

# UMWELTWISSENSCHAFTEN UND SCHADSTOFF-FORSCHUNG

ZEITSCHRIFT FÜR UMWELTCHEMIE UND ÖKOTOXIKOLOGIE

ORGAN DER ARBEITSGEMEINSCHAFT UMWELTCHEMIE UND ÖKOTOXIKOLOGIE DER GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER  
SOWIE DER ARBEITSGEMEINSCHAFT UMWELTCHEMIE UND ÖKOTOXIKOLOGIE DER CHEMISCHEN GESELLSCHAFT  
UND DES VERBANDES DEUTSCHER GEOÖKOLOGEN E.V.

September 1990

3

*Methan  
als Treibhausgas*

**Schwerpunktthema:  
Bewertung von  
Umweltchemikalien**

*Risiko-Analyse  
und -Bewertung*

*Dioxin in Sediment- und  
Fischproben*

*Polybromierte  
Diphenylether*

*Nitro-PAK  
aus Verbrennungsprozessen*

*Schwermetalle:  
Bioverfügbarkeit*

*Entschwefelungs-  
verfahren*

*Luftüberwachung  
mit dem Lagrange-  
Ausbreitungsmodell*

*Rüstungsaltslasten  
einer TNT-Anlage*

*Chemische Ökologie  
-Natürliche Botenstoffe*

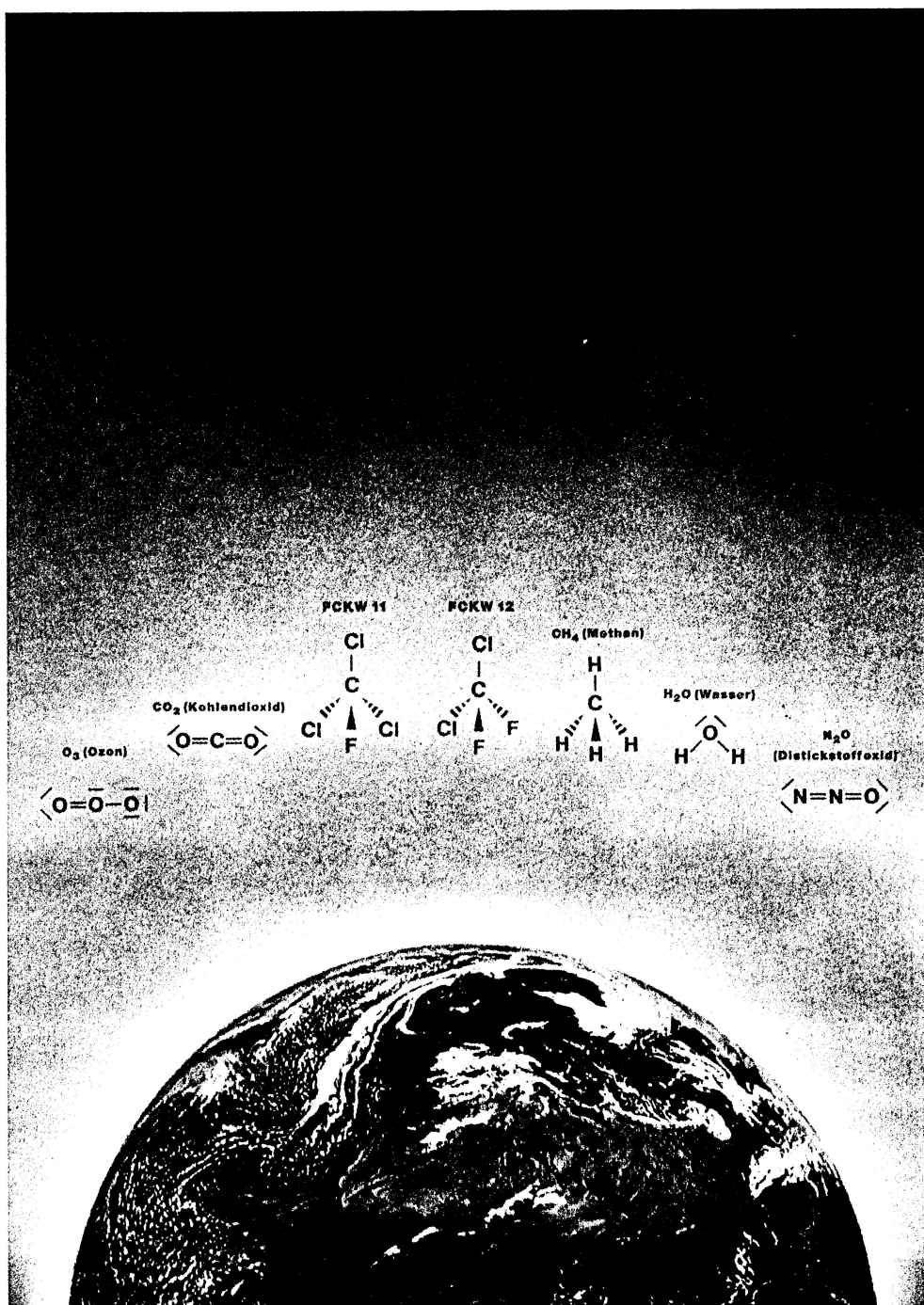
*Analytische Chemie  
in Europa*

*Abwasserabgabe*

*Verbrennungsanlagen  
für Abfälle*

*Deutsche Stiftung Umwelt*

*Umweltchemie und  
Ökotoxikologie in  
GDCh und CG*



HERAUSGEGEBEN VON O. HUTZINGER

UWSF-Z. Umweltchem. Ökotox · ISSN 0934-3504 · USZOE · 2(3)121 – 180 Sept. 1990

**ecommed**  
verlagsgesellschaft mbh

## Schwerpunktthema: Bewertung von Umweltchemikalien

### Einstufung von Stoffen als „umweltgefährlich“

- Entwicklung eines Einstufungsschemas zum Zwecke der Kennzeichnung nach dem Chemikaliengesetz

D. Strupp<sup>1</sup>, H.-P. Lühr<sup>1</sup>, H. Th. Grunder<sup>1</sup>, J. Gerdesmann<sup>1</sup>, J. Ahlers<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institut für Wassergefährdende Stoffe, An der Technischen Universität Berlin, Hardenbergplatz 2, D-1000 Berlin 12

<sup>2</sup> Umweltbundesamt, Bismarckplatz 1, D-1000 Berlin 33

#### 1 Einleitung

Das Gesetz zum Schutz vor gefährlichen Stoffen (Chemikaliengesetz-ChemG) bezweckt, Mensch und Umwelt vor den schädlichen Einwirkungen gefährlicher Stoffe zu schützen.

„Umweltgefährlich“ im Sinne des ChemG sind Stoffe, „die selbst oder deren Verunreinigungen oder Zersetzungsprodukte geeignet sind, die natürliche Beschaffenheit von Wasser, Boden oder Luft, von Pflanzen, Tieren oder Mikroorganismen sowie des Naturhaushaltes derart zu verändern, daß dadurch erhebliche Gefahren und erhebliche Nachteile für die Allgemeinheit herbeigeführt werden.“

Der Schutz von Mensch und Umwelt vor gefährlichen Stoffen kann durch diverse Maßnahmen angestrebt werden, die bis zum **Verwendungsverbot** reichen können. Diese äußerste Maßnahme ist jedoch nur zulässig, wenn den Gefahren durch *Einstufung, Verpackung und Kennzeichnung* nicht hinreichend begegnet werden kann. § 13 ChemG schreibt vor, daß der Hersteller oder Einführer einen Stoff einzustufen, zu verpacken und zu kennzeichnen hat, wenn er umweltgefährliche Eigenschaften aufweist. Der **Einstufung** zum Zwecke der Kennzeichnung kommt deshalb erhebliche Bedeutung zu. Sie muß, um ihren Zweck erfüllen zu können, bereits bei deutlich niedrigeren Eingriffsschwellen wirksam werden als andere Maßnahmen, z.B. Verbote.

Während derartige Einstufungen und Kennzeichnungen für die übrigen Gefährlichkeitsmerkmale bereits seit längerem eingeführt sind (z.B. Totenkopf für giftige Substanzen), existiert bis heute für das Gefährlichkeitsmerkmal „umweltgefährlich“ noch keine Definition. Das liegt einerseits an den sehr allgemeinen Umschreibungen im ChemG für dieses Merkmal und zum anderen daran, daß keine Stoffeigenschaften existieren, die für sich alleine den umfassenden Begriff „umweltgefährlich“ ausfüllen können. Daher wurde eine Expertengruppe ins Leben gerufen, deren Aufgabe es war – aufbauend auf Vorschlägen, die im Umweltbundes-

amt erarbeitet wurden und ausgehend von den in der Grundstufe des ChemG zur Verfügung stehenden Daten – , ein Einstufungsschema zu entwickeln und die Ergebnisse in die Beratung auf EG-Ebene einzubringen. Ein derartiges Schema muß einfach sein, da der Hersteller selbst in der Lage sein soll, eine Einstufung vorzunehmen. Daher wurde auch auf Expositionsüberlegungen verzichtet und die Umweltgefährdung ausschließlich unter Zugrundelegung *stoffimmanenter Eigenschaften* abgeleitet. Da in der Grundstufe des ChemG keine Testergebnisse vorgelegt werden, die eine sinnvolle Abschätzung der Gefährdung für die Umweltkompartimente *Luft* und *Boden* ermöglichen, wurden Einstufungskriterien ausschließlich für den Bereich *Wasser* erarbeitet. Diese Einstufung ersetzt nicht eine spätere ausführliche Bewertung der Umweltgefährlichkeit durch das Umweltbundesamt.

Während der Entwicklung eines Schemas zur Einstufung und Kennzeichnung von Stoffen wurden verschiedene **Einstufungsmodelle** vorgeschlagen. Sie berücksichtigen im wesentlichen die Kriterien der Grundstufenprüfungen, insbesondere

- Biologisch leichte/nicht-leichte Abbaubarkeit
- Akute Toxizität gegenüber aquatischen Organismen (Fisch, Daphnie, Alge)
- Hinweis auf ein Bioakkumulationspotential (Verteilungskoeffizient n-Octanol/Wasser, Pow)

Alle vorgeschlagenen Modelle gehen davon aus, daß eine sehr hohe **aquatische Toxizität** bereits allein ausreicht, um eine Umweltgefährlichkeit zu begründen. Bei geringerer aquatischer Toxizität müssen weitere Parameter wie nicht-leichte Abbaubarkeit und/oder ein hohes Akkumulationspotential hinzukommen.

Die Arbeiten der Expertengruppe wurden begleitet durch ein F + E-Vorhaben, in dem die einzelnen Einstufungsmodelle an Hand von Stoffdaten überprüft werden sollten [1]. Wegen der geringen Zahl der nach dem ChemG neuangemeldeten Stoffe ist diese Gruppe nicht repräsentativ genug. Daher wurden zur Prüfung des Erfassungsspektrums der Modelle Listen von Altstoffen erzeugt, zu denen bereits umweltrelevante Daten vorliegen, und zu denen benötigte

<sup>2</sup> Korrespondenz: Priv.-Doz. Dr. J. Ahlers, Umweltbundesamt, Bismarckplatz 1, D-1000 Berlin 33

Stoffinformationen aus diversen zugänglichen Quellen (Literatur, Datenbanken) zusammengetragen werden konnten. Besonderes Augenmerk wurde darauf gelegt, möglichst repräsentative Chemikalien zu erfassen und nicht die normalerweise in Datenbanken vorherrschenden „auffälligen“ Substanzen.

## 2 Material und Methoden

### 1. Stoffauswahllisten

Im Rahmen dieser Arbeit werden zwei Stofflisten betrachtet. Es handelt sich einmal um eine Zufallsauswahl (ca. 100 Stoffe) aus den in der Bundesrepublik Deutschland mit mehr als 1 000 t/a vermarkteten Großchemikalien – **Altstoffe** –, zu denen die Chemische Industrie einen Grunddatensatz vorgelegt hat, und die unseres Erachtens eine repräsentative Auswahl aus der Vielzahl der vorhandenen Stoffe darstellen. Zum Vergleich wurden die in der Bundesrepublik Deutschland nach dem ChemG neu-angemeldeten Stoffe (ca. 80 Stoffe) analysiert.

### 2. Einstufungsmodelle

Zur Auswertung wurden immer die Organismen-Gruppen (Fische bzw. Daphnien bzw. Algen) mit der *größten Sensibilität* bzw. der *kleinsten festgestellten Wirkkonzentration* herangezogen. Die 9 zur Diskussion gestellten Einstufungsmodelle sind in → Tabelle 1 zusammengefaßt:

**Modell I** entspricht dem von der deutschen Expertengruppe erarbeiteten Vorschlag,

**Modell II** dem Vorschlag der EG-Experten.

Die **Modelle III und IV** sind Varianten des Vorschlages I mit z.T. anderen Schwellenwerten (III c) bzw. unter Nichtberücksichtigung der Algentoxizität (IV).

Bei den **Vorschlägen V und VI** kommen unter b) und c) nur nicht-leicht abbaubare Stoffe zur Einstufung; unter c) muß eine bestimmte aquatische Toxizität sowohl mit der Eigenschaft „nicht leicht abbaubar“ als auch mit einem hohen Bioakkumulationspotential verbunden sein.

**Modell VII** ist ein Vorschlag, der im Rahmen der Gefahrgutklassifizierung RID/ADR diskutiert wird. Auch hier muß oberhalb von 1 mg/l aquatische Toxizität eine nicht-leichte Abbaubarkeit und ein hohes Bioakkumulationspotential gegeben sein.

**Modell VIII** stellt ein von Experten der skandinavischen Länder erarbeitetes Einstufungsschema dar, das als Variante des EG-Vorschlages II angesehen werden kann.

Das **Modell IX** wurde in der deutschen Expertengruppe als Kompromiß zwischen dem Vorschlag I und dem von der Industrie favorisierten Modell III diskutiert. Es enthält alle Teilkriterien a)–c) von III, und ähnlich wie bei Modell I als Höchstgrenze für die aquatische Toxizität 100 mg/l. Im Bereich von 10–100 mg/l kommen allerdings nur nicht-

Tabelle 1: Einstufungsmodelle

Modell-Nr.	LC-50 Fisch oder EC-50 Daphnien oder EC-50 Alge (in mg l <sup>-1</sup> )	Biolog. Abbau:		log Pow
		– leicht	+	
I	a	≤ 1		≥ 3
	b	> 1 ; ≤ 10	+	
	c	> 1 ; ≤ 100	–	
II	a	≤ 1		≥ 3
	b	> 1 ; ≤ 10	+	
	c	> 1 ; ≤ 100	–	
	d		–	
III	a	≤ 1		≥ 3
	b	> 1 ; ≤ 10	+	
	c	> 1 ; ≤ 10	–	
IV	a	≤ 1	} ohne Algen	≥ 3
	b	> 1 ; ≤ 10		
	c	> 1 ; ≤ 100		
V	a	≤ 0,1		≥ 3
	b	> 0,1 ; ≤ 1	–	
	c	> 1 ; ≤ 10	–	
VI	a	≤ 1		≥ 3
	b	> 1 ; ≤ 10	–	
	c	> 10 ; ≤ 100	–	
VII	a	≤ 1	} ohne Algen	≥ 3
	b	> 1 ; ≤ 10		
VIII	a	≤ 1		≥ 3
	b	> 1 ; ≤ 100	+	
	c	> 1 ; ≤ 100	–	
	d		–	
IX	a	≤ 1		≥ 3
	b	> 1 ; ≤ 10	+	
	c	> 1 ; ≤ 10	–	
	d	> 10 ; ≤ 100	–	

Jedes Modell besteht aus maximal 4 Teilmodellen (a–d). Diese setzen sich aus maximal 3 zu erfüllenden Merkmalen (Merkmalkombination aus aquatischer Toxizität und/oder biologischem Abbau und/oder log Pow) zusammen.

**Beispiel:** Eine Einstufung nach II b erfolgt dann, wenn die aquatische Toxizität zwischen 1 und 10 mg/l liegt, der Stoff gleichzeitig biologisch leicht abbaubar ist und der log Pow-Wert mindestens 3 ist.

leicht abbaubare Stoffe zur Einstufung, die gleichzeitig ein hohes Bioakkumulationspotential aufweisen.

**Modell IX** entspricht darüber hinaus Modell VI, stuft aber zusätzlich leicht abbaubare Stoffe im Bereich 1–10 mg/l ein, die ein hohes Bioakkumulationspotential aufweisen (IX b).

### 3. Datenbeschaffung

Die Daten stammen aus F + E-Vorhaben des Umweltbundesamtes [2, 3], den Grunddatensätzen des VCI (Verband der Chemischen Industrie), der MITI-Liste [4] und eigenen Recherchen in den wichtigsten Fakten- und Fachliteratur-Datenbanken.

<sup>3</sup> Pow = Verteilungskoeffizient n-Octanol/Wasser

4. Datenbeschreibung

Für die *akuten Fischtoxizitätswerte* wurden i.a. die LC-50-Werte (letale Konzentrationen) bei 48 bzw. 96stündiger Einwirkung der Stoffe verwendet.

Für die *akute Daphnientoxizität* wurden i.a. die EC-50-Werte (Schwimmunfähigkeit) bei 24- bzw. 48stündiger Einwirkung verwendet.

Für die *akute Algentoxizität* wurden die EC-50-Werte (Wachstumshemmung) bei 72- bzw. 96stündiger Dauer verwendet.

Bei der *biologischen Abbaubarkeit* wurden die Stoffe als  
 – leicht abbaubar (O<sub>2</sub>-Verbrauch/CO<sub>2</sub>-Entwicklung 60 % oder mehr bzw. DOC<sup>4</sup>-Abnahme 70 % oder mehr), Symbol + (Plus) in → Tabelle 1 bzw.  
 – nicht-leicht abbaubar (in allen anderen Fällen), Symbol – (Minus) in → Tabelle 1 gekennzeichnet.

Für den n-Octanol/Wasser-Verteilungskoeffizienten (Pow bzw. log Pow) wurden experimentelle und berechnete Werte verwendet.

3 Ergebnisse

1. Analyse der vorliegenden Daten

Abb. 1 gibt einen Überblick über die prozentuale Verteilung der für die Einstufungsmodelle verwendeten Stoffeigenschaften, *aquatische Toxizität*, auf die beiden betrachteten Stoffgruppen *Altstoffe mit hohem Produktionsvolumen* und *neuangemeldete Chemikalien*.

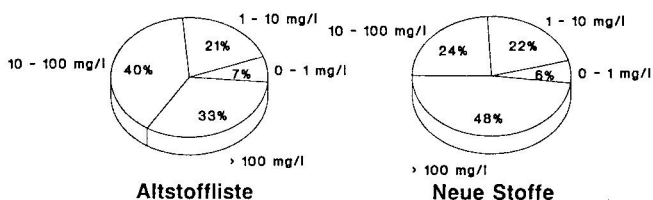


Abb. 1: Prozentuale Verteilung der Stoffe auf einzelne Toxizitätsbereiche. – Für die aquatischen Toxizitäten wurden jeweils die niedrigsten LC-50- bzw. EC-50-Werte (Fisch, Daphnie, Alge) herangezogen.

Bei den *Altstoffen* weist nur ein geringer Anteil hohe aquatische Toxizitäten (< 1mg/l) auf; der Hauptanteil liegt bei 10–100 mg/l bzw. bei > 100 mg/l. Bei *neuangemeldeten Stoffen* findet sich eine ähnliche Verteilung, wobei ein noch höherer Anteil im Bereich von > 100 mg/l zu finden ist.

2. Prozentuale Einstufungen

Abb. 2 gibt am Beispiel des vom EG-Expertengremium vorgeschlagenen Modells II eine Aufschlüsselung, welchen Anteil die einzelnen Merkmalkombinationen a bis d (Teilmodelle) an der Gesamtzahl an Einstufungen innerhalb des Modells aufweisen.

<sup>4</sup> DOC: Dissolved Organic Carbon = gelöster organisch gebundener Kohlenstoff

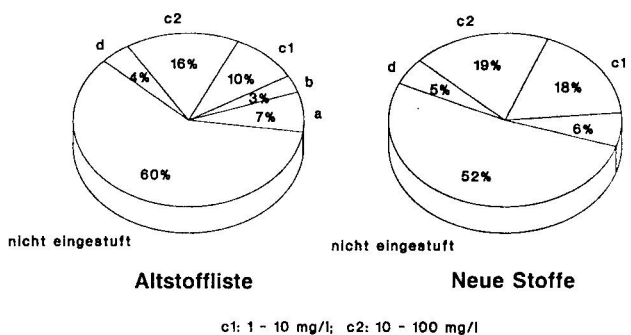


Abb. 2: Prozentuale Verteilung der Stoffe auf die einzelnen Merkmalkombinationen des Modelles II (EG-Vorschlag)

Das Kriterium II c ist hierbei noch einmal unterteilt in den Bereich 1–10 mg/l und in 10–100 mg/l für die aquatische Toxizität. Es ist zu sehen, daß der Hauptanteil an Einstufungen durch das Kriterium II c herbeigeführt wird, also Stoffe betreffend, die *nicht-leicht abbaubar* sind und deren aquatische Toxizität im Bereich von 1–100 mg/l liegt. 52 bzw. 60 % der Stoffe kommen nicht zur Einstufung, da ihre Eigenschaften nicht unter die Teilmodelle a–d fallen.

Abb. 3 zeigt, welche Auswirkungen die in den einzelnen Modellen gewählten Schwellenwerte bzw. die Merkmalkombinationen auf die Zahl an Einstufungen haben. Es werden Werte zwischen 10 und annähernd 50 % Einstufungen beobachtet, wobei der Anteil an Einstufungen bei neuen Stoffen generell etwas höher liegt als bei den betrachteten Altstoffen.

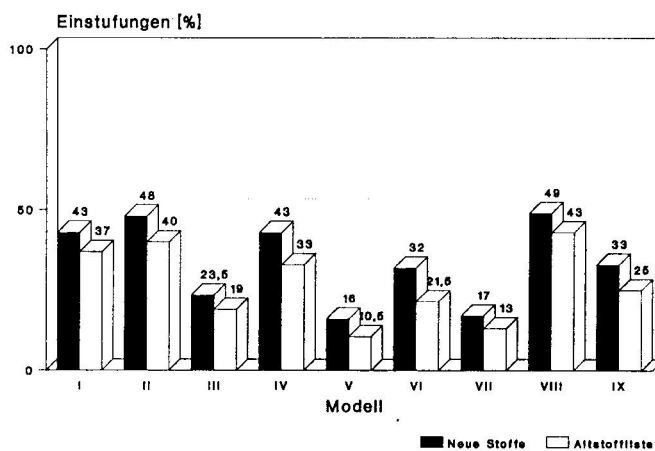


Abb. 3: Prozentsatz der Stoffe, die bei den einzelnen Modellen eingestuft werden

Die Modelle I, II, IV, VI, VIII und IX haben gemeinsam die Obergrenze von 100 mg/l für die aquatische Toxizität und eine Einstufung allein aufgrund dieser bei LC-50 bzw. EC-50 ≤ 1 mg/l (jeweils Teilmodelle a). Die Tatsache, daß bei den Modellen VI und IX im Bereich der aquatischen Toxizität von 10–100 mg/l neben einer *nicht-leichten Abbaubarkeit* zusätzlich ein *hohes Bioakkumulationspotential* gegeben sein muß, führt zu einer deutlichen Reduzierung der Zahl an Einstufungen gegenüber I.



Ein Vergleich der Modelle I und IV zeigt, daß die Berücksichtigung der **Algentoxizität** das Gesamtergebnis nur geringfügig beeinflusst. Allerdings sind nicht zu allen Stoffen entsprechende Daten verfügbar. Da in einigen Fällen die Werte für die Algen- im Vergleich zu den Fisch- oder Daphnientoxizitäten deutlich niedriger lagen, ist es sinnvoll, diesen Parameter mit zu berücksichtigen, da diese Effekte als Indikator für Einflüsse auf photosynthetisch aktive Primärproduzenten angesehen werden können.

Der Vergleich der Modelle I und II weist darauf hin, daß die Merkmalkombination

nicht-leicht abbaubar und  $\log Pow \geq 3$

ebenfalls nur geringfügig zu Buche schlägt.

Die Modelle V und VII besitzen eine ähnliche Struktur (Obergrenze 10 mg/l in Kombination mit nicht-leichter Abbaubarkeit und hohen  $\log Pow$ ) und führen daher nur zu einer sehr geringen prozentualen Einstufung. Die Erhöhung der Schwellenwerte um den Faktor 10 (Modell VI im Vergleich zu Modell V) führt zu einer Verdoppelung der Zahl der Einstufungen.

### 3. Eingestufte Stoffe

Neben diesen quantitativen Angaben ist es natürlich auch von Interesse festzustellen, welche Stoffe bei welchem Modell eingestuft bzw. nicht eingestuft werden. In → Tabelle 2 sind daher exemplarisch für die Modelle I, II, III, V und IX die Großchemikalien zusammengestellt, die jeweils

Tabelle 2: Eingestufte Altstoffe

CAS-Nr.	Name	Einstufung	WGK
Eingestuft nach Modell V			
76-13-1	Ethan, 1,1,2-trichlor-1,2,2-trifluor-	c	2
79-34-5	1,1,2,2-Tetrachlorethan	c	-
80-05-7	Phenol, 4,4'-(methylethylidene)bis-	c	(2)
99-54-7	Benzol, 1,2-dichlor-4-nitro-	c	(2)
121-87-9	Benzolamin, 2-Chlor-4-nitro-	b	-
126-73-8	Tri-n-butylphosphat	c	2
151-21-3	Schwefelsäure, Monododecylester, Natrium Salz	a	(1)
541-73-1	Benzol, 1,3-dichlor-	c	-
1817-47-6	Benzol, 1-(1-methylethyl)-4-nitro-	c	-
13464-80-7	Dihydrazinsulfat	b	-
zusätzlich eingestuft nach Modell III			
75-86-5	Propannitril, 2-Hydroxy-2-methyl-	a	3
85-01-8	Phenanthren	a	-
88-75-5	Phenol, 2-nitro-	c	(1)
95-48-7	Phenol, 2-methyl-	b	(2)
100-41-4	Ethylbenzol	b	1
108-90-7	Benzene, Chloro-	c	2
3452-97-9	1-Hexanol, 3,5,5,-trimethyl-	b	-
14861-17-7	Benzolamin, 4-(2,4-dichlorophenoxy)-	a	-
25339-17-7	Isodecanol	a	-
zusätzlich eingestuft nach Modell IX			
98-08-8	Benzol, (trifluormethyl)-	d	-
120-78-5	2,2'-Dithio-bis-benzothiazole	d	-
64742-88-7	Testbenz in D 60	d	(2)
64742-95-6	Naphta leicht	d	(2)
zusätzlich eingestuft nach Modell I			
56-23-5	Tetrachlormethan	c	3
60-00-4	EDTA	c	-
75-21-8	Ethylenoxid	c	2
78-59-1	Isophoron	c	(1)
88-74-4	Benzolamin, 2-nitro-	c	-
91-23-6	Benzol, 1-methoxy-2-nitro-	c	2
94-68-8	N-Ethyl-o-toluidin	c	(1)
95-54-5	1,2-Benzoldiamin	c	(1)
118-48-9	Isatosäureanhydrid	c	-
288-32-4	Imidazol	c	(2)
298-07-7	Di-2-ethylhexylphosphat	c	(1)
zusätzlich eingestuft nach Modell II			
78-42-2	Triocetylphosphat	d	(1)
102-09-0	Carbonic acid, diphenylester	d	(1)
131-09-9	2-Chloranthrachinon	d	-
90193-76-3	1,2-Benzoldicarbonsäure, di-C(16-18) Alkylester	d	(0)

zur Einstufung kommen. Soweit vorhanden, sind zum Vergleich die Einstufungen nach den Wassergefährdungsklassen entsprechend dem Wasserhaushaltsgesetz § 19 g, Absatz 5 (WGK-Einstufungen) mitangegeben, da sie z.Zt. in der Bundesrepublik Deutschland die umfassendste Klassifizierung auf diesem Gebiet darstellen und ein ähnliches Schutzziel anstreben.

#### 4 Diskussion

Die gängigen Bewertungsmodelle gehen davon aus, daß bei akuten aquatischen Toxizitäten von LC-50 bzw. EC-50 < 1 mg/l der Verdacht auf eine *hohe Gefährdung* der Umwelt gegeben ist. Sie liegt bei den hier betrachteten industriellen Großchemikalien ebenso wie bei den neuangemeldeten Chemikalien nur bei 6–7 % aller Stoffe vor (→ Abb. 1). Bei LC-50 bzw. EC-50 > 100 mg/l dürfte im allgemeinen nur eine *geringe Umweltgefährdung* vorliegen, obwohl bedacht werden muß, daß eine verlässliche Extrapolation von akut toxischen zu längerfristigen Wirkungen kaum möglich ist. KÜHN und Mitarbeiter beobachteten Faktoren von 2–3 000 zwischen akuten und längerfristigen Effekten [5].

Der Bereich zwischen 1 und 100 mg/l (LC-50 bzw. EC-50) erfordert eine differenziertere Betrachtung. Mit abnehmender Toxizität müssen weitere Gefahrenmerkmale wie *hohes Akkumulationspotential* und/oder *nicht-leichte Abbaubarkeit* hinzutreten, um eine Umweltgefährdung zu begründen.

Abb. 2 zeigt am Beispiel des auf EG-Expertenebene favorisierten Modells das Ergebnis einer derartigen Kombination von Gefährlichkeitsmerkmalen. Ungefähr

- 7 % der Stoffe weisen eine hohe akute aquatische Toxizität auf,
- 3 % (bzw. 0 % bei neuen Stoffen) eine Toxizität im Bereich 1 bis 10 mg/l und ein hohes Bioakkumulationspotential,
- 10 % (bzw. 18 % bei neuen Stoffen) die gleiche Toxizität in Verbindung mit nicht-leichter Abbaubarkeit,
- 16 % (bzw. 19 % bei neuen Stoffen) sind nicht-leicht abbaubar und haben LC-50 bzw. EC-50-Werte im Bereich 10–100 mg/l.

Während die ersten 3 Kombinationen relativ unumstritten sind, gehen die Meinungen, ob die letztere eine bedeutsame Gefahr für die Umwelt belegt, weit auseinander. Die EG-Expertengruppen hat deshalb die Möglichkeit vorgesehen, durch Vorlage längerfristiger Tests diese Stoffe zu „entlasten“ (ein NOEC-Wert<sup>5</sup> von > 1 mg/l würde eine Einstufung als „umweltgefährlich“ nicht erforderlich machen).

In Anbetracht der oben erwähnten Tatsache, daß zwischen akuten und längerfristigen Effekten Faktoren von 2–3 000 beobachtet werden [5], erscheint diese Vorgehensweise sinnvoll. So können einerseits ca. 60 % der Stoffe dieser Gruppe „entlastet“ werden, und andererseits bleiben die

unter Umweltgesichtspunkten problematischen Altstoffe eingestuft. Die Gesamtzahl an Einstufungen würde sich bei den industriellen Großchemikalien damit auf ca. 26 % belaufen, eine Zahl, die unter dem Gesichtspunkt des *vorbeugenden Umweltschutzes* sicherlich nicht zu groß ist. Es sollte hierbei auch berücksichtigt werden, daß durch eine Einstufung und Kennzeichnung als *mildeste Regulierungsmaßnahme* Gefahren für Mensch und Umwelt abgewendet und damit weitergehende Maßnahmen nach dem Chemikaliengesetz überflüssig werden.

Der *deutsche Vorschlag Nr. IX* (→ Tabelle 1) schränkt die Zahl an Einstufungen von Stoffen mit einer aquatischen Toxizität zwischen 10 und 100 mg/l durch die Forderung ein, daß gleichzeitig eine nicht leichte Abbaubarkeit und ein hohes Bioakkumulationspotential vorhanden sein müssen. Diese Kriterienkombination führt dazu, daß 2/3 der Stoffe in der Gruppe C 2 nicht mehr zur Einstufung kommen.

Im EG-Expertenvorschlag ist zusätzlich das *Kriterium d* (nicht-leicht abbaubar und  $\log Pow \geq 3$ ) enthalten. Zwar erfüllen 16 % der Großchemikalien und sogar knapp 37 % der neuangemeldeten Stoffe diese Kriterienkombination, aber die überwiegende Mehrzahl dieser Chemikalien werden bereits durch die Kriterien a–c eingestuft (→ Tabelle 1), d.h. sie sind auch toxisch gegenüber aquatischen Organismen, so daß sich die Gesamtzahl nur um 4 % bzw. 5 % (neue Stoffe) erhöht. Ursache für diesen Befund ist offensichtlich die Tatsache, daß sich Chemikalien mit hohem  $\log Pow$  im lipophilen Bereich der Membran sehr stark anreichern und als Folge davon die Funktion der Zelle zum Erliegen kommen kann. Dies wird auch als Erklärung dafür genommen, daß für derartige Chemikalien eine sehr hohe Korrelation zwischen dem  $\log Pow$  und der Toxizität gegenüber Fischen und Mikroorganismen beobachtet wurde [6]. Trotz der geringen Auswirkung auf die Gesamtzahl an Einstufungen hat dieses Teilkriterium jedoch seine Bedeutung vor allem, um Chemikalien zu erfassen,

1. die bei *geringer akuter Toxizität* eine verhältnismäßig *hohe Langzeittoxizität* aufweisen,
2. für die Fälle, in denen aufgrund geringer Löslichkeit keine akuten Effekte zu beobachten waren, aber aufgrund *nicht-leichter Abbaubarkeit* in Verbindung mit einem *hohen Bioakkumulationspotential längerfristige Wirkungen* nicht auszuschließen sind. Die Ergebnisse längerfristiger Tests sind in der Grundstufe des ChemG nicht verlangt.

In diesem Zusammenhang ist darauf hinzuweisen, daß Stoffe auch durch Angabe des *Biokonzentrationsfaktors* anstelle des Octanol/Wasser-Verteilungskoeffizienten entlastet werden können. Hierdurch wird der Tatsache Rechnung getragen, daß Chemikalien mit sehr hohem  $\log Pow$  häufig aufgrund von Molekülgröße oder geringer Wasserlöslichkeit nicht in nennenswertem Umfang in die Zelle gelangen.

Auch *Detergentien*, bei denen die Angabe eines Verteilungskoeffizienten problematisch ist, da sie sich aufgrund ihres bipolaren Charakters in der Grenzschicht beider Lösungsmittel vorfinden, könnten auf diese Weise besser beurteilt werden. Die Zahl der unter d) eingestuften Chemi-

<sup>5</sup> NOEC-Wert = No Observed Effect Concentration-Wert

kalien würde sich bei Verwendung des Biokonzentrationsfaktors deutlich vermindern.

Abb. 3 zeigt die Auswirkung der einzelnen vorgeschlagenen Modelle auf die Gesamtzahl an Einstufungen, wobei „Entlastungsmöglichkeiten“ nicht berücksichtigt wurden. Die stark unterschiedlichen Schwellenwerte bei den einzelnen Modellen (→ *Tabelle 1*) und die Tatsache, daß bei einigen Modellen drei Gefährlichkeitsmerkmale (*Toxizität, nicht-leichte Abbaubarkeit* und *hoher log Pow*) für eine Einstufung zusammenkommen müssen (*Modelle V, VI, VII* und *IX*), führt erwartungsgemäß auch zu stark unterschiedlichen Einstufungszahlen. Sie reichen von 10 – 43 % bei den industriellen Großchemikalien. Insbesondere die *Modelle V* und *VII* und im geringeren Maße auch die *Modelle III* und *VI* führen zu einer sehr geringen prozentualen Einstufung, die zahlreiche problematische Chemikalien wie z.B. Tetrachlormethan, Ethylenoxid, 1-Methoxy-2-nitrobenzol (→ *Tabelle 2*) unberücksichtigt läßt.

Auf der anderen Seite erscheinen gut 40 % Einstufungen bei den *Modellen II* und *VIII* etwas hoch. Allerdings müssen die oben diskutierten *Entlastungsmöglichkeiten* berücksichtigt werden, die, wie am Beispiel des *Modells II* diskutiert, die Zahl der Einstufungen auf unter 30 % reduzieren würde. Interessant ist in diesem Zusammenhang ein Vergleich mit den Einstufungen im Rahmen des *Gesundheitsschutzes* bei den gleichen Chemikalien. Es zeigte sich, daß allein aufgrund ihrer *akuten oralen Säugetiertoxizität* 33 % dieser Chemikalien eingestuft und gekennzeichnet werden müssen [1], eine Zahl, die sich sicherlich noch deutlich erhöhen wird, wenn man weitere gesundheitsrelevante Einstufungen mit hinzunimmt. Wenn man demnach den *Umweltschutz* neben dem seit längerem etablierten *Gesundheitsschutz* ernst nehmen will, so erscheinen die von der deutschen Expertengruppe bzw. den EG-Experten vorgeschlagenen Einstufungsmodelle (*I* bzw. *II* und unter Umständen *IX*) der vernünftigste Weg zu sein, das angestrebte Schutzziel zu erreichen.

Für den deutschen Vorschlag (*IX*) spricht, daß die Einstufungen ausschließlich mit Grundstufendaten möglich sind. Allerdings werden zahlreiche problematische Stoffe, z.B. die meisten aliphatischen Chlorkohlenwasserstoffe, nicht eingestuft. Liegen nur Grundstufendaten vor, so werden beim EG-Vorschlag relativ viele Chemikalien als „umweltgefährlich“ eingestuft. Zur „Entlastung“ muß die Industrie weitere Daten vorlegen. Dieser Mehraufwand erscheint jedoch zumindest bei wirtschaftlich bedeutenden Chemikalien als zumutbar und führt zu einer erheblich sichereren Basis für die Einstufung eines Stoffes als „umweltgefährlich“.

Neben der Gesamtzahl an Einstufungen ist es auch von Interesse herauszufinden, inwieweit dieses notgedrungen sehr einfache Schema mit anderen Klassifizierungen oder Bewertungen korreliert, die ein ähnliches Schutzziel anstreben. In → *Tabelle 2* sind daher die im Rahmen der *Modelle I, II, III, V* und *IX* eingestuften Chemikalien (ohne Berücksichtigung der Entlastungsmöglichkeit) zusammengestellt und mit den Einstufungen in *WGK-Klassen* – soweit vorhanden – verglichen. Es zeigt sich, daß die *Modelle V, III* und

*IX* doch einige *WGK 2-* und *3-Stoffe* nicht erfassen. Der *EG-Vorschlag (Modell II)* enthält einen Stoff, der von der Industrie mit „*WGK 0*“ eingestuft wurde. *WGK 1-Stoffe* finden sich in den *Modellen I, II, III* und *V*.

Auf der anderen Seite werden ein *WGK 3-Stoff* (Acrylamid, CAS-Nr. 79-06-1) sowie 6 Stoffe der *WGK 2* in den Modellen der → *Tabelle 2* nicht eingestuft.

Tetrachlorkohlenstoff (*WGK 3*) erfährt in den *Modellen V, III* und *IX* aufgrund des gerade zu niedrigen *log Pow*-Wertes (2,83) keine Einstufung.

Die *WGK 2-Stoffe* Ethylenoxid, 1-Methoxy-2-nitro-Benzol und Imidazol werden weder in den *Modellen V* und *III* noch in *IX* eingestuft, 1-Butenamin, N,N-dibutyl- ausschließlich in *Modell VIII* (→ *Tabelle 1*).

Diese Ergebnisse zeigen, daß die vorgeschlagenen Einstufungsverfahren nach dem Chemikaliengesetz nur bedingt mit den Wassergefährdungsklassen entsprechend dem Wasserhaushaltsgesetz übereinstimmen. Das liegt vor allem daran, daß in den letzteren deutlich mehr Parameter insbesondere aus dem Bereich des Gesundheitsschutzes (*akute und chronische Säugetiertoxizität, Mutagenität, Kanzerogenität, Teratogenität*) zur Stoffbewertung herangezogen werden.

Im Rahmen der Einstufung nach dem ChemG hinsichtlich des Gefährlichkeitsmerkmals „umweltgefährlich“ wurden diese Parameter nicht berücksichtigt. Sie sind zwar auch umweltrelevant, werden aber bereits durch Einstufungen im Gesundheitsbereich abgedeckt. Weiterhin ist zu berücksichtigen, daß ein Schema, welches die Einstufung eines Stoffes durch den Hersteller ermöglichen soll, möglichst einfach sein muß und demnach das Gefährlichkeitsmerkmal „umweltgefährlich“ nur sehr eingeschränkt widerspiegelt. Es kann keinesfalls die gründliche Bewertung der Gefährlichkeit des Stoffes durch Experten ersetzen.

## 5 Literatur

- [1] F + E-Forschungsvorhaben 10604029 vom Institut für Wassergefährdende Stoffe an der TU Berlin (IWS): „Überprüfung der Kriterien zur Einstufung und Bewertung von Stoffen hinsichtlich des Gefährlichkeitsmerkmals 'umweltgefährlich'“
- [2] F + E-Forschungsvorhaben 8210205308 vom Bayerischen Landesamt für Wasserwirtschaft: „Bewertung wassergefährdender Stoffe“ Zusammenfassender Bericht 1982 – 1986“
- [3] F + E-Forschungsvorhaben 10604022 vom Fraunhofer-Institut für Umweltchemie und Ökotoxikologie: „Weiterentwicklung eines Verfahrens zur Einstufung neuer Stoffe hinsichtlich ihrer Umweltgefährlichkeit“
- [4] Ministry for International Trade and Industry (MITI): The List of the Existing Chemical Substances Tested on Biodegradability by Microorganisms or Bioaccumulation in Fish Body. Tokyo 1984
- [5] F + E-Forschungsvorhaben 10603052 vom Institut für Wasser, Boden- und Lufthygiene des Bundesgesundheitsamtes: „Schadstoffwirkung von Umweltchemikalien im Daphnien-Reproduktionstest als Grundlage für die Bewertung der Umweltgefährlichkeit in aquatischen Systemen“
- [6] AHLERS, J.; BENZING, M.; GIES, A.; PAULI, W.; RÖSICK, E.: „Yeast as an unicellular model system in ecotoxicology and xenobiochemistry“. Chemosphere, 17, 1603 – 1615 (1988)