

6. Szerves mikroszennyezők kockázatbecslése

A kockázatbecslés, kockázatkezelés a nukleáris iparban, a katonai és polgári légiközlekedésben, valamint az űrtechnológia területén jelent meg először, hiszen ezek olyan területek, ahol viszonylag magas potenciális baleseti veszély áll fenn, a következmények pedig igen súlyosak lehetnek. Manapság már igen elterjedt ez a módszer a veszélyek, kockázatok felmérésére, ragsorolására és kezelésére. Mindezek, a kockázatmenedzsment részterületei napjainkban a minőségirányítás szerves részeit képezik.

6.1. A kockázatbecslés alapjai

A kockázatbecslés területe olyan kiterjedt és szerteágazó, hogy már a meghatározása sem lehet egyértelmű. Mást értünk egy munkahelyi kockázatbecslésen, mást egy termék vagy egy ellátási lánc élelmiszeripari kockázatbecslésén és természetesen teljesen eltérő egy vegyület vagy keverék ökológiai kockázatbecslése. Napjainkban a kockázatbecslés számtalan módszere ismert és használatos, a különböző eljárások, stratégiák és megközelítések jellemzően az egyes részterületeken terjedtek el.

6.1.1. A kockázatbecslés célja

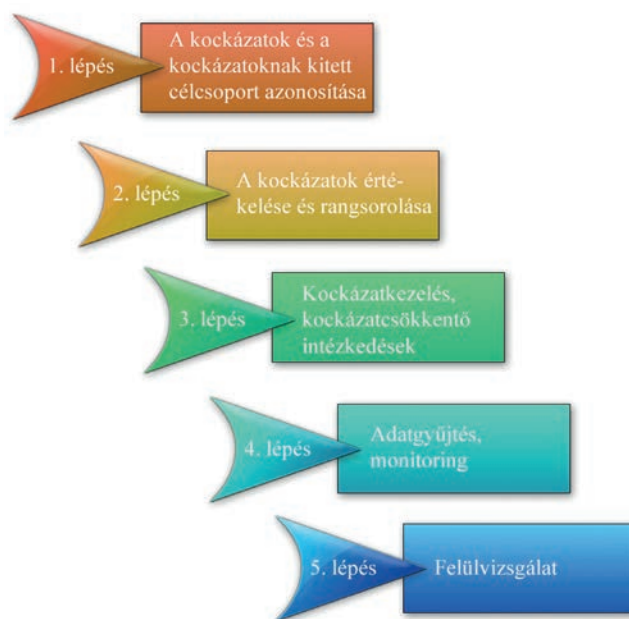
A kockázatmenedzsment részeként a kockázatbecslés elsődleges célja a jellemzően kedvezőtlen kimenetelű események, balesetek vagy káresemények kockázatának minél pontosabb meghatározása, hogy további intézkedésekkel azok elfogadható mértékűre csökkenthetők vagy megszüntethetők legyenek. A kockázatmenedzsment akkor működik jól, ha a felmért és priorizált kockázatok csökkentésére megfelelő lépések történnek, és e lépések hatása folyamatos felülvizsgálaton megy keresztül. Mindebből következik, hogy a kockázatbecslés nem statikus fogalom. Egyrészt egy folyamatos tevékenységhez, a kockázatkezeléshez kapcsolódik, másrészt a monitoring és felülvizsgálat szakaszain keresztül egy ciklikus folyamat része.

6.1.2. A kockázatkezelés folyamata

A kockázatbecslés és kockázatkezelés folyamatának általános lépéseit a 6.1. ábra foglalja össze.

Az első lépés mindenképpen a veszélyek, kockázatok alapos felmérése, de ebben a lépésben szükséges meghatározni a veszélynek, kockázatoknak kitett célcsoportot is. Fontos megállapítani a kockázatbecslés határait, hiszen ha túlságosan nagy területet ölel fel, akkor az eredmény átláthatatlan és használhatatlan lesz. A kockázatértékelés második lépése a felmért kockázatok priorizálása, fontossági sorrendbe állítása. Ez általában két szempont alapján történik, a kockázat mértékét és az előfordulás valószínűségét veszi figyelembe. A pontozás- és rangsorolás-alapú kockázatbecslés esetében ennél a lépésnél több szempont is szerepet játszhat. Az értékelt kockázatok

prioritás szerinti kezelése a harmadik lépés, ahol a cél egyértelműen a kockázatok mértékének csökkentése, esetleg megszüntetése. Mindezeket a monitoring, majd a felülvizsgálat szakasza követi, amely során megállapítást nyer, hogy a kockázatsökkentésre tett intézkedések sikeresek voltak-e, azaz a kockázatok mértékében kimutatható volt-e az elvárt mértékű csökkenés. A folyamat ezt követően előlről kezdődik, a folyamatba beépítve az esetleges változásokat, új kockázatokat, valamint megállapítva más, korábban felmért kockázatok megszűnését.



6.1. ábra

A kockázatkezelés folyamata, lépései (Goda Zoltán)

6.1.3. A kockázatok típusai

A kockázatbecsléshez mindenképpen ismerni kell a kockázatok típusait és azok egymáshoz való viszonyát [1] (6.2. ábra).

Kockázat (Risk): a veszély megvalósulásának, azaz a káros hatás bekövetkezésének a valószínűsége. Nem kockázat az, ami biztosan bekövetkezik, vagy biztosan nem következik be.

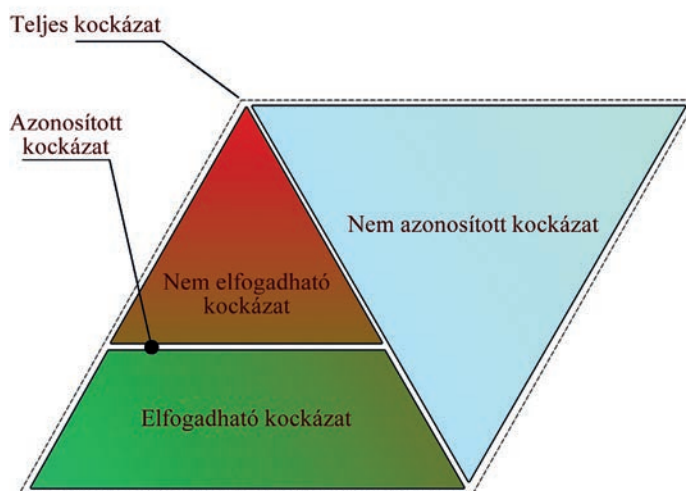
Nem azonosított kockázat (Unidentified Risk): Az a kockázat, amelyet nem határoztak meg, ismeretlen, nem mérhető, de valós probléma.

Azonosított kockázat (Identified Risk): Az a kockázat, amely különböző elemzési technikákkal meghatározható, a nem elfogadható és az elfogadható kockázatok összességét jelenti.

Elfogadható kockázat (Acceptable Risk): Az azonosított kockázat azon része, amely további csökkentés nélkül is megengedhető. A súlyos következmények kockázata nagyon kicsi, vagy a kevésbé súlyosaknak kissé nagyobb, de elegendően alacsony kockázata van.

Nem elfogadható kockázat (Unacceptable Risk): Az azonosított kockázat azon része, amit vagy megszüntetni, vagy csökkenteni szükséges.

Teljes kockázat (Total Risk): Az azonosított és a nem azonosított kockázatok összessége.

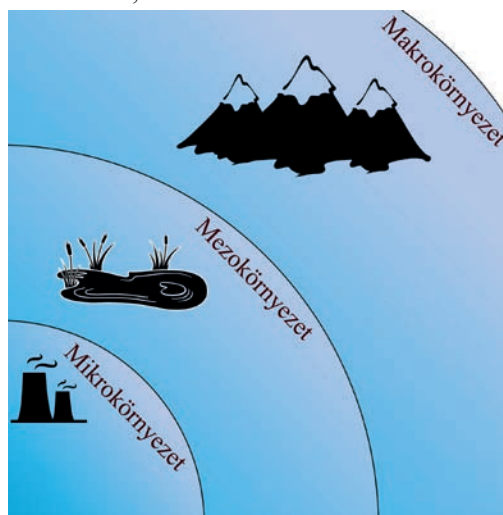


6.2. ábra

A kockázatok típusai és egymáshoz viszonyított helyzete (Goda Zoltán)

6.1.4. A kockázatbecslés térbeli szintjei és időbeli irányai

A kockázatértékelés térbeli határait vizsgálva meghatározhatunk mikro-, mezo-, valamint makrokörnyezetet (6.3. ábra). A mikrokörnyezet főleg egy adott tevékenység vagy szennyezőanyag-emisszió közvetlen környezetét jelenti, ahol a kockázatbecslés jellemzően a szennyezőforrás vagy a tevékenység közvetlen hatásának vizsgálatára irányul, esetleg egy vagy kevés stresszort (a rendszer egyensúlyát, biztonságát veszélyeztető belső vagy külső tényezőt) vizsgál. A mezo- és makrokörnyezet lényegesen nagyobb területet (például egy települést, egy vízi ökoszisztémát) vizsgál, ahol mind a kockázat forrása, mind a stresszorok száma több lehet.



6.3. ábra

A kockázatok térbeli szintjei (Goda Zoltán)

6.1.5. A kockázatbecslés lehetséges időbeli irányait tekintve két módszer ismert

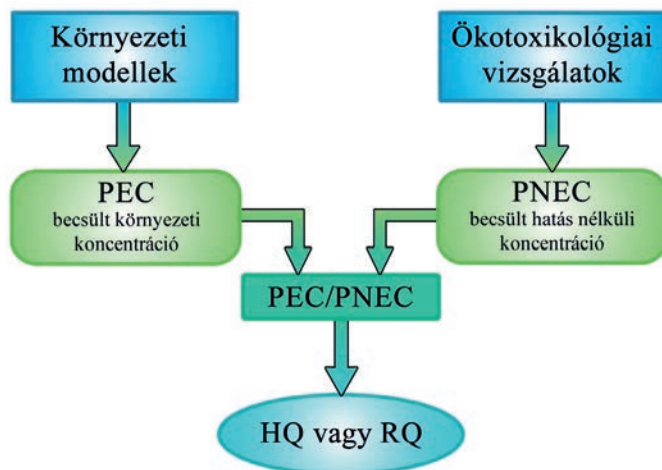
A prediktív vagy megelőző kockázatbecslés egy stresszor (egy feltételezhetően toxikus folyamat) egy adott környezeti elemre vagy rendszerre gyakorolt jövőbeni hatását írja le. A prediktív kockázatbecslés egy potenciálisan toxikus anyag vagy keverék egy vagy több környezeti elemre gyakorolt hatását jelzi előre. A káros hatású anyag lehet egykomponensű, de lehet olyan keverék, amely tartalmazhat több toxikus elemet is. Prediktív kockázatbecslést ma már rutinszerűen végeznek bizonyos vegyszerek, növényvédő szerek forgalomba hozatalát megelőzően. Napjainkban nemcsak különböző vegyületek, hanem egyéb potenciálisan kockázatos stresszorok, például genetikailag módosított organizmusok forgalomba hozatalát is prediktív kockázatbecslés előzi meg.

A *retrospektív kockázatbecslés* a már szennyezett környezet vizsgálatából és méréséből indul ki. A retrospektív kockázatbecslés jelentősége manapság egyre fontosabb, ennek oka az, hogy a prediktív kockázatbecslés nem alkalmas egy már régebben fennálló károsodás negatív hatásának felmérésére. A retrospektív kockázatbecslés általában a forrás jellemzőit, a hatást vagy expozíciót veszi alapul [1].

6.1.6. Kockázati tényező meghatározása

Szerves mikroszennyezők esetében (más szennyezésekhez hasonlóan) a veszély mértékét a kockázati tényezővel (*Risk Quotient* – *RQ*, más megnevezésekben *Hazard Quotient* – *HQ*) jellemezhetjük. Ezzel egy olyan dimenzió nélküli számot kapunk, amely magában foglalja egy szennyező anyag mért környezeti koncentrációját és azt a becsült, számított értéket, amely negatív hatást nem fejt ki. Környezetre, illetve egy ökoszisztémára ez az alábbiak szerint alakul:

$$RQ = \frac{PEC}{PNEC}$$



6.4. ábra

A *PEC/PNEC* és a *HQ/RQ* összefüggései ([2] alapján)

A kockázati tényező tehát a becsült környezeti szennyezőanyag-koncentráció (*Predicted Environmental Concentration* – *PEC*) és az ökoszisztémára még nem ható becsült koncentráció (*Predicted*

No Effect Concentration – **PNEC**) hányadosa. Egyes esetekben a PEC helyettesíthető a **MEC** (*Measured Environmental Concentration*) azaz a mért környezeti koncentráció értékével, amennyiben ezek az adatok rendelkezésre állnak. Minél nagyobb az **RQ** értéke, annál nagyobb a kockázat, amit a környezetbe került szerves mikroszennyező jelent. Ha az RQ értéke kisebb, mint 1, akkor nincs szükség beavatkozásra, hiszen a koncentráció kisebb a káros hatást kifejtő koncentrációnál, ám ha ez az érték nagyobb, mint 1, akkor további lépések, kockázatsökkentő intézkedések szükségesek. Az RQ meghatározásának folyamata a 6.4. ábrán látható [2].

6.1.7. Kockázatbecslő mátrix alkalmazása

A kockázatbecslő mátrix használata elsősorban munkahelyi kockázatbecslés készítésénél elterjedt módszer. Lényege, hogy egy esemény bekövetkezésének valószínűségét és az esemény súlyát össze-síti, számszerűsíti, így az egyes események kockázatuk alapján jól prioritizálhatók [3]. Környezeti, ökológiai kockázatbecslés esetén kevésbé terjedt el, ezen a területen főleg egy konkrét stresszor vagy egyes szennyezőforrások különböző környezeti elemekre, területekre gyakorolt hatását számszerűsíti (6.5. ábra). A kockázat mértékének számszerűsítésére egy előre meghatározott skálán szereplő értéket rendelünk hozzá. Minél magasabb a kockázat mértéke, annál nagyobb értéket kap.

	Kockázatnak kitett csoport					
		Felszíni vízbázis	Talaj-vízbázis	Réteg-vízbázis	Karszt-vízbázis	Parti szűrésű vízbázis
Kockázat forrása	Ipari eredetű szerves hulladék	4	6	2	3	3
	Kommunális szennyvizek	5	3	1	2	4
	Mezőgazdasági szerves szennyezők	3	6	2	3	2
	Közel-keleti eredetű szennyezők	4	5	1	2	2

6.5. ábra

A kockázatbecslő mátrix lehetséges alkalmazása környezeti kockázatbecslésnél (Goda Zoltán)

A kockázatbecslő mátrix hátránya, hogy meglehetősen pontatlan, kevés információt hordoz, és mellette mindenképpen szükséges kiegészítő, nagyobb pontosságot adó módszerek alkalmazása. A 6.5 ábrán néhány szennyezőforrás vízbázisokra gyakorolt, becsült hatását tüntettük fel. Az ábrán szembejövő, hogy legnagyobb kitettségük a talajvízbázisoknak van, míg a legvédelettebbnek a réteg-vízbázisok tekinthetők.

6.2. A kockázatbecslés lehetséges módszerei szerves mikroszennyezők esetében

Kockázatbecslés készítésekor az első és legfontosabb feladat az információszerzés. A kockázatbecslés akkor lesz teljes, illetve a kockázatok csökkentésére irányuló lépések akkor lesznek hatékonyak, ha megelőzőleg az információszerzés alapos és részletes volt. Mindenekelőtt a kockázatbecslés célját és hatókörét szükséges meghatározni. Szerves mikroszennyezők hatását, kockázatát vizsgálhatjuk többek között

- a környezetre,
- a vízi ökoszisztémákra,
- a talajra,
- a légkörre,
- az emberi egészségre,
- az ivóvízbiztonságra,
- egy konkrét, jól körülhatárolható területre.

A mikroszennyezők hatásának vizsgálata általában a környezetre túl általános, hiszen az összes szerves mikroszennyező hatását kellene megvizsgálnunk a teljes globális környezetre, ami átláthatatlanul nagy információmennyiséget jelentene. Az ivóvízbiztonság és az emberi egészség területe pedig nem választható el egymástól. Bármely módszert is választjuk, a jó kockázatbecslés alapja az átgondolt, alapos és minden részletre kiterjedő információgyűjtés.

6.2.1. *RQ/HQ* – kockázati tényező számítása a gyakorlatban

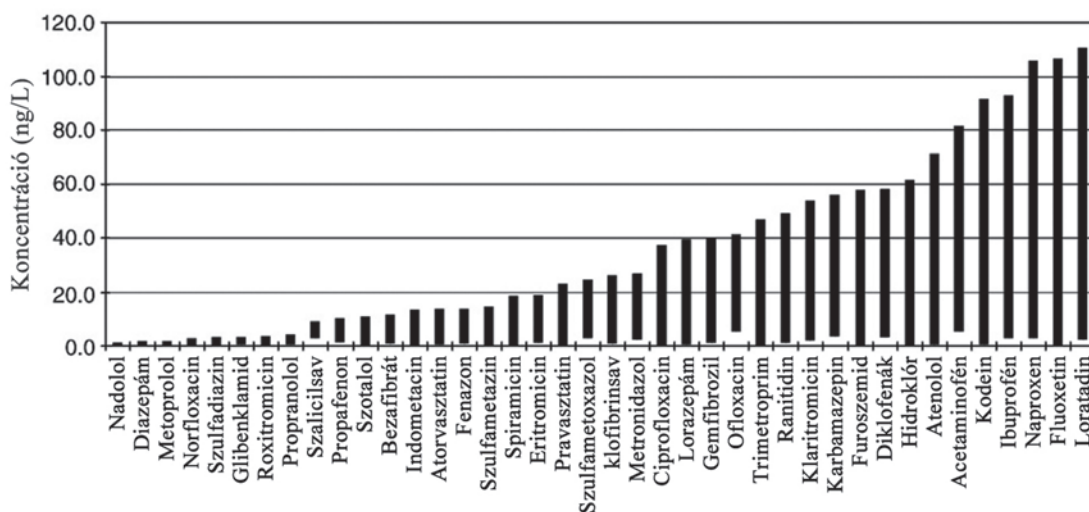
A különböző gyógyszermaradványok egyik legismertebb emissziója a kommunális szennyvizek kibocsátása. A gyógyszerkészítmények elfogyasztásukat követően elsősorban vizelettel és széklettel ürülnek változatlanul vagy metabolitok formájában, illetve glükuronsav és kénsav konjugátumai formájában. E szennyező anyagok környezetben történő megjelenése általában a hiányos vagy nem megfelelő hatásfokú szennyvíztisztítás következménye. A kórházak és egyéb egészségügyi intézmények szennyvizében e vegyületek koncentrációja különösen magas, és ezeket a szennyvizeket jellemzően előkezelés nélkül vezetik be a kommunális szennyvízhálózatba [4].

A jelenlegi egyesült államokbeli és európai szabályozás előírja, hogy az új gyógyszerekre a szokásos akut toxicitási tesztekkel kell elvégezni (algákra, *Daphnia magna*-ra és halakra), ha a hatóanyag becsült vagy mért környezeti koncentrációja (PEC vagy MEC) meghaladja az 1 µg/L értéket az Egyesült Államokban, vagy a 10 ng/L értéket az Európai Gyógyszerügynökség (EMA) által meghatározott biztonsági küszöbértéknek megfelelően. Azoknál a vegyületeknél, amelyek esetében a PEC meghaladja ezeket az értékeket, kockázatbecslést szükséges lefolytatni a kockázati tényező számításával. Ez a PEC vagy MEC és a PNEC hányadosából számítható. Ha a kockázati tényező értéke kisebb, mint 1, további intézkedésre nincs szükség, amennyiben ezt az értéket meghaladja, további értékelés, részletesebb vizsgálatok szükségesek [5].

Egy kutatásban Spanyolország északkeleti részén vizsgáltak 7 szennyvíztisztító telep nyers és tisztított szennyvizében, valamint a befogadó Ebro folyó vizében különböző, összesen 78-féle gyógyszermaradvány jelenlétét [6]. A folyó vizében kimutatható gyógyszermaradványok széles spektruma egyértelműen jelezte, hogy e szerves mikroszennyezők fő forrásai a szennyvíztisztító telepek. A kutatók azt tapasztalták, hogy a kommunális szennyvizek tisztítására kialakított technológiákkal – nem kielégítő hatásfokkal ugyan – de a mikroszennyezők kisebb hányadát sikerült eltávolítani az elfolyó szennyvízből. Meglehetősen nehéz annak becslése, hogy az egyes szennyező

anyagok a különböző célszervezetekben milyen hatást váltanak ki. A kockázati tényező (HQ) számítása hasznos lehet, amely felhasználható a stresszor, ebben az esetben a szerves mikro-szennyezők potenciális ökológiai kockázatának jellemzésére. A legtöbb kockázatértékelési megközelítésben ezt a hányadost a becsült környezeti koncentráció (PEC) és a becsült hatás nélküli koncentráció (PNEC) arányában számítják ki. A retrospektív kockázatbecslés során a PEC helyett a mért környezeti koncentráció (MEC) értéket használják a gyógyszermaradványok jelentette kockázatok értékeléséhez.

A 6.6 ábrán az Ebro folyóban észlelt legjellemzőbb gyógyszerek koncentrációinak tartománya látható. A felszíni vizekben gyakrabban észlelt gyógyszerek azonosak azokkal, amelyek a szennyvizekben is jelen vannak.



6.6. ábra

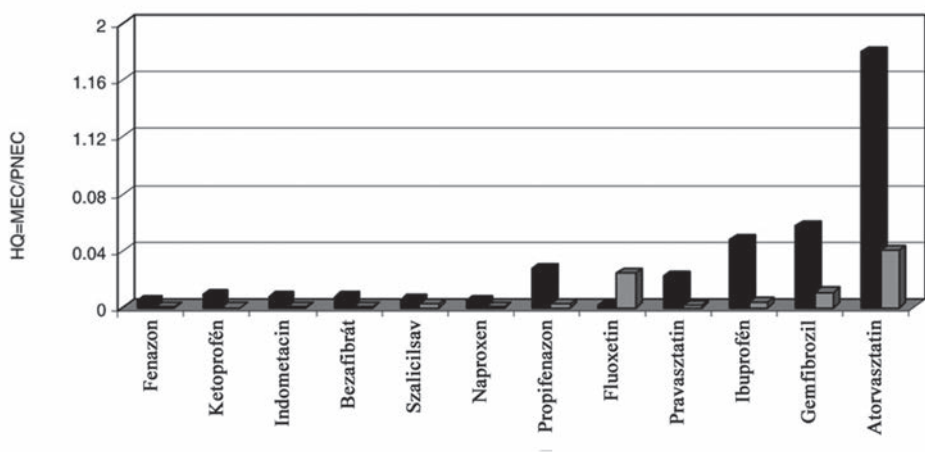
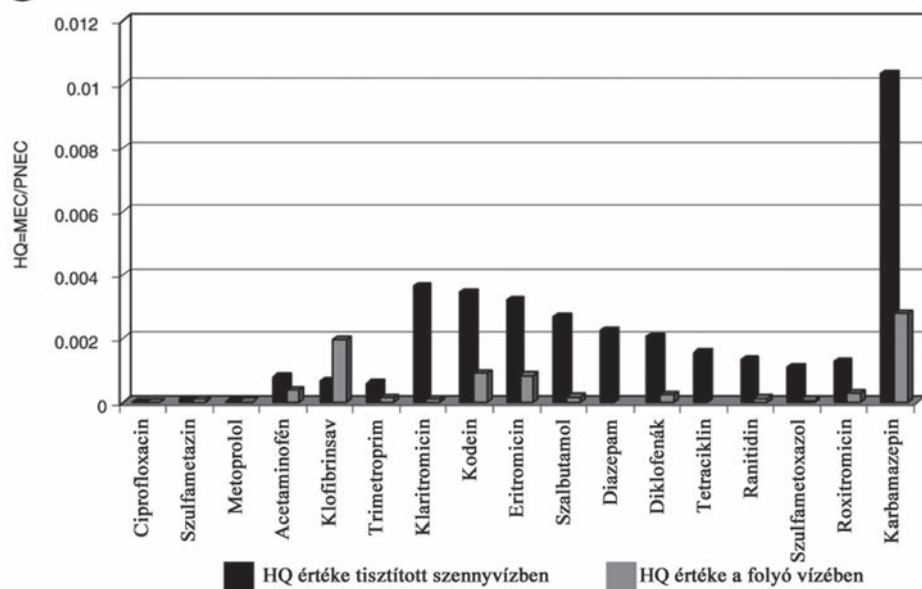
Mért koncentrációértékek az Ebro folyó vizében ([6] alapján)

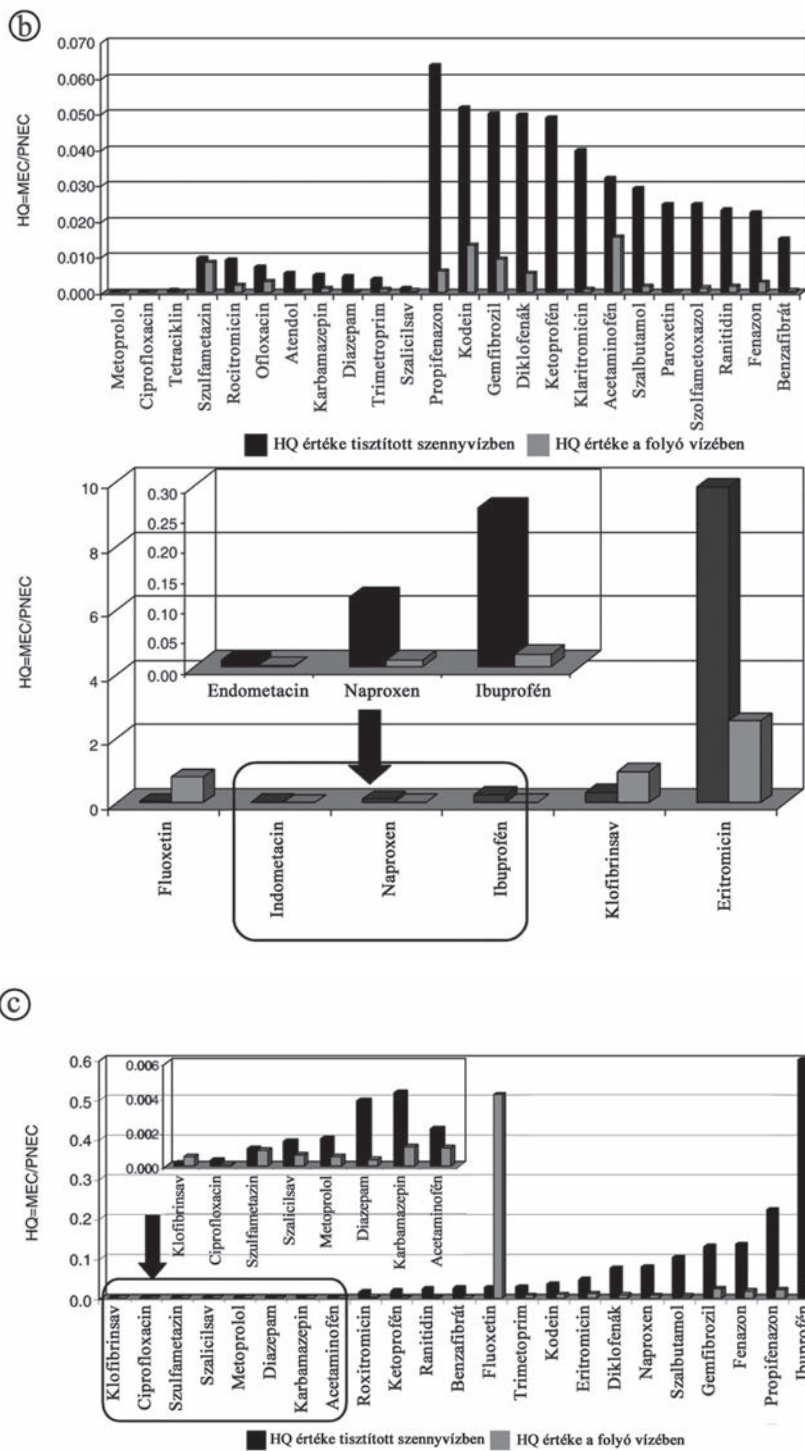
A befogadó vízfolyásokban az átlagos és alacsony eltávolítási hatásfokú vegyületek gyakrabban fordulnak elő a befogadókban. Annak ellenére, hogy a fájdalomcsillapítók és egyes gyulladáscsökkentők eltávolítási hatásfoka jónak mondható, e vegyületek szintén mindenütt, egyes esetekben jelentős koncentrációban mérhetők a folyóvizekben. Ennek oka lehet az a tény, hogy bár a tisztítás során mennyiségük hatékonyan csökkenthető, a nyers szennyvízben olyan magas a koncentrációjuk, hogy a tisztított szennyvízben maradó szint továbbra is jelentős marad.

A vizsgált felszíni víztestben az egyes gyógyszermaradványok koncentrációi jellemzően 10 és 100 ng/L között alakultak, míg a szennyvízben általában egy nagyságrenddel nagyobbak voltak, egyes esetekben elérve a µg/L értékeket is.

A fenti kutatásban mind az elfolyó szennyvízben, mind pedig az Ebro folyó vizében mért koncentrációértékek alapján számolták ki a kockázati tényezőt (HQ) halakra (a), *Daphnia magnára* (b) és algára (c). A 6.7. ábrán a kockázati tényező értékei láthatók.

a





6.7. ábra

Halakra (a), Daphniára (b), és algára (c) vonatkozó kockázati tényezők egyes gyógyszermaradványok esetében ([6] alapján)

A 6.7. ábrán bemutatott eredmények alapján kijelenthető, hogy a különböző élő szervezetek érzékenysége tekintve az alga > daphnia > halak a sorrend, habár néhány vegyületre a *Daphnia* érzékenyebbnek bizonyult, mint az alga. Az eredmények azt mutatják, hogy a vizsgált felszíni víztestben a gyógyszermaradványok jelenléte nem okoz jelentős kockázatot, hiszen az esetek többségében a kockázati tényező értéke nem érte el a kritikus 1-es értéket. Ebben a kutatásban egynél magasabb HQ-értékek a *Daphnia* esetében eritromicinhez, a klofibrinsavhoz és a fluoxetinhez tartoztak, algák esetében pedig a szulfametoxazol jelentett toxicitási kockázatot. A tisztított szennyvízre számolt HQ-érték magasabb volt, mint a folyó vízében.

Mindezek alapján arra a következtetésre juthatunk, hogy a befogadó hígító hatása hatékonyan csökkenti a gyógyszermaradványok lehetséges környezeti kockázatát. A szakirodalomban azonban főleg akut toxicitásra vonatkozó adatokat találunk, a krónikus hatás kapcsán nem rendelkezünk megfelelő adatbázissal, ezt mindenképpen érdemes figyelembe venni.

6.2.2. A NORMAN-hálózat

Az új szennyezők (*contaminants of emerging concern* – CECs) környezeti kockázatának meghatározására egyedi módszert fejlesztett ki, és mára a legkiterjedtebb működő rendszer a NORMAN-hálózat, amely az Európai Bizottság támogatásával 2005 óta működik [7]. Néhány év alatt a NORMAN-hálózat folyamatosan működő, önfenntartó rendszerré, referencialaboratóriumok és kutatóközpontok hálózatává vált, amely az új szennyezők megfigyelését és monitoringját tűzte ki célul a környezet, kiemelten az európai felszíni víztestek állapotára vonatkozóan. A hálózat célja, hogy ellenőrzött információkat gyűjtsön az új szennyezők környezeti jelenlétéről, egységesítse az adatgyűjtés módszereit, és biztosítsa az információcserét e szennyező anyagok környezeti jelenlétét és kockázatát illetően. Fontos cél és szempont a mérési módszerek és a monitoringeszközök validálása és harmonizációja, ezáltal a kockázattertelékelések minőségének növelése. A NORMAN-hálózat egyfajta kapocsként működik a politika és a tudomány területe között, amely elősegíti az összehangolt fellépést az új szennyezők azonosításának és kockázatsökkentésének érdekében.

A NORMAN-hálózat legfontosabb feladatait az alábbi öt pontban lehet összefoglalni:

- egy független, átlátható és nyitott rendszer működtetése, amely a fenntartható, veszélyes anyagoktól mentes környezetért dolgozik;
- az új szennyezők környezeti jelenlétének kutatás;
- figyelő- és riasztórendszer az új szennyezők környezeti veszélyeivel kapcsolatban;
- híd a tudomány területe és a politikai döntéshozók között;
- olyan innovatív kezdeményezések platformja, amely az új kutatási és monitoringmódszerek feltárását tűzte ki célul.

E célok eléréséhez a NORMAN nem csupán az új szennyezőkkel foglalkozó tudományos közösségeket kapcsolja össze, hanem a tudományterületen tevékenykedő döntéshozókat és magánvállalkozásokat is. A hálózat tevékenységét nyolc munkacsoportban végzi, amelyek az új szennyezők különféle aspektusaival foglalkoznak. A WG1-munkacsoport feladata az új szennyezők prioritizálása, a WG2 a biológiai vizsgálati módszerek fejlesztésével és validálásával foglalkozik. A WG3-munkacsoportban történik a kockázatosnak ítélt szennyező anyagok azonosítása és elemzése, a WG4-csoport a nano- és mikroszemcséjű (mű)anyagokkal foglalkozik. A WG6-csoport kifejezetten a különböző eredetű szennyvíz hasznosításának lehetőségeire és az új szennyezők okozta korlátozások meghatározására fókuszál, a WG6-munkacsoport pedig az új szennyezők jelenlétét belső környezetekben vizsgálja [8] (6.8. ábra).

WG1 Az új szennyezők priorizálása	WG2 Biológiai vizsgálatok és biomarkerek a víz- minőségvédelemben	WG3 Kockázatos szennyezőanyagok hatásorientált elemzése és azonosítása
Munkacsoportok közti tevékenység: Passzív mintavétel Az új szennyezők passzív mintavétele		
Munkacsoportok közti tevékenység: nem célzott szűrés (NTS) Nem célzott szűrés technikák a környezeti megfigyeléshez		
WG4 Nano- és mikroszemcséjű szennyezőanyagok	WG5 Szennyvíz-újrahasznosítás és az új szennyezők	WG6 Új szennyezőanyagok beltéri környezetben

6.8. ábra

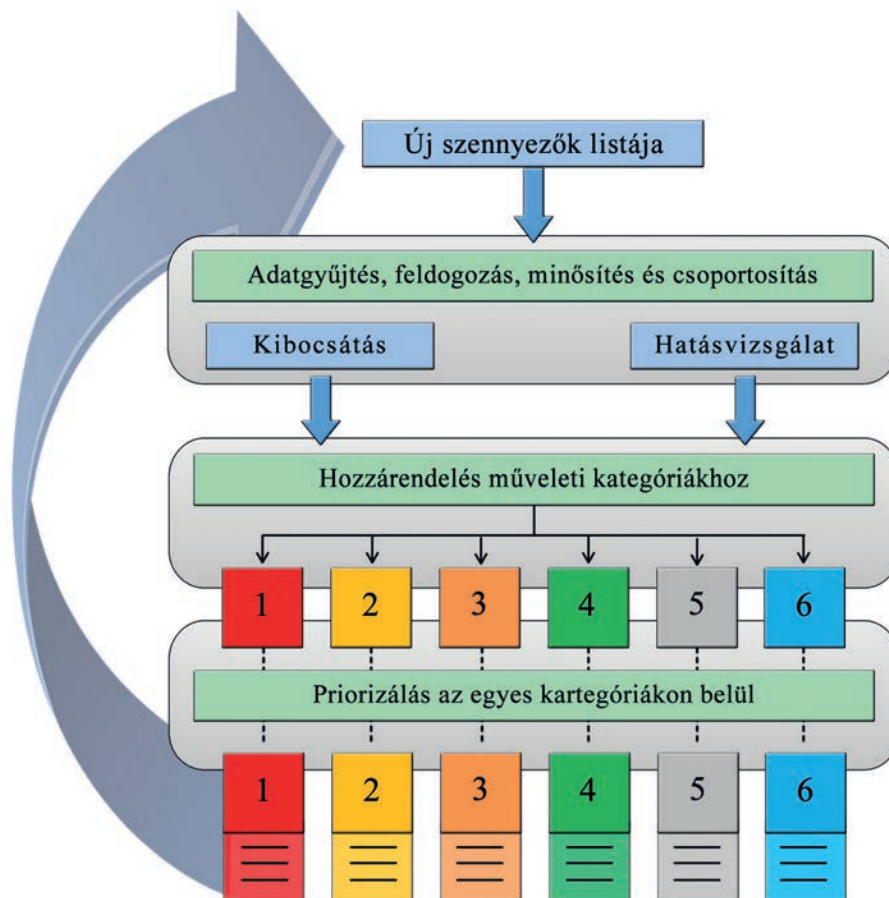
A Norman-rendszer munkacsoportjai [8]

A rendszer működése a megfelelő mennyiségű és minőségű adatok szervezett gyűjtésén alapul, ezért az adatgyűjtés és az olyan adatbázisok fejlesztése, mint az EMPODAT a projekt kezdete óta a NORMAN fő tevékenységei közé sorolható [9]. Az EMPODAT mára a legnagyobb nemzetközi adatbázis lett, 500 új szennyező mintegy tízmillió adatát rögzíti. Az új szennyező anyagok rangsorolása kiemelt fontosságú feladat a környezet védelmével foglalkozó vezetők és a tudományos közösség számára, hiszen ez alapvető fontosságú a további szennyezések megelőzésével és csökkentésével kapcsolatos intézkedések meghatározása, valamint az erőforrások hatékony elosztása és kihasználása szempontjából. A NORMAN ezek alapján kidolgozott egy racionális és holisztikus megközelítést ezen anyagok priorizálására (6.9. ábra), amely a meglévő adatbázisból dolgozik, de figyelembe veszi az egyes területeken előforduló esetleges információhiányt is [10].

Az egyes kategóriákon belüli prioritást olyan speciális mutatók alapján értékelik, mint a perzisztencia, a bioakkumulációs tulajdonság, a toxikológiai vagy ökotoxikológiai hatások, valamint olyan kockázatértékelési mutatók, mint hatás nélküli koncentráció (PNEC) túllépésének gyakorisága és kiterjedtsége.

A rendszer egy webes alapú adatbázis segítségével működik, amely folyamatos újraértékelést végez, ha valamilyen új információk, megbízhatóbb adatok állnak rendelkezésre, illetve ha visszajelzések érkeznek egyes kockázatsökkentő intézkedések eredményeiről.

A NORMAN-módszertan döntéstámogató keretet biztosít azon anyagok listájának folyamatos frissítéséhez, amelyek esetében valamilyen intézkedést (csökkentést, kutatást, monitorozást) szükséges végrehajtani. A rendszer gyengesége – hasonlóan más programokhoz – az, hogy bizonyos szennyezőkre, szennyezőanyag-csoportokra a rendelkezésre álló kutatási eredmények alapján nagyobb hangsúlyt fektet, így nem közvetít teljes körű áttekintést az európai víztestek állapotáról. Napjainkban jellemzően több ezer anyag és azok bomlástermékei vannak jelen az egyes környezeti mintákban, olyan összetett keverékeket képezve, amelyek összetételét és hatásait csak részben lehet azonosítani a jelenlegi megfigyelési és kockázatértékelési módszerekkel. A NORMAN-rendszer más, hasonló rendszerekkel együttműködve próbálja ezeket a hiányosságokat csökkenteni, és új módszerek tesztelésével és bevezetésével növelni a kockázatértékelések minőségét [11].



6.9. ábra

Új szennyezők prioritizálása a Norman-rendszerben [10]

6.2.3. Pontozás- és rangsorolás-alapú kockázatbecslés

A szerves mikroszennyezők kockázatértékelésére az alábbiakban bemutatott módszert célzottan a felszíni vizek és az ivóvíz minőségének paramétereit figyelembe véve fejlesztették ki, a környezettel és az emberi egészséggel összefüggésben [12]. A módszer bemutatásához kapcsolódó kutatáshoz 58 szerves mikroszennyezőt választottak ki, figyelembe véve azok jellemző előfordulását a felszíni vizekben, a Duna folyóban és a kezelt szennyvízben, valamint a termelt és felhasznált mennyiségüket. A vizsgált szerves mikroszennyezők között gyógyszerek, ipari vegyületek, rovarirtók, nanoanyagok, égésgátlók, felületaktív anyagok, testápolási termékek (PPCPs), valamint a koffein és a nikotin szerepeltek. A vizsgált vegyi anyagokra vonatkozó adatokat a gyártó által kibocsátott biztonsági adatlapokból, valamint környezeti mérések eredményeiből gyűjtötték.

A vizsgált szerves mikroszennyezők rangsorolásához prioritási rendszert dolgoztak ki, amely olyan paramétereket vett figyelembe, mint az adott vegyület éves termelt és felhasznált mennyisége, oktanol-víz megoszlási hányadosa, biológiai bonthatósága, valamint a környezeti és az emberi egészségre gyakorolt hatásai (6.1. táblázat).

6.1. táblázat

A rangsorolás-alapú kockázatbecslés vizsgálati szempontjai ([12] alapján)

Paraméterek	Kategóriák	Pontérték
Előállítás (felhasználás)	< 1 kg/év	0
	1–100 kg/év	1
	100–1000 kg/év	3
	1–10 t/év	5
	>10t	10
K _{ow} (oktanol-víz együttható)	100000–1000000	0
	10000–100000	1
	1000–10000	2
	100–1000	3
	10–100	5
	<10	10
Abiotikus degradálhatóság	könnyű: t _{1/2} : 0–2 nap	0
	mérsékelt: t _{1/2} : 2–7 nap	1
	t _{1/2} : 1 hét – 1 hónap	2
	t _{1/2} : 1 hónap – 1 év	3
	perzisztens: t _{1/2} > 1 év	5
Biodegradálhatóság	könnyű: t _{1/2} : 0–2 nap	0
	mérsékelt: t _{1/2} : 2–7 nap	1
	t _{1/2} : 1 hét – 1 hónap	2
	t _{1/2} : 1 hónap – 1 év	3
	perzisztens: t _{1/2} > 1 év	5
Endokrin rendszert károsító hatás	nincs	0
	lehetséges	3
	van	5
Immunrendszert károsító hatás	nincs	0
	lehetséges	3
	van	5
Szövet (bőr) károsító hatás	nincs	0
	lehetséges	3
	van	5
Mutagenitás	nincs	0
	lehetséges	3
	van	5
Karcinogenitás	nincs	0
	lehetséges	3
	van	5
Reprodukciót befolyásoló hatás	nincs	0
	lehetséges	3
	van	5
Legalacsonyabb akut toxicitás (EC ₅₀ , LC ₅₀)	>100 mg/L	0
	10–100 mg/L	2
	1–10 mg/L	3
	<1 mg/L	5
Legalacsonyabb krónikus (öko)toxicitás NOEC/LOEC	>100 mg/L	0
	10–100 mg/L	2
	1–10 mg/L	3
	<1 mg/L	5

Megjegyzés: EC₅₀: a koncentrációérték, amely hatást vált ki a tesztorganizmusok 50%-án; LC₅₀: a koncentrációérték, amely halálos a tesztorganizmusok 50%-ára; NOEC: a koncentrációérték, amelynél hatás nem figyelhető meg; LOEC: a legalacsonyabb koncentrációérték, amelynél hatás figyelhető meg.

Az egyes szerves mikroszennyezőket kategóriánként értékelték, majd az összegzett eredmény alapján készült el a prioritási lista (6.2. táblázat). Ezek alapján a lista első 3 helyére a nikotin, a biszfenol-A és a szulfametoxazol került. Ezek a szennyező anyagok gyakran fordulnak elő az édesvízi környezetben, és mind a környezetre, mind pedig az emberi egészségre kockázatot jelentenek. Összességében elmondható, hogy az így elkészült prioritási lista hasonló más kutatási eredmények és más kockázatbecslő módszerek eredményeihez. A kockázati összesített pontérték alapján felállított rangsor első 20 elemét a 6.2. táblázat tartalmazza.

6.2. táblázat

Egyes szerves mikroszennyezők összesített kockázati tényezőn alapuló rangsorolása ([12] alapján)

Kockázati sorrend	Vegyület neve	Vegyület CAS-száma	Kockázati összesített pontérték
1.	Nikotin	1954.11.05	57
2.	Biszfenol-A	1980.05.07	57
3.	Szulfametaxazol	723-46-6	55
4.	Metamizol (nátriumsó)	68-89-3	53
5.	Diuron	330-54-1	52
6.	Nonilfenol	25152-54-3	51
7.	Uretán/etil-karbamát	51-79-6	51
8.	Karbamazepin	298-46-4	51
9.	Doxorubicin	23214-92-8	50
10.	Bisz(tributiltin)oxid	56-35-9	50
11.	Paracetamol	103-90-2	50
12.	Aminofenazon	1958.11.01	49
13.	Verapamil	52-53-9	46
14.	Karboplatin	41575-94-4	46
15.	Ciproteron	2098-66-0	46
16.	Pentaklorofenol (PCP)	87-86-5	46
17.	Benzotiazol	95-16-9	46
18.	Gemfibozil	25812-30-0	46
19.	Epoxikonazol	135319-73-2	45
20.	Simazin	122-34-9	45

6.2.4. SAR/QSAR-modellek

A szerkezetaktivitási összefüggés (*Structure-Activity Relationship* – **SAR**) és a mennyiségi szerkezetaktivitási összefüggés (*Quantitative Structure-Activity Relationship* – **QSAR**) modellek olyan matematikai modellek, amelyeket a vegyületek fizikokémiai, biológiai, ökotoxikológiai és környezeti hatására, sorsára vonatkozó becslésre használnak azok kémiai szerkezetének és tulajdonságainak ismeretében [13].

Az **SAR** olyan minőségi összefüggés, amely egy rendszert egy adott tulajdonság vagy hatás meglétével vagy éppen hiányával kapcsol össze. A **QSAR** pedig egy matematikai modell, amely a kémiai szerkezetből levezetett egy vagy több mennyiségi paramétert kapcsol össze egy tulajdonság vagy hatás mennyiségi mérőszámával.

A **QSAR** lényegében matematikai kapcsolatot ír le a molekulák szerkezeti jellemzői és valamilyen aktivitásadatuk között, mint a gyógyhatás vagy éppen a toxicitás. A mennyiségi függvénykapcsolat segítségével könnyebben meghatározható, hogy milyen tulajdonságok felelősek egy aktivitás léteért vagy hiányaért. A modell segítségével költséges kísérletek nélkül lehetséges új vegyületek különféle aktivitásértékeinek számszerű előrejelzése. A modell segítségével a moleku-

lák csoportosíthatók, osztályozhatók, megállapítható a humán egészségügyi vagy ökotoxikológiai hatásuk [14].

A QSAR-modell segítségével szervesanyag-keverékek mikroorganizmusokra kifejtett toxikus hatását lehet modellezni. Korábbi kutatások eredményei alapján egy 6-8-10 komponensű keverék egyes komponensei egyedi IC_{50} koncentrációinak 5%-a akár 50%-os gátlást is előidézhethet az ökotoxikológiai vizsgálati rendszerben.

A toxikus egységet az i-edik komponensre az alábbi összefüggéssel lehet leírni:

Toxikus egység az i komponensre (TU_i):

$$TU_i = \frac{C_i}{IC_{50i}}$$

A keverék toxicitási indexe:

$$MTI \text{ (Mixture Toxicity Index)} = 1 - \log M / \log M_0$$

Összegző index (AI):

$$AI \text{ (Assuming Index)} = 1/M - 1, \text{ ha } M \leq 1$$

$$AI = 1 - M, \text{ ha } M > 1$$

ahol:

C_i – az i komponens koncentrációja,

IC_{50i} – az i komponens toxicitása (az a koncentrációérték, amely 50%-os inhibíciót okoz).

$M = TU_{\text{sum}} = \sum TU$

$M_0 = M$ a keverékben a legnagyobb TU_i

A QSAR-modell az úgynevezett egységes keverékre alkalmazva felírható:

$$\sum_{i=1}^n TU_i = n * TU_i = 1$$

$$TU_i = \frac{1}{n}$$

A fenti összefüggések csak akkor érvényesek, ha az n számú toxikus anyag keverékében a toxicitási index mindegyik anyagra azonos. Az i komponens 50%-os inhibíciót okozó koncentráció (C_i) értéke:

$$C_i = \frac{IC_{50,i}}{n}$$

QSAR-modellt az úgynevezett nem egységes keverékre alkalmazva felírható:

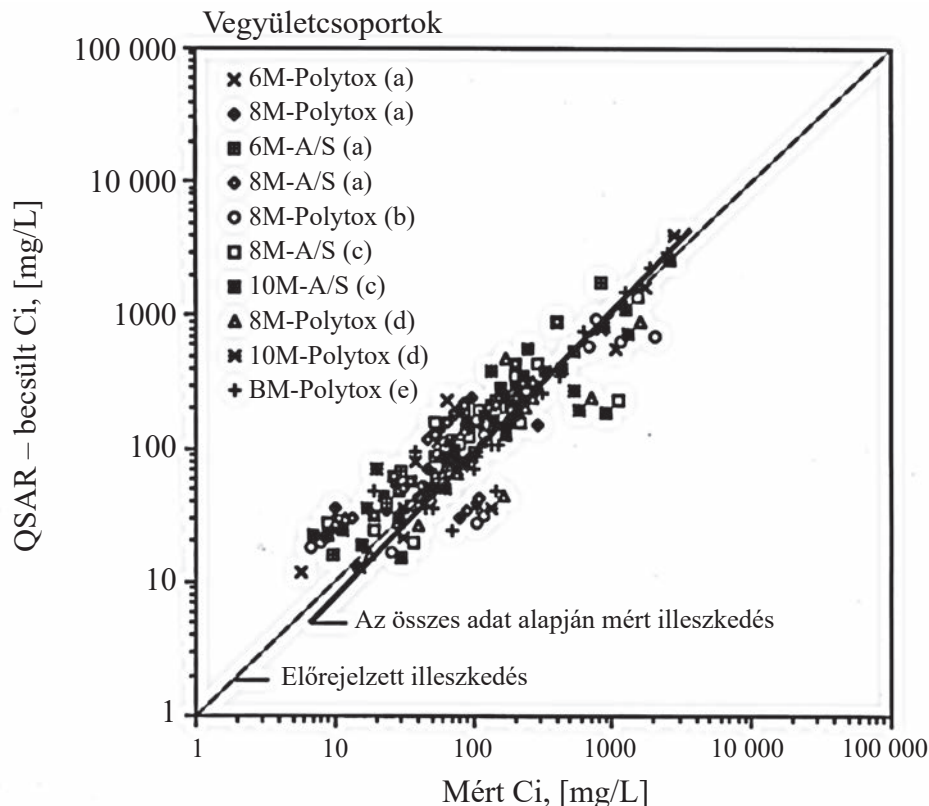
$$C_n = IC_{50,n} * [1 - \sum_{i=1}^{n-1} TU_i]$$

A nem egységes keverékeknél is kiszámítható az n-edik komponenshez tartozó koncentrációérték (C_n), amely a toxicitási végponton az együttes 50%-os inhibícióhoz tartozik. A számításhoz szükséges, hogy az egyes komponensek toxikus egység (TU) értékeit összegezzük:

$$\sum_i^{n-1} TU_i$$

és a komponens egyedi toxicitási értékét ($IC_{50,n}$) ismerjük.

A korábbi kutatásokban végzett vizsgálatokhoz két baktériumkultúrát (*Polytox* és *eleveniszap*) használtak fel. A vizsgálatokat 66 kémiai vegyület esetében egyes, kettős, egységes és nem egységes keveréktípusok kialakításával végezték el. A kiválasztott 66 vegyület tipikus környezetszennyező vegyületekből (aromások, halogén alifások, alkánok, alkoholok, ketonok és éterek) lett összeállítva. A QSAR-modell segítségével különböző vegyületcsoportoknál az egyes komponensek mért (C_{im}) és számított (C_{isz}) koncentrációinak összefüggését is ki lehet számolni. A 6.10. ábra a mért és a modell által számított koncentrációértékek összefüggését mutatja be. Az összefüggés viszonylag erős korrelációs kapcsolatot ($r^2 = 0,80$) mutat [15].



6.10. ábra

QSAR-modell alapján a jelzett és a mért toxikus vegyületek koncentrációinak összefüggése ([15] alapján)

Nirmalakhandan és társai két és több szerves vegyület baktériumokra kifejtett együttes toxicitási hatását vizsgálták [15]. A vizsgált vegyületeknél toxicitási hatás az egyes vegyületek toxicitásának összegzésében jelentkezett. A kvantitatív összefüggések értékeléséhez a QSAR-modell alkalmazását javasolják. Az egyes vegyületek toxikus koncentráció értékeinek kimérésére a respirometrikus módszer javasolható, amely egyszerű és gyors módszernek tekinthető. A szerzők a QSAR-modell alkalmazásával 50 kémiai vegyület esetében végezték a toxicitási vizsgálatokat. Az 50 vegyületből vegyületcsoportokat is összeállítottak, és ezekkel is elvégezték a toxicitási vizsgálatokat. A mért és a modell által számított toxicitási értékek erős korrelációs kapcsolatot mutattak ($r^2 = 0,80$) [16].

6.2.5. Az ECOSAR-modell

Az ökológiai szerkezetaktivitási összefüggés (ECOSAR) gyakran használt QSAR-eszköz, amelyet az USA EPA fejlesztett ki egy vegyi anyag akut, azaz rövid távú és krónikus, azaz hosszú távú toxicitásának előrejelzésére. Az ECOSAR elsősorban a vízi szervezetekre, például halakra, gerinctelen víziállatokra és vízínövényekre alkalmazható. A digitális felületen futó program főbb jellemzői a következők:

- A szerkezetileg hasonló szerves vegyi anyagok csoportosítása a rendelkezésre álló, kísérletileg igazolt hatásdózisértékek felhasználásával.
- Az új vagy még nem tesztelt vegyi anyagok toxicitásának előrejelzése az adatbázisban szereplő vegyi anyagok fizikai-kémiai tulajdonságai alapján.
- Az új vagy még nem vizsgált vegyi anyagok legrepresentatívabb osztályának meghatározása.
- Az adatbázis folyamatos frissítése az elérhető forrásokból összegyűjtött adatsorok vagy benyújtott kutatások, tanulmányok alapján.
- Az ECOSAR-szoftver ingyenesen elérhető és használható bárki számára [17].

6.2.6. Kombinált módszer peszticidkeverékek ökológiai kockázatának meghatározására

A felszín alatti vizek peszticidszennyezéssel szembeni védelme prioritást élvez a globális környezetpolitikában, tekintve, hogy a felszín alatti vizek szennyeződése évtizedekig is tarthat, jelentős kárt okozhat az ivóvízbázisokban, befolyásolja a felszín alatti vizek minőségét, és veszélyt jelenthet a felszín alatti vizek ökoszisztémájára is. A növényvédő szerek szerepe a mezőgazdaság számára káros hatású baktériumok, gombák és gyomok visszaszorításában vitathatatlan, ezért a második világháború óta használatuk mind mennyiségileg, mind pedig a szerfajták számát tekintve jelentősen megnőtt [18]. A felszín alatti víztesteket érintő peszticidszennyezés Svédországon kívül az összes EU-tagállamban kimutatható [18]. Különösen problematikus a szennyezés a mediterrán térségben, ahol a száraz évszakban a felszín alatti vízkészletek is jelentősen csökkenhetnek. Fontos hangsúlyozni azt a tényt, hogy a felszín alatti víztesteket általában nem egyetlen peszticid szennyezi, hanem bennük különböző szennyező anyagok keveréke mutatható ki. E szennyezőanyag-keverékek gyakori előfordulása ellenére a jelenlegi EU-szabályozások szinte kizárólag az egyes vegyi anyagok kockázatértékelésére fókuszálnak. A peszticidkeverékek toxicitása azonban általában magasabb, mint az egyes komponensek toxicitása [19]. Ez azt jelenti, hogy a különböző vegyületek még akkor is hozzájárulhatnak a keverék teljes toxicitásához, ha külön-külön olyan alacsony koncentrációban fordulnak elő, amely nem vált ki káros hatást az édesvízi élővilágra.

Di Lorenzo és munkatársai a peszticidszennyeződés négy különböző kockázati forgatókönyvét vizsgálták 11 olaszországi alluviális, azaz folyóvízi hordalékos rétegben található felszín alatti vízbázisban, kiemelve közülük azt, amelyet a döntéshozók a kockázat csökkentésére legeredményesebben használhatnak [20]. Az 1. és a 2. forgatókönyvet a Víz Keretirányelv által meghatározott jó kémiai állapot elérésének megghiúsulására vonatkozó kockázatok bemutatására használták, míg a 3. és 4. forgatókönyv olyan ökológiai kockázatok bemutatására készült, amelyek a felszín alatti üregekben és víztartó közegekben előforduló élőlények, azaz a sztigofauna peszticidek általi veszélyeztetettségéből adódnak. A kockázatbecslést megalapozandó átfogó kutatást folytattak Olaszország középső területén, ahol az említett vízbázisokban 42 növényvédő szert vizsgáltak 120 mintavételi ponton, mintegy 6 éven keresztül.

Az EU Víz Keretirányelvében foglaltak elérésének peszticidek és peszticidkeverékek miatt történő megghiúsulására két forgatókönyvet mutattak be (1), (2). A kockázatok meghatározása az EU által kiadott *Útmutató a felszín alatti vizek állapotának meghatározásához és a trend értékeléséhez* [21] dokumentuma alapján történt, és 5 lépésből állt.

Az első lépés az egyes növényvédő szerek mintavételi pontokon mért értékeinek (MEC) meghatározása volt (az 1. forgatókönyvben átlagos MEC-értékekkel, a 2. forgatókönyvben maximális MEC-értékekkel dolgoztak). A mennyiségi meghatározás méréshatára (<LOQ) alatt jelentett koncentrációkat a LOQ felével megegyező értékekkel helyettesítették.

A második lépésben az egyes peszticideknél meghatározott MEC-értékek összevetése történt a felszín alatti vízminőség standardban (*Groundwater Quality Standards* – GQS) meghatározott értékkel, amely 0,1 µg/L, amely értéket a felszín alatti vizekről szóló irányelv (GDD, EC 2006) 1. számú melléklete rögzíti [22].

A harmadik pontban az egyes növényvédő szerek MEC-értékeinek összegzése (Σ_MEC) történt mintavételi helyenként.

A 4. lépésben a Σ_MEC értékét összevetették a felszín alatti vízminőség standardban meghatározott érték (0,1 µg/L) ötszörösével, 0,5 µg/L-rel (az egyes növényvédő szerek GQS-értékének 5-szöröse) a túllépések kimutatására.

Végül az 5. lépés a GQS-ben foglalt érték túllépésének meghatározása, mértékének kiszámítása volt a vizsgált víztartó rétegekben. A túllépések mértékét elfogadhatónak tekintették, ha az egyes MEC-értékek és/vagy a Σ_MEC -értékek túllépését a víztartó réteg mintavételi helyeinek kevesebb mint 20%-ában regisztrálták.

A 2. forgatókönyv esetében az egyes peszticidek legmagasabb koncentrációját vették figyelembe (max MEC), mert egy adott peszticidet ökológiai szempontból akkor is kockázatosnak kell tekinteni, ha magas koncentráció csak egyszer volt mérhető.

A peszticidekből és peszticid keverékekből adódó ökológiai kockázatokra két különböző forgatókönyvet készítettek (3. és 4. forgatókönyv) az összes mintavételi helyre, a GERAp eljárást követve.

A GERAp (*Groundwater Ecological Risk Assessment due to pesticides*) ötlépéses eljárás, amely két mérőszámra épül, nevezetesen az RQind és az RQmix. Az RQind a MEC (a 3. forgatókönyvben az átlagos, a 4.-ben pedig a maximális MEC-értékkel számolva) és az egyes peszticidek becsült hatás nélküli koncentrációjának (PNEC) arányából adódik.

$$RQ_{ind} = \frac{MEC}{PNEC}$$

A PNEC ebben az esetben egy peszticid olyan becsült koncentrációja, amely a felszín alatti vizek ökoszisztémáiban élő fajok jelentősebb részénél még nem okoz kedvezőtlen változásokat, ám a sztingobiotikus fajokkal végzett rövid távú biológiai vizsgálatok bizonytalansága miatt a PNEC-értékeket a felszíni, édesvízi rákfélék akut érzékenységi adataiból számították ki.

$$PNEC = \frac{EC50}{AF/CF}$$

Az EC50 azt a koncentrációt jelenti, amelynél a tesztelt szervezetek 50%-ánál valamilyen negatív hatás mutatható ki. Az AF (*assessment factor*) egy értékelési tényező, amely a PNEC számítása kapcsán felmerülő bizonytalanságokat számszerűsíti. A tengervíz AF-értéke mindig magasabb, mint az édesvízi AF-érték, mivel a tengervíz kapcsán kevesebb adat áll rendelkezésünkre. Az AF-értékét különböző vízi szervezetekre EU-direktívában rögzítették, a kutatásban vizsgált édesvízi rákfélék esetében az értéke 1000. A CF (*correction factor*) értéke 10 az Európai Gyógyszerügynökség

iránymutatásában foglaltak alapján [23]. A PNEC-értékek számítása ebben a kutatásban a *Crustacea taxonra* történt, az EC50- és az LC50-értékeket az egyes peszticidekre a rendelkezésre álló szakirodalomból gyűjtötték ki.

A vizek minőségét meghatározó szabványokat követve a peszticidkeverékekre vonatkozó kockázati tényező (RQ_{mix}) számítása az alábbi egyenlet alapján történt.

$$RQ_{mix} = \sum_{i=1}^n \frac{MEC_i}{PEC_i} = \sum_{i=1}^n RQ_{ind}$$

ahol n a vizsgált peszticidek száma az egyes mintavételi helyeken. Az RQ_{ind} az egyes peszticidek kockázati tényezője, amelynek számítása a fentebb bemutatott egyenlet alapján történt.

A GERAp-módszer 5 lépését az alábbiak szerint lehet összefoglalni.

Az első lépésben történt az RQ_{ind} , azaz az egyes peszticidek kockázati tényezőjének meghatározása minden vizsgált peszticidre, mindegyik mintavételi helyen.

A második lépés során történt az egyes peszticidek RQ_{ind} -értékeinek összevetése az „1” értékkel. (Emlékeztető: Ha az RQ értéke kisebb, mint 1, akkor nincs szükség beavatkozásra, hiszen a mért koncentráció kisebb a káros hatást kifejtő koncentrációnál; ha ez az érték nagyobb, mint 1, akkor további lépések szükségesek.) Azokban az esetekben, amikor az RQ_{ind} egyenlő volt vagy meghaladta az 1-et, ökológiai kockázat volt megállapítható.

A következő lépésben az RQ_{mix} értékének meghatározása történt az egyes mintavételi pontokon és összevetése az „1” értékkel. Ha az $RQ_{mix} \geq 1$, az ökológiai kockázat feltételezhető volt.

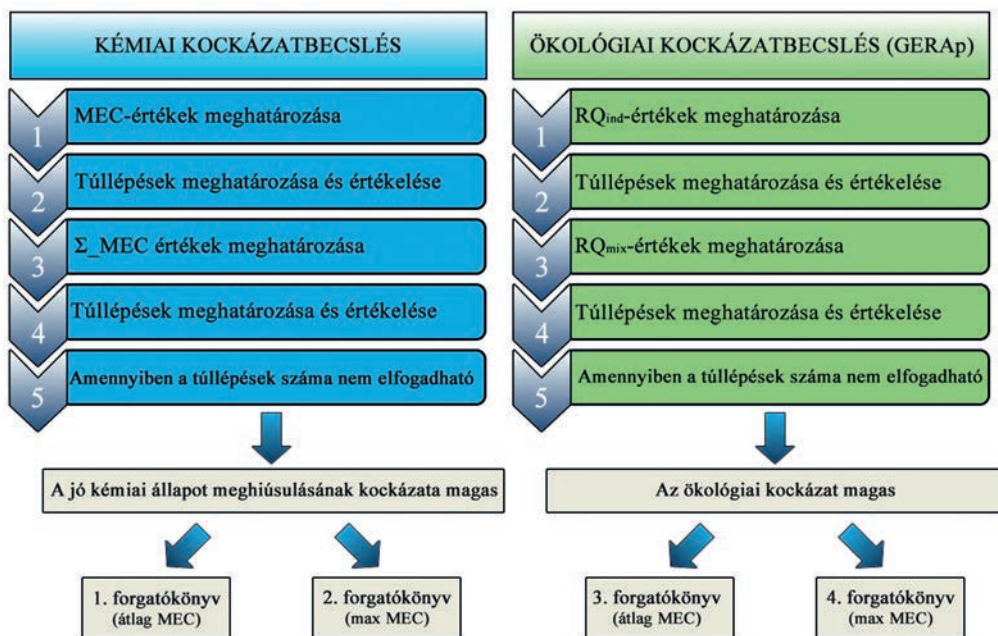
Az RQ_{mix} -értékek eloszlásának 75. percentilisének számítása következett a 4. lépésben a 11 vízadó rétegre, amely egy olyan küszöbértéket eredményezett, amely felett a mintavételi helyeken jelentős ökológiai kockázat volt feltételezhető. A küszöbértéket meghaladó RQ_{mix} -értékek (ebben a vizsgálatban 5 ilyen volt) magas ökológiai kockázatot jeleztek.

Végül az 5. lépés során a túllépések mértékének számítása következett az egyes víztartó rétegekben. A túllépések mértékét elfogadhatónak tekintették, ha az RQ_{ind} túllépését (azaz az $RQ_{ind} \geq 1$ értéket) és/vagy az RQ_{mix} túllépését (azaz az $RQ_{mix} \geq 5$ értéket) a mintavételi helyek kevesebb mint 20%-ánál regisztrálták. A vízadó rétegek esetében ökológiai kockázatot állapítottak meg, amennyiben az RQ_{ind} értéke meghaladta az 1-et, és magas ökológiai kockázatot állapítottak meg, ahol az RQ_{mix} értéke túllépte az 5-öt.

A kutatásban lefolytatott kémiai kockázatértékelés és ökológiai kockázatbecslés folyamatát a 6.11. ábra foglalja össze.

A kutatásban lefolytatott kockázatértékelés tehát 4 különböző forgatókönyv alapján történt, amelyek meglehetősen eltérő eredményt hoztak. Az 1. forgatókönyv, amelyben az átlagos MEC-értéket vetették össze a GQS-ben meghatározott számadattal, csupán egyetlen víztestben jelzett kockázatot, ahol 2-féle herbicid- és 1 rovarirtószer-származék koncentrációja volt elfogadhatatlan. A 2. forgatókönyvben a maximális MEC-értéket vették alapul, azaz a vizsgált időszakban mért értékek közül a legmagasabbal számoltak. Ebben a forgatókönyvben lényegesen nagyobb volt a kockázatnak kitett víztestek száma, 9 esetben elfogadhatatlan kockázatot sikerült megállapítani, ahol 19 peszticid koncentrációja volt jelentős. A 3. és a 4. forgatókönyvben kockázati tényező számítását végezték el, a 3. esetben átlagos, a 4.-nél pedig maximális MEC-értékkel számolva. Mindkét forgatókönyv szerint mind a 11 vizsgált víztest kockázatosnak minősült.

A tanulmány megállapítása szerint a kockázatbecslés realisabb eredményt hozott azokban az esetekben, ahol a mért környezeti koncentráció legnagyobb értékével, azaz a maximális MEC-értékkel számoltak. A tanulmány szerzői a 2. és a 4. forgatókönyv kombinációját javasolták a kockázatsökkentő intézkedések kidolgozásához és ütemezéséhez.



6.11. ábra

A kémiai és ökológiai kockázatbecslés folyamatábrája ([20] alapján)

6.3. Összefoglalás

A szerves mikroszennyezők kockázatbecslése meglehetősen szerteágazó terület. Számos módszer létezik, amely alapul szolgálhat egy-egy ökológiai vagy környezeti kockázatbecslés elkészítéséhez, de jellemző, hogy a kutatások ezekre az alapokra építkezve saját módszertant dolgoznak ki. Az **RQ** vagy **HQ** rövidítéssel jelölt kockázati tényező számításával számos kutatásban, publikációban találkozhatunk, amelyet egy vegyület vagy keverék becsült vagy mért környezeti koncentrációja (**PEC** vagy **MEC**) és a becsült hatás nélküli koncentráció (**PNEC**) hányadosaként számolhatunk. A szerkezetaktivitási összefüggés (*Structure-Activity Relationship* – **SAR**) és a mennyiségi szerkezetaktivitási összefüggés (*Quantitative Structure-Activity Relationship* – **QSAR**) modellek olyan matematikai összefüggések, amelyeket a vegyületek fizikokémiai, biológiai, ökotoxikológiai és környezeti hatására, sorsára vonatkozó becslésre használnak. A pontozás- és rangsorolás-alapú kockázatbecslésnél több szempont alapján értékeljük a vizsgált vegyületeket, és az így kapott számérték alapján, kockázatuk szerint rangsorolhatók.

Összességében megállapítható, hogy a szerves mikroszennyezők kockázatértékelésére nincs általánosan elterjedt, elfogadott módszertan, jellemző, hogy hasonló alapokra építkezve egy-egy kutatás céljára továbbfejlesztett, optimalizált módszer használatos. A kockázatbecslési módszerek gyakori hiányossága, hogy nem minden esetben rendelkeznek megfelelő mennyiségű és elegendően részletes kiindulási információval. Általában előre kiválasztott 20-, 30-, esetleg 50-féle vegyületre fókuszálva végzik a vizsgálatokat, így természetesen átfogó kép a vizsgált területről nem kapható. Ellenben a vizsgált csoporton belül pontos prioritizálás végezhető, így megállapítható, mely vegyületek, vegyületcsoportok igényelnek nagyobb figyelmet, illetve – lehetőség szerint – kockázatcsökkentő intézkedéseket.

Bibliográfia

1. Kováts N, Gábor P. Ökológiai kockázatelemzés és -becslés, mint vizes élőhelyek kezelését megalapozó metodológia. 2001.
2. Chai Ching Hsia I, Shafie N, Razali N, Manap A, Salleh I. Using CHARM Modelling to Decide the use and Discharge of Surfactant at an Offshore EOR Project. 2018.
3. Embry M, Bachman A, Bell D, Boobis A, Cohen S, Dellarco M, et al. Risk assessment in the 21st century: Roadmap and matrix. *Critical Reviews in Toxicology*. 2014;44.
4. Petrović M, Hernando MD, Díaz-Cruz MS, Barceló D. Liquid chromatography–tandem mass spectrometry for the analysis of pharmaceutical residues in environmental samples: a review. *Journal of Chromatography A*. 2005;1067(1):1–14.
5. Cooper ER, Siewicki TC, Phillips K. Preliminary risk assessment database and risk ranking of pharmaceuticals in the environment. *Science of The Total Environment*. 2008;398(1):26–33.
6. Gros M, Petrović M, Ginebreda A, Barceló D. Removal of pharmaceuticals during wastewater treatment and environmental risk assessment using hazard indexes. *Environment International*. 2010;36(1):15–26.
7. Brack W, Dulio V, Slobodník J. The NORMAN Network and its activities on emerging environmental substances with a focus on effect-directed analysis of complex environmental contamination. *Environmental Sciences Europe*. 2012;24.
8. NORMAN-network. The Norman network Working Groups. [letöltve 2019 08. 12.]. Elérhető: www.norman-network.net/?q=Working%20Groups
9. NORMAN-network. NORMAN – EMPODAT Database. [letöltve 2019 08. 12.]. Elérhető: www.norman-network.net/empodat/
10. Dulio V, Bavel B, Brorström-Lundén E, Harmsen J, Hollender J, Schlabach M, et al. Emerging pollutants in the EU: 10 years of NORMAN in support of environmental policies and regulations. *Environmental Sciences Europe*. 2018;30.
11. Brack W. The Challenge: Prioritization of emerging pollutants. *Environmental Toxicology and Chemistry*. 2015;34:2181.
12. Molnár M, Gruiz K, Hajdu C, Nagy Z, Vaszita E, Fenyvesi É. Tiered approach for environmental risk assessment of emerging pollutants in aquatic systems. 2014.
13. Farkas O. Mennyiségi szerkezet-hatás összefüggések retenciós indexek és biológiai aktivitás előrejelzésére. Budapest: Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem; 2007.
14. Öllös G. Természetes és antropogén szerves anyagok. Budapest: Közlekedési Dokumentációs Kft.; 2007.
15. Xu S, Nirmalakhandan N. Use of QSAR models in predicting joint effects in multi-component mixtures of organic chemicals. *Water Research*. 1998;32(8):2391–2399.
16. Colborn T. Endocrine disruption from environmental toxicant. Rom WN, editor. Philadelphia: Lippincott-Raven Publishers; 1998.
17. EPA. Ecological Structure Activity Relationships (ECOSAR) Predictive Model. [cited 2019 Aug 10]. Elérhető: www.epa.gov/tsca-screening-tools/ecological-structure-activity-relationships-ecosar-predictive-model
18. Meffe R, de Bustamante I. Emerging organic contaminants in surface water and groundwater: A first overview of the situation in Italy. *Science of The Total Environment*. 2014;481:280–295.
19. EUROSTAT. Agri-environmental Indicator – Consumption of Pesticides 2016. [cited 2019 Nov 10]. Elérhető: http://ec.europa.eu/eurostat/statistics-explained/index.php/Agri-environmental_indicator_-_consumption_of_pesticides
20. Di Lorenzo T, Cifoni M, Fiasca B, Cioccio A, Galassi D. Ecological risk assessment of pesticide mixtures in the alluvial aquifers of central Italy: Toward more realistic scenarios for risk mitigation. *The Science of the Total Environment*. 2018;644:161–172.
21. European Commission (EC). Technical Guidance on groundwater status and trend assessment. Guidance Document No. 18. Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). 2009.
22. Directive 2006/118/EC of the European Parliament and of the Council of 12 December 2006, on the protection of groundwater against pollution and deterioration. 2006.
23. European Medicines Agency (EMA). Guideline on assessing the environmental and human health risks of veterinary medicinal products in groundwater. 2018.