

Vegyianyagok kockázatának mérése

Gruiz Katalin

A vegyi anyagok a környezetbe kerülve az ökoszisztémát és benne az embert veszélyeztetik. A veszélyeztetés sokkomponensű bonyolult folyamat eredménye, melynek mértéke nem határozható meg egyszerűen. Egy viszonylag új tudományág, a környezeti kockázatelemzés a kockázat nagyságát mérőszámmal igyekszik jellemezni. Ehhez integráltan használja a geológia, az ökológia, a vegyész tudományok, a biológia, a matematika, a fizika legújabb ismereteit.

A kockázatelemzés, vagyis a veszély mérőszámmal való jellemzése rendkívül fontos összehasonlítás és a prioritások megállapítása esetében. A kockázat elemzés szolgáltatja a tudományos alapot a gyakorlati környezetvédelemhez és a környezetvédelmi politikához is. Az egységes környezeti kockázatelemzési módszerek kidolgozásán és bevezetésén tudósok, környezetvédők és politikusok munkálkodnak.

1. A környezeti kockázat

A kockázat, valamely károsnak ítélt jövőbeni esemény, melynek mértéke a bekövetkezés valószínűségétől és a kár nagyságától függ.

A környezeti kockázat abból adódik, hogy az ökoszisztéma és benne az ember a természetbe kikerült veszélyes, kockázatot jelentő anyagnak **ki van téve** és az **hat rá**.

A **vegyi anyagok** a környezetbe kerülve az ökoszisztémában nehezen becsülhető változásokat hoznak létre, egyensúlyok eltolódását, a fajeloszlás megváltozását, gyakran egyes fajok teljes kipusztulását, s ezzel helyrehozhatatlan károkat okoznak.

A xenobiotikumok mindig fokozott veszélyt jelentenek az ökoszisztémára, mert kezdetben ismeretlenek a velük kapcsolatba kerülő élőlények számára. Anyagcseréjük, enzimszisztémájuk még nem alkalmazkodhatott a szennyezőanyaghoz, rezisztenciát sem alakíthattak ki, sem a biodegradációra nem készülhettek fel. A xenobiotikumok nem minősülő vegyületek és az elemek is komoly kockázatot jelenthetnek az ökoszisztémára, ha a normálistól eltérő koncentrációban és eloszlásban kerülnek a környezetbe.

A környezetet szennyező **vegyi anyagok káros hatásának** felméréséhez mennyiségi és minőségi információ szükséges magáról a szennyezőanyagról, az érintett környezeti elemekről, az ökoszisztémáról, valamint a szennyezés időbeni lefolyásáról.

A toxikológusok a vegyi anyagok okozta károkat főleg az ember, néha egy-egy kiemelt, veszélyeztetett faj szempontjából vizsgálják. Utóbbira példa a peszticidek esete, amikor mérik és megadják a szer halakra, vagy méhekre gyakorolt toxikus hatását, hogy alkalmazáskor ezt figyelembe lehessen venni. A toxikológusok általában olyan tesztorganizmusokon mérik a vegyi anyagok, például az új, szintetikus vegyületek akut és krónikus toxicitását, vagy mutagén, karcinogén, teratogén vagy reprotoxikus hatásait, melyek alapján az emberre lehet extrapolálni. Ez sem mindig egyszerű feladat, hiszen egyik élőlény fajról egy másikra extrapolálás rengeteg háttér-információt igényel, és egy sor hibalehetőséget rejt magában.

Az **ökoszisztéma** egészére vonatkozó kockázat még az ember esetén is sokkal összetettebb, a hatások és kölcsönhatások eredője valóban csak becsülhető. A helyes becslést az érintett terület jellegzetességeinek, a vegyület vagy elem tulajdonságainak, viselkedésének és hatásainak, valamint a környezeti elemek tulajdonságainak ismerete teszi lehetővé.

A szennyező **vegyi anyag hatására** bekövetkező változások teljes meghatározása az ökoszisztéma minden fajtát, egymáshoz viszonyított arányát és a szezonális változásokat is figyelembe véve rendkívül bonyolult és költséges feladat. Az ép, érintetlen ökoszisztéma szabályszerű viselkedését sem ismerjük részleteiben. A törvényszerűségek komplex felderítésére egy-két kiterjedt projekt folyik a világban, amikor több kutatócsoport vizsgálja éveken át a kijelölt területet, a trófikus lánc minden fajtát.

A helyzetet tovább bonyolítja, hogy a szennyezőanyagok sosem, vagy nagyon ritkán fordulnak elő egymagukban. Általában több szennyező, de nem ritka, hogy szennyezők százai fordulnak együttesen elő, melyek kölcsönhatásai egymással és a környezeti elemekkel valamint az ökoszisztéma tagjaival követhetetlen szövevényt alkotnak, melynek felderítésére és változásainak mérésére nem elegendők a fizikai vagy kémiai módszerek.

Az **ökotoxikológia** mindkét problémára megoldást kíván nyújtani. Viszonylag egyszerű ökotoxikológiai tesztekkel méri a hatást, majd ezekből az eredményekből extrapolál a teljes ökoszisztémára. Hasonlóan, ahogy a patkányokon végzett etetési kísérletekből a humán toxikológus extrapolál az emberre.

Az ökotoxikológiai tesztek végezhetjük tiszta vegyi anyagokkal vagy környezetből származó szennyezett mintákkal, tehát megállapíthatjuk egyes vegyi anyagok ökotoxicitását, de megadhatjuk a víz, az üledék, talaj, vagy levegőminták ökotoxicitását, leggyakrabban hatást még nem mutató koncentrációban vagy dózisban kifejezve.

1.1. Vegyi anyagok kockázatának számszerű jellemzése

A vegyi anyagok kockázatának mérése és számszerű jellemzése (**ERA** = Environmental Risk Assessment) a környezetvédelemmel kapcsolatos döntések tudományos alapjául szolgál, akár környezeti-technológiai, akár gazdasági, akár irányítási, akár politikai-jogi területről legyen szó. Egy-egy példával szeretném megvilágítani a kockázat felmérésének és mérőszámmal való jellemzésének szükségességét és alkalmazását.

A veszély mértékét a **kockázati tényezővel (RQ = Risk Quotient)** jellemezzük. **A kockázati tényező az előre jelezhető környezeti koncentráció (PEC = Predicted Environmental Concentration)** és az ökoszisztémára **előre jelzés szerint károsan még nem ható koncentráció (PNEC = Predicted No Effect Concentration)** hányadosa. Minél nagyobb ez az érték, annál nagyobb a veszély, amit a környezetbe került vegyi anyag jelent. Ha ez az érték kisebb, mint **1**, nincs szükség beavatkozásra, ha nagyobb, mint **1**, további vizsgálatok szükségesek. Ha a részletesebb vizsgálatok eredményeinek figyelembevételével is nagyobb, mint **1**, akkor el kell kezdeni a kockázatcsökkentés lehetőségein és megoldásain gondolkozni.

A kockázatot tehát számszerűsíteni kellett ahhoz, hogy értékelésre és összehasonlításra tudjuk használni. A számszerű érték képzése kockázatfelmérés során történik, melynek lépései az alábbiak:

- a veszély ill. veszély forrásának azonosítása,
- a kitettség, vagy más szóval a környezeti koncentráció felmérése a terület ismeretében,
- a hatás ismerete és mennyiségi meghatározása,
- a kockázat becslése,
- a kockázat jellemzése.

A kockázati tényező értékei és a hozzájuk rendelhető veszélyeztetési szintek

1. táblázat: A kockázati mérőszám interpretálására használt veszélyszintek

RQ = PEC/PNEC	Veszély
< 0,001	elhanyagolható
0,001 – 0,1	kicsi
0,1 - 1	enyhe
1 - 10	nagy
>= 10	igen nagy

A környezeti kockázat jellemzésére tehát a **kitettséget (expoziáció = környezeti koncentráció)** és a **hatást** kell összevetnünk, s viszonyukból, arányukból a kockázat nagyságának jellemzésére mérőszámot alkotni.

A kockázat felmérés céljával az ember és/vagy az ökoszisztéma veszélyeztetettségének megállapítását jelölhetjük meg. A környezeti kockázatfelmérés általános célja annak megállapítása, hogy a megfigyelt, vagy mért szennyezőanyag koncentráció elfogadhatatlan kockázatot jelent-e a környezetre, s abban az emberre.

1.2. A vegyi anyagok általános és helyspecifikus kockázata

Kockázatos anyagok környezeti kockázatának mennyiségi meghatározása akár általános (jogi szabályozási célokra), akár helyspecifikus (konkrét esetekre), azonos alapokon nyugszik.

Konkrét szennyezett területek esetén a **forrás-útvonal-receptorok** mentén az általánostól a területspecifikus felé haladva pontosíthatjuk a kockázatfelmérést. Az elején, adathiányos állapotban közelítő számítást végzünk, nem helyspecifikus adatok felhasználásával. Információ hiányában konzervatív gondolkodásmódot követve mindig a rosszabb esetet kell figyelembe venni. Például, ha bizonytalan hogy a talaj típusa agyag, vagy homokos agyag-e, akkor a felszín alatti vízre nagyobb kockázatot jelentő, kevésbé vízzáró talajt kell alapul venni a számításainkban, és akkor nem fogjuk alábecsülni a létező kockázatokat. Természetesen az adatok pontosításával csökkenhet a kockázat becslés értéke.

Más a helyzet a statisztikai adatok felhasználásával, hiszen ott a területre érvényes érték felfele és lefele is eltérhet az országos átlagtól, tehát az átlagértéket használva alábecsülhetjük a helyi kockázatot. Még rosszabb lehet a helyzet, az európai statisztikákat használjuk. Ebből is látszik, hogy milyen fontos a lokálisan érvényes ökoszisztéma, a területhasználatok és a helyi szokások ismerete.

A szennyezett területek egyik legnagyobb problémája, hogy gyakran kockázatos anyagok keverékei szennyeznek.

1.3. Kockázatos anyagok keverékeinek környezeti kockázata

A vegyes szennyezőanyag szélsőséges esetének tekinthető a teljesen ismeretlen összetételű szennyeződés. Teljesen ismert vegyes szennyeződés aligha létezik. Egy vegyes szennyeződést tartalmazó felmért és még fel nem mért terület csak a meghatározatlanság mértékében különbözik. Ennek ellenére a legtöbb ismeretlen szennyezőanyagot tartalmazó hulladék, talaj, vagy más környezeti elem esetében is a kémiai megközelítést alkalmazzák. Szakértői becslések szerint régebben szennyezett öröklött területek esetében a lehetséges szennyezőanyagok 80%-a be sem kerül az állapotfelmérési terv analitikai programjába.

Ha a vegyes szennyeződést tartalmazó mintát (talajt, szennyvizet, üledéket, iszapot, stb.) **ökotoxikológiai tesztelésnek** vetik alá, akkor az eredmények alapján közvetlenül tudunk extrapolálni, faktoriális, vagy valószínűségi módszer segítségével az ökoszisztémára károsan még nem ható koncentrációra.

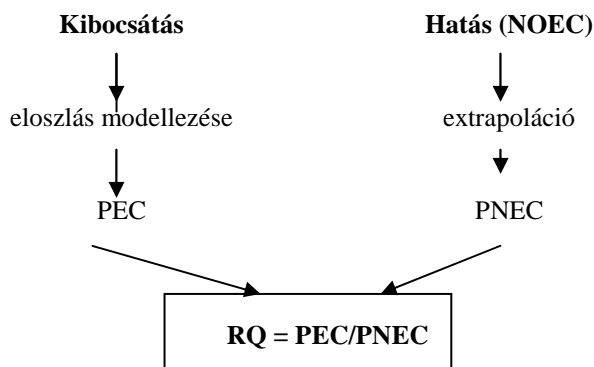
A szennyezett területek ökotoxikológiai tesztelése segítségével a régi, ismeretlen, sokkomponensű, kémiailag kimutathatatlan, vagy az állapotfelmérési programban nem szereplő toxikus hatású anyagok jelenlétére is fény derülhet.

A vegyes szennyeződésű területek kvantitatív kockázatfelmérésének tehát komoly korlátokat szabhat a szennyeződés komponenseinek azonosíthatatlansága és az analitikai programból való hiánya. Ezért kiegészítésül, mintegy kizáró bizonyítékképpen ilyen területek esetében mindenképpen szükséges az állapotfelmérés olyan integrált megoldása, mely a fizikai-kémiai módszerek mellett ökotoxikológiai tesztek is alkalmaz. Amennyiben a kémiai analitikai eredmények alapján, vagy a bizonyított hozzáférhetetlenség miatt magasabb egyedi határértéket engedélyeznének, akkor célszerű három trófikus szintről származó tesztorganizmussal laboratóriumi ökotoxikológiai tesztek végezni, és ha a teszteredmények is alátámasztják azt, hogy a megemelt határérték, valódi „káros hatás még nem mutatató” érték, akkor megfelelő a biztonság. Természetesen monitoring rendszer felállítása mindenképpen szükséges.

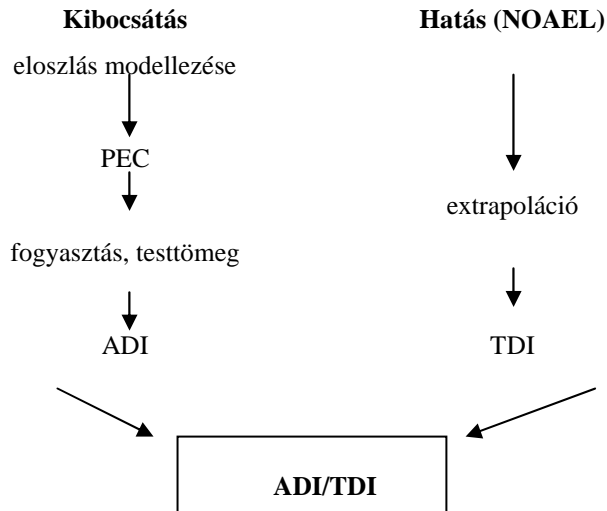
2. A kockázat mérésének alapja

Az anyagok kockázatának megítélése mindig a **kitettség** és a **hatás** összevetésén alapul. A kockázat számszerűsítéséhez a környezetben valószínűsíthető kockázatos anyag koncentrációt és hatását, helyesebben az előreláthatóan hatást még nem mutató koncentrációt kell egymással összevetnünk, vagyis a PEC / PNEC hányadost meghatározni.

A köztudatban elterjedt és általunk is használt kifejezések közül a kockázat mérése, a kockázat felmérése és a kockázat becslése ugyanazon folyamatot jelölik, vagyis az ábrán látható séma szerinti koncentrációk illetve dózisok meghatározását és hányadosuk képzését. A „becslés” kifejezés használatát az indokolhatja, hogy mind a PEC, mind a PNEC, mind pedig a TDI (Tolerable Daily Intake = elfogadható napi bevitel) meghatározásánál közelítő számításokat, modellezést, extrapolációt alkalmazunk, tehát becsljük az értékeket, pesszimista becslést alkalmazunk.



1. ábra: A kockázatfelmérés folyamatábrája környezeti kockázat esetén



2. ábra: A kockázatfelmérés folyamatábrája emberi egészségkockázat esetére

Ezzel az eljárással tehát a kockázat két koncentráció, vagy dózis hányadosaként értelmezett dimenzió nélküli szám, egy mérőszám, mely értelmezhetően, abszolút értékben adja meg a kockázat nagyságát (RQ).

A kockázat kifejezés magában foglalja azt, hogy a kockázatos anyag találkozik a környezettel és egy adott, vagy feltételezett környezetre hat. A vegyi anyag önmagában is veszélyes, mert gyúlékony, mérgező, stb., a veszély akkor is fennáll, ha még elő sem állítottuk. A kockázat kifejezés viszont csak a környezettel, a receptorokkal együtt értelmezhető.

2.1. A környezet kitétsége, a PEC érték meghatározása

Az adatbázisokból származó és/vagy a mért értéktől a származtatott PEC értékhez úgy juthatunk, hogy figyelembe vesszük:

- a szennyezőanyag tulajdonságait,
- vízoldhatóságát,
- megoszlási hányadosait,
- molekulatömegét,
- (bio)degradálhatóságát,
- bioakkumulálhatóságát,
- a szennyezett közeg hatását,
- a kockázatos anyag mozgását a környezetben,
- az adszorpció mértékét,
- a hozzáférhetőségét,
- a kibocsátás helyétől milyen távolságban mértünk, stb.

A **környezet kitétsége** a mért értékek és/vagy a kibocsátásból kiinduló számítások alapján állapítható meg. A forrásból induló transzport során a vegyi anyag eléri a környezeti elemeket és a receptorokat ezt az útvonalat terjedési modellek alapján, számítógépes programmal szimulálhatjuk. A szennyezőanyag terjedésének valóság-hű modellezéséhez ismernünk kell a szennyezőanyag és a környezet jellegzetességeit, hogy a kölcsönhatásokat helyesen ítélhessük meg.

A környezeti koncentráció (PEC), azaz a kitétség meghatározásának lépései:

- A transzport folyamatok leírása,
- Eloszlási modellhez szükséges minimális adathalmaz beszerzése,
- A környezet definiálása, lokális és/vagy regionális szinten,
- Másodlagos adatok beszerzése: megoszlási hányadosok a környezeti elemekben, a degradáció mértéke (biotikus, abiotikus),
- A degradáció toxikus közti- vagy végtermékének figyelembevétele,
- A kibocsátás felmérése, vagy becslése,
- Eloszlás és viselkedés a környezetben,
- PEC számítása.

A **PEC** számításához szükség van a szennyezőanyag fizikai-kémiai tulajdonságaira, mint pl.: mólusúly, oktanol-víz megoszlási hányados, szorpciós tulajdonságok, vízdoldhatóság, gőznyomás, illékonyság, forrpon.

Egy szennyezett terület esetében a forrásból kiindulva modellezhetjük a szennyezőanyag terjedését. A forrás lehet maga a szennyezett terület is.

2.2. A koncentráció–hatás összefüggés vizsgálata

A környezetünket veszélyeztető anyagok megítélése hatásuk alapján történik. Ez a hatás lehet toxikus, mutagén, teratogén, vagy más káros hatás. A dózis - válasz összefüggés vizsgálata és értékelése megmutatja számunkra a kockázatos anyagok egészségkárosító hatásának mértékét, s azt a koncentrációt, vagy dózist, amely még nem okoz észrevehető hatást a vizsgált testorganizmuson. A káros hatást még nem mutató koncentrációk illetve dózisok megjelölésére az ökológiai kockázat és a humán egészségkockázat esetében más és más jellemzőket alkalmaznak az ökotoxikológusok és a humántoxikológusok.

Az emberre károsan nem ható koncentráció

Az emberre károsan még nem ható kockázatos anyag koncentrációt extrapolációval határozzuk meg toxikológiai adatok alapján. A humántoxikológusnak széleskörű adatbázis áll rendelkezésére, s kialakult annak a módszere is, hogy állatokkal végzett kísérletek eredményéből, a NOAEL értékek alapján ún. faktoriális módszerrel hogyan határozzák meg az ember számára még elviselhető, (tolerábilis) dózist, abból kiindulva pedig a még elviselhető napi bevitt (TDI = Tolerable Daily Intake). A faktorokat, a biztonsági tényezőket, melyekkel a NOAEL értéket osztják, hogy megkapják a TDI-t, csak részben választják meg biológiai indokok alapján.

A kockázatos anyaggal kapcsolatos információkat kézikönyvekből és adatbázisokból gyűjtjük ki. Fontos, hogy az ADI (átlagos napi bevitt) értékeket validált forrásokból szerezzük be.

Az átlagos napi dózis, vagyis a kitettség meghatározása

Az átlagos napi dózis (ADI = Average Daily Intake) a szervezetbe került kockázatos anyag mennyiségét jelenti egységnyi testtömegre és időegységre vonatkoztatva. Mértékegysége: mg/kg.nap.

$$ADI = Ck * BM * EG / TT$$

Ck = kockázatos anyag koncentrációja a szennyezett közegben (mg/kg)

BM = lenyelt, bevitt mennyiség (kg/nap)

EG = expozíció gyakorisága (nap/év)

TT = testtömeg (kg)

Egy szennyezett terület esetében az ADI értéket minden szennyezőanyagra ki kell számítani. Az átlagos napi dózis meghatározásánál megkülönböztetünk gyermeket, nőt, férfit. Az expozíció becsléséhez átlagos, vagy helyspecifikus fogyasztási értékeket használhatunk. A fogyasztás értékein kívül ismerni kell a helyben természetesen élelmiszerek részarányát, a területhez kötődő tevékenységformákat, területhasználatokat. Az expozíció időtartama is helyspecifikus tényező.

Az **TDI** értékhez, mint referenciaértékhez hasonlítjuk a becsült expozíció mértékét. A kettő hányadosa a kockázati hányados, az **RQ**.

RQ = ADI / TDI = átlagos napi dózis / tolerálható napi dózis (lenyelésre)

RQ = IC / RfC = belégtelt koncentráció / tolerálható napi koncentráció (belégzésre)

Az összes szennyezőanyagra és az összes expozícióra útra kiszámított **RQ** értéket össze kell adni, így kapjuk meg az érintett populációra vonatkozó összes kockázat mértékét. A kockázati tényezőt (**RQ**) az előre jelezhető környezeti koncentráció és az előreláthatólag károsan még nem ható koncentráció hányadosa. Ebből a definícióból adódóan az egynél nagyobb kockázati hányados már komoly kockázatot jelent. 0,1 és 1,0 között enyhe mértékű a kockázat. Általában az **RQ =1** értékhez tartozó **PEC = PNEC** alapon a környezeti koncentráció a károsan még nem ható koncentrációval azonos lehet. De vegyük figyelembe, hogy ekkor már az enyhe és a nagy kockázat határán vagyunk.

A toxikus hatásokból adódó kockázati tényezőkön kívül a mutagén és karcinogén hatásokból eredő kockázatot is figyelembe kell venni.

Az ökoszisztémára károsan nem ható koncentráció előrejelzése

Az érintett ökoszisztémára károsan még nem ható koncentráció egyes tesztorganizmusokkal folytatott vizsgálati eredményekből kapható meg extrapolálással.

Ha egy toxikus szennyezőanyag kikerül a környezetbe, az messzemenő következményekkel jár. Az ott élő ökológiai közösség egyes tagjait, egyes fajait háttérbe szorítja, sőt kipusztulásukat is okozhatja, másokat előnyhöz juttat, tehát felborítja az ökoszisztéma egyensúlyát.

Az ökoszisztémák kisebb-nagyobb mértékben képesek alkalmazkodni a környezet változásaihoz, néha extrém környezeti tényezőkhöz is képesek idomulni, meg tudnak felelni a klimatikus változásoknak és a legkülönbözőbb stresszeknek. Az ökológiai közösség egyes tagjai érzékenyebben reagálnak a környezeti hatásokra, mások rezisztensek. Egyes környezeti hatások csak a közösség tagjainak arányát tolják el, mely bármikor visszaalakulhat, de történhet irreverzibilis károsítás is.

Az ökotoxikológusok az ökoszisztémát jól reprezentáló és annak történéseit jellemző tesztorganizmusokra és mérési módszerekre van szükségük.

- A bioindikáció a vizsgált ökológiai rendszer legérzékenyebb tagjának meglétét, vagy hiányát vizsgálja,
- a biomonitoring a monitor-szervezetekben lejátszódó változásokat, pl. akkumulációt,
- az ökotoxikológiai tesztek laboratóriumban végzett vizsgálatok, egy, vagy több fajt alkalmazó tesztek, a koncentráció hatás görbe kimérésére.
- Adott terület diverzitásának vizsgálata (pl. életközösségek, koreloszlás, egyedszám, egyedsűrűség, egészségi állapot, szaporodási ráta, stb.) a biodiverzitás eltérése a háttér területtől.

A PNEC érték meghatározása ill. kiszámítása az adatbázisokban elérhető adatok értékelésével kezdődik. Az adatbázisok a legtöbb vegyületre hiányosak. A meglévő eredmények legtöbbje rövid idejű, tehát akut toxicitási tesztből származik.

Az adatbázisokban található adatok lehetnek akut, vagy krónikus hatáson alapuló tesztek, amelyek végpontja is különbözhet. Ha az adatbázisban nem találunk egy vegyületre adatot, akkor a szerkezet hasonlósága alapján becsülhetjük a toxicitását, hasonló szerkezetű ismert hatású vegyület adataiból (QSAR)

Az ökotoxikológiai vizsgálatok, azok értékelése és a kapott eredmények felhasználása során sok a hibalehetőség.

- Fajonkénti nagy eltérések miatt, nehéz egyik fajra kapott eredményből egy másikra következtetni.
- Az akut toxicitás méréséből nem mindig lehet a hosszabb ideig tartó (krónikus) hatásokra következtetni.
- A laboratóriumi mérésekből csak nagy hibával lehet a valódi ökoszisztémában lezajló történésekre következtetni, ennek okai
 - hogy egyetlen faj nem reprezentálja az ökoszisztémát,
 - tiszta vegyületekre kapott adatok nem veszik figyelembe az additív, szinergens, vagy antagonist hatásokat, a szennyezőanyag és a mátrix kölcsönhatását, stb. (Horváth és munkatársai, 1996)

A PNEC érték megállapítására alkalmazott ökotoxikológiai tesztek eredményét az elvégzett tesztek számától és minőségétől függően biztonsági faktorokkal vesszük figyelembe. Ez az ún. faktoriális módszer. Az EU-TGD (1995) javaslat felsorolja a különböző környezeti elemek esetén használatos tesztorganizmusokat és megadja a biztonsági faktorok alkalmazásának rendjét. Az 2. bemutatja a PNEC képzéséhez ajánlott faktorokat vízi ökoszisztéma tesztorganizmusaival nyert ökotoxikológiai eredmények alapján.

2. táblázat A PNEC érték előrejelzésére alkalmazott biztonsági faktorok

Ökotoxikológiai tesztelés	Biztonsági faktor
Három különböző trofikus szint élőlényeivel legalább 1-1-akut toxicitási teszt (LC50: hal, alga, Daphnia)	1000
Legalább egy hosszú távú NOEC mérés akár hal, akár Daphnia	100
Két különböző NOEC mérés, két különböző trofikus szint élőlényeivel (hal és/vagy alga és/vagy Daphnia)	50
Három trofikus szint élőlényeivel meghatározott krónikus NOEC értékek	10
Szabadföldi adatok, vagy mezokozmosz kísérletek egyedi felmérés	1

Az ökológiai kockázat pontosítása, iterációs megközelítés

A veszély a PEC/PNEC hányadossal jellemezhető; minél nagyobb ez az érték, annál nagyobb az egyszerű, vagy összetett szennyezőanyag által okozott veszély (ld. 2. táblázat). Ha ez az érték kisebb, mint 1, nincs szükség további teendőre, pontosabb vizsgálatra vagy intézkedésre. Ha az RQ nagyobb, mint 1, további vizsgálatok szükségesek. A veszély jellemzése a környezetünkben már megtalálható és újonnan keletkező vegyületek illetve a csúcsragadozókra kifejtett kockázatbecslés esetén különböző séma szerint történik.

A 3. ábra a környezetünkben már megtalálható és újonnan keletkező vegyületekre mutat be egy általános kockázatbecslési eljárást. A módszer a következő lépéseket tartalmazza:

- PEC / PNEC arány meghatározása a meglévő adatok segítségével.
- Ha a PEC / PNEC arány nagyobb, mint 1, meg kell nézni, hogy a PEC illetve a PNEC értékének pontosításával csökkenthető-e PEC / PNEC arány. Ehhez további információra illetve vizsgálatokra van szükség.
- További információ beszerzése, újabb vizsgálatok elvégzése.
- PEC / PNEC arány módosítása.

A lépések átgondolása során pesszimista gondolkodásmódot kell alkalmazni. Ha bizonytalan az információnk, rossz minőségű vagy nincs adatunk, akkor a lehető legrosszabb esetet vegyük alapul. Ha a pesszimista becslés ellenére $RQ < 1$ értéket kapunk, biztosak lehetünk benne, hogy joggal minősítjük a vegyi anyagot, vagy a területet enyhé veszélyességűnek, további intézkedésekre nincs szükség.

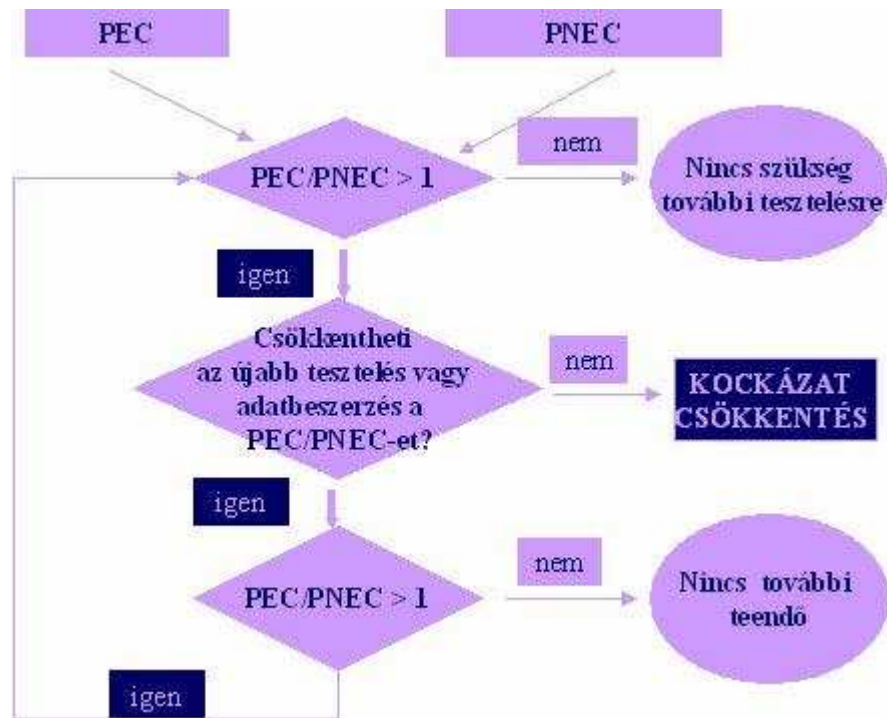
A 3. ábrán bemutatott iterációs eljárás végeredménye alapján megállapítható, hogy szükségesek-e kockázatmérséklő lépések. Az iterálást akkor hagyhatjuk abba, ha az adatok pontosításával már nem csökkenthető a kockázati tényező. A pontosítással minimalizált kockázati tényező a vegyi anyagra illetve a területre jellemző kockázat kvantitatív eredménye. Összefoglalva ismét megadjuk a kockázatfelmérésben használt extrapolációval kapott értékeket kitétségre és hatásra.

Ökológiai kockázat esetén:

RQ = kockázati tényező, az előre jelezhető környezeti koncentráció (PEC) és az előreláthatólag károsan még nem ható koncentráció (PNEC) hányadosa

PEC = kitétség, a környezetben valószínűsíthető kockázatos anyag koncentráció

PNEC = az ökoszisztémára károsan még nem ható szennyezőanyag koncentráció



3. ábra: Általános kockázatfelmérés iteratív eljárása

Humán egészségkockázat esetén:

$RQ = ADI / TDI$ = átlagos napi dózis / tolerálható napi dózis (lenyelés esetén)

ADI = átlagos napi dózis

TDI = megengedhető napi dózis, mértékegysége: mg/kg.nap

$RQ = IC / RfC$ = belélegzett koncentráció / tolerálható napi koncentráció (belégzés)

IC = belélegzett koncentráció

RfC = referencia koncentráció, amelyre vonatkoztatva értékeljük a belégzés útján bekövetkező terhelést.

A bioakkumuláció

A PNEC kalkulálásánál igen fontos a bioakkumuláció figyelembe vétele. A bioakkumuláció felelős a táplálékláncba kerülésért.

Bioakkumulációval kell számolnunk a szerves ionok egy részénél, pl. a nehézfémeknél és a nehezen bontható (perzisztens) apoláros szerves vegyületeknél.

- A biokoncentráció a vízi környezetből való felvétel nettó eredménye, vagyis valamely vegyületnek egy organizmus által felvett és leadott értékének különbsége,
- a bioakkumuláció minden felvételi lehetőséget figyelembe vesz,
- a biomagnifikáció a bioakkumuláción kívül a szennyezőnek a táplálékláncon keresztül történő transzportját is jelenti.

A biokoncentrációs faktor (BCF) az organizmusban mérhető koncentráció és környezeti elemben mérhető szennyező-koncentráció aránya.

$$BCF_{\text{növény}} = C_{\text{növény}} / C_{\text{talaj}}$$

A szerves vegyületek bioakkumulációs faktora arányos az oktanol-víz megoszlási hányadosukkal. (3. táblázat)

3. táblázat A bioakkumulációs faktor és az oktanol-víz megoszlási hányados (K_{ow}) értékeinek összefüggése szerves vegyületeknél

Bioakkumulációs hajlam	BCF	log K_{ow}
nagy	>3	>3
közepes	1,5 – 3	1,5 - 3
kicsi	<1,5	<1,5

Egy sor biológiai faktor miatt természetesen eltérések lehetnek a K_{ow} és BCF érték között. Ennek okai a következők lehetnek:

- az aktív transzport,
- a vegyület megváltozhat a membránon átkerülve,
- kölcsönhatásba léphet bizonyos sejtanyagokkal,
- a felvétel és kiürítés kinetikája és jellegzetességei.
- emiatt a magas K_{ow} értéken kívül a bioakkumuláció akkor valószínűsíthető, ha a vegyület erősen adszorbeálódik, ha rokon vegyületeiről ismert bioakkumulálhatósági hajlamuk, valamint ha nehezen hidrolizálhatóak és rosszul biodegradálódnak.

A bioakkumulációs teszteknel figyelembe kell venni magát, a mérési eredményekből számított BCF-t, a kiürítés idejét (CT_{50}), az anyagcsere utakat, a transzformációt a sejten, vagy az organizmuson belül, a szervspecifikus akkumulációt, a kiürítetlen megkötött maradékot és a vegyület hozzáférhetőségét.

Élelmiszerek toxikus anyag koncentrációja

$$PEC_{\text{hal}} = PEC_{\text{víz}} \times BCF_{\text{hal}}$$

$$PEC_{\text{növény}} = PEC_{\text{talaj}} \times BCF_{\text{növény}}$$

PEC_{hal} vagy $PEC_{\text{növény}}$ értékeket a tápláléklánc felsőbb tagjai, például a csúcsragadozók kockázatának megállapítására a $PNEC_{\text{oral}}$ ragadozó értékkel kell összevetni.

Az ember veszélyeztetettségének jellemzésére ADI (átlagos napi bevitel) értékeket kell számítani a hal és növényi koncentrációk alapján, a fogyasztás és a fogyasztó jellemzőinek figyelembevételével, és azokat az ember még tolerálható táplálkozással történő beviteli (TDI_{oral}) értékeivel összevetni.

3. Vegyi anyagok általános kockázatelemzése, határértékképzés

Az olyan vegyi anyagok gyártásának és használatának engedélyezéséhez, melyeket nagy mennyiségben állítanak elő, és felhasználásuk során is számíthatunk nagyobb mennyiség környezetbe kerülésével, elengedhetetlen az előzetes ökotoxikológiai tesztelés. Az illető vegyi anyag előre jelezhető környezeti koncentrációját kell összevetni az ökoszisztémára előreláthatóan károsan még nem ható koncentrációjával.

Az előre jelezhető károsan még nem ható koncentráció (PNEC) tulajdonképpen nem más, mint egy hatáson alapuló határérték. Sok országban a vegyi anyagok határértékeit, a környezeti minőségi kritériumokat a vegyi anyagok hatása alapján állapítják meg. Egy ország rendeleteibe bekerülő hatáson alapuló határérték, mondjuk felszíni ízek esetében nem egy konkrét felszíni vízre, hanem az országra jellemző „átlagos” felszíni vízre, azaz egy fiktív felszíni vízre érvényes. Ezt a határértéket alkalmazzák minden felszíni vízre, holott szigorúan véve egyik konkrét felszíni vízre sem igaz. Egységes európai határértékek az európai átlagkörnyezetre vonatkoznak, tehát csak iránymutatóul használhatóak, ha helyspecifikus értékelést végzünk. Lokálisan egészen más érték adódhat a PNEC-re (előrejelzés szerint károsan még nem ható koncentráció), mint a törvényes szennyezettségi határérték (A magyar rendeletben: B).

Általános kockázatelemzésről akkor beszélünk, ha nincs megadva a konkrét, terület, hanem például egy állam rendeleteibe készülő általános határérték képzéséhez szükséges a kockázat számszerűsítése.

Általános, hatáson alapuló határértékek képzésénél, a multifunkcionalitás igénye miatt, az ökotoxikológiai hatásokból indulunk ki, és az ökoszisztémára vonatkozó PNEC érték lesz a határérték, természetesen megkülönböztetve a vízi és a szárazföldi ökoszisztémákat.

Helyspecifikus határértékképzés során egy konkrét területre érvényes PNEC értéket határozzunk meg. Ilyenkor a konkrétan ismert területhasználatokból indulunk ki, hiszen a területhasználat egyértelműen meghatározza az expozíciós útvonalakat. Ha a felszín alatti víz ivóvízbázis, akkor az ivóvíz minőségi kritériumokat tekintjük károsan még nem ható koncentrációknak (PNEC, TDI).

Mind általános, mind helyspecifikus kockázat esetén igaz az alábbi összefüggés

$$PEC / PNEC = RQ \leq 1$$

vagyis, az RQ-nak egynél kisebbnek kell lennie. Ezt az összefüggést kétféleképpen is alkalmazhatjuk: ha ismerjük a területhasználatokból adódó expozícióknak megfelelő PNEC értéket, akkor ahhoz megadhatjuk a maximálisan megengedhető PEC, azaz környezeti koncentráció értéket. Ha ennél nagyobb a pillanatnyi érték, akkor a számított PEC a kockázatsökkentő eljárás célértékét is jelenti. A másik irány, ha ismerjük a környezeti koncentrációt, az $RQ \leq 1$ kritérium alapján megválaszthatjuk azt a területhasználatot, amely nagyobb PNEC-et tesz lehetővé (korlátozás a területhasználatban).