

Europäische Akademie

zur Erforschung von Folgen
wissenschaftlich-technischer Entwicklungen
Bad Neuenahr-Ahrweiler GmbH

Direktor:

Professor Dr. Carl Friedrich Gethmann

**Zur Umweltgefährdungsbewertung
von Schadstoffen und Schadstoffkombinationen
durch Reichweiten- und Persistenzanalyse**

Ausarbeitung
im Rahmen des Projektes „Umweltstandards“

von

Ulrich Müller-Herold und Martin Scheringer

Dezember 1999

Europäische Akademie

zur Erforschung von Folgen
wissenschaftlich-technischer Entwicklungen
Bad Neuenahr-Ahrweiler GmbH

Direktor:

Professor Dr. Carl Friedrich Gethmann

**Zur Umweltgefährdungsbewertung
von Schadstoffen und Schadstoffkombinationen
durch Reichweiten- und Persistenzanalyse**

Ausarbeitung
im Rahmen des Projektes „Umweltstandards“

von

Ulrich Müller-Herold und Martin Scheringer

Dezember 1999

Die Schriften der „Graue Reihe“ umfassen aktuelle Materialien und Dokumentationen, die von den Wissenschaftlern der Europäischen Akademie zur Erforschung von Folgen wissenschaftlich-technischer Entwicklungen Bad Neuenahr-Ahrweiler GmbH laufend erarbeitet werden. Die Publikationen der „Grauen Reihe“ werden als Manuskripte gedruckt und erscheinen in loser Folge im Selbstverlag der Europäischen Akademie. Sie können über die Europäischen Akademie auf schriftliche Anfrage hin bezogen werden.

Herausgeber:

Europäische Akademie

zur Erforschung von Folgen
wissenschaftlich-technischer Entwicklungen
Bad Neuenahr-Ahrweiler GmbH

Postfach 14 60, D-53459 Bad Neuenahr-Ahrweiler
Telefon: ++49 - (0)2641 - 973 - 300, Telefax -320
e-mail: europaeische.akademie@dlr.de

Direktor:

Professor Dr. Carl Friedrich Gethmann (V.i.S.d.P.)

ISSN 1435-487 X

Redaktion:

Dagmar Uhl, M. A.

Druck:

Druckerei Martin Warlich, Bad Neuenahr-Ahrweiler

INHALTSVERZEICHNIS

1.	Einführung und Fragestellung	5
2.	Bewertung von Umweltchemikalien	8
2.1	Bisherige Vorgehensweise	9
2.2	Schwierigkeiten	12
3.	Reichweiten	15
3.1	Expositionsabschätzung: Ausgangsdaten	16
3.2	Skizze der Reichweitenberechnung	18
3.3	Differenzierungen aufgrund von Reichweiten	19
4.	Reichweiten und Chemikalienbewertung	23
4.1	Das Vorsorgeprinzip	23
4.2	Das ALARA-Prinzip und der „Stand der Technik“	24
4.3	Reichweiten, ALARA und der Stand der Technik	26
4.4	Erstes Beispiel: H-FCKW	28
4.5	Zweites Beispiel: Perchlorethylen	31
4.6	Drittes Beispiel: Silikone und Chlorparaffine	33
5.	Kombination des Reichweitenkonzeptes mit Zusatzkriterien	36
5.1	Biokonzentration	36
5.2	Weitere wirkungsnähere chemische Kriterien	37
5.3	Reichweitenbewertung in Verbindung mit Zusatzkriterien	38
6.	Ausblick: Stoffkombinationen	39
6.1	Reichweiten und Stoffkombinationen	39
6.2	Anhang: Co-Exposition und der Co-Reichweite zweier Stoffe	41

1. Einführung und Fragestellung

Ein wesentlicher Teil der heute bekannten Umweltbelastungen wird durch unerwünschte Nebenwirkungen absichtlich oder unbeabsichtigt in die Umwelt freigesetzter Chemikalien verursacht. Verfahren für Zulassung, Einsatz und Überwachung eingeführter und neu entwickelter Substanzen sind deshalb für die weitere Entwicklung der Umweltsituation von großer Bedeutung. Bei der Einschätzung der mit der Chemikalienfreisetzung verbundenen Risiken sind nicht nur bekannte Schäden, sondern auch Möglichkeiten bislang unbekannter Schäden mit einzubeziehen, wie das im Rahmen des Vorsorgeprinzips vorgesehen ist.

Für die einzelnen Stoffe ergibt sich eine jeweils charakteristische Situation zwischen zwei Grenzfällen: Ist eine Substanz schon lange bekannt und in ihren toxikologischen sowie ökotoxikologischen Eigenschaften breit untersucht, so wird man beim weiteren Vorgehen auf diesen Kenntnissen aufbauen und Maßnahmen mit den etablierten Methoden der Risikoforschung begründen wollen. Ist hingegen über Wirkungen einer Substanz wenig oder nichts bekannt, so wird man auf das Vorsorgeprinzip zurückgreifen, wobei nur dann mit vernünftigen Ergebnissen gerechnet werden kann, wenn das Vorsorgeprinzip nach gut begründeten Methoden zur Anwendung gebracht werden kann.

Bei der Wahl zwischen Risiko- und Vorsorgemethoden der Chemikalienbewertung kommen aber auch praktische Überlegungen zum Zuge. Die Einzelstoffbeurteilung bei der Risikoabschätzung für Chemikalien, wie sie von den Industrieländern verfolgt wird, hat sich als außerordentlich langwierig und kostenintensiv herausgestellt. Das EU-Programm zur Überprüfung von 100 000 Altchemikalien, die vor 1981 auf dem Markt waren – alle nach 1981 eingeführten Stoffe müssen in der EU vor der Markteinführung bewertet werden – hat bis jetzt noch keine Ergebnisse gezeitigt. Eine erste Prioritätsliste von 42 Stoffen ist 1994 verabschiedet worden. Bisher allerdings sind keinerlei Entscheidungen gefällt worden. Das EU-Programm wird noch Jahrhunderte

brauchen, um sich durch die Liste der Altchemikalien hindurchzuarbeiten und dabei erhebliche Mittel verbrauchen, die anderswo vielleicht sinnvoller eingesetzt werden könnten.

In Ländern wie Dänemark, Deutschland, den Niederlanden oder Schweden, die innerhalb der EU im Umweltbereich eine Führungsrolle einnehmen, wird deshalb ernsthaft erwogen, ob nicht allein aus diesen – eher praktischen als wissenschaftlichen – Gründen einer Bewertung nach dem Vorsorgeprinzip der Vorzug zu geben ist. Eine solche Position wird beispielsweise in dem Bericht des offiziellen schwedischen Chemical Policy Committee (CPC) vom Juni 1997 vertreten.

Insbesondere der weite Zeithorizont bei der Bestandsaufnahme der Altchemikalien ist ein Grund zur Besorgnis. Abgesehen von der Landschaftszerstörung ist ja gerade der Einsatz dieser Altchemikalien ein Hauptgrund sowohl für die Zunahme der Umweltprobleme nach den fünfziger Jahren als auch für ihre öffentliche Wahrnehmung. Was könnte der ökologische Nutzen einer Bewertungsmethode sein, die nach realistischer Einschätzung das Gros ihrer Ergebnisse erst liefern kann, wenn diese Ergebnisse kaum noch gebraucht werden können. Zwar sind einige der Schlüsselsubstanzen identifiziert und geeignet ersetzt worden. Indessen bestehen wenig Zweifel, daß sich unter den übrigen 100 000 Altchemikalien noch weitere Problemfälle finden werden.

Obleich das Vorsorgeprinzip per Definition auf Abwendung von Schäden ausgerichtet ist, ist weder beim ALARA-Prinzip noch beim „Stand der Technik“ ausdrücklich gesagt, welche Zielgrößen denn durch die gewählte Maßnahme – in der Regel eine Verminderung von Emissionsmengen – eigentlich *unmittelbar* beeinflußt werden sollen. Für (schädliche) Auswirkungen sind ja nicht Emissionen, sondern Immissionen und die aus ihnen sich ergebenden Expositionen maßgeblich. Das Immissionspotential und Expositionspotential sind die Größen, die einen quantitativen Vergleich von Emissionsdaten in Hinblick auf die Folgewirkungen überhaupt erst ermöglichen.

Um diese noch vage Einsicht genauer zu fassen, sind Größen notwendig, mit denen das Ausmaß von Gefährdungen durch Immissionen

bzw. durch Expositionen quantitativ bestimmt werden kann, selbst und vor allem auch dann, wenn die Art möglicher Schäden noch gar nicht bekannt ist. Ein derartiges Maß sind zeitliche und räumliche Reichweiten von Chemikalien: Wie weit kann eine Substanzmenge, die irgendwo freigesetzt wird, überhaupt gelangen, bevor sie durch einen der zahlreichen Abbauprozesse zersetzt worden ist, und welche Zeit wird das in Anspruch nehmen? Es entspricht klassischen Kausalitätsvorstellungen, daß eine Substanz nur dann irgendwo weitere Wirkungen auslösen kann, wenn sie ebenda überhaupt vorhanden ist. Außerhalb einer Zone, die durch zeitliche und räumliche Reichweiten gegeben ist, können unmittelbare Wirkungen sich nicht einstellen, was auch immer diese Wirkungen sein mögen.

Eine solche Konstellation weist unmittelbar in Richtung des Vorsorgeprinzips. An genauer untersuchten Beispielen zeigt sich indessen sofort, daß Reichweiten in natürlicher Weise durchaus auch mit anderen Überlegungen und insbesondere mit Risikoüberlegungen kombiniert werden können. So zeigt sich, daß bei der Entwicklung der H-FCKW der mögliche Schaden, den die FCKW in der Stratosphäre anrichten, ja grundsätzlich bekannt war. Über die quantitativen Aspekte können im Prinzip auch durch Modellrechnung synthetische Wahrscheinlichkeiten errechnet werden. Die Entwicklung der H-FCKW zeigt also gerade, daß Reichweitenbegrenzungen nicht nur Vorsorge gegen unbekannte Schäden sondern auch zur Eindämmung ihrer Natur nach wohlbekannter Schäden eingesetzt werden können.

Aus dem großen Spektrum von Fragen, die im Zusammenhang mit Reichweiten, Gefährdungsmaßen, Umweltwirkungen und dem Vorsorgeprinzip zu klären sind, soll in der vorliegenden Ausarbeitung vor allem den folgenden Einzelfragen nachgegangen werden:

- *Wem* genau gilt die Vorsorge gemäß Reichweitekriterien? (Abs. 3.3)
- Sind Reichweitekriterien anschlussfähig an das „ALARA-Prinzip“ ? (Abs. 4.3)

- Sind Reichweitekriterien anschlussfähig an das Prinzip vom „Stand der Technik“? (Abs. 4.3)
- Lassen räumliche und zeitliche Reichweiten sich durch wirkungsnähere Kriterien ergänzen? (Abs. 5.3)
- Können Reichweitekriterien möglicherweise auch als Gefährdungsmaße für Kombinationen von Stoffen angewendet werden? (Kap. 6)

2. Bewertung von Umweltchemikalien

Vielfach, insbesondere in den Natur- und Ingenieurwissenschaften, wird das Verhältnis zwischen Faktenerhebung und Bewertung so gesehen, daß die naturwissenschaftliche Untersuchung einen – mehr oder minder – objektiv gegebenen Sachverhalt zum Gegenstand hat und daß sich die Bewertung als ein getrennter, oft von subjektiven Sichtweisen geleiteter Schritt anschließt.

Bei der Untersuchung und Bewertung anthropogener Umweltveränderungen werden jedoch die Grenzen dieses Zwei-Schritt-Ansatzes deutlich: Einerseits ist der naturwissenschaftliche Faktenbestand, mit dem anthropogene Umweltveränderungen mittlerweile dokumentiert sind, so umfangreich und uneinheitlich geworden, daß er nahezu beliebig viele, auch widersprüchliche Folgerungen zuläßt und dadurch das Bewertungsverfahren lähmt (Gutachterdilemma). Andererseits sind in vielen Fällen die naturwissenschaftlichen Resultate für die Bewertung anthropogener Umweltveränderungen nach wie vor unzureichend, weil das Verhalten der betroffenen Umweltsysteme noch immer ungenügend bekannt ist (z. B. beim Waldsterben). Eine Leitfrage für die hier vorgestellten Überlegungen ist somit, wie sich ein Ausweg aus dem Dilemma aus Datenüberschuß einerseits und gleichzeitigem Datenmangel andererseits finden läßt.

2.1 Bisherige Vorgehensweise

Für die Untersuchung der physikalischen, chemischen und biologischen Umweltveränderungen, die durch Umweltchemikalien ausgelöst werden, hat sich seit den 60er Jahren ein multidisziplinäres Forschungsgebiet aus Umweltanalytik, Toxikologie, Ökosystemforschung, Umweltphysik, u.a. Disziplinen herausgebildet.

Das Ziel dieses multidisziplinären Forschungsgebiets besteht darin, das Verteilungsverhalten von Umweltchemikalien und die Belastung von Organismen und Ökosystemen durch diese Substanzen zu bestimmen (*environmental risk assessment*). Die dabei verfolgte Vorgehensweise umfaßt die beiden Hauptschritte *Expositionsanalyse* und *Wirkungsanalyse*. In der Expositionsanalyse werden mit Methoden der Umweltchemie, Umweltphysik, Hydrologie etc. die *Transport- und Transformationsprozesse* untersucht, denen chemische Substanzen in der Umwelt unterliegen. Die Wirkungsanalyse beschäftigt sich dann mit den *toxischen* und *ökotoxischen Wirkungen*, die die Substanzen nach Transport und ggf. Transformation bei den exponierten Organismen und Ökosystemen auslösen. Zur Bewertung einer Substanz werden dann die Resultate beider Schritte zusammengeführt, indem gemessene oder abgeschätzte Expositionswerte (*predicted environmental concentrations*, PEC) mit Wirkungsschwellen (z.B. *predicted no effect concentrations*, PNEC) verglichen werden.

Diese Vorgehensweise ist mittlerweile ausführlich in der Literatur dokumentiert, s. z. B. McCarthy u. Mackay (1993), Mackay et al. (1996), und sie hat sich auch in verschiedenen Verordnungen und Richtlinien zur Bewertung, zum Test und zur Anmeldung oder Registrierung von Chemikalien niedergeschlagen (z.B. im deutschen Chemikaliengesetz, in der EU-Direktive 93/67/EEC oder in der schweizerischen Stoffverordnung). Diese behördlich festgelegten Untersuchungsschemata gehen von der Unterscheidung zwischen alten und neuen Stoffen aus (alte Stoffe: ca. 100 000 Substanzen, die Anfang der 80er Jahre auf dem Markt waren) und verlangen eine Risikobewertung (*risk assessment*) für alle neuen und für ca. 5000 als prioritär einge-

stufte alte Stoffe für Einzelheiten s. z.B. das *Technical Guidance Document* der EU (TGD, EU 1996).

Das in den Verordnungen und Richtlinien festgelegte Verfahren wird hier nicht im einzelnen dargestellt, sondern es werden vier Schritte unterschieden, die sich an der Gliederung des Ereignisablaufs in die Stufen von Emission, Exposition und Effekten orientieren. Dies ist sinnvoll, weil das hier dargestellte Reichweiten-Konzept aus dieser Gliederung des Ereignisablaufs entwickelt wird.

1. Der erste Schritt besteht in der Charakterisierung der Substanzen anhand ihrer physikalischen und chemischen Eigenschaften: Wasserlöslichkeit, Dampfdruck, Henry-Konstante, Octanol-Wasser-Verteilungskoeffizient, Geschwindigkeitskonstanten für Hydrolyse und Photolyse u. a. Die Substanzeigenschaften bilden einen minimalen Grundstock für die Chemikalienbewertung; sie sind in Zusammenstellungen wie z.B. Howard (1991), Howard *et al.* (1991), Rippen (1987), Verschueren (1983) aufgeführt (s. dort für Verweise auf zugrundeliegende Einzelarbeiten). Zu den umweltrelevanten Stoffeigenschaften werden z.B. in der schweizerischen Stoffverordnung oder im TGD der EU auch Angaben zur akuten Toxizität bei Algen, Daphnien und Fischen gezählt. In der hier gegebenen Darstellung werden solche Daten jedoch unter Schritt 3, Wirkungen, eingeordnet.

Zusätzlich zur Charakterisierung einer Substanz anhand ihrer physikalisch-chemischen Eigenschaften müssen die tatsächlichen *Emissionen* dieser Substanz erfaßt werden. Dies geschieht mit Hilfe von Daten zur produzierten bzw. freigesetzten *Substanzmenge* sowie zum Gebrauchsmuster und Freisetzungsmuster (punkt-, linien- oder flächenförmige Emittenten, stoßförmige oder kontinuierliche Emission, Emission in Luft, Wasser oder Boden). Szenarien und Daten zur Stoffemission sind in den Kapiteln 5 und 7 des TGD der EU zusammengestellt. Bei Substanzen wie Pestiziden, deren Verwendungszweck Freisetzung impliziert, und Lösungsmitteln, die vielfach vollständig in die Umwelt gelangen, ist die Freisetzungsmenge eng mit der Produktionsmenge korreliert.

2. Nach der Emission laufen zahlreiche Transport- und Transformationsprozesse ab, die sowohl durch die physikalisch-chemischen Eigenschaften der betrachteten Substanz als auch durch *Umwelteinflüsse* wie Temperatur, Feuchtigkeit, An- oder Abwesenheit von Sauerstoff u. v. a. m. bestimmt werden. Die Transport- und Transformationsprozesse bestimmen die Konzentration, mit der die betrachtete Substanz in der Umwelt auftritt und der Organismen (Mikroorganismen, Pflanzen, Tiere, Menschen) und Ökosysteme ausgesetzt sind. Das Produkt aus den beiden Faktoren Konzentrationshöhe und Einwirkungsdauer bildet die Exposition.

Die Exposition wird üblicherweise nur als die Vorstufe, d. h. als die notwendige Bedingung für Wirkungen angesehen. Die eigentliche Bewertung erfolgt erst durch den Vergleich von Expositionswerten wie der *predicted environmental concentration* mit wirkungsbezogenen Konzentrationswerten wie z.B. dem *no observed adverse effect level* (noael), wobei die letzteren den entscheidungsrelevanten Bezugspunkt bilden. Die Frage, inwieweit die Exposition, da sie das Potential für Wirkungen bildet, bereits eine *eigenständige* Bewertungsgrundlage bilden kann („expositionsgestützte Chemikalienbewertung“), wird in der Literatur zwar vereinzelt angesprochen (Stephenson 1977, Schmidt-Bleek u. Hamann 1986, Klöpffer 1989), nicht jedoch konsequent diskutiert.

3. Die Exposition hat schließlich verschiedene *Wirkungen* zur Folge (wobei unter Wirkungen immer *Auswirkungen* zu verstehen sind). Diese Auswirkungen mit denen Organismen und Ökosysteme auf Chemikalienbelastungen reagieren, werden im Rahmen von Toxikologie und Ökotoxikologie untersucht. Grundsätzlich sollen die Auswirkungsbefunde in eine Kausalbeziehung zu den einwirkenden Konzentrationen und zu den physikalisch-chemischen Substanzeigenschaften gesetzt werden. Zielsetzung ist, Struktur-Aktivitäts-Beziehungen (Auer 1988, Hermens u. Opperhuizen 1991, Hermens u. Verhaar 1996) und Dosis-Wirkungs-Beziehungen aufzustellen, so daß Schwellenwerte für das Auftreten von Wirkungen bzw. noael-Werte (*no observable adverse effect levels*) oder

pnec-Werte (*predicted no effect concentration*) angegeben werden können (Ahlers et al. 1994). Im einzelnen ist zu unterscheiden zwischen akuter, subchronischer und chronischer Toxizität (unterschiedliche Dauer und Höhe der Einwirkung) sowie zwischen verschiedenen Wirkebenen: molekular, zellulär, organismisch oder ökosystemar. Weil die Vielzahl dieser Fälle nicht im Rahmen der Testverfahren für Chemikalien abgedeckt werden kann, müssen Verfahren zur Extrapolation von einzelnen Testszenarien auf tiefere Konzentrationen, längere Einwirkungsdauern und andere Wirkebenen entwickelt werden. In diese Extrapolationsverfahren fließen eine Vielzahl zusätzlicher Annahmen ein, z.B. die Annahme, daß „Nicht-Wirkungs-Konzentrationen“ mit Hilfe von „Sicherheitsfaktoren“ aus Konzentrationen für die akute Toxizität erhalten werden können, oder die Annahme, daß durch den Schutz der *Struktur* eines Ökosystems auch seine *Funktion* gewährleistet bleibt.

4. Das auf diese Weise gewonnene Verständnis von Emission, Transport, Transformation und Wirkungsmechanismen soll dann mit Hilfe von Modellrechnungen und Struktur-Aktivitäts-Beziehungen auch die *Vorhersage* von Exposition und Wirkung bei neuen Chemikalien ermöglichen.

2.2 Schwierigkeiten

Das vorangehend skizzierte Vorgehen, das von den „nackten“ Substanzeigenschaften bis zu komplexen Umweltveränderungen auf Effekt-Ebene reicht, wirft erhebliche methodische und praktische Schwierigkeiten auf: Das Verteilungs- und Transformationsverhalten in der Umwelt wird nicht nur von den unter Laborbedingungen ermittelten Substanzeigenschaften, sondern auch durch Umwelteinflüsse wie Wetterbedingungen (Temperatur, Sonneneinstrahlung etc.), Bodenbeschaffenheit oder die Anwesenheit von Mikroorganismen bestimmt.

Dabei erweist sich zunächst die geographische Variabilität der *Umwelteinflüsse* als zentrales Problem, das der reproduzierbaren Bestimmung von Verteilungsmechanismen, Expositionswerten und Wirkungsbedingungen entgegensteht. Dieses Problem kann zugespitzt so formuliert werden, daß man die Umwelteinflüsse einerseits nicht vollständig erfassen kann und daß man andererseits Artefakte ohne Realitätsbezug erhält, wenn man sie auszuschließen versucht.

Hinzu kommt die Variabilität der *Zielorganismen*. Bei den Wirkungen auf den Menschen steht dabei die *interindividuelle* Variabilität im Vordergrund, während im Bereich der sonstigen Lebewesen die beträchtlichen Unterschiede zwischen den zahllosen Spezies unvermeidlich auf die Frage führt: Auf welche Spezies soll eine Regelung sich abstützen? Ist es nicht die empfindlichste, so nimmt man bewußt den Verlust von Arten in Kauf. Bezieht man sich hingegen auf sehr empfindliche Arten, kann die Regelung zu rigoros ausfallen.

Der Einfluß der Umweltbedingungen wird umso stärker wirksam, je weiter die Untersuchung von den physikalisch-chemischen Substanzigenschaften über die Expositionsanalyse bis zur Wirkungsanalyse vordringt: Die Toxizität einer Substanz hängt ab vom Zielorganismus (z.B. Pflanzen; Mikroben, Wirbellose, Fische, Säugetiere, Menschen), von der Höhe und Dauer der Exposition (akut, chronisch; hoch, niedrig), von Art und Umfang der Resorption durch den Organismus (über Nahrung, Atmung oder durch die Haut). Daher bleibt die explizite und dabei möglichst allgemeingültige Formulierung von Dosis-Wirkungs-Beziehungen ein offenes und kontrovers diskutiertes Problem. Unklar sind u.a. die folgenden Punkte:

- die Aussagekraft von Einzeltests über den getesteten Bereich hinaus (Extrapolation auf tiefere Dosen, längere Expositionszeiten, andere Spezies, andere Wirkebenen (Population, Ökosystem)) (Suter 1993, Mathes 1997);

- die Eignung von Schwellenwerten wie dem *no observed adverse effect level* als Bezugspunkte für die Bewertung (Hoekstra u. van Ewijk 1993, Laskowski 1995);
- der Zusammenhang zwischen den verschiedenen Wirkungsebenen (molekulare und zelluläre Ebene, Organe, Organismen, Populationen, Ökosysteme) (Power u. McCarthy 1997);
- die Mechanismen von Kombinationswirkungen.

Die vorangehend beschriebenen Schwierigkeiten, die sich im Rahmen von Expositionsanalyse und Wirkungsanalyse ergeben, können folgenden Bereichen zugeordnet werden:

1. *Unvollständigkeit des Untersuchungsrahmens*: Die sehr hohe Komplexität von Umweltsystemen führt dazu, daß der Untersuchungsgegenstand nie vollständig abgedeckt ist: Die Randbedingungen und Systemgrenzen einer Untersuchung sind zu gewissem Grad willkürlich bzw. kontingent, dies wiederum bedeutet, daß die Resultate verschiedener Untersuchungen i.a. nicht kompatibel sind und daß bei konkreten Daten ein hoher Interpretationsbedarf besteht.
2. *Unklare Relevanz der Indikatoren*: Die Schwierigkeiten, auf der deskriptiven Seite des Verfahrens die Komplexität zu reduzieren, haben ihre Entsprechung auf der normativen Seite: Vielfach ist nicht klar, inwiefern die verwendeten Indikatoren überhaupt Schäden (welcher Art, welchen Ausmaßes) dokumentieren, d.h. es fehlen *Werturteile* für die Festlegung des normativen Bezugspunkts und für die Auswahl der relevanten Zielgrößen.
3. *Unklare Gewichtung verschiedener Indikatoren*: Auch für den Fall, daß sich eine Untersuchung auf gewisse, explizit herausgestellte Indikatoren konzentriert (z.B. die Toxizität einiger Leitchemikalien bezüglich einiger Leitspezies), bleibt unklar, wie diese Indikatoren

relativ zueinander zu gewichten sind bzw. wie sie zu einer Gesamtgröße aggregiert werden können. Die Befunde sind also „multidimensional“ (jeder Indikator entspricht einer Dimension), ohne daß ein gemeinsamer Maßstab gegeben wäre.

4. *Mangelnde Praktikabilität:* Industriell hergestellt werden weltweit etwa 100000 chemische Substanzen, hinzu kommt eine unbekanntete Zahl von Verunreinigungen und Umwandlungsprodukten (Streit 1994). Bei dieser Zahl ergibt sich aus der Diskussion sämtlicher Transport-, Transformations- und Wirkungsprozesse eine Menge von Detailfragen, die die Kapazität und Leistungsfähigkeit auch des umfangreichen modernen naturwissenschaftlichen Systems weit übersteigt.

3. Reichweiten

In der Umweltchemie ist die zeitliche Reichweite einer anthropogenen Substanz ein Maß für ihre Verweildauer (Persistenz) in der Umwelt. Die zeitliche Reichweite wird allgemein als zentral für die Beurteilung des Umweltverhaltens chemischer Substanzen angesehen (Stephenson 1977, Klöpffer 1989). Der Vorschlag, analog zur zeitlichen Reichweite räumliche Reichweiten als ein Maß für die Mobilität einer Substanz in der Umwelt – d.h. für ihr Potential, weit entfernt vom Freisetzungsort Schäden zu verursachen – heranzuziehen, geht zurück auf Scheringer, Berg und Müller-Herold (1994). Insbesondere wird vorgeschlagen, zeitliche und räumliche Reichweiten auf der Grundlage von Expositionen zu definieren und damit von einer wirkungs- zu einer expositions-basierten Chemikalien-Bewertung zu gelangen. Im folgenden ist dieser Ansatz von den Autoren weiter präzisiert worden (Scheringer u. Berg, 1994; Müller-Herold, 1996). Die technischen Einzelheiten der Berechnung räumlicher Reichweiten hat Scheringer (1996, 1997) anhand eines numerischen Modells ausgearbeitet und dargestellt. Die Entwicklung eines analytischen Berechnungsverfahrens

rens ist von Müller-Herold und Nickel (1998) kürzlich abgeschlossen worden.

Reichweiten von Chemikalien lassen sich grundsätzlich aus Meßdaten oder aus Modellrechnungen ableiten. Bei der hier vorgestellten Methode werden Reichweiten anhand einfacher Modelle abgeschätzt, die auf das „Einheitswelt“-Konzept aufbauen. In der Sprache dieser Modelle werden dabei folgende Prozesse berücksichtigt, die für die globale Chemodynamik in erster Linie bestimmend sind: (1) der langreichweitige Transport in der Atmosphäre durch Windströmung, (2) der langreichweitige Transport in den Ozeanen durch Wasserströmungen, (3) der Stoffaustausch zwischen Boden, Wasser und Luft sowie (4) der Stoffabbau in den drei Kompartimenten Boden, Wasser und Luft. (Die Überlegungen, die zur Auswahl gerade dieser Vorgänge und zur Nichtberücksichtigung anderer führen, sind ausführlich dokumentiert und können in der entsprechenden Literatur gefunden werden). Unmittelbares Resultat sind räumlich verteilte Expositionswerte (Exposition = zeitintegrierte Konzentration). Aus den Expositionsverteilungen werden in einem zweiten Schritt räumliche Reichweite und Persistenz ermittelt.

3.1 *Expositionsabschätzung: Ausgangsdaten*

Für diese Rechnungen werden 1. geophysikalische, stoffunabhängige und 2. umweltchemische, stoffabhängige Daten benötigt. Im allereinfachsten Fall – definiert durch die Annahme des sofortigen lokalen Verteilungsgleichgewichtes zwischen den Kompartimenten Boden, Wasser und Luft – bestehen die erforderlichen geophysikalischen Daten aus den (relativen) Volumina V_i der drei Kompartimente, sowie aus den entsprechenden Diffusionskoeffizienten D_i , die den großräumigen Transport in Troposphäre und Ozeanen definieren:

Phase	$D_i / \text{km}^2 \text{ s}^{-1}$	V_i / m^3
Wasser (w)	0.01	233
Luft (a)	4	200 000
Boden (s)	0	1

An stoffspezifischen Daten werden die Abklingkonstanten k_a , k_w und k_s für die drei Kompartimente – tabelliert etwa in Howard *et al.* (1991) – sowie die Verteilungskoeffizienten K_{ij} für die thermodynamische Gleichgewichtsverteilung zwischen den Kompartimenten i und j benötigt. K_{aw} , K_{sw} und K_{as} sind die Luft-Wasser-, Boden-Wasser und Luft-Boden-Verteilungskoeffizienten (N.B.: Es gilt $K_{ij} = 1/K_{ji}$) Die Verteilungskoeffizienten errechnen sich aus der Henry-Konstanten K_H (in $\text{Pa m}^3 \text{ mol}^{-1}$) und dem Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten K_{oc} einer Substanz

$$K_{aw} = K_H / RT,$$

$$K_{sw} = f_{oc} K_{ow} = f_{oc} \times 0.41 \times K_{oc} = 0.82 \times K_{oc}.$$

$$K_{as} = K_{aw} / K_{sw}$$

Der Anteil f_{oc} des organischen Kohlenstoffs am Bodenmaterial wurde zu 0.02 angesetzt. Der Faktor 0.41 überführt den Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten K_{ow} in den Verteilungskoeffizienten K_{ow} organische Materie-Wasser. (Die Kalibrierung dieser Größen hat eine lange Vorgeschichte, für die wiederum auf die entsprechende Literatur verwiesen sei.)

Als Beispiel sei Lindan (Hexachlorhexan) angeführt, welches ähnliche Eigenschaften wie DDT aufweist. In Ländern der Dritten Welt wird es aus Kostengründen verbreitet eingesetzt. Bei der Bekämpfung von Bodenschädlingen ist es DDT überlegen.

Verbindung	k_s (s^{-1})	k_w (s^{-1})	k_a (s^{-1})	$\log K_{ow}$	K_H ($\text{Pa m}^3/\text{mol}$)
Lindan	6.32×10^{-8}	6.32×10^{-8}	3.782×10^{-6}	3.61	2.96×10^{-1}

In der hier skizzierten, einfachsten Variante ist das Modell auf unpolare organische Chemikalien zugeschnitten (weitere Beispiele siehe Tab 1). Für Substanzen, die unter verschiedenen Bedingungen (pH-Wert, Redoxpotential) in Form verschiedener Spezies (Ionen, Komplexe) vorliegen, müssen die Formeln angepaßt werden. Dasselbe gilt für den Fall,

daß Effekte zweiter Ordnung wie Bindung an suspendierte Sedimente oder an atmosphärische Partikel mit einbezogen werden sollen.

3.2 Skizze der Reichweitenberechnung

Mit Hilfe dieser Modellparameter wird nun folgende Situation modelliert: An einer Stelle $x = 0$ werde zu einer bestimmten Zeit $t = 0$ eine Einheitsmenge der fraglichen Substanz freigesetzt. Diese verteilt sich zunächst lokal in die drei Kompartimente und wird dann in Wasser und Luft (möglicherweise global) verfrachtet. Zugleich unterliegt sie in den Kompartimenten einem Abbau. Die Lösung der entsprechenden Modell-Gleichungen – auf Grundlage der oben angeführten Parameter – liefert dann Werte für die Konzentration $c(x,t)$ an einem beliebigen anderen Ort x zu einer beliebigen anderen Zeit t . Die Gleichungen können entweder numerisch auf dem Computer (Methode Scheringer) oder aber analytisch von Hand (Methode Müller-Herold) gelöst werden.

Die Exposition $e(x)$, d.h. die zeitlich kumulierte Belastung an eine festen Ort x , erhält man durch Summieren über die Belastungen zu allen Zeiten t (Das mag man sich so vorstellen: Am Ort x wird einfach ein Zähler aufgestellt, der die eintreffenden Molekeln registriert und die Ereigniszahlen aufsummiert)

$$e(x) \stackrel{def}{=} \int_0^{\infty} c(x,t) dt$$

Die Expositionen sind nun die eigentlichen Rohdaten, aus denen zeitliche und räumliche Reichweiten berechnet werden. Dafür gibt es eine Reihe verschiedener Möglichkeiten. Die bisher von uns untersuchten Fälle führen auf sehr ähnliche Werte, so daß eine differenzierende Diskussion der verschiedenen Methoden nicht notwendig ist. Dasselbe betrifft auch weitere Einzelheiten wie die Modellierung auf einer Kreislinie bzw. auf einer Kugeloberfläche. Auch hier zeigt sich, daß man analoge Ergebnisse erhält, ganz gleich ob man die Welt durch eine Kreislinie oder eine Kugeloberfläche approximiert).

Erwähnt werden muß dabei die Annahme, daß sowohl die Kreislinie als auch die Kugeloberfläche als gleichförmig (unstrukturiert, homogen, isotrop) vorausgesetzt werden – wenn man von der Aufteilung in die drei Kompartimente absieht. Natürlich ist die Erdoberfläche nicht gleichförmig. Dementsprechend hängen die Expositionen sehr wohl vom Freisetzungsort wie auch von der sonstigen Struktur der Oberfläche ab. Für eine *substanzorientierte* Folgenabschätzung, die sich ja auf den allgemeinen Fall bezieht, darf indessen kein spezieller Freisetzungsort ausgezeichnet werden: Freisetzung kann irgendwo erfolgen. Um die Auswirkung spezieller Freisetzungsorte auszuschalten, hat man über alle Anfangsbedingungen (Freisetzungsorte) zu mitteln. Dies ist mathematisch gleichwertig zur Freisetzung in einer gleichförmigen Welt.

Zeitliche Reichweite (Symbol: τ) und die räumliche Reichweite (Symbol: ρ) können nunmehr explizit angegeben werden. Im Fall von Lindan etwa erhält man

$$\tau = 21.7 \text{ Tage} , \quad \rho = 2 \text{ 600 km.}$$

Weitere Beispiele finden sich in Tab 2 (S. 22) sowie in den Abb. 1 und 2 (S. 47, 48). Für Einzelheiten siehe Scheringer (1997) sowie Müller-Herold und Nickel (1998).

3.3 Differenzierungen aufgrund von Reichweiten

Bei der Frage, wie das Reichweitenkonzept in der weiteren Diskussion eingesetzt werden kann, unterscheiden wir zwischen dem politisch-staatlichen und dem ethischen Diskussionsrahmen. Die Unterscheidung ergibt sich daraus, daß die Möglichkeiten staatlichen Handelns begrenzt sind, so daß universalistische Ethiken in der Praxis undurchsetzbar sind. Andererseits wird aber auch innerhalb der Möglichkeiten staatlicher Souveränität nicht unbedingt ethisch gehandelt.

Am offensichtlichsten betrifft das die Frage der intergenerationellen Gerechtigkeit, die in der Ethik vergleichsweise breit diskutiert wird, während sie im rechtlich-politischen Bereich des großen Zeithorizontes wegen kaum praktische Bedeutung hat. Hinzu kommt die Frage der

rechtlichen Zuständigkeit: hier spielt es eine wichtige Rolle, ob Probleme im innerstaatlichen Rahmen, zwischen zwei oder einigen wenigen Staaten, oder aber global geregelt werden müssen, während diese Unterscheidungen in der Ethik, insbesondere vor dem Hintergrund von Universalisierbarkeitsforderungen, eine vergleichsweise geringere Bedeutung haben.

Im Bereich der zeitlichen Reichweiten ist die Spanne von 25 Jahren dadurch ausgezeichnet, daß diese Zeit im Schnitt der Dauer einer Generationenfolge entspricht. Es kommt hinzu, daß 25 Jahre in der Größenordnung auch der Spanne des aktiven Berufslebens entsprechen, d.h. der Zeit, während der einem Menschen wirksame Handlungsmöglichkeiten zu Gebote stehen. Bezüglich der zeitlichen Reichweiten τ unterscheiden deshalb wir 3 Fälle:

1. $\tau > 25$ Jahre. In diesem Fall erstrecken sich die Auswirkungen über mehr als eine Generation. Organische Xenobiotika mit derartig langer Lebensdauer dürften nicht zugelassen werden. Potentielle Verwender haben sie entweder durch andere Stoffe zu ersetzen oder chemisch so lange abzuwandeln (analog zu den Modifizierungen bei der Arzneimittelentwicklung), bis sie in Kategorie 3. fallen
2. $1 \text{ Jahr} \leq \tau \leq 25 \text{ Jahre}$. Es können sich ernsthafte Probleme ergeben, die von der verursachenden Generation getragen und gelöst werden müssen. In diesem Falle ist die Substanz entweder zu ersetzen, zu modifizieren (analog zu den Modifizierungen bei der Arzneimittelentwicklung), bis sie in Kategorie 3. fällt, oder der Umgang mit ihr müßte unter ähnlichen Sicherheitsvorkehrungen erfolgen wie jener mit radioaktiven Materialien.
3. $\tau \leq 1$ Jahr. Vom Standpunkt der zeitlichen Reichweiten – und nur von diesem aus – gibt es keine Einwände gegen diese Substanzen (Schwierigkeiten können sich ergeben aus großer räumlicher Reichweite, großen Mengen, hoher akuter Toxizität, langzeitigem Einsatz)

TABELLE 1

Abklingkonstanten und Verteilungskoeffizienten (nach Scheringer, 1996)

Verbindung	k_s (s ⁻¹)	k_w (s ⁻¹)	k_a (s ⁻¹)	log K_{ow}	K_H (Pa m ³ /mol)
1 CCl ₃ F	2.93x10 ⁻⁸	2.93x10 ⁻⁸	2.72x10 ⁻¹⁰	2.53	9.83x10 ³
2 CH ₃ CClF ₂	2.93x10 ⁻⁸	2.93x10 ⁻⁸	1.40x10 ⁻⁹	1.60	2.42x10 ⁴
3 Tetrachlorkohlenstoff	2.93x10 ⁻⁸	2.93x10 ⁻⁸	2.19x10 ⁻⁹	83	3.08x10 ³
4 Tetrachlorethylen	2.93x10 ⁻⁸	2.93x10 ⁻⁸	9.11x10 ⁻⁸	3.40	1.51x10 ³
5 1-Butanol	2.00x10 ⁻⁶	2.00x10 ⁻⁶	3.99x10 ⁻⁶	0.88	5.64x10 ⁻¹
6 Dioxan	7.71x10 ⁻⁸	7.71x10 ⁻⁸	4.32x10 ⁻⁶	-0.27	4.94x10 ⁻¹
7 Cyclohexan	7.71x10 ⁻⁸	7.71x10 ⁻⁸	4.03x10 ⁻⁶	3.44	1.95x10 ⁴
8 Benzol	7.64x10 ⁻⁷	7.64x10 ⁻⁷	6.99x10 ⁻⁷	2.13	5.50x10 ²
9 Pyridin	2.00x10 ⁻⁶	2.00x10 ⁻⁶	2.73x10 ⁻⁷	0.65	7.09x10 ²
10 Azeton	2.00x10 ⁻⁶	2.00x10 ⁻⁶	1.25x10 ⁻⁷	-0.24	3.72x10 ⁰
11 Formaldehyd	2.00x10 ⁻⁶	2.00x10 ⁻⁶	5.31x10 ⁻⁵	0.35	3.31x10 ⁻²
12 Aldrin	2.62x10 ⁻⁸	2.62x10 ⁻⁸	3.85x10 ⁻⁵	6.50	5.03x10 ¹
13 Chlordan	9.88x10 ⁻⁹	9.88x10 ⁻⁹	6.77x10 ⁻⁶	5.54	4.91
14 Dieldrin	1.27x10 ⁻⁸	1.27x10 ⁻⁸	8.66x10 ⁻⁶	4.32	5.88
15 Endosulfan	1.74x10 ⁻⁶	1.74x10 ⁻⁶	1.41x10 ⁻⁵	3.83	1.13
16 Hexachlorobenzol	5.24x10 ⁻⁹	5.24x10 ⁻⁹	9.33x10 ⁻⁹	5.31	1.32x10 ²
17 Lindan	6.32x10 ⁻⁸	6.32x10 ⁻⁸	3.78x10 ⁻⁶	3.61	2.96x10 ⁻¹
18 Mirex	1.80x10 ⁻⁹	5.36x10 ⁻⁸	1.76x10 ⁻¹⁰	6.89	7.10x10 ¹
19 Hexachlorobiphenyl	4.17x10 ⁻⁹	4.17x10 ⁻⁹	1.16x10 ⁻⁷	6.80	3.00x10 ¹
20 Chlorbenzol	7.36x10 ⁻⁸	7.36x10 ⁻⁸	4.80x10 ⁻⁷	2.84	3.49x10 ²
21 1,4-Dichlorbenzol	7.71x10 ⁻⁸	7.71x10 ⁻⁸	1.75x10 ⁻⁷	3.52	1.52x10 ²
22 1,2,4-Trichlorbenzol	7.71x10 ⁻⁸	7.71x10 ⁻⁸	2.73x10 ⁻⁸	4.02	1.44x10 ²
23 Toluol	6.17x10 ⁻⁷	6.17x10 ⁻⁷	3.38x10 ⁻⁶	2.73	6.01x10 ²
24 <i>p</i> -Cresol	2.27x10 ⁻⁵	2.27x10 ⁻⁵	2.33x10 ⁻⁵	1.94	9.79x10 ⁻²
25 Nitrobenzol	7.63x10 ⁻⁸	7.63x10 ⁻⁸	6.44x10 ⁻⁵	1.85	2.47x10 ⁰
26 Malathion	1.61x10 ⁻⁶	2.88x10 ⁻⁷	3.56x10 ⁻⁵		2.03x10 ⁻³
27 Methyl Parathion	4.34x10 ⁻⁸	3.48x10 ⁻⁷	3.34x10 ⁻⁵	2.86	1.01x10 ⁻²
28 Disulfoton	6.69x10 ⁻⁷	6.69x10 ⁻⁷	7.27x10 ⁻⁵	4.02	4.04x10 ⁻¹
29 Atrazin	6.06x10 ⁻⁸	1.07x10 ⁻⁶	1.01x10 ⁻⁵	2.75	2.66x10 ⁻⁴

TABELLE 2

Zeitliche und räumliche Reichweiten

Verbindung	τ (Tage)	ρ (Kilometer)
1 CCl ₃ F	28600	20037
2 CH ₃ CClF ₂	5720	20032
3 Tetrachlorkohlenstoff	3620	20027
4 Tetrachloroethylene	88.2	15526
5 1-Butanol	3.45	1451
6 Dioxan	11.5	2507
7 Cyclohexan	1.99	2708
8 Benzol	11.5	6479
9 Pyridin	28.7	10096
10 Azeton	8.50	4203
11 Formaldehyd	3.11	398
12 Aldrin	1.54	874
13 Chlordan	10.3	2079
14 Dieldrin	1.71	1847.
15 Endosulfan	1.70	1232
16 Hexachlorobenzol	921	19847
17 Lindan	21.7	2598
18 Mirex	4360	19321
19 Hexachlorobiphenyl	877	11603
20 Chlorbenzol	16.7	7823
21 1,4-Dichlorobenzol	46.4	12352.
22 1,2,4-Trichlorobenzol	30.0	10197
23 Toluol	2.38	2956
24 p-Cresol	0.344	1110
25 Nitrobenzol	0.270	678
26 Malathion	24.8	539
27 Methyl Parathion	17.7	617
28 Disulfoton	1.09	616
29 Atrazin	7.63	267

Anmerkung: Die sehr hohen Ausbreitungsgeschwindigkeiten im Falle kurzer Lebensdauer beruhen auf einer physikalisch unrealistischen Eigentümlichkeit der Diffusionsgleichung. Der hier entwickelte Ansatz wurde für persistente Chemikalien entwickelt, für welche dieses Verhalten ohne Bedeutung ist.

Bezüglich der räumlichen Reichweiten ρ sei daran erinnert, daß bei einer Reichweite von 10 000 km in einer flachen Welt ein Kreis mit einem Durchmesser von 20 000 km und auf der Erdkugel gerade eine Hemisphäre nach einer örtlich eng umschriebenen Freisetzung bestrichen wird. Dementsprechend unterscheiden wir 3 Fälle:

1. $\rho > 10\,000$ km. Dies sind Stoffe von globaler Reichweite. Ihr Einsatz sollte nicht gestattet werden, ihr Verwendungszweck mit geeigneteren Substanzen erreicht werden. Ausnahmen könnten überzeugend begründete, zeitlich begrenzte Anwendungen im Kleinmaßstab bilden.
2. $2\,000 \text{ km} \leq \rho \leq 10\,000$ km. Dies sind Stoffe von hemisphärischer Reichweite. Sie verursachen grenzüberschreitende Verschmutzung. Ihre Handhabung ist international zu beobachten, wie dies im Rahmen des „critical loads“-Programmes erfolgt. Sie sind mittelfristig geeignet zu verändern oder zu ersetzen.
3. $\rho \leq 2\,000$ km. Stoffe von (im wesentlichen) nationaler Reichweite. Vom Standpunkt der räumlichen Reichweiten – und nur von diesem aus – gibt es keine Einwände gegen diese Substanzen (Schwierigkeiten können sich ergeben aus großer zeitlicher Reichweite (Persistenz), großen Mengen, hoher akuter Toxizität, langfristigem Einsatz).

4. Reichweiten und Chemikalienbewertung

4.1 Das Vorsorgeprinzip

Die Verfahren zur Risikobewertung gehen von der Unterstellung aus, daß die zu beurteilenden Handlungen hinsichtlich ihrer Wirkungen bekannt sind, so daß das Auftreten von Schäden sowohl im Ausmaß als auch in der relativen Häufigkeit des Auftretens spezifiziert werden kann. Die Folgen einer Handlung werden dabei zur Beurteilung ihrer

Wünschbarkeit herangezogen. Eine derartige Verfahrensweise ist nicht mehr möglich, wenn man über die Folgen einer fraglichen Handlung entweder überhaupt nichts weiß oder aber eine Unsicherheit solchen Ausmaßes besteht, daß man sich eine verantwortungsvolle Handlungsbeurteilung nicht zutraut (Renn, 1991). Diese Art von Ahnungslosigkeit ist grundsätzlich zu unterscheiden von derjenigen Unsicherheit, die sich darin niederschlägt, daß das Eintreten ihrer Art nach bekannter Folgen nur mit einer bestimmtem Wahrscheinlichkeit vorausgesagt wird. Unsicherheit führt dazu, daß man mit einer Schwankungsbreite des Eintretens von Wirkungen rechnet, Ahnungslosigkeit führt zur Nichtbeachtung möglicher, jedoch noch nicht erkannter Handlungsfolgen.

Eine Lösung des Problems der Ahnungslosigkeit wird darin gesehen, eine Minimierung von Handlungsfolgen überhaupt anzustreben. Diesem Ansatz hat eine Reihe von Ländern – darunter die Bundesrepublik Deutschland – innerhalb des Umweltrechtes in Gestalt des Vorsorgeprinzips besondere Geltung eingeräumt. Das Vorsorgeprinzip ist dabei nicht nur ein Prinzip des Umweltrechts, sondern zugleich auch eine Leitidee der Umweltpolitik. (Rehbinder 1990) Grundsätzlich sollen danach etwa Emissionen auch dann vermieden werden, wenn negative Wirkungen aufgrund fehlender Kenntnisse nicht bekannt sind, sie aber auch nicht ausgeschlossen werden können.

4.2 Das ALARA-Prinzip und der „Stand der Technik“

In inhaltlicher Hinsicht ist das Vorsorgeprinzip nach dem gegenwärtigen Stand der Diskussion recht unscharf. In der Praxis wird das Gebot der Vorsorge gegen noch unbekannte Wirkungen von Emissionen nach zwei unterschiedlichen Prinzipien zur Geltung gebracht:

- dem Grundsatz vom „Stand der Technik“. Nach diesem Prinzip muß jede Emission unterbleiben, die mit einer auf dem Markt vorhandenen und erprobten Rückhaltetechnik vermieden werden

könnte. Neben dieser „schwachen“ Form gibt es noch eine weitergehende, „starke“ Form des Prinzips, in der nicht die Verfügbarkeit einer Technik auf dem Markt herangezogen wird, sondern das Vorhandensein wissenschaftlichen Know-hows für die mögliche Entwicklung neuartiger Anlagen zum Maßstab gemacht wird. Dieser starken Form des Prinzips entspricht der im deutschen Atomgesetz verankerte „Stand der Wissenschaft und Technik“, wonach neue, aus der Wissenschaft stammende Konzepte zur Rückhaltung von Schadstoffen oder zur Verbesserung technischer Sicherheit auch dann verwirklicht werden müssen, wenn sie noch nicht technisch erprobt sind (Renn 1991).

- dem „ALARA-Prinzip“ (as low as reasonably achievable). Nach diesem Grundsatz muß jede Emission so weit wie möglich reduziert werden, wobei die Grenze des Möglichen bei dem gerade noch wirtschaftlich und sozial vertretbaren Aufwand zu sehen ist. Das „reasonably achievable“ im Namen bedingt, daß Alternativen (Kompensationsmöglichkeiten) bestehen, d.h. auf dem Markt verfügbar sind (Renn, 1991). Insofern erscheint das ALARA-Prinzip als eine besondere Form des schwachen Prinzips vom Stand der Technik. (Das starke Prinzip vom Stand der Technik und Wissenschaft geht dann aber über das ALARA-Prinzip hinaus.)

Gegenüber beiden Prinzipien wird angeführt, daß sie zu suboptimalen Lösungen führten. So wird etwa argumentiert, daß bei Anwendung des (schwachen) Grundsatzes vom Stand der Technik ein „möglicherweise gefährlicher“ Stoff in großen Mengen freigesetzt werden darf, sofern auf dem Markt eine entsprechende Rückhalte-Technologie nicht verfügbar ist, oder aber, daß umgekehrt wertvolle wirtschaftliche Ressourcen für die Reduzierung eines „völlig ungefährlichen“ Stoffes verwandt werden, nur weil auf dem Markt genügend Techniken dafür angeboten werden (Renn 1991).

In der Praxis wird es häufig so sein, daß eine Art „gemischter“ Situation vorliegt: bezüglich einiger weniger Schadensdimensionen werden Kenntnisse bestehen, die Risikoüberlegungen und damit optimale

Lösungen ermöglichen. Bezüglich des ganzen unbekanntes Restes hingegen wird das Vorsorgeprinzip zum Zuge kommen müssen.

Insgesamt ist festzustellen, daß Prinzipien der Vorsorge vor allem dann gelten sollten, wenn über mögliche Konsequenzen einer Handlung weitgehend Ungewißheit herrscht. Ist diese Voraussetzung nicht gegeben, können Prinzipien der Vorsorge als Anreize zur Risikoreduktion dienen, führen aber zur suboptimalen Verwendung gesellschaftlicher Ressourcen. Abweichung vom optimalen Modell ergibt und rechtfertigt sich in jedem Fall durch Anwendung des Vorsorgeprinzips (bezüglich der Dimensionen der Ahnungslosigkeit).

4.3 Reichweiten, ALARA und der Stand der Technik

Bei der traditionellen emissionsorientierten Anwendung des ALARA-Prinzips und des Prinzips vom „Stand der Technik“ ist die Zielgröße eine MengenvARIABLE: es geht um die Quantitäten freigesetzter Stoffe. Der Bezugspunkt sind also Emissionen. Auswirkungen in der Umwelt beruhen aber in kausal viel direkterer Weise auf Immissionen und in noch direkterer Weise auf Expositionen. *Es zeigt sich nun, daß das ALARA-Prinzip mit Hilfe des Reichweitenkonzeptes aus seinem traditionellen Anwendungsbereich, den Emissionen, auf die wirkungsnäheren Kriterien Immission und Exposition übertragen und damit präventiv wirkungsvoller eingesetzt werden kann.*

Zwischen Emission am Freisetzungsort und Immission am Wirkungsort liegt ein weiter und komplizierter Weg, der im zweiten Schritt des klassischen Vierschritt-Verfahrens der Chemikalienbewertung behandelt wird (s. Abs. 2.1). Es stellt sich nun heraus, daß Immissionen an einem fest vorgegebenen Ort sich als Produkt zweier Faktoren ergeben, die getrennt voneinander bewertet und gesteuert werden können: der am Freisetzungsort emittierten Menge einerseits und andererseits des Vermögens der Substanz, auf den verschiedensten Wegen an den Immissionsort zu gelangen. Immission ist, grob gesagt, das Produkt

von Emissionsmenge M_o und Mobilitätsverhalten (s. Abs. 6.2 Gl. (A.1): Die örtlichen Konzentrationen – und damit auch die Exposition – sind linear in M_o , das damit immer als Faktor abgespalten werden kann). Mit Hilfe dieser Faktorisierung lassen sich das ALARA-Prinzip und das Prinzip vom „Stand der Technik“ auf Immissionen übertragen: durch Beibehaltung der beiden Prinzipien in Bezug auf Emission und durch ihre Erweiterung zu einem Qualitätsziel für das Mobilitätsverhalten bei der Auswahl vorhandener bzw. beim Entwurf von neuen Chemikalien für einen bestimmten Einsatz.

Noch wirkungsnäher ist man bei einer Übertragung beider Prinzipien auf *Expositionen*. Um das zu sehen, stelle man sich vor, eine Substanz sei weitgehend immobil und verbleibe im wesentlichen am Freisetzungsort. Schwermetalle sind dafür ein gutes Beispiel: Emission und Immission sind in diesem Falle proportional, identisch bis auf eine Einheitenumrechnung. Die Wirkung der bewußten Substanz hängt nun davon ab, wie lange es dauert, bis sie an diesem Ort abgebaut bzw. mineralisiert worden ist. Quantitativ wird das in der Definition der Exposition zusammengefaßt (s. Abs. 3.2). Wie zuvor die Immission faktorisiert *in diesem besonderen Fall* auch die Exposition in ein Produkt zweier Faktoren: der emittierten Menge und der Lebensdauer (Persistenz). Ganz analog läßt sich auch hier das ALARA-Prinzip und das Prinzip vom „Stand der Technik“ auf Expositionen übertragen: durch Beibehaltung der beiden Prinzipien in Bezug auf Emissionsmengen und durch ihre Erweiterung zu einem Qualitätsziel bezüglich des Persistenzverhaltens bei der Auswahl von Chemikalien.

Das Gesagte läßt sich nun so zusammenfassen: Mobilitätsverhalten und Persistenz können quantitativ charakterisiert werden durch Angabe der räumlichen und zeitlichen Reichweiten ρ und τ . Bei gegebener Emissionsmenge genügen deshalb Immissionen und Expositionen einem ALARA-Prinzip bzw. einem Prinzip vom „Stand der Technik“, falls auch zeitliche und räumliche Reichweite der emittierten Substanzen derartigen Prinzipien genügen. Für Reichweiten heißt das:

- Eine Substanz genügt einem ALARA-Prinzip bezüglich der Reichweiten, falls zeitliche und räumliche Reichweite so klein wie mög-

lich sind: as low as reasonably achievable. Danach müßte unter den für den vorgesehenen Verwendungszweck in Frage kommenden Stoffen jener eingesetzt werden, der die kürzesten Reichweiten aufweist, wobei wiederum die Grenze des Möglichen bei dem gerade noch wirtschaftlich und sozial vertretbaren Aufwand zu sehen wäre.

- Das „schwache“ Prinzip vom Stand der Technik (der Chemie) würde in diesem Fall besagen, daß der Einsatz eines Stoffes unterbleiben muß, falls der Verwendungszweck mit einer auf dem Markt vorhandenen und erprobten Substanz kürzerer Reichweite erreicht werden kann.
- Das „starke“ Prinzip vom Stand der Technik (in diesem Falle: der Chemie) wäre hier wohl so zu fassen, daß der Einsatz eines Stoffes unterbleiben muß, falls der Stand der chemischen Wissenschaft Herstellung und Einsatz eines geeigneteren, noch nicht synthetisierten Stoffes als aussichtsreich erscheinen läßt.

Im Sinne der Reichweiten-Unterscheidungen (Abs. 3.3.) wäre für die Zulassungspraxis folgendes Vorgehen denkbar: Die Maximal-Reichweiten von $\rho > 10\,000$ km und/oder $\tau > 25$ Jahre sind Ausschluß-Kriterien: Substanzen aus diesen Klassen sind unzulässig. Im mittleren Bereich $2000\text{ km} \leq \rho \leq 10\,000\text{ km}$ und/oder $1\text{ Jahr} \leq \tau \leq 25\text{ Jahre}$ könnte das ALARA-Prinzip eingesetzt werden. Substanzen aus den unteren Klassen $\rho < 2\,000\text{ km}$ und/oder $\tau \leq 1\text{ Jahr}$ können – aus der Sicht des Reichweitenkonzeptes – beibehalten werden.

4.4 Erstes Beispiel: H-FCKW

Fluorchlorkohlenwasserstoffe (FCKW) werden seit den dreißiger Jahren als Kühlmittel eingesetzt, weil sie nicht brennbar sowie kaum toxisch sind und einen hohen Dampfdruck haben. Wegen ihrer Wirkungen als Treibhausgase und bei der Schädigung der Ozonschicht in der Stratosphäre wurde im Protokoll von Montreal 1986 international

vereinbart, die Freisetzung bis zum Jahre 2000 um 50% zu vermindern. Es ergab sich die Nachfrage nach geeigneten Ersatzstoffen mit 1. ähnlichen erwünschten Eigenschaften (geringe Brennbarkeit und Toxizität, hoher Dampfdruck), 2. weniger Nebenwirkungen in der Atmosphäre. Die zu erhaltenden (ähnlichen) Eigenschaften stellen sicher, daß die Ersatzstoffe in den bestehenden technischen Anlagen weiter verwendet werden können, daß also keine Investitionen für neue Anlagen notwendig waren. Die unerwünschten Nebenwirkungen in der Stratosphäre andererseits beruhen vor allem auf der langen Verweildauer in den tieferen Schichten der Atmosphäre unterhalb einer Höhe von 15 km (der Troposphäre), die eine Vorbedingung für einen mengenmäßig relevanten Übertritt in die Stratosphäre ist (in der sich die einmal dort angelangten Substanzen über Jahrzehnte halten).

FCKW	HFCKW	Troposphärische Lebensdauer /Jahre
CCl ₃ F		60
CCl ₂ F ₂		120
CCl ₃ -CClF ₂		90
CClF ₂ -CClF ₂		200
CClF ₂ -CF ₃		400
	CHCl ₂ -CF ₃	1.6
	CH ₃ -CCl ₂ F	7.8

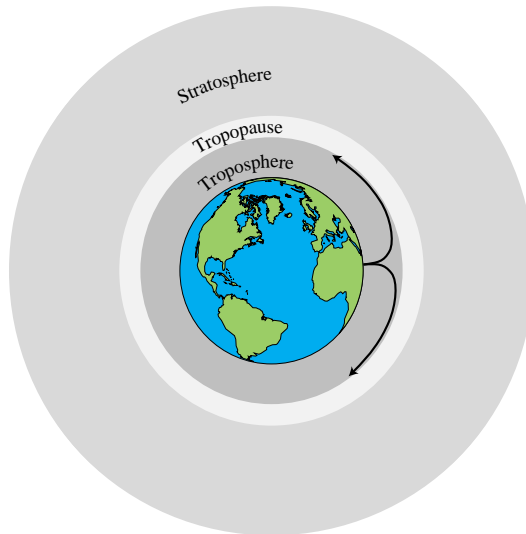
Tabelle 3:

Troposphärische Lebenszeiten von FCKW und HFCKW (Nach Ballschmiter, 1992)

Die Kenntnis der troposphärischen Abbauprozesse führte zu der wissenschaftlich begründeten Vermutung, daß die Einführung einiger Wasserstoff-Atome in die FCKW-Moleküle zu schneller abbaubaren Verbindungen mit den gewünschten Eigenschaften führen würde. Diese Vermutung wurde rasch bestätigt (s. Tabelle 3). Vom Standpunkt des Reichweitenkonzeptes wurde damit: 1. die vertikale Reichweite von 50 km auf 15 km Höhe beschränkt, 2. die zeitliche Reichweite (Persistenz) von bis zu mehreren hundert Jahren auf unter 10 Jahre vermindert. Es ist allerdings zu sagen, daß die zeitlichen Reichweiten (Lebensdauern) noch groß genug sind für eine globale Ausbreitung in

der Troposphäre und auch für einen geringfügigen Übertritt in die Stratosphäre.

Der Ersatz der FCKW durch die H-FCKW ist klarerweise mit dem Ziel einer Reichweitenbegrenzung erfolgt. Er beruht also auf einer Anwendung des Reichweitenkonzeptes, kann andererseits jedoch nicht als Anwendung des Vorsorgegedankens betrachtet werden: die Wirkungen der FCKW in der Stratosphäre sind hinreichend bekannt und die Reichweitenbegrenzung bei den Kühlmitteln ist hier als kausale Therapie wohlbekannter Schadstoffwirkungen anzusehen. Das Element der Ahnungslosigkeit, wie es im Vorfeld des Vorsorgeprinzips konstitutiv ist, fehlt hier zumindest in bezug auf die Hauptwirkung.



Vertikale Reichweitenbeschränkung auf die Troposphäre (Aus Müller-Herold, 1996)

Es ist interessant, daß zur Zeit ihrer Einführung in den dreißiger Jahren eine Reichweitenbegrenzung der Kühlmittel in der Tat Ausdruck des Vorsorgeprinzips gewesen wäre. Es wird derzeit von Wissenschaftshistorikern – durchaus kontrovers – diskutiert, ob 1930 grundsätzlich die Kenntnisse schon vorhanden waren, die es erlaubt hätten, an eine Schädigung der stratosphärischen Ozonschicht durch flüchtige Halogenverbindungen zu denken. Unabhängig von der Frage

des Zeitpunktes zeigt die genauere Analyse allerdings, daß die erforderlichen Teilerkenntnisse in weitgehend von einander getrennten Subkulturen der wissenschaftlichen Gemeinschaft gewonnen wurden. Ganz unabhängig von der Frage nach der Existenz der erforderlichen Kenntnisse ist deshalb festzustellen, daß eine diesbezügliche Risikoabschätzung schon aus praktischen Gründen kaum möglich gewesen wäre.

Hätte man in den dreißiger Jahren die FCKW und auch die HFCKW aus Reichweitenüberlegungen abgelehnt, so wäre uns – wie die spätere Entwicklung zeigt – manches erspart geblieben. Andererseits aber waren die neuen Treibgase ja gerade eine Antwort auf die vielen Unfälle, die sich durch Haushaltskühlschränke mit Ammoniak oder Schwefeldioxid ereignet hatten. (Die Häufung derartiger Unfälle im Berlin der zwanziger Jahre brachte übrigens Einstein und Szilard dazu, selbst einen Kühlschrank zu entwickeln, der allerdings nie gebaut wurde). Der Ersatz der alten gefährlichen Treibmittel Ammoniak und Schwefeldioxid beruhte also durchaus auf einer Risikouberlegung bezüglich bekannter Nachteile. Er beruhte indessen ebenso auf einer Vernachlässigung des Vorsorgegedankens, d.h. der „Dimension der Ahnungslosigkeit“. Insofern ist dieses Beispiel recht typisch für die Gesamtproblematik.

4.5 Zweites Beispiel: Perchlorethylen

Perchlorethylen wird u. a. als Reinigungsmittel in der chemischen Kleiderreinigung verwendet. Perchlorethylen ist eine farblose Flüssigkeit von intensivem Geruch, schwerer als Wasser und stark flüchtig; es ist stabil gegenüber chemischem und biologischem Abbau. Toxikologisch wurde Perchlorethylen wie andere chlorierte Lösungsmittel auch als akut und chronisch wirksames Leber- und Nervengift identifiziert.

Trotz stetiger Verbesserung der Rückhaltetechnologien in der chemischen Reinigung gelangen während des Nutzungszyklus (Anlieferung,

Anwendung, Rückführung) erhebliche Mengen Perchlorethylen in die Umwelt, vorrangig in die Atmosphäre. Die troposphärische Lebensdauer von etwas über hundert Tagen führt dazu, daß sich Perchlorethylen weiträumig in der nördlichen Hemisphäre verteilt und zu geringem Anteil auch in die Stratosphäre übertritt, wo es geringfügig zum Ozonabbau beiträgt. Atmosphärische Persistenz und räumliche Reichweite – über 10 000 km – sind also relativ hoch.

Zudem kann Perchlorethylen im Anschluß an Bodenkontaminationen ins Grundwasser gelangen, wo es wegen seiner hohen Dichte bis auf den Grund des Wasserleiters absinkt. Da es dort nur langsam in verschiedene Folgeprodukte (u.a. Vinylchlorid) umgewandelt und schließlich abgebaut wird, kann es während mehrerer Jahre und Jahrzehnte mit dem Grundwasserstrom verfrachtet werden, so daß weitreichende Kontaminationsfahnen entstehen. Somit besitzt Perchlorethylen auch im Grundwasser eine hohe Persistenz und räumliche Reichweite.

Reichweite und Persistenz geben eine Abschätzung des exponierten räumlichen und zeitlichen Bereichs. In diesem Bereich können einerseits bekannte Wirkungen auftreten, so daß die Reduktion von Persistenz und Reichweite die Vermeidung dieser bekannten Wirkungen zum Ziel hat (vgl. dazu das Beispiel H-FCKW). Andererseits sind manche Aspekte der Umweltchemie und Ökotoxikologie von Perchlorethylen auch heute noch unbekannt (vor allem die Frage seiner verschiedenen Metaboliten und ihrer Umweltrelevanz), und aus dieser Perspektive ist die Reduktion von Persistenz und Reichweite als eine mögliche Umsetzung des Vorsorgeprinzips zu verstehen (Vermeidung potentieller Wirkungen im von der Exposition betroffenen Bereich). Aus diesem Grund kann die Suche nach Alternativen zur Verwendung von Perchlorethylen in der Kleiderreinigung durch die relativ hohen Werte für Persistenz und Reichweite motiviert werden.

Eine der verschiedenen Alternativen, die zur Zeit in diesem Zusammenhang diskutiert werden, beruht auf der Verwendung von flüssigem bzw. überkritischem Kohlendioxid, das unter einem Druck von ca. 16

bar steht, als Lösungsmittel. Diese Technologie erfordert einen Hochdruckbehälter, in dem das Reinigungsgut mit dem Kohlendioxid behandelt wird; die Trocknung erfolgt ohne zusätzlichen Energieaufwand durch Druckabsenkung (Kohlendioxid entweicht gasförmig). Das Kohlendioxid wird aus der Atmosphäre bzw. aus Verbrennungsprozessen in der petrochemischen Industrie gewonnen und bedeutet somit keinen zusätzlichen Ausstoß an Treibhausgasen. Kohlendioxid hat in den Konzentrationen, in denen es in der Atmosphäre auftritt, keine toxischen Wirkungen.

Somit würden bei einem Wechsel von der Perchlorethylen- zur Kohlendioxid-Technologie die langreichweitigen Perchlorethylen-Expositionen und die daran hängenden (potentiellen) Wirkungen sowie die Vergiftungsgefahr am Arbeitsplatz vermieden, während sich gleichzeitig neue Anforderungen an die Arbeitssicherheit ergeben: Die Erstickungsgefahr durch unkontrolliert ausströmendes Kohlendioxid und die Explosionsgefahr durch den Hochdruckbetrieb müssen kontrollierbar bzw. vernachlässigbar klein sein. Dies kann beim mittlerweile erreichte Stand der Hochdruck-Technologie angenommen werden (ES&T 1997).

4.6 Drittes Beispiel : Silikone und Chlorparaffine

Silikone und Chlorparaffine werden seit den 40er Jahren industriell hergestellt (die Produktionsmenge beträgt zur Zeit jeweils mehrere 100 000 t/a) und in einer Vielzahl von Anwendungsbereichen eingesetzt und damit auch in die Umwelt eingetragen. Es handelt sich um zwei Stoffgruppen, für die einerseits bisher keine schwerwiegenden toxischen oder sonstige umweltrelevante Wirkungen bekannt sind und die andererseits in erheblichem Ausmaß in der Umwelt präsent sind und deswegen einen „reinen“ Anwendungsfall für das Vorsorgeprinzip bilden. Das Reichweiten-Konzept kann dabei zur Spezifizierung des Expositionsmusters dienen, mit dem die Substanzen in der Umwelt auftreten.

a) Silikone: Silikone bestehen aus einem Grundgerüst von Silizium-Sauerstoff-Ketten, die an den Silizium-Atomen verschiedene organische Gruppen tragen (z.B. Methylgruppen bei Polydimethylsiloxan). Sie umfassen eine Vielzahl von Substanzen mit einem breiten Spektrum von molekularen Strukturen und physikalisch-chemischen Eigenschaften (Öle, Harze, plastische Feststoffe). Sie werden in einem Umfang von über 500 000 t/a (weltweit) hergestellt und werden in tausenden von industriellen Produkten und in allen Lebensbereichen eingesetzt, z.B. zur Wärmeübertragung in Kühl- und Heizsystemen, zur Imprägnierung von Papier und Textilien, als Hydrauliköle, Isoliermaterialien, Trägermaterialien für Farbstoffe u.v.a.m.

Akute oder chronische toxische Wirkungen, Mutagenität oder Kanzerogenität sind bisher nicht festgestellt worden (vgl. allerdings die Debatte über Brustimplantate). Die meisten Silikone können aufgrund ihrer sehr großen molekularen Strukturen nicht in Körperzellen eindringen, allerdings werden Silikone mit einem Molekulargewicht von unter 1000 in das Gewebe aufgenommen und akkumulieren dort (reversibel, d.h. sie können auch wieder ausgeschieden werden). Silikone sind z.T. sehr beständig gegenüber chemischem und biologischem Abbau. Sie gelangen in die Umwelt u.a. über das Abwasser, sind nach der Abwasserbehandlung in der Kläranlage an den Klärschlamm adsorbiert und werden weiter verteilt, wenn der Klärschlamm in die Umwelt ausgetragen wird. Einen anderen Freisetzungspfad bilden Deponien, in denen mit dem Deponiegut die verschiedensten festen Silikone entsorgt werden; das weitere Verhalten dieser deponierten Silikone ist unbekannt. Silikone mit niedrigerem Molekulargewicht sind relativ flüchtig und gelangen teilweise in die Atmosphäre, wo sie relativ schnell chemisch abgebaut werden.

b) Chlorparaffine (BUA 1992): Chlorparaffine werden durch direkte Chlorierung von C_{10} - bis C_{30} -Paraffinen erhalten; sie bilden viskose farblose oder blaßgelbe Flüssigkeiten, die zu 20 bis 70 Gewichtsprozent aus Chlor bestehen und einen breiten Bereich von Dichte und Viskosität abdecken. Sie sind unbrennbar, wasserunlöslich und bis ca. 150 °C thermisch stabil (dieser Wert kann durch zusätzliche Stabilisa-

toren erhöht werden). Ihre akute und chronische Toxizität ist niedrig; Mutagenität besteht keine, Kanzerogenität wurde in Lebenszeitstudien mit Ratten festgestellt. Bei kurzzeitigen Chlorparaffinen wurde starke Bioakkumulation in Fischen festgestellt.

Chlorparaffine werden in einem Umfang von mehreren 100 000 t/a (weltweit) hergestellt und finden breite Verwendung als Flammschutzmittel, Weichmacher für PVC, Imprägniermittel, Trägermaterialien in Straßenmarkierungsfarben und Schiffsanstrichen u.v.a.m.; z.T. werden sie auch als Ersatzstoffe für polychlorierte Biphenyle verwendet. Entsprechend diesen Verwendungen gelangen sie durch Abdampfung aus Kunststoffen und durch Auswaschung aus Kunststoffen, Beschichtungen und Anstrichen in die Umwelt. In der Kläranlage adsorbieren sie stark an den Klärschlamm und werden wie die Silikone mit diesem weiterverfrachtet.

Auf der Basis wirkungsbezogener Endpunkte (Toxizität, Ozonabbau-potential etc.) können beide Stoffgruppen zur Zeit als relativ harmlos beurteilt werden. Allerdings weisen ihre Persistenzen und räumlichen Reichweiten auf eine signifikante Exposition hin, die nicht ohne weiteres rückgängig gemacht werden kann, wenn man zu einem späteren Zeitpunkt „plötzlich“ mit zur Zeit noch unbekanntem Wirkungen konfrontiert ist. Das Vorsorgeprinzip besagt nun, daß es gute Gründe gibt, diese Expositionen rückgängig zu machen bzw. grundsätzlich zu vermeiden, auch wenn zur Zeit keine Wirkungen bekannt sind.

Im einzelnen bedeutet dies für die beiden Stoffgruppen der Silikone und Chlorparaffine: In einem ersten Schritt sollten die in die Umwelt gelangenden Silikone hinsichtlich Molekulargewicht, organofunktionellen Gruppen (die eine etwaige Toxizität bewirken könnten), Persistenz und räumlicher Reichweite/Verteilungsverhalten in der Umwelt genauer klassifiziert werden. Zumindest für die Verbindungen mit vergleichsweise niedrigem Molekulargewicht sollte nach Alternativen mit geringerer Persistenz und Reichweite gesucht werden (die ihrerseits ebenfalls nicht toxisch, mutagen, kanzerogen etc. sein dürfen). Dabei sollten auch Alternativen in Betracht gezogen werden, die – wie im

Fälle des Kohlendioxid in der Kleiderreinigung – mit einem Wechsel der Technologie verbunden sind. Es geht also nicht allein um eine Einzelstoffbetrachtung bzw. einen direkten Stoffvergleich, sondern um Lösungen, die bei einer erweiterten Betrachtung des Systems, in dem ein Stoff zum Einsatz kommt, erkennbar werden.

Für Chlorparaffine sollte ebenfalls nach weniger persistenten Ersatzstoffen gesucht werden; ein wichtiger deutscher Produzent hat – nach längeren Diskussionen – die Produktion von Chlorparaffinen u.a. aus Vorsorgeerwägungen bzw. aufgrund der potentiellen Kanzerogenität eingestellt. Bei einigen Anwendungsgebiete stehen bereits Ersatzstoffe mit geringerer Persistenz und Reichweite zur Verfügung, z. B. Substanzen auf Mineralölgrundlage.

5. Kombination des Reichweitenkonzeptes mit Zusatzkriterien

5.1 Biokonzentration

Will man bei der Chemikalienbewertung nach dem Vorsorgeprinzip die Reichweiten durch wirkungsnähere Kriterien ergänzen, ohne jedoch unmittelbar biologische bzw. toxikologische Kriterien zu verwenden, so bieten sich chemische Kriterien an, die in der Kausalkette zwischen (geographischer) Exposition und biologischer Wirkung liegen.

Das am weitesten eingeführte und am besten begründbare Kriterium dieser Art ist die Biokonzentration. Das Verhältnis der Gleichgewichtskonzentrationen in einem Organismus (C_W) und im Wasser (C_A) wird als Biokonzentrationsfaktor C_A / C_W bezeichnet. Da die wäßrigen Teilphasen eines Organismus für eine Substanz ähnliches Lösungsvermögen aufweisen wie Wasser selbst, erstaunt es nicht, daß der Biokonzentrationsfaktor einer Substanz im wesentlichen von ihrer

Fettlöslichkeit bestimmt ist. Diese wird üblicherweise durch den Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten abgeschätzt, der auch für die Reichweitenbestimmung benötigt wird. Der Biokonzentrationsfaktor ist zumindest in der Hinsicht eine durchaus sinnvolle Ergänzung der Reichweitenbewertung, als für seine Bestimmung keine zusätzlichen Daten benötigt werden. Üblicherweise werden Stoffe als bioakkumulierend eingestuft, wenn sie einen Biokonzentrationsfaktor von über 100 oder einen Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten von über 1000 haben. Diese Schwelle wird diskursiv diskutiert.

Biokonzentrierende Stoffe, die ausreichend persistent sind, können sich in der Nahrungskette anreichern und gefährden damit besonders die Endglieder trophischer Netze. Wegen der besonderen Rolle des Fettgewebes bei ihrer Einlagerung sind von diesem Mechanismus vor allem in der Arktis und in der Subarktis lebende Tiere und Menschen betroffen. Unter den Tieren sind es besonders die maritimen Großsäuger, die durch Bioakkumulation gefährdet werden. Es ist deshalb folgerichtig, daß in den Richtlinien, die von der schwedischen CPC-Kommission vorgeschlagen worden sind, Stoffe ausgeschlossen werden sollen, die persistent und biokonzentrierend sind.

5.2 Weitere wirkungsnähere chemische Kriterien

Nach Gesichtspunkten der Reaktivität können weitere Eigenschaften bezeichnet werden, aufgrund deren von entsprechenden Stoffen nichts Gutes erwartet werden kann:

- alkylierende
- interkalierende
(planare π -Elektronensysteme enthaltende)
- epoxidierende

Verbindungen können Punktmutationen auslösen und werden deshalb mit der Krebsentstehung in Verbindung gebracht. Hier ist allerdings zu sagen, daß die Fixierung auf die Krebsproblematik zulasten anderer

Umwelttoxinen geht und die Aufmerksamkeit etwas einseitig in eine Richtung lenkt. Dies gilt vor allem für die US-amerikanische Spielart der Ökotoxikologie. Die Wirkungen von DDT und den PCBs zeigen aber sehr deutlich, daß es andere relevante Noxen gibt. (Ein Stoff ist nicht bloß darum unbedenklich, weil er nicht karzinogen ist).

Interkalierende, fettlösliche und persistente Stoffe werden aber auch mit den pseudo-östrogenen Wirkungen in Zusammenhang gebracht, die vom ökologischen Gesichtspunkt her zu besonderer Sorge Anlaß geben.

5.3 Reichweitenbewertung in Verbindung mit Zusatzkriterien

Für die Zulassungspraxis könnten Zusatzkriterien grundsätzlich auf zweierlei Art mit den Reichweiten kombiniert werden: Entweder man benützt die Zusatzkriterien, um auf der Grundlage einer mittleren Reichweitencharakteristik doch noch zu einem Ausschluß-Kriterium zu kommen. Dies könnte in der folgenden Weise geschehen: Angenommen, ein Stoff befindet sich in einer der mittleren Klassen $2\ 000\text{ km} \leq \rho \leq 10\ 000\text{ km}$; $1\text{ Jahr} \leq \tau \leq 25\text{ Jahre}$ (oder in den beiden). Nach Abs. 4.2 käme demnach das ALARA-Prinzip zum Zug. Ist die Substanz aber zusätzlich bioakkumulierend, so führt beides zusammen zum Ausschluß.

Die andere Möglichkeit besteht darin, Zusatzkriterien als *Modifikatoren* einzusetzen. Dabei könnte folgendermaßen argumentiert werden: Enthält eine organische Substanz nur Kohlenstoff, Sauerstoff, Wasserstoff und Stickstoff, so ist ihre *Akzeptanz* bei höheren Werten von τ und ρ größer, als wenn sie auch Chlor enthält (Der Akzeptanzunterschied beruht auf Erfahrungen mit der biologischen Evolution und mit xenobiotischen Organika). Enthält also eine Substanz Chlor oder ist sie alkylierend, interkalierend oder epoxidierend, so werden τ und ρ mit einem festzulegenden Faktor multipliziert und anschließend mit der Reichweitenklassifikation eingestuft. Die unvermeidliche Kontro-

verse um die Festlegung der Multiplikationsfaktoren muß bei diesem Vorgehen in Kauf genommen werden.

Dank dieser beiden Möglichkeiten ist es zumindest grundsätzlich sichergestellt, daß weitere, nicht reichweitenartige Daten in eine Reichweitenbewertung miteinbezogen werden können (Anschlußfähigkeit).

6. Ausblick: Stoffkombinationen

6.1 Reichweiten und Stoffkombinationen

Das Reichweitenkonzept ist bisher noch nicht im Zusammenhang mit Stoffkombinationen untersucht worden. Stoffkombinationen werden traditionell unter dem Gesichtspunkt der *Kombinationswirkungen* beurteilt und nicht unter dem Gesichtspunkt der kombinierten Exposition allein. Wenn im folgenden einige neuartige Überlegungen zu dieser Frage vorgestellt werden, so ist darin nicht ein Forschungsergebnis, sondern eher die heuristische Vorüberlegung für ein Forschungsprogramm zu sehen. In diesem Sinne seien die folgenden Überlegungen als eine Art allererster Annäherung an das Problem betrachtet.

Dazu gehen wir ganz analog vor wie im Falle einer Einzelsubstanz: wir sagen also, daß das elementare kombinierte Ereignis darin besteht, daß je eine Molekel der beiden in Frage kommenden Stoffe an einem Ort x vorhanden sind. Ist $c_1(x,t)$ die Konzentration des Stoffes 1 am Ort x zur Zeit t und $c_2(x,t)$ die Konzentration des Stoffes 2 am selben Ort zur selben Zeit, so ist das Produkt $c_1(x,t)c_2(x,t)$ ein Maß für die Häufigkeit des elementaren kombinierten Ereignisses am Ort x zur Zeit t . Hat man nun einen Zähler, der die elementaren kombinierten Expositionereignisse zählt und den zeitlichen Verlauf aufsummiert, so erhält man die Co-Exposition (engl.: co-exposure, as abbreviated from: combined exposure) $e_{12}(x)$ am Ort x

$$e_{12}(x) \stackrel{def}{=} \int_0^{\infty} c_1(x,t)c_2(x,t)dt$$

Die entsprechende Co-Reichweite ρ_{12} ergibt sich dann aus dem Entropierang der Co-Expositions-Entropie – in Analogie zur Reichweite einer einzelnen Substanz (Müller-Herold u. Nickel, 1998). Im Rahmen numerischer Rechnungen könnte man auch hier mit Quantilen rechnen (Scheringer, 1996).

Eine kurze explorative Rechnung (Abs 6.2) genügt, um sich ein erstes, qualitatives Bild davon zu machen, wie das Potential, über weite Entfernungen Kombinationswirkungen zu erzielen, vom Zusammenspiel der Ein-Stoff-Eigenschaften beeinflusst wird. Wie im Fall eines einzelnen Stoffes (Müller-Herold u. Nickel, 1998) ergibt sich in diesem einfachsten Fall die Reichweite aus D/k , das gerade die Dimension einer Länge hat, falls D eine Diffusionskonstante und k eine Abklingkonstante ist. Je größer also D ist, d.h. je rascher der Stoff sich verbreitet, desto weiter kommt er. Je größer andererseits seine Abklingkonstante k ist, d.h. je kürzer seine Lebensdauer ist, desto weniger weit kommt er.

Im einfachsten Fall hängt die Co-Reichweite in genau dieser Art von einer kombinierten Diffusionskonstanten D_{12} und einer kombinierten Abklingkonstanten $k_{12} = k_1 + k_2$ ab (s. Anhang, Gl. A.2 und A.5). Die kombinierte Diffusionskonstante D_{12} ist mithin eine Art „reduzierter“ Diffusionskonstante der beiden Einzelstoffe, während die Abklingkonstante k_{12} für die simultane Präsenz – nicht ganz überraschend – die Summe der beiden entsprechenden Ein-Stoff-Abklingkonstanten ist.

Wie man daraus sieht, ist die kombinierte Diffusionskonstante D_{12} kleiner als die beiden Ein-Stoff-Diffusionskonstanten D_1 oder D_2 , die kombinierte Präsenz breitet sich also weniger rasch aus als die Einzelpräsenz. Da zudem die kombinierte Abklingkonstante k_{12} größer ist als die beiden Ein-Stoff-Abklingkonstanten k_1 und k_2 , ist die kombinierte Präsenz auch kurzlebiger als die Einzel-Präsenz. Beides führt in jedem Falle zu einer im Vergleich mit den Einzelstoffen geringeren Reichweite. Bei Gleichheit der beiden Diffusions- und der beiden Abklingkonstanten ist die Co-Reichweite halb so groß wie die Ein-Stoff-Reichweite.

Bei typischeren Freisetzungsmustern wird die Sache schnell verwickelt. Werden die beiden Stoffe zu verschiedenen Zeitpunkten an verschiedenen Orten freigesetzt, so lassen einen – selbst wenn die Welt eine einfache Linie bleibt – die Integraltafeln rasch im Stich. Es ist nicht ganz einfach, ein quantitatives Bild des kombinierten Verhaltens zu gewinnen. Darüber hinaus bestehen zumindest derzeit noch keinerlei Vorstellungen, wie die Co-Reichweiten mit dem Vorsorgeprinzip in eine Verbindung gebracht werden könnten. Zumindest heuristisch ist indessen klar geworden, daß das Reichweitenkonzept auch auf Stoffkombinationen angewendet werden kann. Von einem Bewertungswerkzeug allerdings kann noch keine Rede sein.

6.2 ANHANG: Co-Exposition und Co-Reichweite zweier Stoffe

Der Einfachheit halber sei angenommen, die Freisetzung erfolge in einer eindimensionalen, nicht gekrümmten und unstrukturierten Welt, mathematisch dargestellt durch eine Gerade. Aus demselben Grund sei weiterhin angenommen, die Freisetzung einer Einheitsmenge $M_0 = 1$ erfolge zur selben Zeit $t = 0$ am selben Ort $x = 0$. Die Abklingkonstanten der beiden Substanzen seien k_1 und k_2 , ihre Diffusionskonstanten D_1 und D_2 . Die Konzentrationen der beiden Stoffe am Ort x zur Zeit t ist dann

$$c_i(t, x) = M_0 e^{-k_i t} \frac{1}{\sqrt{4\pi D_i t}} e^{-x^2/4D_i t} \quad , \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.1})$$

woraus die Co-Exposition berechnet werden kann

$$\begin{aligned} e_{12}(x) &= \int_0^\infty c_1(x, t) c_2(x, t) dt & (\text{A.2}) \\ &= \int_0^\infty e^{-(k_1 + k_2)t} \frac{1}{4\pi\sqrt{D_1 D_2 t}} e^{-\frac{x^2}{4t}\left(\frac{1}{D_1} + \frac{1}{D_2}\right)} dt \\ &= \frac{1}{2\pi\sqrt{D_1 D_2}} K_o(|x|\alpha) \quad \alpha^2 = \frac{(D_1 + D_2)(k_1 + k_2)}{D_1 D_2} \end{aligned}$$

Dabei ist K_0 die modifizierte Hankelfunktion¹ und $|x|$ der Betrag von x . Die Normierung der Co-Exposition ergibt sich aus

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e_{12}(x) dx \stackrel{def}{=} \frac{2}{2\pi\sqrt{D_1 D_2}} \int_0^{\infty} K_0(|x|\alpha) dx = \frac{b}{\pi\sqrt{D_1 D_2} \alpha} \quad (\text{A.3})$$

Dabei ist $b = \int_0^{\infty} K_0(x) dx$ eine universelle Konstante, die nicht von den Modellparametern abhängt. Für die auf 1 normierte Co-Exposition $\varepsilon_{12}(x)$ erhält man damit

$$\varepsilon_{12}(x) = \frac{\alpha}{2b} K_0(|x|\alpha) \quad (\text{A.4})$$

und die Co-Expositions-Entropie ist dann

$$\begin{aligned} S_{12} &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon_{12}(x) \ln \varepsilon_{12}(x) dx = -2 \int_0^{\infty} \varepsilon_{12}(x) \ln \varepsilon_{12}(x) dx \\ &= -\ln \alpha + const. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Die räumliche Co-Reichweite errechnet sich in diesem Fall aus dem entsprechenden Entropierang (Müller-Herold u. Nickel, 1998) gemäß

$$\rho_{12}(x) = e^{S_{12}} = \frac{const.}{\alpha} \approx \sqrt{D_{12}/k_{12}} \quad (\text{A.6})$$

wobei die Co-Diffusionskonstante $D_{12} = D_1 D_2 / (D_1 + D_2)$ gleich der „reduzierten“ Diffusionskonstanten der beiden Stoffe ist, während die Co-Abklingkonstante $k_{12} = k_1 + k_2$ für die simultane Präsenz die Summe der beiden entsprechenden Ein-Stoff-Abklingkonstanten ist.

¹ $K_0(pq) = \int_0^{\infty} \frac{\cos px}{\sqrt{q^2 + x^2}} dx$

Literatur

Ahlers, J., Diderich, R., Klaschka, U., Marschner, A., Schwarz-Schulz, B. (1994) Environmental Risk Assessment of Existing Chemicals, *Environmental Science and Pollution Research* **1** (2), 117–123.

Auer, Ch. M. (1988) Use of Structure-Activity Relationships in Assessing the Risks of New Chemicals, in: Hart, R. W., Hoerger, F. D. (Eds.): *Carcinogen Risk Assessment: New Directions in the Qualitative and Quantitative Aspects*. Banbury Report 31, Cold Spring Harbor Laboratory.

Ballschmiter, K. (1992) Transport und Verbleib organischer Verbindungen im globalen Rahmen, *Angewandte Chemie* **104**, 501–528.

Bundesumweltamt, (Beratergremium für umweltrelevante Altstoffe (1992) *Chlorparaffine*. BUA Stoffbericht 93, Verlag Chemie, Weinheim.

Chemical Policy Council (1997) *Towards a Sustainable Chemicals Policy (English Summary)*. Government Official Reports 1997:84 Swedish Ministry of the Environment.

ES&T (1997) Supercritical CO₂-Based Cleaning System among Green Chemistry Award Winners, *Environmental Science and Technology* **31** (7), 414A.

EU (Europäische Union) (1996) *Technical Guidance Document in Support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for New Notified Substances and Commission Regulation (EC) No 1488/94 on Risk Assessment for Existing Substances*. Office for Official Publications of the European Communities, 4 Bände.

Hermens, J., Opperhuizen, A. (1991) QSAR in Environmental Toxicology, *The Science of the Total Environment* **109/110** (special issue).

Hermens, J.L.M., Verhaar, H.J.M. (1996) QSAR in Predictive Environmental Toxicology – From Mechanistic Studies to Applications in Risk Assessment, *Environmental Science and Pollution Research* **3** (2), 96–98.

Hoekstra, J.A., Van Ewijk, P.H. (1993) Alternatives for the No-Observed-Effect Level, *Environmental Toxicology and Chemistry*, **12**, 187–194.

Howard, P.H. (Hrsg.) (1991) *Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals*. Vol.I (Large Production and Priority Pollutants), Vol.II (Solvents), Vol.III (Pesticides), Lewis Publishers, Chelsea.

Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F., Meylan, W.M., Michalenko, E.M. (Hrsg.) (1991) *Environmental Degradation Rates*. Lewis Publishers, Chelsea.

Klöpffer, W. (1989) Persistenz und Abbaubarkeit in der Beurteilung des Umweltverhaltens anthropogener Chemikalien, *Zeitschrift für Umweltchemie und Ökotoxikologie* **2**, 43–51.

Laskowski, R. (1995) Some Good Reasons to Ban the Use of NOEC, LOEC and Related Concepts in Ecotoxicology, *Oikos*, **73** (1), 140–144.

Mathes, K. (1997) Ökotoxikologische Wirkungsabschätzung – Das Problem der Extrapolation auf Ökosysteme, *Zeitschrift für Umweltchemie und Ökotoxikologie* **9** (1), 17–23.

McCarthy, L.S., Mackay, D. (1993) Enhancing Ecotoxicological Modeling and Assessment, *Environmental Science and Technology* **27** (9), 1719–1728.

- Mackay, D., DiGuardo, A., Paterson, S., Kicsi, G., Cowan, C.E. (1996) Assessing the Fate of New and Existing Chemicals: a Five-Stage Process, *Environmental Toxicology and Chemistry* **15**(9), 1618–1626.
- Müller-Herold, U. (1996) Measures of Endangerment, *The Geneva Papers on Risk and Assurance* **21**, 383–392.
- Müller-Herold, U., Nickel, G. (1998) An Entropy Rank Estimate for the Geographical Range of Organic Pollutants, *Tübinger Berichte zur Funktionalanalyse* **7**, 181–194.
- Power, M., McCarthy, L.S. (1997) Fallacies in Ecological Risk Assessment Practices, *Environmental Science and Technology* **31** (8), 370A–375A.
- Rehbinder, E. (1990) *Das Vorsorgeprinzip im internationalen Vergleich*, Werner-Verlag, Düsseldorf.
- Renn, O. (1993) *Risikobewertung, Risikokommunikation und vorbeugendes Konfliktmanagement*, Vorlesungsskript ETH Zürich, WS 1992/93, Abs. 3.6.
- Rippen, G. (1987) *Handbuch Umweltchemikalien*. 2. Auflage, ecomed., Landsberg
- Scheringer, M. (1996) Persistence and Spatial Range as Endpoints of an Exposure-Based Assessment of Organic Chemicals, *Environmental Science and Technology* **30** (5), 1652–1659.
- Scheringer, M. (1997) Characterization of the Environmental Distribution Behavior of Organic Chemicals by Means of Persistence and Spatial Range, *Environmental Science and Technology* **31** (10), 2891–2897.

- Scheringer, M., Berg, M., Müller-Herold, U. (1994) Jenseits der Schadensfrage: Umweltschutz durch Gefährdungsbegrenzung, in: Berg, M. et al. (Hrsg.): *Was ist ein Schaden? Zur normativen Dimension des Schadensbegriffs in der Risikowissenschaft*. Polyprojekt-Dokumente Bd. 2, Verlag der Fachvereine Zürich, 115–146.
- Scheringer, M., Berg, M. (1994) Spatial and Temporal Range as Measures of Environmental Threat, *Fresenius Environmental Bulletin* **3** (8), 493–498.
- Schmidt-Bleek, F., Hamann, H.-J. (1986) Priority Setting among Existing Chemicals for Early Warning, in: Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung (Hrsg.) *Environmental Modelling for Priority Setting among Existing Chemicals*. ecomed, Landsberg 455–464.
- Stephenson, M.S. (1977) An Approach to the Identification of Organic Compounds Hazardous to the Environment and Human Health, *Ecotoxicology and Environmental Safety* **1**, 39–48.
- Streit, B. (1994) Lexikon der Ökotoxikologie. 2.Auflage, Verlag Chemie, Weinheim.
- Suter, G. W. (1993) New Concepts in the Ecological Aspects of Stress: The Problem of Extrapolation, *The Science of the Total Environment*, Supplement 1993, 63–76.
- Verschueren, K. (1983) *Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals*. Van Nostrand Reinhold, New York.

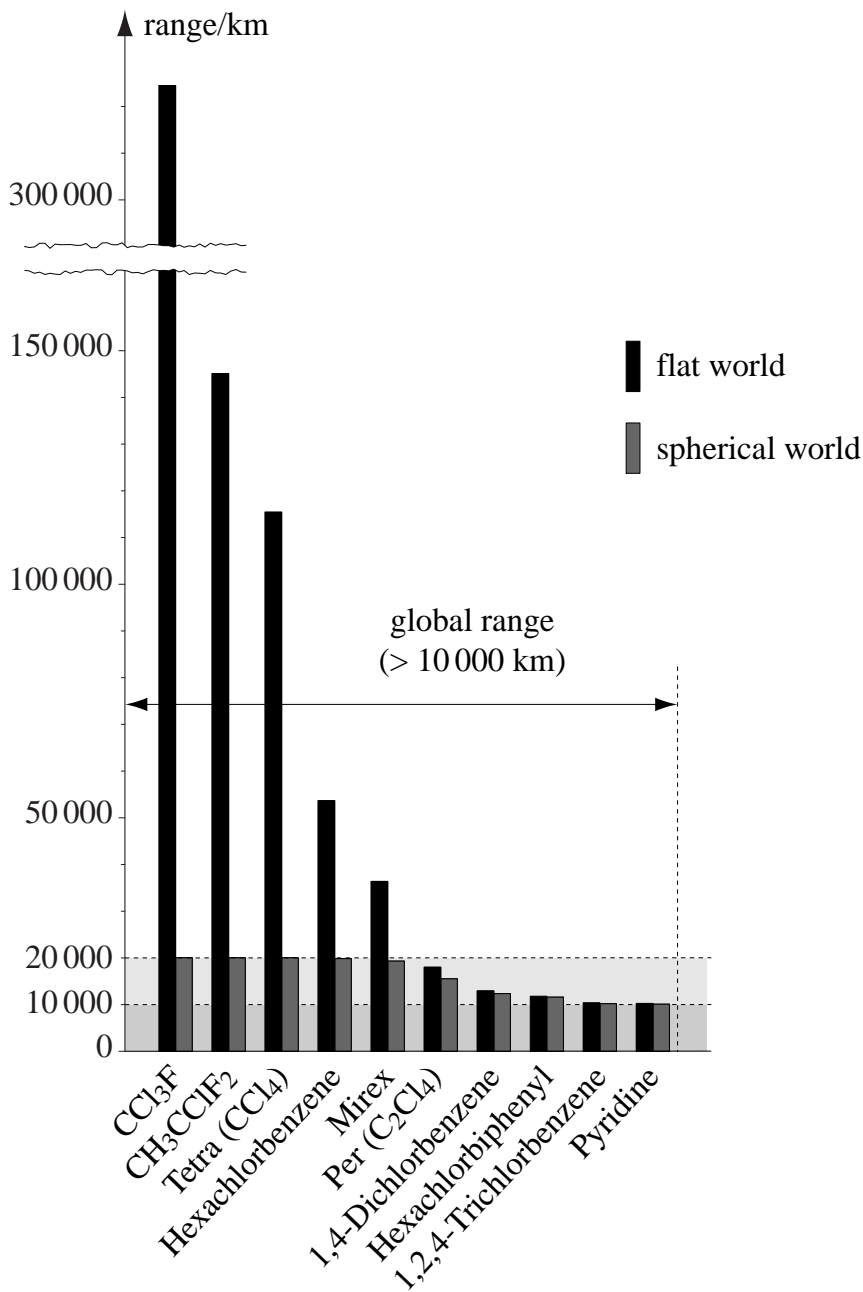


Abb.1: Xenobiotische Stoffe mit globaler räumlicher Reichweite. Zur Verdeutlichung ihrer potentiellen Mobilität sind daneben die Reichweiten in einer "ebenen" Welt mit denselben lokalen Charakteristika wie die Erdoberfläche dargestellt

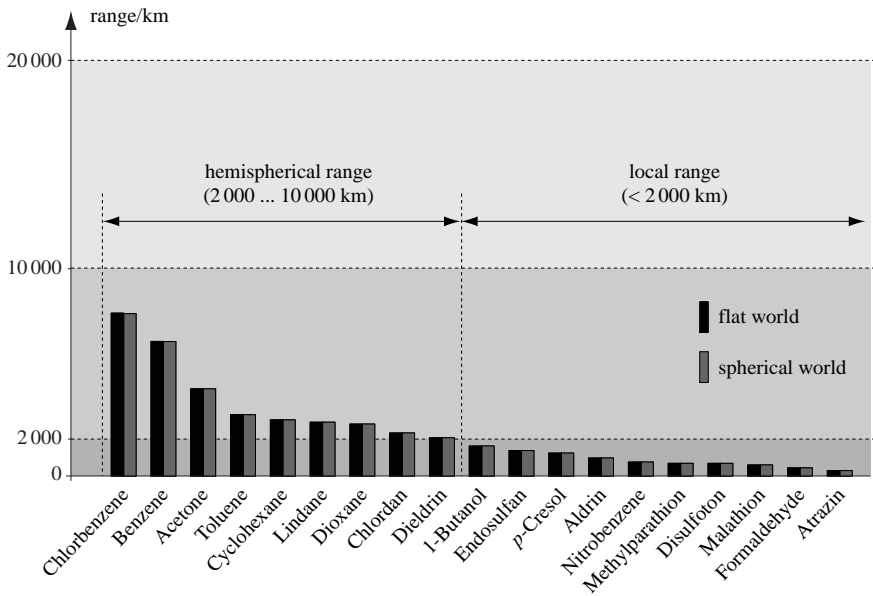


Abb.2: Xenobiotische Stoffe mit hemisphärischer und lokaler räumlicher Reichweite. Die zum Vergleich wiederum mit dargestellten Reichweiten in einer "ebenen" Welt mit den lokalen Charakteristika der Erdoberfläche stimmen mit den terrestrischen vollständig überein