

## Vorkommen, Verhalten und Bewertung von Chemikalien im Boden

# Bewertung und Beurteilung von Chemikalien im Boden

## – Informationsbedarf und Datenlage

W. Klein

Fraunhofer-Institut für Umweltchemie und Ökotoxikologie, Graftschaft, Postfach 1260, W-5948 Schmallenberg

**Zusammenfassung.** Die Bewertung von Chemikalien im Boden bedarf, mehr als andere Kompartimente, einer **Schutzzielorientierten Datenakquisition und -interpretation**. Es sollten viel deutlicher als bisher die relevanten und konstanten Stoffeigenschaften einerseits und die aus Interaktion mit der Matrix resultierenden Deskriptoren andererseits differenziert werden. Bedingt durch die beträchtliche *räumliche Varianz* der für die Beurteilung wichtigen Boden- und weiteren Umwelteigenschaften, z.T. auch ihre *zeitliche Varianz*, ist eine deutliche **Trennung zwischen prospektiver Bewertung und der Beurteilung aktueller Belastungssituationen** mit unterschiedlichem Informationsbedarf unumgänglich.

### 1 Problemstellung

Zur Beurteilung der Belastung des Bodens mit Chemikalien existieren unterschiedliche Konzepte, sowohl im Hinblick auf die Fülle der zu beachtenden **Schutzziele**, als auch für die verschiedenen **Belastungstypen**. Je nach Beurteilungsebene innerhalb der Konzepte ist auch ein unterschiedlicher Grad der Information über Exposition und Wirkung von Chemikalien erforderlich.

### 2 Übergeordnete Bewertungskriterien

Die übergeordneten Kriterien zu **Exposition und Wirkung** sind generell anwendbar, obwohl heute kaum mit den erforderlichen Daten auszufüllen. Die Kriterien sind

1. für die *Expositionsrelevanz*:
  - Einträge/Austräge
  - Persistenz bzw. Abbaubarkeit
  - Mobilität
  - Anreicherung,
2. für die *retrospektive Beurteilung* (wie für Wasser und Luft):
  - analytisch nachweisbare Kontaminationen.

Für die Beurteilung der **Wirkung** sind ökotoxikologische Informationen angezeigt.

### 3 Belastungstypen

Der Datenbedarf für die Beurteilung der verschiedenen Belastungen des Bodens unterscheidet sich nicht grundsätz-

lich, jedoch in der Schwierigkeit der *Erhebung der Daten* bzw. in der *erforderlichen Präzision* und für die *Stufen der Beurteilung*.

1. Für **dispersen kontinuierlichen Eintrag**, der im wesentlichen über den *Luftpfad* erfolgt, besteht die besondere Schwierigkeit in der **Voraussage** bzw. **Erfassung** dieses Eintrags.
2. Der **absichtliche disperse Eintrag** erfolgt im wesentlichen durch *landwirtschaftliche Chemikalien*. Dieser ist, sowohl in Menge/Hektar, als auch über die *Zeit* und für den Anteil der behandelten Fläche, vergleichsweise einfach erhebbar.
3. Für die Beurteilung der Bodenbelastung durch **Altlasten** und **Unfälle** sind bei heutigem Kenntnisstand nur *unge-nügende Voraussagen* möglich.  
Für die systematische Behandlung von Chemikalien im Bodenschutz werden zielorientierte Konzepte und Strategien benötigt. Hierzu gehört die **Differenzierung** zwischen Stoffen mit *erhöhtem* und *vernachlässigbarem Gefährdungspotential* und damit eine differenzierte experimentelle und theoretische Behandlung dieser Stoffe (Prioritätensetzung).

### 4 Nutzungsbezogene Kriterien (Variablen)

Die besondere Schwierigkeit der Voraussage und Beurteilung von Bodenbelastungen ergibt sich aus 1. der *räumlichen* und *zeitlichen Varianz* der relevanten Bodeneigenschaften, 2. ihrer Beeinflussung durch verschiedene Nutzungen sowie 3. aus diesen Nutzungen selbst. Die folgende Auflistung dieser Größen verdeutlicht die Komplexität (ergänzt, nach HABERLAND 1990):

- Bodenfunktion
- aktuelle Stoffkonzentration im Boden
- frühere, aktuelle und geplante Bodennutzung
- aktueller und (abgeschätzt) zukünftiger Stoffeintrag
- Organischer Kohlenstoff (Menge, Zusammensetzung)
- Tonmineralien (Menge, Zusammensetzung)
- Kationenaustauschkapazität
- Redoxpotential
- pH, Leitfähigkeit der Bodenlösung
- Bodenluft- und Wasserhaushalt
- Bodentemperatur
- Dichte

- Partikelgrößenverteilung
- Porosität (Porenvolumen)
- Biologische Aktivität, Biomasse
- Bewuchs
- Niederschläge, Lufttemperatur, Strahlung
- Flurabstand des Grundwassers
- geschätzte bodentyp-, bodenfunktions- und bodennutzungsbezogene Belastbarkeit.

Es ist offensichtlich, daß die generelle **standortspezifische Erhebung** all dieser Variablen einen unvermeidbaren Aufwand darstellt. Andererseits beeinflussen sie alle den Verbleib einer eingetragenen Chemikalie bzw. die Nutzungsmöglichkeit eines jeden Standortes. Abschätzungen des *quantitativen Einflusses* sind z.T. möglich.

## 5 Chemikalieneigenschaften

Zur Beurteilung von Persistenz, Mobilität und Akkumulation von Chemikalien im Boden werden herangezogen 1. physikalisch-chemische Konstanten, 2. Variablen, die z.T. mit *korrespondierenden Bodeneigenschaften* in Wechselwirkung stehen. 3. Da diese in der Aktion teilweise nicht vorausschaubar quantifizierbar sind, werden auch abgeleitete Variablen, also Größen aus Interaktion: Chemikalie + Umweltfaktor benutzt.

Die relevanten physikalisch-chemischen Konstanten sind:

- Molmasse, Molvolumen
- Dampfdruck
- Henrykonstante
- Wasserlöslichkeit
- Pow
- Dissoziationskonstante
- Komplexierungskonstante.

Zur Beschreibung von Persistenz, Mobilität und Akkumulation werden die folgenden Größen benutzt, die jedoch zwangsläufig *standortvariabel* sind:

- Hydrolyse
- Photolyse
- Bioabbau
- Adsorption/Desorption ( $K_D$ ,  $K_{OC}$ )
- Volatilisierung
- Transfer-Faktoren
- Bildung von nicht extrahierbaren Fraktionen der Kontamination
- Bioakkumulationsfaktoren.

Die Möglichkeiten und Grenzen der Nutzung *nicht-standortspezifischer* bzw. *geschätzter Daten* zum Verhalten von Chemikalien im Boden werden hier für zwei Schlüsselgrößen dargestellt:

- Sorption (zur Beurteilung der Mobilität)
- Abbau (zur Beurteilung der Persistenz).

### 5.1 Sorption von Chemikalien im Boden

Zur Beschreibung der Sorption von Chemikalien in Böden werden in Schüttelversuchen  $K_D$ -Werte<sup>1</sup> bestimmt. Da bei nichtionigen Stoffen wesentlich *Sorption* an dem organischen Kohlenstoffgehalt des Bodens vorherrscht, wird auf dessen Gehalt normiert und  $K_{OC}$ -Werte<sup>2</sup> benutzt. Zur Abschätzung von  $K_{OC}$ -Werten existieren Korrelationen mit

dem Octanol/Wasser-Verteilungskoeffizienten ( $P_{OW}$ ) (KHARICKHOFF 1981). Von ca. 800 organischen umweltrelevanten Chemikalien, für welche die Verfügbarkeit experimenteller physikalisch-chemischer Daten erhoben wurde, existieren für weniger als 10 %  $K_{OC}$ -Werte und für mehr als 60 %  $P_{OW}$ -Werte (ALTSCHUH 1990).

Untersuchungen

- zur Entwicklung von Struktur-Verhaltens-Beziehungen für die Voraussage von  $K_{OC}$ -Werten,
  - im Rahmen der Erstellung der OECD-Prüfrichtlinie für Adsorption/Desorption im Boden
- und die Erfahrung bei der Prüfung von Pflanzenschutzmitteln zu dieser Fragestellung haben gezeigt, daß  $K_{OC}$  *keinesfalls eine Konstante für eine Chemikalie ist*.

Die Messung des  $K_{OC}$  mit fünf sorgfältig für einen Ringtest ausgesuchten Böden (Euroböden), die sich hinsichtlich ihres Sorptionsverhaltens stark unterscheiden sollten, ergab z.B. für Atrazin: etwa gleicher und niedriger  $K_{OC}$  in drei der fünf Böden, hoher und unterschiedlicher  $K_{OC}$  in zwei Böden (KÖRDEL, VON OEPEN, 1990).

Die z.B. zur Abschätzung des Grundwassergefährdungspotentials notwendige Präzision von Sorptionsdaten (Variation um Faktor 2 u.U. ausreichend) ist mit Schätzmethoden nicht erreichbar und aus Messungen mit einem Boden für einen anderen Standortboden nicht voraussagbar.  $K_{OC}$ -Werte sollten deshalb mit Vorsicht interpretiert und benutzt werden.

In jüngeren Veröffentlichungen wurden standardisierte HPLC-Säulenmaterialien für eine einfache Bestimmung des Sorptionsverhaltens im Boden vorgestellt (HODSON, WILLIAMS 1988; SZABO et al., 1990). Sie wurden teilweise in einer UBA/Chemische Industrie-Aktivität überprüft und scheinen eine gute Alternative zur orientierenden Ermittlung der Sorptionseigenschaften von Chemikalien zu sein. Ein wesentlicher Vorteil ist neben der Einfachheit und damit der Möglichkeit, die Datenbasis zu verbessern, die Tatsache, daß derartige HPLC-Kapazitätsfaktoren eine umweltrelevant nicht existierende Präzision von allgemeinen  $K_{OC}$ -Werten nicht unterstellen.

### 5.2 Abbau von Chemikalien im Boden

Wichtige Abbauprozesse sind *Hydrolyse* und *Bioabbau* im Boden sowie *photochemischer Abbau* an der Bodenoberfläche. Zum Abbau von Chemikalien in Böden existieren im wesentlichen Daten für wenige prioritäre Stoffe neben umfangreichen Daten, die im Rahmen der Pflanzenschutzmittelprüfung erhoben werden. Es existieren standardisierte Laborverfahren, in welchen die **Elimination der Ausgangssubstanz** und die **Bildung von Abbauprodukten** bestimmt werden. Eine eventuelle *Volatilisierung* wurde bisher nicht untersucht. Noch stärker als die Sorption variiert der *Bio-*

<sup>1</sup>  $K_D$ : Konstante der Verteilung einer Substanz  $K_D$  zwischen gelöster und sorbierter Form:

$$K_D = \frac{\mu\text{g/g Boden}}{\mu\text{g/ml Lösung (H}_2\text{O)}}$$

<sup>2</sup>  $K_{OC}$ :  $K_D$  normiert auf den organischen Kohlenstoffgehalt des Bodens:

$$K_{OC} = \frac{K_D \cdot 100}{\% \text{ OC}}$$

*abbau* in Böden, auch bei Durchführung der Prüfungen nach standardisierter Methodik. Diese Variation beträgt häufig mehr als eine Größenordnung. In Felduntersuchungen, in welchen alle Eliminationsprozesse, d.h. einschließlich *Volatilisierung* und *Photoabbau*, mitgemessen werden, kann die Variation bis zu einer Größenordnung betragen. Die *Geschwindigkeit* des Abbaus ist ähnlich entscheidend für die Beurteilung wie das Sorptionsverhalten.

## 6 Einfluß anderer chemischer Belastungen für die Beurteilung des Verhaltens von Chemikalien im Boden

Für die **Wechselwirkungen** zwischen chemischen Belastungen im Boden liegen nur wenige Informationen vor. Es ist bekannt, daß *Cosolventien*<sup>3</sup> (wichtig bei Altlasten) oder oberflächenaktive Stoffe (z.B. in Pflanzenschutzmittelformulierungen) einen Einfluß auf die Verlagerung im Boden haben (SCHEUNERT 1987; WOOD et al., 1990).

## 7 Beurteilungskonzepte für Chemikalien im Boden

### 1. Umweltgefährlichkeit

Die Beurteilung der Gefährlichkeit von Chemikalien für bzw. über das Kompartiment Boden ist im Zusammenhang mit der **Chemikaliengesetzgebung** zu sehen. Wenn *anwendungsbezogene* bzw. *produktionsbezogene* Szenarien für diese *prospektive Beurteilung* einen Eintrag in den Boden wahrscheinlich machen, sind Informationen zu den oben genannten Kriterien erforderlich (OECD 1989). In der Grundstufe werden diese nicht für das Kompartiment Boden erhoben. Da diese Gefährlichkeitsbeurteilung *nicht standortspezifisch* zu erfolgen braucht, sind hier Daten ausreichend, welche erlauben, ein Gefährdungspotential zu *klassifizieren*. Es wird deshalb empfohlen, die vorliegenden **Daten zum aquatischen Bioabbau** für die Beurteilung der Abbaubarkeit heranzuziehen sowie das Sorptionsverhalten aus dem  $P_{OW}$  abzuschätzen bzw. mit den erwähnten HPLC-Kapazitätsfaktoren zu charakterisieren. Ergeben sich daraus signifikante Expositionspotentiale, ist eine Beurteilung in Analogie zum Aquatischen Bereich angebracht. Da Wirkungsdaten für Organismen im Boden kaum vorliegen, müssen diese auf Basis der sonstigen Kenntnisse über ökotoxikologische Eigenschaften erarbeitet werden.

### 2. Flächendeckende, ortsspezifische Beurteilung von Kontaminationen

Eine Bund/Länder-Sonderarbeitsgruppe „Informationsgrundlagen des Bodenschutzes“ bearbeitet ein Konzept zur flächendeckenden und ortsspezifischen Beurteilung unter Berücksichtigung von Transfer-Pfaden. In diesem Konzept werden bisher nur solche Stoffe betrachtet, welche als Bodenkontaminanten **bekannt** sind. Die Höhe der Kontamination wird in einem Stufenplan beurteilt und führt zu unterschiedlichen normativen Maßnahmen. Zur Zeit erfolgt eine Datensammlung für Stoffe der Bodenschutzkon-

zeption zur Realisierung dieses Konzeptes (HABERLAND 1990).

### 3. Exposition des Menschen durch Transfer von kontaminierten Standorten

Eine Arbeitsgruppe der ECETOC (ECETOC 1990) hat kürzlich einen Stufenplan zur Gefährlichkeitsbeurteilung von Chemikalien in kontaminierten Böden entwickelt, mit einer umfassenden Modellierung der verschiedenen Pfade dieser Stoffe zum Menschen. Auch in dieser Konzeption werden eine Reihe von Informationen zu den genannten Kriterien und Umweltvariablen benötigt, welche für ein erstes Screening durchaus abschätzbar sind, die für eine ortsspezifische Beurteilung jedoch zum größeren Teil spezifisch erhoben werden müssen.

## 8 Schlußfolgerungen

Eine systematische Bearbeitung zur Beurteilung von Chemikalien in Böden ist bisher nicht erfolgt. Eine systematische Prioritätensetzung zur Erkennung der Stoffe, welche ein Boden-Gefährdungspotential haben, ist jedoch zumindest für den **Expositionsteil** möglich. Hierfür lassen sich Mobilität und Persistenz aus vorliegenden Fakten ausreichend genau abschätzen.

Aufgrund der verfügbaren umfangreichen Erhebungsdaten zum Vorkommen von Schwermetallen und einigen organischen Chemikalien in Böden, ihrer Verlagerung im Grundwasser und ihres Transfers zum Menschen ist zu schließen, daß für Standorte, deren Kontamination bei einem Screening nicht als unbedenklich beurteilt werden kann, *umfangreiche standortspezifische Erhebungen* unumgänglich sind.

## 9 Literatur

- ALTSCHUH, J.: Limitations on the Calculation of Physicochemical Properties. Proceedings of the ESF Workshop on Chemical Exposure Prediction (European Science Foundation), 1990
- Bodenschutzkonzeption der Bundesregierung, BMI, Verlag Kohlhammer, 1985
- ECETOC: Hazard Assessment of Chemical Contaminants in Soil, Technical Report No. 40, 1980
- HABERLAND, W.: VDI-Dechema Tagung, 15. – 17. Mai 1990, Lindau
- HODSON, J.; N. A. WILLIAMS: The Estimation of the Adsorption Coefficient (Koc) of Soils by High Performance Liquid Chromatography, *Chemosphere* 17, 67 (1988)
- KHARICKOFF, S. W.: Semi-empirical Estimation of Sorption of Hydrophobic Pollutants on Natural Sediments and Soils. *Chemosphere* 10, 883 (1981)
- KÖRDEL, W.; B. VON OEPEN: unveröffentlichte Ergebnisse 1990
- OECD: Environment Monographs, No. 27, Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods for Chemicals, 1989
- SCHEUNERT, L.: Formation and Alteration of Mixtures by Biotic and Abiotic Processes in Soil, in: Vouk, V. B. et al., Scope 30, Methods of Assessing the Effects of Mixtures of Chemicals, 1987
- SZABO, G.; S. L. PROSSER; R. A. BULMAN: Determination of the Adsorption Coefficient (Koc) of some Aromatics for Soil by RP-HPLC on two Immobilized Humic Acid Phases. *Chemosphere*, 21, 777, (1990)
- WALKER, A. et al.: EWRS Herbicide-Soil Working Group: Collaborative Experiment on Simazine Persistence in Soil, *Weed Research* 23, 373 – 383 (1983)
- WOOD, A. L.; D. C. BOUCHARD; M. L. BRUSSEAU; P.S.C. RAO: Cosolvent Effects on Sorption and Mobility of Organic Contaminants in Soils. *Chemosphere* 21, 575 (1979)

<sup>3</sup> Cosolventien: Neben der untersuchten chemischen Bodenbelastung vorliegende Substanzen, die das Löslichkeitsverhalten verändern können.