízis csökkenti az anyag koncentrációját a vízben, így a vízben élő szervezetekben való biológiai akkumuláció mértéke is csökken. Ha a fél-életidő a környezetre jellemző pH (4-9) és hőmérséklet tartományban kevesebb, mint 12 óra, ott a hidrolízis sebessége valószínűleg nagyobb, mint az érintett élő szervezetekre jellemző felvételi ráta. A biológiai akkumuláció valószínűsége tehát erősen csökken. Ilyen esetekben a kiindulási anyagok helyett esetleg a meghatározott hidrolízis termékekre kell majd elvégezni a BCF vizsgálatokat. Meg kell azonban jegyezni azt is, hogy a legtöbb esetben a hidrolízis termékek hidrofílebb tulajdonságúak, mint a kiindulási anyagok, ezért alacsonyabb lesz a biológiai akkumulációra való hajlamuk.

Degradáció

A vizekben, és így a vízben élő szervezetekben kialakuló koncentrációt is jelentősen csökkenthetik a biotikus és abiotikus bomlási folyamatok. Előfordulhat azonban, hogy a felvétel sebessége még mindig nagyobb, mint a degradációs folyamatoké, ami a biológiailag gyorsan bontható anyagok esetében is magas BCF-et eredményezhet. A gyors biológiai bonthatóság tehát önmagában nem zárja ki a biológiai akkumulációt, de a legtöbb ilyen anyag esetében a vízben élő szervezetekben kialakuló koncentrációk viszonylag alacsonyak lesznek. Alapszinten általában kevés adat áll rendelkezésre a degradációs folyamatok kinetikájáról. Új anyagok esetében még magasabb forgalmazási szinteken is előfordulhat, hogy külön indokolni kell az ilyen jellegű vizsgálatok előírását; ezeket az adatokat egyedi mérlegelés alapján a 2. szinten lehet bekérni. Meglévő anyagok esetében már lehetnek adatok a bomlási folyamatok kinetikájával kapcsolatban.

Ha nagy mennyiségben keletkezik valamilyen stabil anyagcseretermék, akkor erre vonatkozóan is értékelni kell a biológiai akkumulációs potenciált. A legtöbb anyag esetében azonban kevés adat várható. A lehetséges anyagcseretermékekkel kapcsolatos adatokat elsősorban emlősökön végzett kísérletekből szerezhetjük be, az eredmény extrapolálásakor azonban nagy körültekintéssel kell eljárni.

Molekulatömeg

Az olyan anyagokat, amelyek molekulatömege meghaladja a 700-at, a halak általában nem veszik fel könnyen elsősorban a sejtmembránon való áthaladáskor jelentkező sztérikus gátlások miatt. Az ilyen anyagok esetében (a $\log K_{ow}$ -tól függetlenül) nem valószínű, hogy jelentősebb biológiai akkumuláció jöhetne létre.

A biológiai akkumulációs hajlamra utaló tényezők összefoglalása

A fenti tényezők figyelembe vételével meg lehet határozni, hogy van-e lehetőség nagyobb mérvű biológiai akkumulációra. Az alábbiakban felsoroljuk az fenti tényezők alapján kialakított kritériumokat.

(Alapszinten) biológiai akkumulációs hajlamot jelez: ha

- a $\log K_{ow} \geq 3$; vagy;
- nagy az anyag adszorpciós hajlama; vagy;
- olyan anyagok közé tartozik, amelyekről tudott, hogy hajlamosak az élő szervezetekben a biológiai akkumulációra; vagy;

- az anyag szerkezeti tulajdonságai olyanok;
- és az anyag nem rendelkezik olyan tulajdonságokkal, - pl. a hidrolizálhatóság (a fél-életidő kisebb mint 12 óra) -, amely csökkenti a biológiai akkumulációs hajlamot.

3.8.3 Hatásértékelés a biológiai akkumulációra és a másodlagos mérgezésre vonatkozóan

3.8.3.1 Általános megközelítés

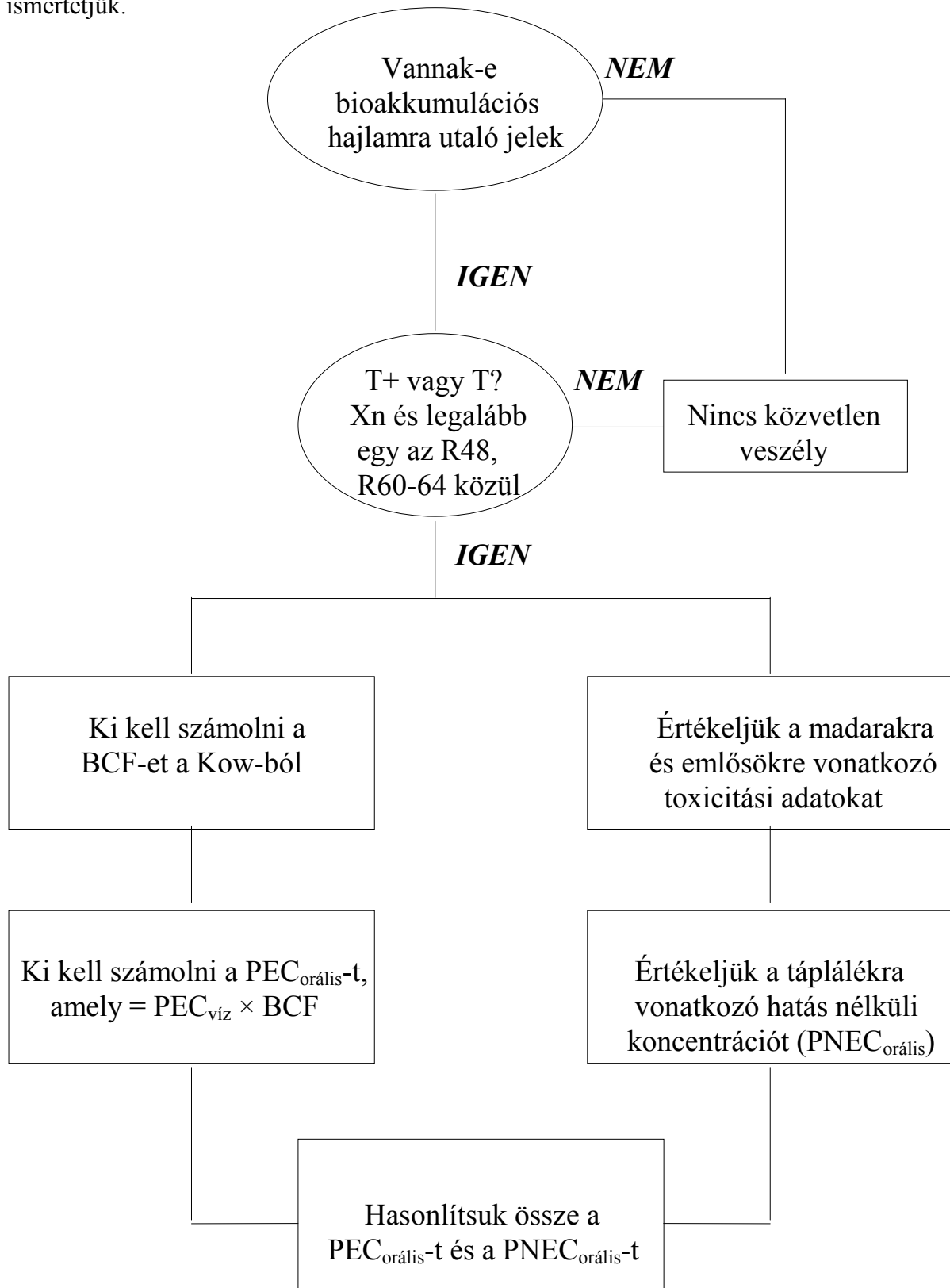
A másodlagos mérgezés előfordulásának értékelésére egy olyan stratégia került kidolgozásra, amely további segítséget nyújt annak megítéléséhez, hogy milyen esetekben kell előírni a biológiai akkumulációs vizsgálatokat. Ez a stratégia figyelembe veszi a $PEC_{v\acute{z}}$ -t, a magasabb rendű élőlények táplálékában kialakuló koncentrációkat, valamint az anyag emlősökre gyakorolt toxicitását, amelyek összességében jelzésértékűek abban a tekintetben, hogy a víz→hal→halevő emlősök vagy madarak táplálékláncon keresztül közvetett környezeti expozíció formájában milyen esetleges káros hatások érhetik a madarakat és az emlős állatokat (Romijn et al., 1993). Mivel ezzel a megközelítéssel kapcsolatosan még igen kevés az alkalmazási tapasztalat, ez az értékelési forma egyelőre ideiglenes jellegűnek tekintendő. Egyes anyagok esetében rendelkezésre állhatnak terepi mérésekből származó adatok is. Habár az értelmezés sokszor nem könnyű, ezeket az adatok fel lehet használni a másodlagos mérgezési kockázatok értékeléséhez (Ma, 1994).

A 12. ábrán a víz→hal→halevő emlősök vagy madarak útvonalra vonatkozó értékelés menetét mutatjuk be vázlatosan. Az értékelés első lépése az, hogy eldöntsük vannak-e arra utaló jelek, hogy az anyag hajlamos a biológiai akkumulációra. Az erre utaló jelekről már részletesen szoltunk az előző részben. Ezt követően azt kell meghatározni, hogy az emlős toxicitási adatok alapján osztályozásra került-e az anyag, pl. mint "nagyon toxikus" (T+), "toxikus" (T) vagy "ártalmas" (Xn) és társul-e hozzá legalább egy a következő R-mondatok közül: R48 "komoly egészségügyi károsodást okozhat, ha az expozíció hosszabb ideig fennáll", R60 "káros hatással lehet a termékenységre", R61 "káros hatással lehet a születendő gyermekre", R62 "a termékenység károsodásának lehetséges kockázata", R63 "a születendő gyermek károsodásának lehetséges kockázata", R64 "káros hatással lehet az anyatejjel táplált csecsemőkre". Ennél a lépésnél azt feltételezzük, hogy a rendelkezésre álló emlős toxicitási adatok alapján megítélhetők a magasabb rendű szervezetekre vonatkozó lehetséges kockázatok.

Amennyiben egy anyag osztályba sorolásra került, vagy a egyéb erre utaló jelek vannak, akkor el kell végezni a másodlagos mérgezésre vonatkozó értékelést.

Ezen a szinten egy egyszerű becslést készítünk, feltéve, hogy a vízre jellemző PEC értékek alapján a halakban kialakuló koncentráció olyan, hogy az a magasabb rendű halevő szervezetekben káros hatásokat okozhat. Amennyiben a másodlagos mérgezés kerülendő, a táplálkozási toxicitás vizsgálatokban a táplálékban mérhető koncentrációnak a NOEL (no observed effect concentration - az a koncentráció, ahol a hatást nem lehet megfigyelni) szint alatt kell lennie és olyan állatokat kell alkalmazni, amelyek megfelelően reprezentálják a halevő madarakat vagy emlősöket. A NOEL definíció szerint a táplálékban lévő az a legmagasabb koncentráció, amely az ilyen táplálék fogyasztáskor nem okoz káros hatásokat ($PNEC_{or\acute{a}lis,hal}$). Ha ismert az anyag BCF értéke, akkor a táplálékra vonatkozó PEC-et ($PEC_{or\acute{a}lis}$) a $PEC_{v\acute{z}}$ -ből ki lehet számolni, majd a kiszámolt értéket össze lehet hasonlítani a $PNEC_{or\acute{a}lis,hal}$ -al.

Ha mért BCF nem áll rendelkezésre, mint ahogy ez a legtöbb új anyag esetében jellemző, az oktanol-víz megoszlási hányados alapján becsült BCF-et kell alkalmazni. A kvantitatív értékelés eredményétől függően kell azután eldönteni, hogy elő kell-e írni a biológiai akkumulációs tesztek elvégzését. Az értékelés menetét részletesebben a következőkben ismertetjük.



10. ábra. A másodlagos mérgezésre vonatkozó értékelés vázlata

3.8.3.2 A BCF kiszámítása a log Kow alapján

Ha mért BCF értékek nem állnak rendelkezésre, a halra vonatkozó BCF-et a Kow és a BCF közötti összefüggés alapján meg tudjuk becsülni. A Kow számítására sokféle módszer létezik. A különböző módszerek következtében előfordulhat, hogy egy anyagra több, igen eltérő Kow-t is megadnak, úgyhogy a Kow értéket is szakértő véleményeztetni kell (ld. még 4. fejezet "A QSAR-ok felhasználása"). Azon anyagok esetében, ahol a log Kow 2 és 6 között van, Veith et al. (1979) cikke nyomán az alábbi lineáris összefüggést alkalmazhatjuk:

$$\log BCF_{hal} = 0,85 \cdot \log Kow - 0,70 \quad (58)$$

Jelölések:

Kow	oktanol-víz megoszlási hányados	[-]
BCF _{hal}	biológiai koncentrációs együttható a halra, nedves súlyra	[l.kg _{nedves hal} ⁻¹]

Ha a log Kow nagyobb, mint 6, egy parabolikus egyenletet kell használni:

$$\log BCF_{hal} = 0,20 \cdot \log Kow^2 + 2,74 \cdot \log Kow - 4,72 \quad (59)$$

Jelölések:

Kow	oktanol-víz megoszlási hányados	[-]
BCF _{hal}	biológiai koncentrációs együttható a halra, nedves súlyra	[l.kg _{nedves hal} ⁻¹]

Mindkét összefüggés a 700-nál kisebb mólsúlyú anyagokra vonatkozik. Meg kell jegyezni, hogy a BCF kísérletes meghatározásának nehézségei miatt ez a matematikai összefüggés nagyobb bizonytalanságot hordoz, mint egy lineáris egyenlet. A két egyenlet részletesebb tárgyalását ld. a 3. fejezetben (A QSAR-ok felhasználása).

3.8.3.3 Kísérletesen meghatározott BCF értékek

Meglévő anyagoknál előfordulhat, hogy van kísérletesen meghatározott BCF. Új anyagok esetében a BCF megléte csak az 1. szinten kötelező. A legtöbb esetben a kísérletesen meghatározott BCF értékeket kell előnyben részesíteni, különösen, ha a kísérletet az OECD 305 E Irányelv (utolsó verzió) (OECD, 1994) alapján végezték. A tesztek eredményeinek értékelésekor az alábbi tényezők lehetnek fontosak:

- BCF (biokoncentrációs együttható);
- CT₅₀ (kiürülési idő, vagy elimináció fél-életidőben megadva);
- anyagcsere/transzformáció;
- szerv-specifikus akkumuláció (reverzibilis/irreverzibilis);
- tökéletlen elimináció (megkötött reziduum);
- biológiai hozzáférhetőség.

Az újabb vizsgálatok alapján megállapítható, hogy a magas Kow-vel rendelkező anyagokkal végzett tesztekben magas biológiai akkumulációs együtthatókat kaptak, feltéve hogy az anyagokat oldékonysági határaiton belül és nagy körültekintéssel vizsgálták, vagyis nem adtak szolubilizáló ágenseket az oldékonyság növelés érdekében. A vizsgálatok időtartama is fontos tényező, mivel az erősen hidrofób anyagok esetében igen hosszú ideig eltarthat, amíg a valódi steady-state állapot a víz és az élő szervezetek között beáll. Az ilyen jellegű lipofil anyagok ezen kívül adszorbeálódhatnak is a különböző biológiai felületeken, pl. a kopoltyú vagy a bőr felületén, ami a biológiai nagytárolást követően toxikus hatásokat okozhat a magasabb rendű élőlényekben.

3.8.3.4 A madarakra és emlősökre vonatkozó toxicitási adatok értékelése

Csak a táplálkozási vagy orális toxicitási adatok relevánsak, mivel a másodlagos mérgezés útvonala kizárólag a táplálékláncon keresztüli felvétel lehet. Az ilyen vizsgálatok eredményei vagy a táplálékban mérhető koncentrációt adják meg (mg/kg), vagy a hatás nélküli dózist (mg/testsúly-kg/nap). A másodlagos mérgezés értékeléséhez az eredményeket át kell alakítani, úgy hogy a táplálékban mérhető koncentrációt adják meg (mg/kg-ban). A konverziós faktorok a VII. mellékletben találhatóak.

A madarakra és emlősökre gyakorolt hatások a legritkább esetben jelentkeznek rövid idejű expozíciót követő mortalitás formájában, úgyhogy a hosszú időtartamú vizsgálatok eredményeit, pl. mortalitási, reprodukciós vagy növekedési NOEC-eket kell előnyben részesíteni. Amennyiben nincs megfelelő toxicitási adat a madarakra vagy az emlősökre, akkor a másodlagos mérgezésre vonatkozó értékelést nem lehet elvégezni.

3.8.3.5 Az előrejelzett hatás nélküli koncentráció (PNEC_{orális}) kiszámítása

Új anyagok esetében az emlősökön elvégzett ismételt dózisos toxicitási tesztek eredményeit használjuk a másodlagos mérgezési hatások értékelésére.

Meglévő anyagoknál madarakra vonatkozó toxicitási adatok is rendelkezésre állhatnak. Az ilyen jellegű eredmények felhasználásával végzett extrapoláció alapján meghatározható táplálékra vonatkozó előrejelzett hatás nélküli koncentráció, ami protektív értéknek tekintendő más madár- és emlősfajokra. A hatás nélküli koncentráció meghatározásához értékelési tényezőket kell alkalmazni, amelyekkel figyelembe vehetők a fajok közötti variációk, a szubkrónikus és a krónikus közötti extrapoláció és a laboratóriumi adatok valószínűsíthető ökoszisztémákra való extrapolálása.

Az akut letális dózisoskat jelképező LD₅₀ (patkány, madarak) extrapolálása krónikus toxicitásra nem elfogadható, mivel ezek a vizsgálatok nem táplálkozási tesztek. Az akut hatás koncentrációk ((5 napos)LC₅₀ madár táplálkozási vizsgálatokban) madaraknál elfogadható az extrapoláláshoz, mivel a legtöbb esetben csak ilyen adatok állnak rendelkezésre ezekkel a gerincesekkel kapcsolatban. Az ilyen jellegű vizsgálatok eredményeihez 1000-es értékelési tényező alkalmazandó. A 28 napos ismételt dózisos toxicitási vizsgálatból származó NOEC-hez a PNEC_{orális} meghatározásakor 100-as (10×10) értékelési tényezőt kell alkalmazni. Ahol a 28 napos vizsgálat helyett 90 napos toxicitási vizsgálat készült, az értékelési tényező 30-ra csökkenthető (ld. EC (1993)).

Ha krónikus vizsgálatok adatai is rendelkezésre állnak, az alkalmazandó értékelési tényező 10. A reprodukív toxicitási hatásokat krónikusnak tekintjük, így erre is ugyanez a faktor alkalmazható.

3.8.3.6 A táplálékban előrejelzett környezeti koncentráció kiszámítása

A táplálékban (a halban) kialakuló koncentrációt a felszíni vizekre vonatkozó PEC-ből és a mért vagy becsült BCF-ből számolhatjuk:

$$PEC_{orális, hal} = PEC_{víz} \cdot BCF_{hal} \quad (60)$$

Jelölések:

BCF_{hal}	biológiai koncentrálódási együttható a halra, nedves súlyra	$[l \cdot kg_{nedves\ hal}^{-1}]$
$PEC_{víz}$	előrejelzett környezeti koncentráció a vízben	$[mg \cdot l^{-1}]$
$PEC_{orális, hal}$	előrejelzett környezeti koncentráció a táplálékban	$[mg \cdot kg_{nedves\ hal}^{-1}]$

Problémát jelenthet annak eldöntése, hogy a kockázat jellemzéshez a lokális vagy a regionális $PEC_{víz}$ -t használjuk-e. A $PEC_{lokális}$ alkalmazásával túlbecsülhetjük a kockázatokat, mivel a hlevő madarak és emlősök a kibocsátás helyétől távol is halásznak. A $PEC_{lokális}$ használata esetében a felszíni vizekben folyó biológiai degradációt sem vesszük figyelembe. A $PEC_{regionális}$ alkalmazása viszont ellentétes hatásokkal járhat, mivel a 200×200 km-es területen belül számos olyan terület lehet, ahol a tényleges koncentráció ennél jóval nagyobb. Megoldást jelenthet egy olyan új terület definiálása, ami a hlevő madarak és emlősök vadászterületén alapszik. Egy további alternatívát jelenthet, ha feltételezzük, hogy a hlevő madarak és emlősök táplálékuk bizonyos százalékát szerzik be a $PEC_{lokális}$ -sal jellemezhető területről, míg egy másik százalékát a $PEC_{regionális}$ -sal jellemezhető területről szedik össze.

Figyelembe véve, hogy a vadászterület nagysága igen különböző lehet, ami újra csak megnehezíti annak eldöntését, hogy a lokális vagy a regionális szintet alkalmazzuk, az utóbbi alternatívát használjuk mégpedig úgy, hogy a táplálék 50%-a a $PEC_{lokális}$ -sal, másik 50%-a pedig a $PEC_{regionális}$ -sal jellemezhető területről származik.

Ha a táplálékra előrejelzett koncentráció meghaladja a megfelelő hatás nélküli koncentrációt, a másodlagos mérgezés fontos expozíciós útvonalat jelenthet a halfogyasztó állatok számára. Ilyen esetben a másodlagos mérgezés ideiglenes jellegű felmérése alapján elő lehet írni a halra vonatkozó biológiai koncentrálódási együttható meghatározását, hogy ezzel elősegítsük a másodlagos mérgezéssel kapcsolatos kockázatok pontosabb értékelését. További részleteket a 4.3 (új anyagok) és a 4.4 (meglévő anyagok) részben találhatunk.

3.8.3.7 A másodlagos mérgezésre vonatkozó értékelés

A víz→hal→hlevő emlősök vagy madarak tápláléklánc a másodlagos mérgezési útvonalakra ad példát. A halfogyasztó állatokra vonatkozó biztonságos koncentrációk nem zárják ki a más vízben élő szervezetekkel (pl. édesvízi kagylók, férgek) táplálkozó madarak vagy emlősök kockázatát. Ki kell tehát emelni, hogy a javasolt módszerek alapján csak indikációt kapunk arra nézve, hogy a másodlagos mérgezés kritikus tényezőt jelent-e a vízi környezetre vonatkozó kockázatbecslésben.

A másodlagos mérgezés részletesebb vizsgálatához számos egyéb tényezőt is figyelembe kell venni (US EPA, 1993; Jongbloed et al., 1994), például:

- a laboratóriumi és a vadon élő állatok anyagcsere sebességei közötti eltérések;
- normál versus különleges környezeti körülmények: eltérések a normál és a különleges körülmények között, pl. párzási időszakban, vándorláskor, vagy télen tapasztalható anyagcsere sebességek tekintetében;
- a különböző táplálékok tápértékeinek eltérései: gabonák vs. halak, kagyló vagy férgek. Mivel a halak tápértéke alacsonyabb, mint a gabonáké, a vadon élő madaraknak és emlősöknek a gabonákhoz viszonyítva több halat kell elfogyasztaniuk ahhoz, hogy ugyanannyi energiát vegyenek fel, ami azt jelenti, hogy nagyobb a szennyezőanyag terhelésük;
- a szennyezőanyag asszimilációjának hatékonysága: a biológiai hozzáférhetőség tekintetében különbségek állnak fenn a tesztállatok (a tesztanyag felszíni alkalmazása) és a vadon élő állatok (az anyag a táplálékba be van épülve) között és/vagy;
- az állatok relatív érzékenysége bizonyos anyagokkal szemben: a madarak és emlősök különböző rendszertani csoportjai között eltérések lehetnek bizonyos anyagok biológiai transzformációja tekintetében. Az EPA ún. fajérzékenységi faktorokat (SSF) alkalmaz, amelyek 1 és 0,01 között változnak.

Jelenleg is folyik a vita arról, hogy vajon kell-e ezeket a faktorokat alkalmazni, vagy sem.

3.8.3.8 A szárazföldi táplálékláncon keresztül megvalósuló másodlagos mérgezésre vonatkozó értékelés

Biológiai feldúsulás ("biomagnifikáció") szárazföldi táplálékláncon keresztül is megvalósulhat. Itt a vízi útvonalhoz alkalmazott módszerhez hasonlóan alkalmazhatunk, azaz a talaj→földigilisztá→férgesekkel táplálkozó madarak vagy emlősök táplálékláncot, ahogy az Romijn et al. (1994) cikkében szerepel. A $PEC_{orális}$ kiszámítása is ugyanúgy történik, mint a vízi expozíciós kapu esetében (ld. a 3.8.3.5 alatt). A $PEC_{orális}$ tehát:

$$PEC_{orális, \text{férges}} = PEC_{talaj} \cdot BCF_{földigilisztá} \quad (61)$$

Jelölések:

$BCF_{földigilisztá}$	biokoncentrációs együttható a földigilisztára, nedves súlyra	$[\text{kg} \cdot \text{kg}_{\text{nedves földigilisztá}}^{-1}]$
PEC_{talaj}	előrejelzett környezeti koncentráció a talajban	$[\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}]$
$PEC_{orális, \text{férges}}$	előrejelzett környezeti koncentráció a táplálékban	$[\text{mg} \cdot \text{kg}_{\text{nedves földigilisztá}}^{-1}]$

A PEC_{talaj} esetében a $PEC_{lokális}$ -t kell alkalmazni, mivel ebben az iszaptrágyázás tekintetében a koncentrációt 180 napra átlagoljuk (ld. 2.3.8.5). Ugyanazt a scenáriót kell használni, mint a vízi tápláléklánc esetében (ld. 3.8.3.6): azaz a táplálék 50%-a a $PEC_{lokális}$ -ból, a másik 50% pedig a $PEC_{regionális}$ -ból jön. Mivel egyelőre kevés az alkalmazási tapasztalat ezzel a módszerrel kapcsolatban, az értékelés ideiglenes jellegűnek tekintendő.

A földigilisztára vonatkozó BCF-et a következőképpen lehet meghatározni:

$$(62) \quad BCF_{\text{földigilisztá}} = \frac{C_{\text{földigilisztá}}}{C_{\text{talaj}}} = K_{\text{földigilisztá-pórusvíz}} \cdot \frac{RHO_{\text{talaj}} \cdot 10^3}{K_{\text{talaj-víz}}}$$

Jelölések:

$BCF_{\text{földigilisztá}}$	biokoncentrációs együttható a földigilisztára, nedves súlyra	$[\text{kg} \cdot \text{kg}_{\text{nedves földigilisztá}}^{-1}]$	
$C_{\text{földigilisztá}}$	koncentráció a földigilisztában	$[\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}]$	
C_{talaj}	koncentráció a talajban	$[\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}]$	
$K_{\text{földigilisztá-pórusvíz}}$	megoszlási hányados a földigilisztá és a pórusvíz között	$[\text{l} \cdot \text{kg}_{\text{nedves földigilisztá}}^{-3}]$	
$K_{\text{talaj-víz}}$	megoszlási hányados a talaj és a víz között	$[\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}]$	9. egyenlet
RHO_{talaj}	a nedves talaj sűrűsége	$[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$	4. egyenlet

A földigilisztákra vonatkozó BCF-et a Connell és Markwell (1990) által kidolgozott QSAR alapján lehet becsülni. A szerzők egy empirikus egyenletet dolgoztak ki a $K_{\text{földigilisztá-pórusvíz}}$ -re növényvédő szerekkel kapcsolatos kísérletes adatok regressziójával a $\log Kow$ 1,0-6,5 tartományra:

$$K_{\text{földigilisztá-pórusvíz}} = 0,25 \cdot Kow \quad (63)$$

Jelölések:

$K_{\text{földigilisztá-pórusvíz}}$	megoszlási hányados a földigilisztá és a pórusvíz között	$[\text{l} \cdot \text{kg}_{\text{nedves földigilisztá}}^{-3}]$
Kow	oktanol-víz megoszlási hányados	$[-]$

Mivel különböző körülmények között végzett vizsgálatok adatait használták fel, meg kell állapítanunk, hogy a fenti tanulmányban jelentős eltérési források vannak. Romijn et al. (1994) kimutatta, hogy a dieldinre, a DDT-re és a pentaklór-fenolra a laboratóriumi tesztekben kapott $BCF_{\text{földigilisztá}}$ értékek mértani közepe < 1 . Ezek a $BCF_{\text{földigilisztá}}$ értékek jól egyeznek a Connell és Markwell (1990) által leközölt eredményekkel.

Amennyiben a tápláléklánc esetében előrejelzett koncentráció ($PEC_{\text{orális}}$) nagyobb, mint a PNEC, a másodlagos mérgezés kritikus útvonalnak tekintendő a féregevő ragadozók esetében. Elvben ugyanazt a módszert kell alkalmazni itt is, mint a vízi expozíció esetében. Jelenleg azonban nem áll rendelkezésre nemzetközileg elfogadott módszer a $BCF_{\text{földigilisztá}}$ számítására. A szerves anyagok esetében valószínűleg nem ez lesz a kritikus faktor itt, mivel a legtöbb anyag esetében a BCF értéke nagyjából 1, ami a fenti képletből is kijön (mivel $Koc = 0,411 \cdot Kow$). Következésképpen megfelelőbbnek tűnik, ha a $BCF_{\text{földigilisztá}}$ meghatározására szolgáló tesztek, vagy az emlősökre vagy madarakra vonatkozó toxicitási további vizsgálatainak elvégzése előtt pontosítjuk a talajra vonatkozó PEC-et.

4 Kockázat jellemzés

4.1 Bevezető

Miután minden egyes környezeti elemre elvégeztük az expozícióbecslést, és a dózis (koncentráció) - válasz (hatás) összefüggés elemzést, a PEC és PNEC értékek összehasonlításával el kell végezni a kockázat jellemzést is. Ezt az 1.2 pont alatt, illetve a 12. táblázatban ismertetett és az alábbiakban újra felsorolt minden egyes környezetvédelmi célkitűzésre külön-külön el kell végezni.

- vízi ökoszisztémák;
- szárazföldi ökoszisztémák;
- csúcsragadozók;
- a szennyvíztisztítók mikroorganizmusai;
- a légkör.

A 17. táblázatban soroltuk fel az előzőekben ismertetettek alapján kialakuló különböző PEC/PNEC arányokat. Attól függően, hogy a kockázat jellemzést új vagy ismert anyagra végezzük, az egyes hatásokra vonatkozó PEC/PNEC arányok alapján eltérő következtetéseket vonhatunk le és eltérő stratégiákat kell majd alkalmazni, ha a PEC/PNEC arányok egynél nagyobbak. Az alábbiakban tehát külön kezeljük az új és a meglévő anyagokra vonatkozó kockázat jellemzéseket. Van azonban számos olyan, a kockázat jellemzéshez használatos általános előfeltétel is, amely az új és a meglévő anyagokra egyaránt vonatkozik. Először ezeket tárgyaljuk.

*17. táblázat. A környezeti kockázatbecslés alapján meghatározott különböző PEC/PNEC arányok áttekintése**

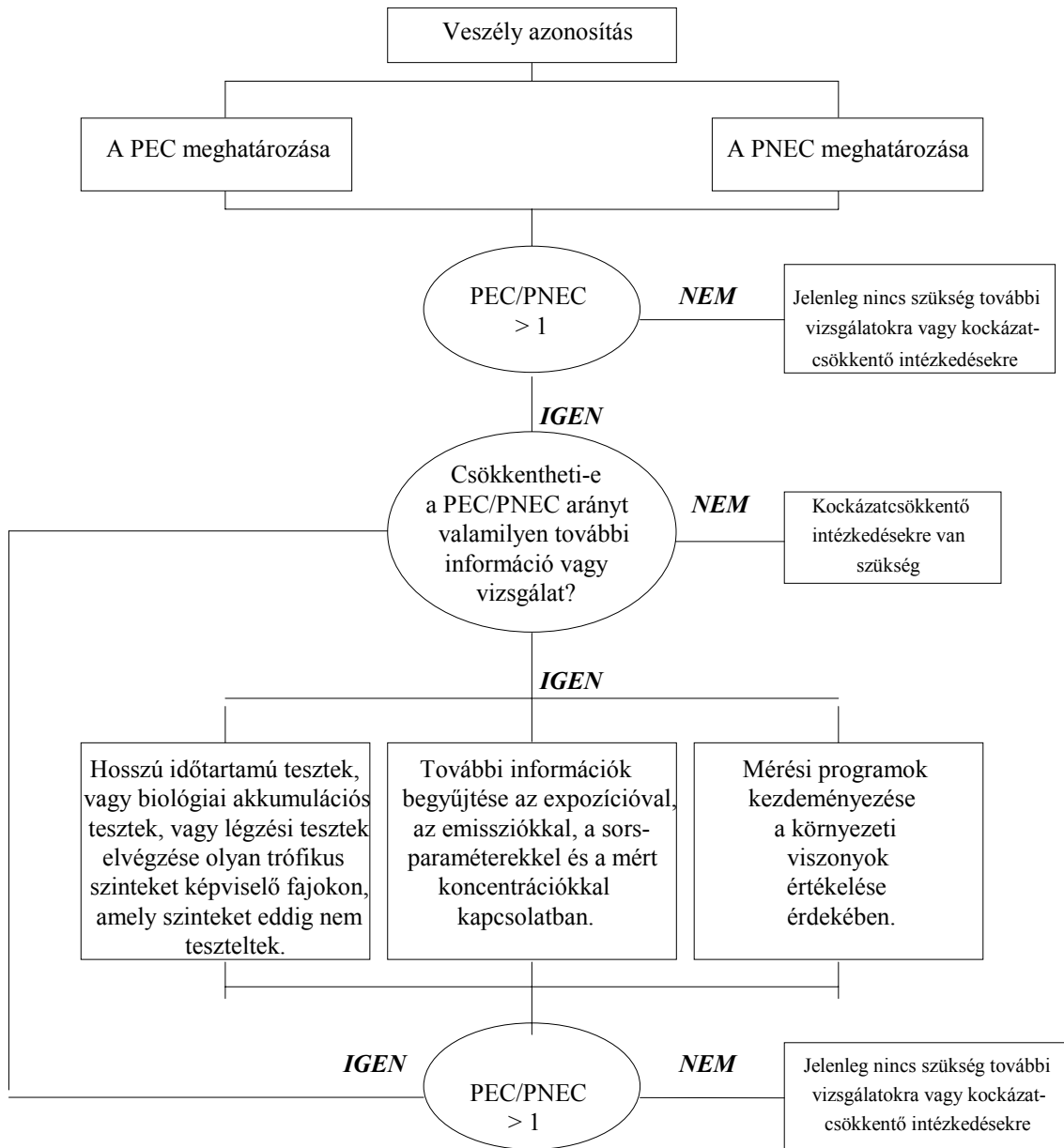
Lokális	Regionális
$PEC_{\text{lokális víz}}/PNEC_{\text{víz}}$	$PEC_{\text{regionális víz}}/PNEC_{\text{víz}}$
$PEC_{\text{lokális üledék}}/PNEC_{\text{üledék}}$	$PEC_{\text{regionális üledék}}/PNEC_{\text{üledék}}$
$PEC_{\text{lokális talaj}}/PNEC_{\text{talaj}}$	$PEC_{\text{regionális mezg. talaj}}/PNEC_{\text{talaj}}$
$PEC_{\text{szennyvíztisztító}}/PNEC_{\text{mikroorganizmusok}}$	
$(0,5 \cdot PEC_{\text{lokális orális, hal}} + 0,5 \cdot PEC_{\text{regionális orális, hal}})/PNEC_{\text{orális}}$	
$(0,5 \cdot PEC_{\text{lokális orális, férgek}} + 0,5 \cdot PEC_{\text{regionális orális, férgek}})/PNEC_{\text{orális}}$	

* Megjegyzendő, hogy ezeket az arányokat az anyag életciklusának minden egyes szakaszában meg kell határozni.

4.2 A kockázat jellemzés általános előfeltételei

A kockázat jellemzési fázis általában az alábbi lépésekből áll (ld. 11. ábra):

- a PEC/PNEC arányok meghatározása a különböző környezetvédelmi célkitűzésekre; Majd a meghatározott PEC/PNEC arányoktól függően:
- annak megállapítása, hogy további információk vagy vizsgálatok alapján tovább pontosíthatók-e a fenti arányok;
- szükség esetén a további információk bekérése, vagy vizsgálatok előírása;
- a PEC/PNEC arány pontosítása.



11. ábra Az új és a meglévő anyagok kockázatbecslésének általános vázлата

Ezt az iteratív eljárást addig kell folytatni, amíg az alábbi következtetések valamelyekét le nem tudjuk vonni:

- jelenleg nincs szükség további vizsgálatokra vagy kockázatsökkentő intézkedésekre;
- kockázatsökkentő intézkedésekre van szükség.

A vízi és szárazföldi ökoszisztémák kockázat jellemzése során közvetlenül össze kell hasonlítani a PEC és a PNEC értékeket, feltéve, hogy a releváns adatok rendelkezésre állnak. Amennyiben a PEC/PNEC arány nagyobb, mint egy, akkor az anyag "aggodalomra ad okot" és további lépések megtételére van szükség.

Az atmoszférára az abiotikus hatások tekintetében csak kvalitatív értékelést lehet készíteni. Ha az eredmények arra utalnak, hogy valamilyen hatás előfordulhat, szakvéleményt kell kérni, vagy az anyaggal kapcsolatos problémát az illetékes nemzetközi szervezetek, pl. az ENSZ Környezetvédelmi Programja (UNEP), Ózonszökkentő Anyagokkal Kapcsolatos Projekt hatáskörébe kell utalni.

A csúcsragadozókra vonatkozó kockázat jellemzést a $PEC_{orális}$ és a $PNEC_{orális}$ összehasonlításával történik a 3.8 pont alatt megadott irányelvek szerint. Amennyiben a $PEC_{orális}/PNEC_{orális}$ arány nagyobb mint egy, és a $PEC_{orális}$ vagy a $PNEC_{orális}$ további pontosítása nem lehetséges vagy nem megoldható, meg kell fontolni a kockázatsökkentő intézkedések bevezetésének lehetőségét.

A szennyvíztisztítóban élő mikroorganizmusok kockázat jellemzése a $PEC_{szennyvíztisztító}$ és a $PNEC_{mikroorganizmusok}$ összehasonlításával történik. Ha e két érték aránya nagyobb, mint egy, akkor ez arra utal, hogy az anyag káros hatást gyakorolhat a szennyvíztisztítók működésére, és ilyen módon "aggodalomra ad okot".

Ha egynél nagyobb a PEC/PNEC arány, az illetékes hatóságoknak konzultálniuk kell az ipar képviselőivel annak meghatározására, hogy az expozícióval és/vagy az ökotoxicitással kapcsolatban az értékelés pontosítása érdekében beszerezhető-e még további adatok és információk.

Ezt követően el kell dönteni, hogy a további adatok és információk vagy vizsgálatok alapján pontosítható-e PEC/PNEC arány. A PEC/PNEC arány tényleges értékétől függően előfordulhatnak olyan esetek is, ahol - olyan PEC-et feltételezve, ami tovább nem pontosítható (pl. reprezentatív mérési adatok alapján meghatározott PEC-ek) - az értékelési tényezők csökkenését előidéző további vizsgálatok alapján sem csökkenthető a PEC/PNEC arány egy alá. Ilyen esetben a mérlegelni kell a kockázatsökkentés lehetőségét, és az erről hozott döntést az esetleges további vizsgálatok eredményei nem befolyásolják.

Amennyiben lehetőség van a kockázat jellemzés pontosítására, de az ehhez szükséges adatok nem állnak rendelkezésre, akkor további információkat kell bekérni és/vagy további vizsgálatokat kell elrendelni. Egyedi elbírálás alapján azt is el kell dönteni, hogy vajon mint a PEC, mint pedig a PNEC értéket pontosítani kell, vagy a kettő közül csak az egyiket. Azt is mérlegelni kell, hogy a további v. Azt is mérlegelni kell, hogy a további vizsgálatok eredményeképpen mely paramétert érint a legérzékenyebben a pontosítás. Ha az illetékes hatóság meghozza a további adatok szükségességéről szóló döntést, akkor ezt megfelelően indokolni kell és biztosítani kell a döntés átvilágíthatóságát is. A döntést ezen kívül feltétlenül a minimális költség és befektetett munka és a maximális eredmény elvére kell alapozni, tovább kerülni kell a szükségtelen állatkísérleteket. Ez az iteratív eljárás egyfajta elővigyázatosságot tükröz, mivel az adatok hiányosságait legrosszabb eseti feltételezésekkel vagy magas értékelési tényezőkkel kompenzáljuk.

Ezzel a megközelítéssel egyben takarékosan bánunk az erőforrásokkal és figyelembe vesszük a kísérleti állatok védelmét is, mivel csak az elengedhetetlenül szükséges vizsgálatokat végezzük el. Az 5.1 és 5.2 részben adunk további útmutatást azzal kapcsolatban, hogy mely vizsgálatokat végeztessünk el, továbbá, hogy hogyan használjuk fel a kapott eredményeket a PEC és/vagy a PNEC pontosításához. A 3. fejezetben (A QSAR-ok felhasználása) pedig a további vizsgálatok szükségességének megítéléséhez felhasználható (Q)SAR-okról, továbbá arról adunk tájékoztatást, hogy hogyan használhatók a (Q)SAR-ok a vizsgálati stratégiákhoz.

4.3 A meglévő anyagok kockázat jellemzése

Az 1488/94 számú Rendelet 5. cikkelye és 3. melléklete alapján a környezeti kockázatbecslés keretében a különböző hatásokra meghatározott PEC és PNEC értékeket össze kell hasonlítani egymással, ahogy azt már a korábbiakban is említettük. A 793/93 számú Rendelet szerint a kockázatok jellemzése alapján az alábbi három döntés valamelyikét kell meghozni:

- (i) További információkra és/vagy vizsgálatokra van szükség.
- (ii) Jelenleg nincs szükség további információkra és/vagy vizsgálatokra, és nincs szükség kockázatsökkentő intézkedésekre azokon túlmenően, amelyek eddig is érvényben voltak.
- (iii) Szükség van a kockázatok korlátozására; figyelembe kell venni a jelenleg alkalmazott kockázatsökkentő intézkedéseket.

A 13. ábrán bemutatott általános séma a meglévő anyagokkal kapcsolatos kockázat jellemzésre vonatkozik. A PEC és a PNEC értékek első összehasonlításánál feltételezzük, hogy az ipar képviselőivel a hatóság már felvette a kapcsolatot, és hogy az összes rendelkezésre álló adatot és információt felhasználták a PEC és PNEC értékek meghatározásához. Ha a kapott PEC/PNEC arány minden egyes környezeti elem esetében kisebb, vagy egyenlő eggyel, a (ii) számú döntést kell meghozni. Ha azonban a PEC/PNEC arány nagyobb, mint egy, akkor a referens feladata, annak eldöntése, hogy a veszély tisztázása érdekében szükség van-e további vizsgálatokra és/vagy tesztekre ((i) döntés) vagy kockázatsökkentő intézkedésekre ((iii) döntés). Ennek megítélésakor a PEC/PNEC arány mértékét, illetve néhány, az alábbiakban felsorolt tényezőt kell figyelembe venni:

- (i.) biológiai akkumulációs hajlamra utaló jelek;
- (ii.) az ökotoxicitási vizsgálatokban kapott toxicitási időgörbék alakja;
- (iii.) a toxicitási vizsgálatok eredményei alapján egyéb káros hatásokra utaló jelek, pl. "Mutagén", "Toxikus" vagy "Nagyon toxikus" klasszifikáció, vagy "Ártalmatlan" klasszifikáció plusz az R40-es ("irreverzibilis hatások lehetséges kockázata") vagy az R48-as ("komoly egészségügyi károsodást okozhat, ha az expozíció hosszabb ideig fennáll") R-mondat;
- (iv.) szerkezeti analógokkal kapcsolatos adatok.

Figyelembe kell venni továbbá az egyéb káros hatásokra utaló jeleket is, pl. osztályozás a következő R-mondatok valamelyikével társulva: R45 ("rákot okozhat"), R46 ("öröklődő genetikai károsodást okozhat"), R47 ("születési károsodásokat okozhat") vagy R60 ("káros hatással lehet a termékenységre").

Ezek a tényezők különösen azoknál az anyagoknál fontosak, ahol "standard" kockázatbecslésre nincs lehetőség, például amiatt, hogy az általában használt modellek a vizsgált anyagnál nem alkalmazhatók, vagy az olyan anyagok esetében, ahol a standard adatsorból nem derülnek ki az anyag tulajdonságaival kapcsolatos szükséges információk (például az erősen hidrofób anyagok a rövid időtartamú vizsgálatokban nem mutatnak toxicitást).

Másodlagos mérgezés esetében egy specifikus kockázat jellemzést kell készíteni. A $PEC_{orális}$ -t és a $PNEC_{orális}$ -t a 3.8. pont alatt megadott módszerekkel kell kiszámítani vagy a rendelkezésre álló mért, vagy az oktanol-víz megoszlási hányadosból számítással meghatározott BCF segítségével. A $PEC_{orális}$ kiszámításához (50-50%-ban) a lokális és a regionális PEC-et is felhasználjuk.

4.4 Az új anyagok kockázat jellemzése

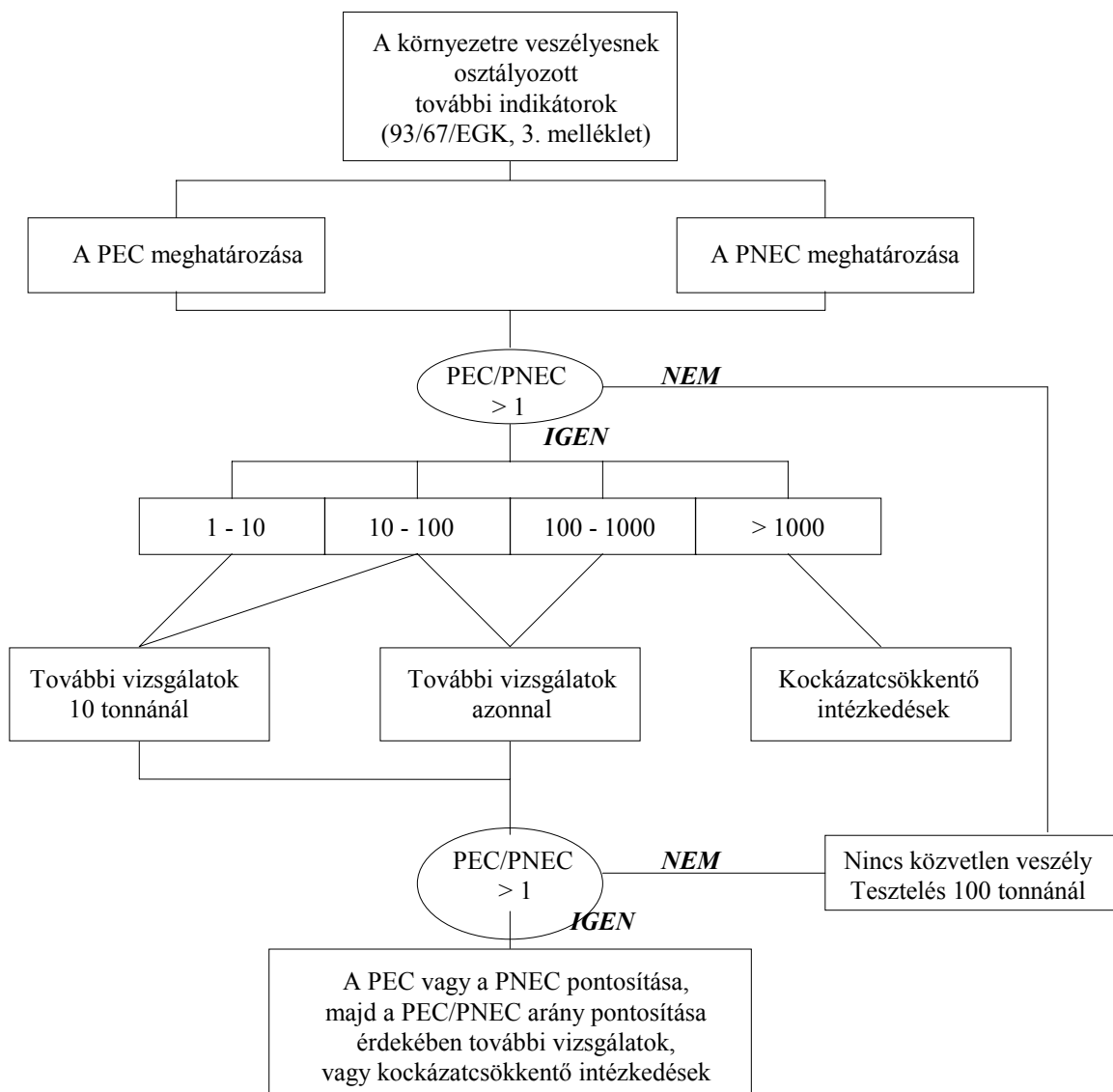
A 93/67/EGK számú Irányelv III. melléklete és 5. cikkelye keretében végzett kockázat jellemzés során az előrejelzett kockázat függvényében ugyancsak el kell végezni a PEC/PNEC arányok iteratív felülvizsgálatát és pontosítását. Ezen kívül a 67/548/EGK számú Irányelv 7.2 cikkelye szerint a ki kell alakítani a kapcsolatot a további vizsgálatokat igénylő tonna-küszöbértékekkel. Amennyiben a kapott PEC/PNEC arány kisebb vagy egyenlő eggyel, akkor az Irányelv 3.4 (i) cikkelyében megfogalmazott következtetést kell levonni:

- A kérdéses anyag közvetlenül nem veszélyes és nincs szükség újabb vizsgálatra mindaddig, amíg a 67/548/EGK számú Irányelv 7(2), 8(3), 8(4) és 14(1) cikkelyei alapján újabb információk nem állnak rendelkezésre.

Ha a PEC/PNEC arány nagyobb, mint egy, akkor a hatóságnak kell eldöntenie, hogy a 3.4 (ii), 3.4 (iii) vagy a 3.4 (iv) következtetést vonja le:

- A kérdéses anyag aggodalomra ad okot és az illetékes hatóságnak kell meghatározni, hogy az értékelés pontosításához milyen további információkra van szükség, és el is rendeli ezen információk benyújtását amikor a piacra dobott mennyiség eléri a 67/548/EGK számú Irányelv 7(2), 8(3), és 8(4) cikkelyeiben megadott következő tonna-küszöbértéket;
- A kérdéses anyag aggodalomra ad okot és a szükséges további információkat azonnal be kell kérni.
- A kérdéses anyag aggodalomra ad okot és az illetékes hatóságnak azonnali hatállyal ajánlásokat kell tennie a kockázatok csökkentésére.

A vízi környezet vizsgálatához és értékeléséhez alkalmazott eljárásokkal kapcsolatos meglehetősen széles tapasztalatok fényében a vízi környezetre vonatkozólag sikerült kidolgozni egy viszonylag jól strukturált döntési sémát, amit a 12. ábrán mutatunk be.



12. ábra Döntési séma az új anyagok kockázatának jellemzéséhez a vízi szervezetekre vonatkozóan

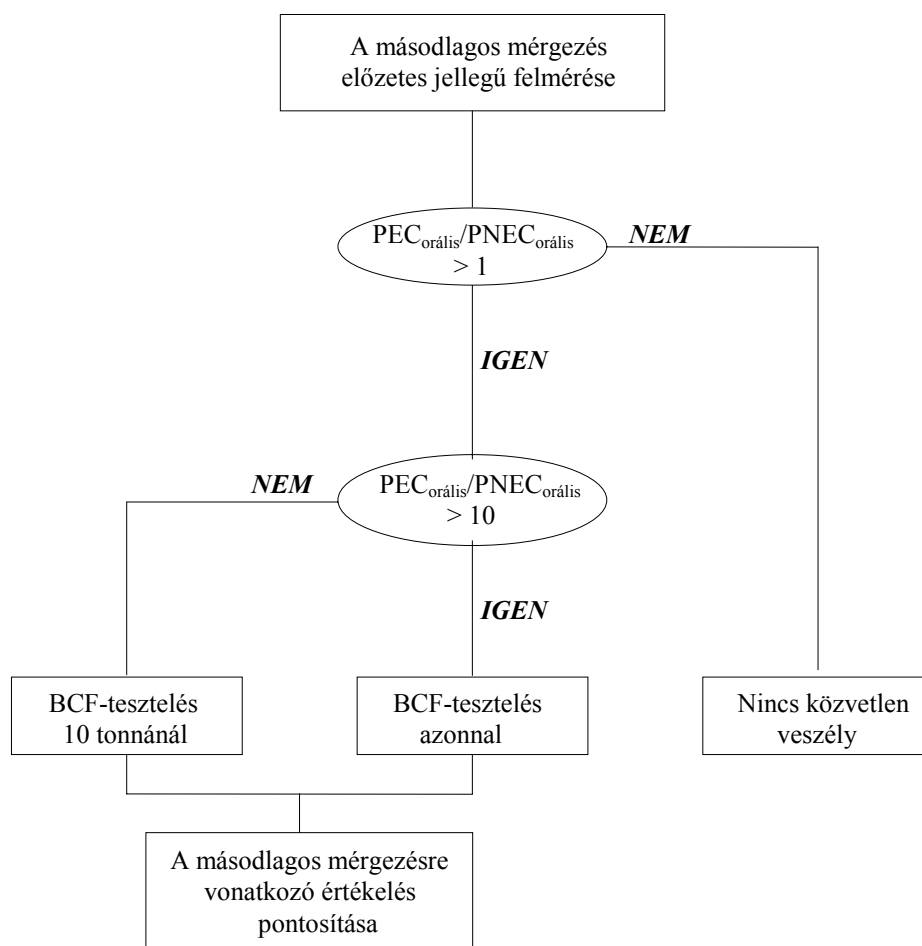
Feltételezzük, hogy a sémába bekerülő anyagok estében a 67/548/EGK számú Irányelv VII.A mellékletében megadott adatokkal (alapszintű műszaki dossziében szereplő) egyenértékű adatok rendelkezésre állnak. A vízi környezetre vonatkozó PEC és PNEC meghatározásához az alapszintű műszaki dossziében szereplő adatokat és információkat használjuk fel. A döntési séma során ezen kívül azt is feltesszük, hogy olyan esetekben, ahol a PEC/PNEC nagyobb, mint egy, a hatóság megtárgyalta ezt a bejelentővel, és hogy az értékeket, különösen a PEC-et, a bejelentő által szolgáltatott további adatok és információ alapján már megfelelően pontosították. A 14. ábrán feltüntetett első PEC/PNEC arány tehát a bejelentővel folytatott tárgyalások alapján módosított érték.

A PEC/PNEC arány értékétől függően, ki kell választani a 93/67/EGK számú Irányelv 3.4 cikkelye alatt megadott alternatív következtetések egyikét. Ha PEC/PNEC arány 10 és 100 között van, akkor vagy azonnal kell a további vizsgálatokat előírni, vagy évi 10 tonna termelési szint felett. E döntés meghozatalakor többek között az alábbi tényezőket kell figyelembe venni:

- (i) biológiai akkumulációs hajlamra utaló jelek;
- (ii) az ökotoxicitási vizsgálatokban kapott toxicitási időgörbék alakja;
- (iii) molekulaszervezeti analógokkal kapcsolatos adatok.

A toxicitási vizsgálatok eredményei alapján egyéb káros hatásokra utaló jelek, pl. 'Mutagén', 'Toxikus' vagy 'Nagyon toxikus' osztályozás, vagy 'Ártalmas' osztályozás plusz az R40-es ('irreverzibilis hatások lehetséges kockázata') vagy az R48-as ('komoly egészségügyi károsodást okozhat, ha az expozíció hosszabb ideig fennáll') R-mondat" ahhoz a döntéshez lehet felhasználni, hogy az anyag beléphet-e a döntési sémába, avagy sem; vagyis hogy kell-e kockázat jellemzést készíteni. Ezt a tényezőt nem lehet figyelembe venni a további vizsgálatok szükségességének elbírálásához.

Az Irányelvben megadott alapvizsgálati csomag (VII.A melléklet) a szárazföldi környezetre és az atmoszférára vonatkozólag viszonylag kevés adatot generál: további, de még mindig korlátozott mennyiségű információk az 1. és a 2. szint (VIII. melléklet) elérése után várhatók. Ahol egy anyag környezeti kockázatbecslése során e két környezeti elem bármelyike relevánssá válik, az 5. részben ismertetett útmutatásnak megfelelően egyedi elbírálást követően további vizsgálatokat kell végezni, és ezzel párhuzamosan pontosítani kell a PEC/PNEC arányt is. A csúcsragadozókra vonatkozó kockázat jellemzéshez speciális értékelési sémát kell alkalmazni, amelyet a 13. ábrán mutatunk be. Ebben az esetben a $PEC_{orális}$ számításához a vízre vonatkozó $PEC_{lokális}$ éves átlagértékét kell alkalmazni. A másodlagos mérgezés számított BCF-re alapozott ideiglenes jellegű értékelésének eredményei alapján (ld. 3.8) kell eldönteni, hogy azonnal vagy a 10 t/év/gyártó termelési volumen elérésekor szükség van-e BCF-mérésekre. Megjegyezendő, hogy a BCF-teszt 1. szintű teszt. A BCF-tesztek eredményeit a csúcsragadozókra vonatkozó kockázat jellemzés pontosításához használhatjuk fel. Amennyiben a $PEC_{orális}$ és a $PNEC_{orális}$ aránya még mindig nagyobb, mint egy, akkor a másodlagos mérgezést kritikus tényezőnek kell tekinteni a haleyőkre vonatkozólag. Ez alapján viszont még specifikusabb vizsgálatokra lehet szükség, például hosszú időtartamú madártáplálkozási vizsgálatokra, amelyek segítségével jobb eredményeket kaphatunk.



13. ábra *Döntési séma az új anyagokkal kapcsolatos másodlagos mérgezés kockázat jellemzéséhez*

4.2 A kockázatok jellemzése, ha a PEC és/vagy a PNEC nem számolható

Habár a kvantitatív PEC/PNEC arányok használata a preferált eljárás a környezeti kockázatbecslés során, előfordulhat, hogy a PEC-et vagy a PNEC-et nem lehet megfelelően meghatározni. Ilyen esetben a kockázat jellemzésben kvalitatív módon kell értékelni azt a valószínűséget, hogy az expozíció várható körülményei között egy adott hatás előfordul-e (ld. 93/67/EGK számú Irányelv, III. melléklet, 4.2 bekezdés).

Amennyiben a kvalitatív expozícióbecslés azt mutatja, hogy egyik környezeti elem esetében sem valószínű a szennyezés, az anyagot automatikusan félre kell tenni, mivel nem jelent közvetlen veszélyt. Ha azonban a kvalitatív expozícióbecslés alapján a környezeti expozíció valószínűsíthető, a kockázat jellemzésnél figyelembe kell venni a 4.4 és 4.3 pontok alatt megadott speciális tényezőket.

Attól függően, hogy mely és összesen hány tényező jelent problémát, el kell dönteni, hogy a 93/67/EGK számú Irányelv 3.4 cikkelyében vagy a 1488/94 számú Rendelet 5. cikkelyében megadott alternatívák közül melyiket kell elfogadni.

Bizonyos anyagoknál előfordulhat, hogy a $PEC_{v\acute{z}}/PNEC_{v\acute{z}}$ arány alapján nem lehet teljes értékű kvantitatív kockázatbecslést végezni, mivel a $PNEC_{v\acute{z}}$ nem számolható ki. Ez olyankor fordulhat elő, ha a rövid időtartamú vizsgálat semmilyen hatást nem mutatnak ki. A rövid idejű toxicitás hiánya azonban nem jelenti feltétlenül azt, hogy az anyag hosszú távon nem toxikus, különösen akkor, ha vízben rosszul oldódik és/vagy erősen hidrofób. Az ilyen anyagok esetében a vízben mérhető koncentráció (az oldékonysági határ alatt) még lehet, hogy nem elegendő ahhoz, hogy rövid idejű toxicitást okozzon, mivel a víz és az élő szervezet közötti steady-state állapot kialakulása hosszabb ideig tart, mint maga a vizsgálat.

Ilyen anyagok esetében tehát kvalitatív kockázatbecslést kell készíteni annak eldöntéséhez, hogy szükség van-e további hosszú időtartamú vizsgálatokra is. A felmérés során teljes mértékben figyelembe kell venni az expozíciós szintet (szükség szerint a $PEC_{lok\acute{a}lis}$ vagy a $PEC_{region\acute{a}lis}$), továbbá annak valószínűségét, hogy a rövid idejű hatások hiányának ellenére hosszú idejű hatások előfordulhatnak. Így tehát különösen a biológiai akkumulációra hajlamos ($\log Kow > 3$) és apoláris szerves anyagok esetében lehet igen nagy szükség további hosszú időtartamú vizsgálatokra. Az ionképző vagy felületaktív anyagok esetében az egyéb fizikai-kémiai tulajdonságok, pl. K_d alapján meghatározott küszöbértéknek elégnek kell lennie a hosszú időtartamú vizsgálat előírásához.

A fentiek figyelembe vételével a hosszú időtartamú vizsgálatokat akkor kell azonnali hatállyal előírni, ha az anyag $\log Kow$ értéke > 3 (vagy a $BCF > 100$), és a $PEC_{lok\acute{a}lis}$ vagy a $PEC_{region\acute{a}lis} >$ a vízdékonyság 1/100-ad részénél.

A vízdékonyságot lehetőleg a vízi toxicitási tesztekben megfigyelt oldhatóság alapján kell meghatározni, nem a desztillált vízben mérhető oldódás alapján (feltéve, hogy ezt az oldékonyságot a tesztoldat centrifugálását és (0,45 μm -es filteren történő) szűrését követően határozzák meg). Ahol a $\log Kow$ nem tekinthető a biológiai koncentráció megfelelő indikátorának, vagy ahol egyéb jelek utalnak a biológiai koncentráció lehetőségére (ld. 3.8 pont), ott egyedi alapon értékelést kell végezni a potenciális hosszú idejű hatásokra vonatkozóan.

5 Vizsgálati stratégiák

5.1 A PEC értékek pontosítása

A PEC pontosítása érdekében a gyártással és a felhasználással kapcsolatos részletes adatoktól eltekintve, a további adatok alapján pontosabban tudjuk meghatározni az eliminációs folyamatokat az egyes környezeti elemekben vagy a szennyvíztisztítóknál. Az elimináció pontos mértékét a szennyvíztisztítóknál a befolyó tisztítatlan és a kifolyó tisztított szennyvízre jellemző koncentrációk mérésével, vagy a degradációs viselkedés vizsgálatával lehet meghatározni. Az alábbiakban ismertetjük az egyes környezeti elemekre vonatkozó degradációs tesztelési stratégiákat. Hasonló módon elő lehet írni a BCF kísérletes meghatározását is, hogy ezáltal pontosítani tudjuk a másodlagos mérgezésre vonatkozó $PNEC_{\text{orális}}$ -t (ld. 3.8. pont).

A PEC pontosításának egy másik módja, ha egyszerű méréseket végzünk (például a kibocsátási pontoknál vagy előrejelzett legrosszabb eseti környezetekben). Hosszú távú mérési programokat csak akkor szabad elindítani:

- ha "határeseti" kockázatbecslést végzünk, ahol az azonnali kockázatcsökkentés nem megalapozott;
- ha ezzel például ellenőrizni tudjuk a kockázatcsökkentő intézkedések hatékonyságát; figyelembe véve az egyéb EU-rendelkezők alapján elindított mérési programokat is.

5.1.1 A vizek

Az alábbiakban ismertetjük a vízi környezetre vonatkozó biológiai degradációs vizsgálati stratégiát. Minden egyes lépésben mérlegelni kell azonban azt is, hogy a további abiotikus vizsgálatok, pl. közvetlen vagy közvetett vízi fotolízis vagy teljes adszorpció/deszorpció vizsgálat segítségével pontosítható-e még jobban a PEC (lokális vagy regionális).

Az alábbi két szituációt kell megkülönböztetni:

PEC/PNEC > 1 és az anyag biológiailag gyorsan bontható

A további biotikus tesztelés valószínűleg kevésbé befolyásolja a PEC értékét, kivéve ha a gyártó vagy az importőr érdemesnek tartja egy szimulációs tesztet elvégzését, amelynek eredményei alapján az eliminációs százalék nagyobbak adódna annál, mint amit a biológiailag gyorsan bontható anyagok esetében feltételezünk.

PEC/PNEC > 1 és az anyag biológiai nem bontható gyorsan

Amennyiben az anyag a gyors tesztben használt koncentráció alatt gátló hatású, akkor a vizsgálatot egy olyan koncentrációnál kell megismételni, ahol az inhibitor hatás nem jelentkezik. Ez csak akkor segíthet a $PEC_{\text{lokális}}$ pontosításában, ha a szennyvíztisztítóra az előrejelzett koncentráció az inhibíciós küszöbérték alatt van.

Valószínű azonban, hogy az eredmények felhasználhatók a $PEC_{\text{regionális}}$ pontosításához. Ha a gyors biológiai degradációs tesztek eredményei arra utalnak, hogy az anyag esetleg biológiailag inherensen bontható, akkor mérlegelni kell a specifikus demonstrációs tesztek (pl. OECD 302B (Zahn-Wellens) vagy 302C (MITI II.)) elvégzésének lehetőségét is. Egy ilyen jellegű vizsgálat előírása előtt azonban részletesen meg kell vizsgálni azt is, hogy vajon a tesztek eredményei alapján várható-e a PEC pontosítása, és ha igen, akkor a pontosítás nyomán változhat-e a kockázat jellemzés általános végeredménye. A $PEC_{\text{lokális}}$ pontosítása például csak akkor várható, ha az inherens tesztek eredményei a 2.3.7 pont alatt megadott kritériumoknak megfelelő degradációt mutatják.

A szimulációs vizsgálatok előtt érdemes lehet elvégezni a Zahn-Wellens tesztet vagy valamilyen hasonló inherens tesztet, hogy ezzel előzetes képet alkothassunk az anyag várható degradációs viselkedéséről. Ki kell emelni, hogy egy inherens teszt nem helyettesítheti a szimulációs teszteket, de segítséget nyújthat a további vizsgálatok megtervezéséhez. Az inherens tesztek tehát opcionálisak és általában nem ajánlott az elvégzésük, ha az alkalmazott magas koncentrációk miatt nehézségekbe ütközik a tesztek kivitelezése (pl. a fellépő toxicitás, illetve a korlátozott oldékonyság miatt).

Az inherens tesztek elvégzését tehát viszonylag nem könnyű megfelelően megindokolni, úgyhogy a degradációs folyamatok kinetikájáról releváns információkat szolgáltató szimulációs tesztek elvégzését kell inkább megfontolás tárgyává tenni. Jelenleg még nincs nemzetközileg elfogadott standard módszer, úgyhogy ideiglenes érvényű protokollokat kell alkalmazni. Az eredmények azután közvetlenül felhasználhatók a modellezett rendszerre vonatkozó PEC számításához. Oda kell figyelni azonban arra is, hogy a vizsgálatokban használt körülmények és koncentrációk megfeleljenek az adott környezeti elemekben (a szennyvíztisztítóknak, a felszíni vizekben, az üledékben és/vagy a talajban) várható valóságos körülményeknek.

5.1.2 A talaj

Amennyiben a talajra vonatkozó PEC/PNEC arány nagyobb, mint egy, a további degradációs vizsgálatok sok esetben pontosíthatják az értékelést:

- Az szennyvíziszap elhelyezéssel a talajba bekerülő anyag mennyiségének becslése a vízi környezetre részletesebb degradációs vagy adszorpciós/deszorpciós vizsgálatok alapján pontosítható;
- Az iszapban való anaerob degradáció lehetőségének vizsgálata is pontosíthatja az eredményeket. Az anaerob biológiai degradáció vizsgálatára van már egy előzetes standard (ISO Draft 11734). Ez a szűrő módszer a szennyvíztisztítók emésztőjében történő anaerob biológiai degradáció lehetőségét vizsgálja. A jövőben az eredmények esetleg felhasználhatók lesznek az üledékben folyó anaerob biológiai degradáció becslésére is. Az anaerob degradációs és inhibíciós tesztek azonban már megfelelően kidolgozták ahhoz, hogy a kockázat jellemzés során figyelembe vehetők legyenek;

- Az talajba bekerülő anyagok további sorsának pontosabb előrejelzése megoldható [gyors, inherens vagy szimulációs] tesztekkel is, feltéve hogy a megfelelő módszerek rendelkezésre állnak és az eredmények befolyásolni tudják a kockázat jellemzés kimenetelét;
- Mérlegelni kell abiotikus talajvizsgálatok, például a (közvetlen) fotolízis teszt, vagy adszorpciós/deszorpciós vizsgálat, elvégzésének lehetőségét is.

5.1.1 A léghő

Az atmoszféra esetében a közvetlen fotolitikus degradáció és az egyéb atmoszférában lejátszódó fotolitikus reakciók kísérletes vizsgálata meglehetősen körülményes, tehát csak olyankor szabad előírni, ha számos jel utal arra, hogy az atmoszférikus PEC komolyabb káros hatásokat okozhat. Ehelyett elsősorban QSAR módszereket érdemes alkalmazni.

5.2 A PNEC értékek pontosítása: stratégia a további vizsgálatokhoz

5.2.1 Bevezető

A vízi környezetre vonatkozólag kidolgozásra került egy részletes stratégia a PNEC pontosításához szükséges további vizsgálatokhoz. A vízi környezetre megadotthoz hasonlóan a szárazföldi környezetre és a másodlagos mérgezésre is ismertetjük a további vizsgálatokkal kapcsolatos döntések meghozatalához alkalmazandó irányelveket (az utóbbiakra vonatkozó útmutatás azonban kevésbé specifikus). Az előírandó további vizsgálatok alapvetően hosszú időtartamú tesztek, mivel a hosszú idejű ökotoxicitási adatok alapján kiszámolt PNEC-ek megbízhatóbbak, mint a rövid idejű adatokra alapozott értékek. A további vizsgálatok során kisebb értékelési tényezőt kell alkalmazni, mivel kisebb a tesztek bizonytalansága. A stratégiák részletesebb ismertetése a hatásértékelési fejezetben (a 3. pont alatt), a megfelelő környezeti elemeknél található.

A $PNEC_{\text{víz}}$ a vízi környezet esetében vagy a legérzékenyebb fajon, vagy ha már van egy vagy két hosszú idejű NOEC, akkor egy másik/harmadik trófikus szinthez tartozó fajon elvégzett hosszú időtartamú vizsgálatokkal pontosítható. A döntéshozatalt (Q)SAR eredmények is segíthetik. A vizsgálati stratégiát az 5.2.2 pont alatt ismertetjük.

A szárazföldi környezetre vonatkozó kockázatbecslési koncepcióba egy olyan stratégia is beletartozik, amelynek során rövid időtartamú toxicitás teszteket végeznek a szárazföldi organizmusokon, mivel ezek nem szerepelnek az alapszintű műszaki dossziében. Rövid időtartamú vizsgálatokra akkor van szükség, ha az egyensúlyi megoszlás alapján elkészített kockázat jellemzés azt mutatja, hogy a talaj esetében potenciális kockázatokkal kell számolni. Ha szükséges, a $PNEC_{\text{talaj}}$ pontosításához hosszú időtartamú vizsgálatokat is elő lehet írni, ehhez azonban szakvéleményt kell kérni (ld. 5.2.3).

Bár a másodlagos mérgezés esetében a $PEC_{orális}/PNEC_{orális}$ arány pontosításakor elsősorban a $PEC_{orális}$ -t pontosítjuk, bizonyos esetekben megfelelőbb, ha a hosszú időtartamú vagy krónikus toxicitási vizsgálatok alapján a $PNEC_{orális}$ -t pontosítjuk. Hogy ténylegesen milyen vizsgálatokat kell elvégezni azt mindig az adott esetre vonatkozóan kell elbírálni.

Mivel sem az üledék, sem az atmoszféra esetében jelenleg még nem állnak rendelkezésre nemzetközileg elfogadott, standardizált vizsgálati és hatásértékelési módszerek, ezért vizsgálati stratégiát sem tudunk javasolni. Ha arra a következtetésre jutunk, hogy e két környezeti elem vonatkozásában kockázatokkal kell számolni, a további vizsgálatokról szóló döntést minden esetben egyedileg kell meghozni.

5.2.2 A vizek

5.2.2.1 Bevezető

Amennyiben a $PEC_{víz}/PNEC_{víz}$ arány nagyobb, mint egy, akkor vagy az expozíciós adatokat kell pontosítani, vagy további vizsgálatokat kell elrendelni. Előfordulhat, hogy a további vizsgálatok egy részét a 67/548/EGK számú Irányelv V. mellékletében megadott módszerek, vagy az OECD Tesztelési Irányelvek (vagy ezzel egyenértékű módszerek) alapján kell elvégezni. csak olyan vizsgálatokat szabad előírni, amelyek alapján a $PNEC_{víz}$ esetleg pontosítható. Bizonyos esetekben érdemes lehet megfontolni az egyetlen fajon végzett vizsgálatoktól eltérően érzékeny és ökoszisztéma-specifikus paraméterek meghatározására irányuló mezokozmosz vagy (fél-)terep vizsgálatok elvégzését is.

A hatásértékelés pontosítása során vigyázni kell arra, hogy a további víztoxikológiai teszteknel a fajok érzékenységét megfelelően figyelembe vegyünk. Habár a választható vizsgálatok száma szükségképpen korlátozott, mindenképpen törekedni kell arra, hogy várható expozíciós körülményeket és kémiai reakciókat tükröző vizsgálati feltételeket teremtsünk.

A további vizsgálatok szükségességének megítélésakor az alábbi irányelveket kell követni:

- A további vizsgálatok célja a $PNEC_{víz}$ pontosítása, aminek következtében a $PEC_{víz}/PNEC_{víz}$ arány is pontosítható.
- Ez a legfontosabb tényező a vizsgálatok szükségességének megítélésében. A további vizsgálatok eredményeképpen pontosítani kell tudni a becsült $PNEC_{víz}$ -t, amely megbízhatóbb, ha hosszú időtartamú ökotoxicitási adatok alapján kerül meghatározásra;
- A hosszú időtartamú vizsgálatok során általában azt a fajt kell újra vizsgálni, amelyik a rövid időtartamú tesztek során a legalacsonyabb $L(E)C_{50}$ -et adta. A $L(E)C_{50}$ értékek közötti különbségeket egyszerű összehasonlítással lehet meghatározni: valamely értéket akkor tartunk szignifikánsan alacsonyabbnak egy másiknál, ha a nagyobb érték meghaladja a kisebb érték tízszeresét. Az egyes rendszertani csoportok relatív érzékenységei tekintetében azonban ezek a definíciók csak általános irányelvek, úgyhogy adott esetben szakértői véleményt kell kérni ezek elbírálására;

- Általában nem szoktak előírni további vizsgálatokat olyan fajok esetében, ahol a rövid időtartamú toxicitás vizsgálatok negatív eredménnyel jártak ($(L(E)C_{50} > 100 \text{ mg/l})$). Ez azonban nem feltétlenül vonatkozik azokra a rosszul oldódó anyagokra (vízoldékonyság $< 1 \text{ mg/l}$), ahol a rövid időtartamú tesztek ugyancsak nem mutattak ki toxicitást (ld. 4.5). Egyéb esetekben szakvéleményt kell kérni annak eldöntésére, hogy adott fajnál szükség van-e további vizsgálatokra.

A biológiai akkumulációra (bizonyítottan vagy feltételezetten) hajlamos anyagoknál figyelembe kell venni olyan hosszú idejű vagy késleltetett hatások jelentkezésének lehetőségét is, amelyek a rövid időtartamú, vagy a biológiai akkumulációra nem hajlamos anyagokhoz alkalmazott vizsgálatokban esetleg nem kimutathatók. Ez különösen fontos lehet a hosszú időtartamú hal és Daphnia toxicitási tesztek szükségességének elbírálásakor, mivel a halak és a Daphnia fejlődése során az életsiklus korai szakaszában a lipid frakció aránya viszonylag magas, ezért a biológiai akkumuláció számos érzékeny életszakaszt érinthet. Vigyázni kell tehát, hogy olyan hosszú időtartamú vizsgálatot válasszunk, amelynek során biztosítható a vizsgált fajban a steady-state koncentráció kialakulása és a vizsgálat időtartama megfelelően hosszú ahhoz, hogy a biológiai akkumulációs hatásokat detektálni lehessen. Ilyen anyagok esetében általában a halra gyakorolt toxikus hatások vizsgálatára általában a hal korai életszakasz (FELS - Fish Early Life Stage) tesztet szokták alkalmazni, de ($\log Kow < 5$ estén) szóba jöhet a 28 napos növekedési teszt vagy ($\log Kow < 4$ estén) a pete és ikra teszt is.

A hosszú időtartamú toxicitási tesztek eredményei alapján azonban nem zárható ki a késleltetett hatások, tehát ha ilyen gyanú felmerül, mérlegelni kell a teljes életsiklus vizsgálat elvégzésének lehetőségét is. A vizsgálat elvégezhető halakra - ilyenkor az US EPA 670/4-73-001 vagy 600/9-78-010 standardjai az irányadók -, és/vagy Daphniára is (a Daphnia esetében azonban még nem létezik standard teljes életsiklus teszt). Az ilyen vizsgálatok elvégzése nem általános, úgyhogy csak kivételes körülmények esetén szabad előírni őket.

Még ilyen összetett információk megléte esetén sem zárható ki az ökoszisztémára gyakorolt késleltetett hatások lehetősége, mivel a fenti vizsgálatok során sem tudunk minden egyes ökotoxikológiai paramétert meghatározni (pl. többgenerációs hatások, vagy viselkedési zavarok, stb.), továbbá azt is figyelembe kell venni, hogy laboratóriumi szinten aligha lehet a biológiai feldúsulási ("biomagnifikációs") hatásokat reprodukálni.

5.2.2.2 A rendelkezésre álló hosszú idejű vizsgálatok

A hatásértékelés pontosítása során általában korlátozott mennyiségben állnak rendelkezésre hosszú időtartamú vizsgálatok eredményei, mégis fontos azonban, hogy a felesleges ismétlések elkerülése, és a maximális információ kinyerése érdekében megfelelő módon válasszuk meg a további vizsgálatokat.

Hosszú időtartamú halakon végzett vizsgálatok

Korai életszakasz teszt (FELS) (OECD 210)

Ezt a módszert tekintjük a legérzékenyebb haltesztnek, ami a pete megtermékenyítésétől a kikelésen és a korai növekedési fázisokon át a hal életciklusának számos szakaszát felöleli. Ez a vizsgálat az érzékeny életszakaszok nagy részét lefedi, és a teljes életciklus teszt mellett jelenleg ez az egyetlen módszer, amely alkalmas a biológiai akkumuláció nyomán keletkező potenciális károsodások vizsgálatára. Ez azonban még mindig egy hosszú időtartamú teszt, a szivárványos pisztráng (*Oncorhynchus mykiss*) esetében tipikusan a kikeléstől számított 60 napig, a melegvízben élő halak esetében pedig a kikeléstől számított körülbelül 30 napig tart, következésképpen a rendelkezésre álló tesztek közül ez a legköltésesebb.

Pete és ikra teszt (irányelv tervezet)²

Ebben a tesztben a megtermékenyüléstől az ikraállapot végéig tartó érzékeny életszakaszt vizsgáljuk. Ez a teszt jóval rövidebb, és így jóval olcsóbb is, mint a FELS-teszt, de nyilván kevésbé részletes. A módszert jelenleg is kidolgozás alatt áll az OECD-nél, és csak tervezet formájában hozzáférhető. Ez a teszt az olyan anyagok esetében jelenthet alternatívát a FELS-sel szemben, amelyeknél a $\log Kow < 4$. Az OECD-nél folyó munka végeztével várhatóan meghatározásra kerülnek majd azon feltételek is, amelyek esetén a FELS helyett ezt a tesztet lehet alkalmazni.

28 napos növekedési teszt (irányelv tervezet)²

Ebben a tesztben meghatározott időszakban mérjük a fiatal halak növekedését, amelyet a halakra gyakorolt toxicitás tekintetében igen érzékeny indikátornak tartanak. Bár a teszt időtartama nem elegendő a hal összes érzékeny életszakaszának vizsgálatához, mégis megfelelő alternatívát jelenthet a FELS helyett, ha az anyag $\log Kow$ értéke < 5 . Ez a módszer jelenleg is kidolgozás alatt áll az OECD-nél, tehát egyelőre csak tervezet formájában hozzáférhető.

14 napos meghosszabbított toxicitási teszt halra (OECD 204)

Ez a teszt nem tekinthető hosszú időtartamú toxicitási vizsgálatnak, mivel a hal életciklusában nem érzékeny szakaszt vizsgál. Ez tulajdonképpen meghosszabbított akut toxicitási vizsgálat, ahol a legfontosabb vizsgált paraméter a mortalitás. A teszt során azonban a szubletális hatásokat is vizsgálják, és ezek hiányában meg lehet határozni a NOEC-et. Nem szabad előírni ezt a tesztet, ha hosszú időtartamú vizsgálatra van szükség. A 14 napos vizsgálat csak akkor rendelhető el, ha a potenciális rövid idejű hatásokról kell további információkat begyűjteni.

² Ezek a tesztek a vizsgálati stratégia keretén belül csak a megadott korlátok között alkalmazhatók. Ezek azonban egyelőre még csak irányelv tervezetek, és még nem készültek el hozzájuk az alkalmazást indokló körülmények precíz megadásai.

Hosszú időtartamú Daphnia vizsgálatok

14 napos szaporodási teszt Daphniára (OECD 202, II. rész)

Ebben a tesztben egyrészt a reprodukciót, másrészt a szülők immobilitását és mortalitását mérjük. A vizsgálat legtöbbször (és lehetőleg) 21 napig tart. Habár ez a teszt nem fedi le a Daphnia teljes életciklusát, mindenképpen felöleli a reprodukció érzékeny szakaszát, így tehát érzékeny hosszú időtartamú vizsgálatnak minősül. A teszttel kapcsolatban azonban számos probléma is felmerült (pl. a reprodukálhatóság tekintetében), úgyhogy jelenleg éppen módosítás alatt áll.

21 napos szaporodási teszt Daphniára (javított OECD 202, II. rész, tervezet)

Ez a teszt az előző módszer továbbfejlesztett változata, ami a megbízhatóság és a reprodukálhatóság javítása érdekében a korábbihoz képest számos fontos módosítást tartalmaz. A végső próbatesztek elvégzése után várhatóan ez váltja majd fel a korábbi OECD irányelvet.

Alga vizsgálatok:

Alga toxicitási teszt (EEC C3)

Az alga növekedésgátlási tesztben standard megvilágítás, hőmérséklet és tápanyagellátás mellett mérjük az algák növekedésére gyakorolt gátló hatásokat. A teszt eredményeképpen egy EC_{50} érték kerül meghatározásra, ami megfelel a rövid idejű $L(E)C_{50}$ -nek. Az E_rC_{50} és az E_bC_{50} közül az alacsonyabb értéket kell felhasználni (az E_rC_{50} a növekedési ráta, az E_bC_{50} pedig a biomassza alapján megállapított érték, ld. Nyholm, 1985 és 1989). Ez nem csak egyszerűen egy többgenerációs teszt, hanem a szubletális hatások és a populáció növekedés csökkenésének kimutatására is alkalmas, tehát valódi krónikus vizsgálatnak tekinthető. Az ebből meghatározott NOEC felhasználható a vizsgálati stratégiában.

5.2.2.3 Döntési táblázat a további vizsgálatokhoz

A további vizsgálatok szükségességéhez alkalmazott döntési folyamat vázolata a 18. táblázatban látható. A döntési folyamat során figyelembe kell venni az alapvető szempontokat, továbbá a józan ész diktálta szabályokat is be kell tartani, amikor az erősen általánosított irányelveket az adott helyzetre próbáljuk alkalmazni. A meghozott döntés a fajok érzékenységétől függően is eltérő lehet. Akárhogyan is, az alapszintű műszaki dossziében megadott alga tesztet első közelítésben rövid időtartamú vizsgálatnak kell tekinteni, és az ebből kapott EC_{50} alapján kell a $PNEC_{vz}$ -et meghatározni. Az alga vizsgálat azonban valójában többgenerációs teszt, így tehát ha vannak más forrásból származó hosszú idejű NOEC-adatok is, a pontosított értékelésben az alga NOEC-et is hosszú idejű NOEC-nek lehet tekinteni. Általánosságban elmondható, hogy az alga NOEC-et más adatok támogatása nélkül nem szokták ilyen célra felhasználni.

A vizsgálati stratégián belül a halakat és a Daphnia fajokat érintő hosszú idejű toxicitás becsléséhez az általános hatásmechanizmussal jellemzett anyagoknál QSAR-ok is alkalmazhatók, amelyekről részletesebb ismertetés a 3. fejezetben ("A (Q)SAR-ok felhasználása") találunk.

18. táblázat. Döntési táblázat a víztoxikológiai vizsgálatokhoz, ha a legalacsonyabb $L(E)C_{50}$ -re alkalmazott értékelési tényezővel a teljeskörű műszaki dosszié ($TAS^{(a)}$) eredményei alapján a $PEC/PNEC$ arány > 1 .

Eltérések az alapszintű műszaki dossziében		További vizsgálatok	A felméréshez rendelkezésre álló adatok	Értékelési tényező ^(b)
Nincs jelentős különbség a hal, a Daphnia vagy az alga $L(E)C_{50}$ értéke között	A1	Hosszú időtartamú hal teszt + hosszú időtartamú Daphnia teszt + az alga NOEC meghatározása	TAS + alga + Daphnia + hal	10
A hal LC_{50} kisebb, mint a Daphnia vagy az alga $L(E)C_{50}$ egy tizede	A2	Hosszú időtartamú hal teszt + az alga NOEC meghatározása Ha az $R/H^{(c)}$ arány halra > 20 : hosszú időtartamú Daphnia teszt ^(d)	TAS + alga + hal TAS + alga + hal + Daphnia	50 10
A Daphnia $L(E)C_{50}$ kisebb, mint a hal vagy az alga $L(E)C_{50}$ egy tizede	A3	Hosszú időtartamú Daphnia teszt + az alga NOEC meghatározása Ha az $R/H^{(c)}$ arány Daphniára > 20 : hosszú időtartamú hal teszt ^(d)	TAS + alga + Daphnia TAS + alga + hal + Daphnia	50 10
Az alga $L(E)C_{50}$ kisebb, mint a hal vagy a Daphnia $L(E)C_{50}$ egy tizede	A4	Más alga típusok tesztelése + hosszú időtartamú hal/Daphnia teszt ^(e)	TAS + két alga ^(e) + hal/Daphnia	10 ^(e)
A hal $L(E)C_{50}$ nagyobb, mint a Daphnia vagy az alga $L(E)C_{50}$ tízszerese	A5	Hosszú időtartamú Daphnia teszt + az alga NOEC meghatározása Ha az $R/H^{(c)}$ arány Daphniára > 20 : hosszú időtartamú hal teszt ^(d)	TAS + alga + Daphnia TAS + alga + hal + Daphnia	50 10
A Daphnia $L(E)C_{50}$ nagyobb, mint a hal vagy az alga $L(E)C_{50}$ tízszerese	A6	Hosszú időtartamú hal teszt + az alga NOEC meghatározása Ha az $R/H^{(c)}$ arány halra > 20 : hosszú időtartamú Daphnia teszt ^(d)	TAS + alga + hal TAS + alga + hal + Daphnia	50 10
Az alga $L(E)C_{50}$ nagyobb, mint a hal vagy a Daphnia $L(E)C_{50}$ tízszerese	A7	Hosszú időtartamú Daphnia teszt + hosszú időtartamú hal teszt + az alga NOEC meghatározása	TAS + alga + hal + Daphnia	10

MEGJEGYZÉSEK:

- (a) TAS = teljes alapadat szolgáltatás, amiben benne van a hal, Daphnia és alga L(E)C₅₀ is.
- (b) AF = az értékelési tényezőt (assessment factor) az ezen szinten rendelkezésre álló legalacsonyabb NOEC-re kell alkalmazni (ideértve az alga tesztből származó NOEC-et is).
- (c) R/H: a rövid és hosszú táv aránya, vagyis a rövid időtartamú tesztből kapott L(E)C₅₀ és a hosszú időtartamú tesztből kapott NOEC aránya.
- (d) Egy harmadik faj vizsgálata általában szükségtelen, mivel már az első fajtól származó toxicitási értékek is protektívek. Ez azonban nem egy merev szabály, mivel az egyes rendszertani csoportok között, sőt a csoportokon belül is nagyok lehetnek a különbségek. Ha tehát a vizsgált fajnál, vagy az alga tesztben a rövid idejű L(E)C₅₀ és a hosszú idejű NOEC aránya > 20, akkor egy harmadik faj tesztelése is szükségessé válhat. A hosszú idejű hal és Daphnia QSAR-ok használata is segíthet annak eldöntésében, hogy milyen harmadik fajt teszteljünk (ld. 3. fejezet "A QSAR-ok felhasználása"). Úgy tartják, hogy ez az arány jól jelezheti az abnormális szintű toxicitást, vagy a speciális hatásmechanizmust, tehát a számított PNEC_{víz} megbízhatóságának javítása érdekében indokolt lehet a további bizonyítékok keresése. Egyéb tényezőket is figyelembe lehet venni, így például a második fajra elvégzett rövid időtartamú toxicitási vizsgálatban megfigyelt toxicitási időgörbe alakját, vagy szubletális hatásokat is. A három NOEC közül a legalacsonyabbra az alkalmazandó értékelési tényező 10. Mielőtt egy harmadik fajra is előírnánk a toxicitási vizsgálatot, megfelelően mérlegelni kell azt is, hogy az így meghatározott NOEC alapján vajon tovább pontosítható-e a PNEC_{víz}.
- (e) Ez a táblázat arra az alapfeltételezésre épül, hogy az alga NOEC már az alapszinten is rendelkezésre áll. Amennyiben ez nem igaz, akkor az 50-es értékelési tényezőt kell alkalmazni.

5.2.3 A talaj

Jelenleg még hiányoznak azok a standard ökotoxikológiai tesztek, amelyekkel a szárazföldi szervezetekre gyakorolt toxikus hatások vizsgálhatók lennének. Az OECD növény és a földigiliszta tesztjei az egyetlen módszerek, amelyek közvetlen kapcsolatban állnak a talajra gyakorolt hatásokkal. Ezek a tesztek viszonylag rövid vizsgálatok, tehát rövid időtartamú teszteknek tekintendők.

Számos kutatási program indult a talajvizsgálatok kidolgozására: ilyen például a Holland Integrált Talajkutatási Program (NISRP; Eijsackers, 1989) és a Svéd Jelzőteszt Rendszer (MATS; Rundgren et al., 1989). Nemrégiben Dániában is elindult egy kutatási program, amelyben helyet kapnak majd a talaj toxicitás kutatások is.

Végül, de nem utolsósorban az EU Környezetvédelmi Programja keretében folyik a nemzetközi SECOFASE (A Talaj Faunára Kifejtett Szubletális Hatások) kutatási projekt finanszírozása is, amelynek ökotoxikológiai tesztek kidolgozása, fejlesztése és standardizálása számos szárazföldi élőlény vizsgálatára (Løkke and Van Gestel, 1993). Jelenleg azonban még nem világos, hogy a vizsgálati stratégiák keretében a talajra vonatkozó reális értékelés érdekében hány és milyen jellegű ökotoxikológiai vizsgálat bevezetésére kerül majd sor. Ez azt jelenti, hogy az alapszintű műszaki dossziében a vízi környezet vizsgálatára irányuló teszteknek (alga, Daphnia és hal) nincsen megfelelője a talajra. A talajlakókra vonatkozó vizsgálati csomag várhatóan az alábbi típusú élőlényekről tartalmaz majd adatokat:

- primér producensek (növények);
- konzumensek (növényevők, gombaevők és dögevők);
- reducensek (hulladékfogyasztók és mikroorganizmusok).

Az OECD Tesztelési Irányelv Kidolgozási Program keretében jelenleg fejlesztik a talajlakó élőlények vizsgálatát célzó tesztcsomagot. A Program keretében Léon és Van Gestel (1994) összegyűjtötte a meglévő nemzetközi teszt irányelveket és az újonnan kifejlesztett módszereket, továbbá összegyűjtötték mindazon szempontokat és kritériumokat is, amelyeket a toxicitási tesztek kiválasztásakor kell figyelembe venni, és a fenti kritériumok pontszámozásával kidolgoztak egy többé-kevésbé standard módszert a vizsgálatok megválasztásához.

Az OECD 1995 júniusában tartott Talaj Munkacsoport találkozóján megtárgyalták a különböző anyagok vizsgálatához szükséges szárazföldi tesztek típusait. Az "általános jellegű" anyagok esetében "első közelítésben" az alábbi tesztek javasolták (OECD, 1995):

- talajon keresztüli expozíció vizsgálata növénytesztek alkalmazásával;
- gyűrűsféreg tesztek (akut és lehetőleg szaporodási teszt is, földigilisztára);

és/vagy

- talajlakó ízeltlábúak tesztelése.

A talajlakó élőlényekkel kapcsolatos tesztek összefoglaló ismertetése a VI. mellékletben található.

Ha úgy döntünk, hogy a $PNEC_{talaj}$ pontosításra szorul, a vizsgálati stratégia szempontjából két helyzetet kell megkülönböztetni:

- (1) Amennyiben toxicitási adatok hiányában a talajlakó szervezetekre az egyensúlyi megoszlás módszerét alkalmazzuk, és a $PEC_{talaj}/PNEC_{talaj} > 1$, rövid időtartamú vizsgálatokat kell végezni, mind primér producens, mind konzumens, mind pedig reducens fajok alkalmazásával. Megfelelően tesztelési irányelvek hozzáférhetők a primér producensek és a konzumensek esetében (OECD 208 és OECD 207). A reducensekre vonatkozó vizsgálatokat növényvédő szerek tesztelésére dolgozták ki, és számos EU-tagállamban mint országos szabványok hozzáférhetők (pl. Hollandiában a NEN (1988), Németországban pedig a BBA (1990b) keretében). Új módszerek kidolgozása jelenleg is folyik (ld. VI. melléklet).

- (2) Amennyiben a $PNEC_{\text{talaj}}$ talajlakó szervezetek vizsgálatai alapján került meghatározásra és a $PEC_{\text{talaj}}/PNEC_{\text{talaj}}$ arány > 1 , akkor további vizsgálatokat kell elrendelni.

Az anyagnak az edényes növényekre, a földigilisztákra vagy a mikroorganizmusokra kifejtett hatásától függően a legérzékenyebb élőlénycsoportra (primér producensek, konzumensek vagy reducensek) kifejtett ökotoxikológiai hatásokkal kapcsolatos információkat a megfelelő paraméterek meghatározását célzó további vizsgálatok segítségével kell bővíteni és tovább fejleszteni. A vizsgálandó fajokat a rendelkezésre álló tesztelési módszerek, az értékelési tényezők indikátor ereje és a javasolt módszerrel kapcsolatos bizonytalanságok figyelembe vételével minden esetben egyedileg kell megválasztani.

6 A környezeti kockázatbecslés c. fejezet hivatkozásai

Ahlers, K., Koch, W., Lange., Marschner , A., Welter G., (1992). Bewertung der Umweltgefährlichkeit von Alten Stoffen nach dem Chemikaliengesetz (ChemG), Chemikaliengesetz-Heft 10, Texte 19/92, Umweltbundesamt, Berlin.

ASTM - American Society for Testing and Materials (1990a). Standard guide for conducting 10-day static sediment toxicity tests with marine and estuarine amphipods. -ASTM Standard E 1367-90. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA: 1-24.

ASTM - American Society for Testing and Materials (1990b). Guide for designing biological tests with sediments.- (Submarine Ballot, Draft #1 dated 10/19/90) (Jim Dwyer; 314/875-5399.) American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA.

ASTM - American Society for Testing and Materials (1990c). Guide for Determination of the Bioaccumulation of Sediment-Associated Contaminants by Fish (Concurrent Subcommittee and Main Committee Ballot, Draft #2 dated 04/17/90) (Mike Mac; 314/994-3331.) American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA.

ASTM - American Society for Testing and Materials (1990d). Guide for Determination of the Bioaccumulation of Sediment-Associated Contaminants by Benthic Invertebrates (Subcommittee Ballot, Draft #3 dated September 1990) (Henry Lee; 503/867-4042.) American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA.

ASTM - American Society for Testing and Materials (1990e). Sediment Testing Methods (Draft #1 dated 11/06/90.) American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA.

ASTM - American Society for Testing and Materials (1991). Standard guide for Conducting Sediment Toxicity Tests with Freshwater Invertebrates.- ASTM Standard E 1383-90. (Marcia Nelson; 314/875-5399.) American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA.

BBA (Biologische Bundesanstalt für Land-und Fortswirtschaft) (1986). Test guideline IV; 4-1; Fate of plant protection agents in soil-degradation, conversion and metabolism for simulation of the compartment soil.

BBA (Biologische Bundesanstalt für Land-und Fortswirtschaft) (1990a). Test guideline IV; 5-1; Degradability and fate of plant protection agents in the water/sediment system for simulation of smaller surface waters.

BBA (Biologische Bundesanstalt für Land-und Fortswirtschaft) (1990b). Richtlinien für die antliche Prüfung von Pflanzenschutzmitteln (Nr VI, 1-1 (2. Auflage)), Auswirkungen auf die Bodenmikroflora. Erlassen im März 1990.

Belfroid, A., W. Seinen, K. van Gestel, J. Hermens and K van Leeuwen (1995). Modelling the accumulation of hydrophobic organic chemicals in earthworms. - Application of the equilibrium partitioning theory. *Environ. Sci. Pollut. Res.* **2**, 5-15.

Bringmann, G. and R. Kühn. (1960). Vergleichende toxikologische Befunde an Wasser-Bakterien. *Gesundheits-Ingenieur* **11**, 337-340.

Bringmann, G. and R. Kühn (1980). Comparison of the toxicity thresholds of water pollutants to bacteria, algae and protozoa in the cell multiplication inhibition test. *Wat. Res.* **14**, 231-241.

BUA (1992). OH radicals in the troposphere. BUA Report 100; GDCh-Advisory Committee on Existing Chemicals of Environmental Relevance, April 1992.

Burton G. A., Jr. (1991). Assessing the toxicity of fresh water sediments. *Environ. Toxicol. Chem.* **10**, (2), 1585-1627.

Burton, G. A., Jr. (1992). Biological Test Method: Acute Test for Sediment Toxicity using Marine or Estuarine Amphipods, Report, EPS 1/RM/26, Environment Canada, Ottawa, Ontario, K1 A OH3, Canada.

Connell, D.W. and R.D. Markwell (1990). Bioaccumulation in the soil to earthworm system. *Chemosphere* **20**, 91-100.

De Greef, J. and De Nijs, A.C.M. (1990). Risk assessment of new chemical substances. Dilution of effluents in the Netherlands. RIVM Report no. 670208001.

De Leeuw, F.A.A.M. (1993). Assessment of the atmospheric hazards and risks of new chemicals: procedures to estimate "hazard potentials". *Chemosphere* **27**, (8), 1313-1328.

Di Toro, D.M., Zarba, C.S., Hansen, D.J., Berry, W.J., Schwarz, R.C., Cowan C.E Pavlou, S.P. Allen, H.E., Thomas, N.A., Paquin P.R. (1991). Technical basis of establishing sediment quality criteria for nonionic organic chemicals using equilibrium partitioning. *Environ. Toxicol. Chem.* **10**, 1541-1583.

ECETOC (1994a). Technical Report No. 56: Aquatic Toxicity data Evaluation.

ECETOC (1994b). Technical Report No. 61: Environmental Exposure Assessment.

ECETOC (in press). Technical Report No. 68: The Role of Bioaccumulation in Environmental Risk Assessment: The Aquatic Environment and Related Food Web.

Emans, H.J.B., Van De Plassche, E.J., Canton, J.H., Okkerman, P.C., Sparenburg, P.M. (1993). Validation of some extrapolation methods used for effect assessment. *Environ. Toxicol. Chem.* **12**, 2139-2154.

EPA (US Environmental Protection Agency) (1980). Office of Toxic Substances, Chemical Use Standard Encoding System (ChemUSES), Volume 2: Function List and Function List Index (Draft) EPA 560/13-80-034b, August 1980, Washington, DC 20460.

Eijsackers, H.J.P. (1989). The Netherlands Integrated Soil Research Programme: plan and realization of the research programme. Programme Office for Integrated Soil Research, Wageningen.

Frank, R. and Klöppfer, W. (1989). A convenient model and program for the assessment of abiotic degradation of chemicals in natural water. *Ecotox. Environ. Safety*, **17**, 323-332.

Heijna-Merkus, E., and Hof M. (1993). Harmonization of model parameters. RIVM report no. 679102022.

Hill, I.R., Heimbach, F., Leeuwangh, P. and Mathiessen, P. (eds.) (1994). Freshwater field tests for hazard assessment of chemicals. Lewis Publishers, London.

Hoekstra, J.A., Van Ewijk, P.H. (1993). Alternatives for the no-observed-effect level. *Environ. Toxicol. Chem.* **12**, 187-194.

ISO (International Organisation of Standardisation) (1994). Water quality - Evaluation of the "ultimate" anaerobic biodegradability of organic compounds in digested sludge - Method by measurement of the biogas production. Draft International Standard No 11734.

ISO (International Organisation of Standardisation) No. 9509. Water quality - Method for assessing the inhibition of nitrification of activated sludge microorganisms by chemicals and waste waters.

Jongbloed, R.H., J. Pijnenburg, B.J.W.G. Mensink, Th.P. Traas and R. Luttik (1994). A model for environmental risk assessment and standard setting based on biomagnification. Top predators in terrestrial ecosystems. RIVM report no. 71901012.

Junge, C.E. (1977). In: Fate of pollutants in the air and water environment. I.H. Suffet (ed), Wiley interscience, New York, 7-25.

Knacker, T. and Morgan, E. (1994). UBA-workshop on terrestrial model ecosystems. UBA-FB 94-117.

Léon, C.D. and Van Gestel, C.A.M. (1994). Selection of a set of standardized laboratory toxicity tests for the hazard assessment of chemical substances in terrestrial ecosystems. Report no. D94004, Department of Ecology and Ecotoxicology, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands.

Løkke, H. and Van Gestel, C.A.M. (1993). Manual for SECOFASE, Development, Improvement and Standardization of Test Systems for Assessing Sublethal Effects of Chemicals on Fauna in the Soil Ecosystem. Report from a workshop held in Silkeborg, Denmark, January 18-19, 1993, National Environmental Research Institute. 41 pp.

Ma. W.-C. (1994). Methodological principles of using small mammals for ecological hazard assessment of chemical soil pollution, with examples on cadmium and lead, In: Donker, M.H.; Eijsacker, H.; Heimbach, F. (eds) *Ecotoxicology of soil organisms*. SETAC Special Publication Series, Lewis Publishers.

Mackay, D. (1991). *Multimedia Environmental Models*. Lewis, Chelsea, MI:

Mackay, D., Paterson, S., Shiu, W.Y. (1992). Generic models for evaluating the regional fate of chemicals; *Chemosphere* **24**, (6), 695-717.

Meylan, W.M., and Howard, P.H. (1991). Bond contribution method for estimating Henry's law constants. *Environ. Toxicol. Chem.* **10**, 1283-1293.

Mikkelsen, J. (1995, in press). Fate Model for Organic Chemicals in an Activated Sludge Wastewater Treatment Plant - Modification of SimpleTreat. National Environmental Research Institute, Denmark. Prepared for the Danish EPA.

NEN (Nederlandse Norm) (1988). Soil - Determination of the Influence of Chemicals on Soil Nitrification, No. 5795, Nederlands Normalisatie-Instituut, Delft.

Notenboom, J. and Boessenkool, J.J. (1992). Acute toxicity testing with the groundwater copepod *Parastenocarsis germanica* (Crustacea). In: Stanford, J.A. and Simons, J.J. (eds.). Proceedings of the first international conference on groundwater ecology. American Water Resources Association, Bethesda, pp. 301-309.

Nyholm, N. (1985). Response Variable in Algal Growth Inhibition Tests - Biomass or Growth Rate? *Water Res.* 19, (3), 273-279.

Nyholm, N. and Källquist, T. (1989). Methods for Growth Inhibition Tests with Freshwater Algae, *Environ. Toxicol. Chem.* 8, 689-703.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1981a). Guideline for Testing of Chemicals No. 305 E, Bioaccumulation: Flow-through Fish Test, Paris.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1981b). Guideline for Testing of Chemicals No. 303 A, Simulation Test - Aerobic Sewage Treatment : Coupled Units Test, Paris.

OECD (1981c). Guideline for testing of chemicals. Paris, OECD, ISBN 92-64-12221-4 (including 1984 and 1987 updates).

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1984). Guideline for Testing of Chemicals No. 201, Alga, Growth Inhibition Test, Paris.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1984). Guideline for Testing of Chemicals No. 202, *Daphnia* sp., Acute Immobilisation Test and Reproduction Test, Paris.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1984). Guideline for Testing of Chemicals No. 204, Fish, Prolonged Toxicity : 14-day Study, Paris.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1984). Guideline for Testing of Chemicals No. 207, Earthworm Acute Toxicity Test, Paris.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1984). Guideline for Testing of Chemicals No. 208, Terrestrial Plants, Growth Test, Paris.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1984). Guideline for Testing of Chemicals No. 209, Activated Sludge, Respiration Inhibition Test, Paris.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1984). Guideline for Testing of Chemicals No. 210, Fish, Early-life Stage Toxicity Test, Paris.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1989). Report of the OECD Workshop on Ecological Effects Assessment, OECD Environment Monographs No. 26.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1992a). Screening Assessment Model Systems (SAMS), Version 1.1, Paris.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1992b). Report of the Workshop on Effects Assessment of Chemicals in Sediment. OECD Environment Monographs No. 60.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1992c). The Rate of Photochemical Transformation of Gaseous Organic Compounds in Air Under Tropospheric Conditions, OECD Environmental Monographs No. 61.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1992d). Report of the OECD Workshop on the extrapolation of laboratory aquatic toxicity data on the real environment, OECD Environmental Monographs No. 59.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1993a). Application of Structure-Activity Relationships to the Estimation of Properties Important in Exposure Assessment, OECD Environmental Monographs No. 67.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1993b). OECD Guidelines for testing of chemicals. Paris, OECD, ISBN 92-64-14018-2.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1994). Guideline for Testing of Chemicals No. 305 E, Bioaccumulation: Flow-through Fish Test, draft revision, Paris.

OECD (Organisation for Economic Cooperation and Development) (1995). Terrestrial Effects Working Group Meeting, Paris 18-19 June 1995. Draft summary of discussions.

Pack, S. (1993). A review of statistical data analysis and experimental design in OECD aquatic toxicology test guidelines. Shell Research, Sittingbourne, UK, prepared for OECD.

Pedersen, F., Samøse-Petersen, L. (1994). Discussion Paper Regarding Guidance for Terrestrial Effects Assessment, 1st Draft, Water Quality Institute, Horsholm, Denmark.

Reynolds, L., Blok, J., de Morsier, A., Gerike, P., Wellens, H., and Bontinck, W.J. (1987). evaluation of the toxicity of substances to be assessed for biodegradability. *Chemosphere* **16**, 2259-2277.

Römbke, J., Bauer, C., Brodesser, J., Brodsky, J., Danneberg, G., Dietze, C., Härle, M., Heimann, D., Klunker, H., Kohl, E.-G., Renner, I., Ruzicka, J., Schalnass, H.-J., Schäfer, H., Vickus, P. (1993). Grundlagen für die Beurteilung des ökologischen Gefährdungspotentials von Altstoffen im Medium Boden, Entwicklung einer Teststrategie, Bericht im Auftrag des Umweltbundesgesundtes, F + E - Vorhaben Nr. 106 04 103, Batelle Eurpoe, Frankfurt am Main.

Romijn, C.A.F.M., Luttk, R., Van De Meent, D., Slooff, W., Canton, J.H. (1993). Presentation of a General Algorithm to Include Effect Assessment on Secondary Poisoning in the Derivation of Environmental Quality Criteria. Part 1: Aquatic Food Chains. *Ecotox. Environ. Saf.* **26**, 61-85.

Romijn, C.F.A.M., Luttk, R., Canton, J.H. (1994). Presentation of a general algorithm to include effect assessment on secondary poisoning in the derivation of environmental quality criteria. Part 2. terrestrial food chains. *Ecotox. Environ. Saf.* **27**, 107-127.

Rundgren, S., Andersson, R., Bringmark, L., Byman, J., Gustaffson, K., Johansson, I., and Tortensson, L. (1989). Soil biological variables in environmental hazard assessment? organisation and research programme. National Swedish Environmental Protection Board, Solna, Sweden. NSEPD report no. 3603.

Samøse-Petersen, L. (1987). Laboratory Method for Testing Side-Effects of Pesticides on the Rove Beetle *Aleochara bilineata* - adults (Col., Staphylinidae). *Entomophaga* **32**, 73-81.

SETAC (1991). Guidance Document on Testing procedures for Pesticides in Freshwater Mesocosms.

SETAC (1992). Workshop Report on Aquatic Microcosms for Ecological Assessment of Pesticides, Wintergreen, Virginia, 6-12 October 1991.

Stavola, A. (1990). Detailed review Paper on Terrestrial Ecotoxicology Test Guidelines, OECD Updating Programme, periodical review.

Strujis, J., Stoltenkamp, J., Van De Meent, D. (1991). A Spreadsheet-based Model to Predict the Fate of Xenobiotics in a Municipal Wastewater Treatment Plant. *Wat. Res.* **25**, (7), 91-900.

Swatzenbach, R.P., P.M. Gswend and DM. Imboden (1993). *Environmental Organic Chemistry*. John Wiley & Sons.

Toet, C., and F.A.A.M de Leeuw (1992). Risk Assessment System for New Chemical Substances: Implementation of atmospheric transport of organic compounds. Bilthoven, National Institute of Public Health and Environmental Protection (RIVM), Report No. 679102 008.

Umweltbundesamt (1993). Entwurf zur Bewertung von Bodenbelastungen, Fachgebiet I 3.7.

Van Beelen, P., Fleuren-Kemilä, A.K., Huys, M.P.A., Van Mill, A.C.M. and Van Vlaardingen, P.L.A (1990). Toxic effects of pollutants on the mineralization of substrates at low experimental concentrations in soil, subsoils and sediments. In: Arendt, F., Hinseveld, M. and Van den Brink, W.J. (eds.). *Contaminated Soil*. Kluwer Academic Publishers, the Netherlands, pp. 431-438.

Van De Meent, D. (1993). Simplebox: a generic multimedia fate evaluation model. RIVM report no. 672720 001.

Van Gestel, C.A.M. (1992). The influence of soil characteristics on toxicity of chemicals for earthworms: a review. In: Becker, H. et al. (eds.). *Ecotoxicology of earthworms*. pp. 44-54, Intercept Andover.

Van Gestel, C.A.M., and W. Ma (1993). Development of QSARs in soil ecotoxicology: earthworm toxicity and soil sorption of chlorophenols, chlorobenzenes and chloroanilines. *Water, Air and Soil Pollution* **69**, 265-276.

Van Jaarsveld, J. (1990). An operational atmospheric transport model for Priority Substances; specifications and instructions for use. RIVM report no. 222501002.

Veith, G.D., D.L. Defoe and B.V. Bergstedt (1979). Measuring and estimating the bioconcentration factor of chemicals in fish. *J. Fish Board Can.* **36**, 1040-1048.

Water Quality Institute, Denmark and RIVM, The Netherlands (final draft 1995). Detailed Review Paper. Aquatic testing methods for pesticides and industrial chemicals. Prepared for National Coordinators of the OECD Test Guidelines Programme, Organisation for Economic Cooperation and Development, OECD.

Zepp, G.R., and Cline, D.M. (1977). Rates of direct photolysis in aquatic environment. *Environ. Sci. Techn.* **11**, (4), 359-366.

Szerkesztői megjegyzés: az angol nyelvű dokumentum a 2. Környezeti kockázatbecslés fejezethez mellékletek formájában további adatokat közöl az alábbi témákról:

- I. melléklet: Emissziós faktorok a különböző használati kategóriákhoz
- II. melléklet: A vegyi anyagok sorsa egy szennyvíztisztítóban a SimpleTreat Modell alapján
- III. melléklet: Az adatok értékelése
- IV. melléklet: Az organizmusok hozzárendelése a trófikus szintekhez
- V. melléklet: Statisztikai extrapolációs módszer
- VI. melléklet: Talajban és üledék-szervezetek további vizsgálatára alkalmas protokollok
- VII. melléklet: Toxicitási adatok hlevő madarakra és emlősökre
- VIII. melléklet: Környezeti kockázatbecslés fémekre és fémvegyületekre
- IX. melléklet: A kőolaj származékok környezeti kockázatbecslése
- X. melléklet: Transzformációs útvonalak
- XI. melléklet: Ionképző anyagok környezeti kockázatbecslése
- XII. melléklet: Európa szennyvíz csatornázottsági helyzete

A mellékletek magyar fordítása nem készült el, az eredeti angol nyelvű anyag a Technikai Útmutató végén 549 oldaltól található.