



Report

Wie lassen sich chemische Produkte und Prozesse hinsichtlich Umwelt und Sicherheit bewerten?

Author(s):

Hungerbühler, Konrad; Brauckmann, Barbara

Publication Date:

2002

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-004452015> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Wie lassen sich chemische Produkte und Prozesse hinsichtlich Umwelt und Sicherheit bewerten?

Informationen und Experimente:
Prof. Konrad Hungerbühler und Dr. Martin
Scheringer
Laboratorium für Technische Chemie der
ETH Zürich
ETHZ Hönggerberg
Departement Chemie
CH- 8093 Zürich
email: scheringer@tech.chem.ethz.ch

Texte Allgemeine
Hintergrundinformationen:
Dr. Barbara Brauckmann
ETHZ Hönggerberg
Departement Chemie
Leiterin Kommunikation
CH- 8093 Zürich
email: brauckmann@org.chem.ethz.ch

Besucherwesen:
Valérie Sebbaâ
ETHZ Hönggerberg
Departement Chemie
Assistenz Kommunikation
CH- 8093 Zürich
email: molekuelmix@org.chem.ethz.ch

Inhaltsverzeichnis

- [Einführung](#)
- [1. Jede Fragestellung erfordert unterschiedlich viele Untersuchungsdetails](#)
- [2. Hilfreiche Modelle für langlebige organische Schadstoffe](#)
- [3. Umweltbezug als wichtige Dimension in Entscheidungsprozessen und Kommunikation](#)
- [4. Begriffserläuterungen von der integrierten Entwicklung bis zur Ökobilanz](#)
- [Kasten: Fallstudien an der ETHZ zu Sicherheit und Umweltschutz in der Chemie](#)
- [Literatur](#)

Einführung

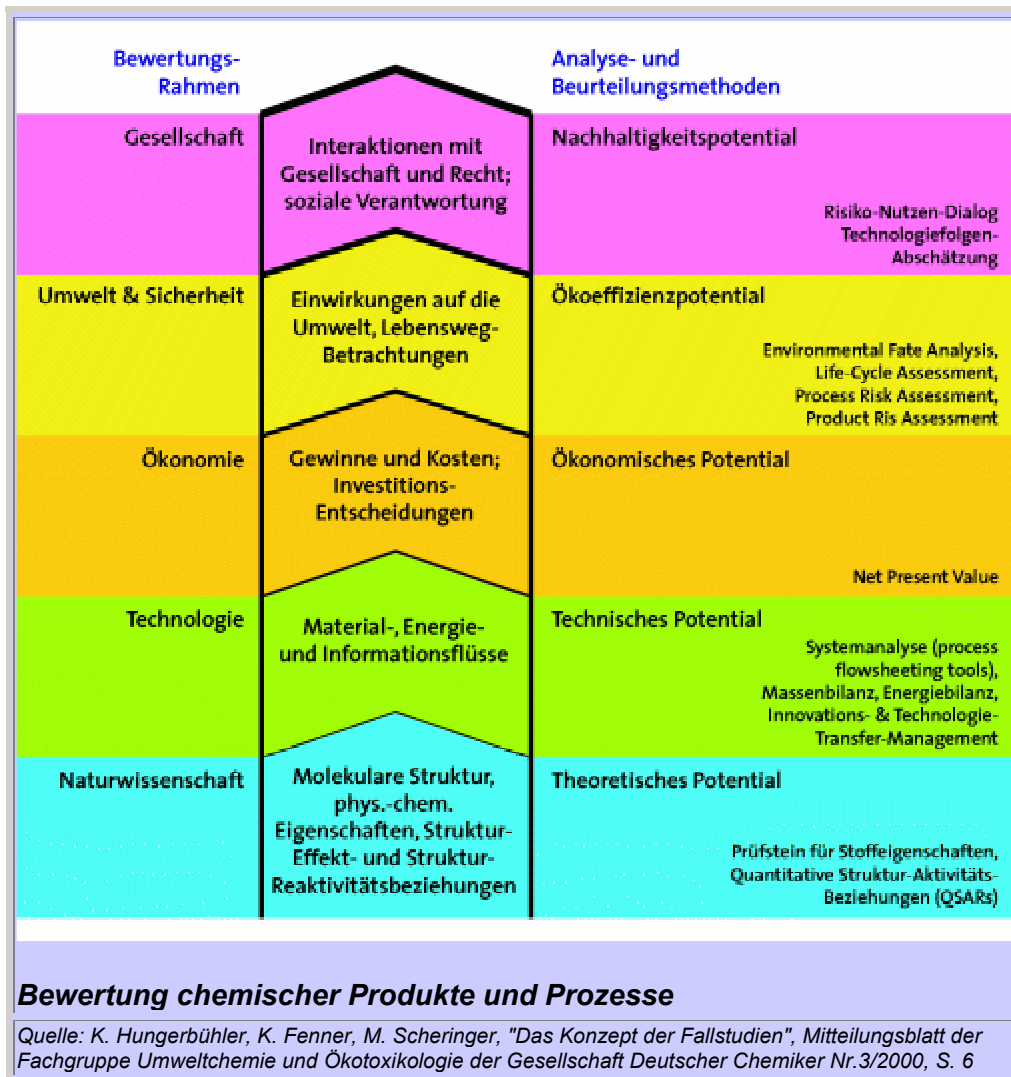
Laut Statistik werden pro Einwohner in der Schweiz vom Haushaltsreiniger bis zum Körperpflegemittel jährlich etwa 100 Kilogramm Chemikalien verbraucht. Nahezu 100.000 der gegenwärtig existierenden chemischen Produkte befanden sich bereits vor 1981 auf dem Markt. Sie schliessen über 95 Prozent der derzeit produzierten Chemikalien ein und werden als Altstoffe charakterisiert. Obwohl viele dieser Substanzen Risiken für die Gesundheit und die Umwelt mit sich bringen können, wurden ihre physikalisch-chemischen und die toxikologischen Eigenschaften bisher nur unvollständig oder gar nicht untersucht. Detaillierte Risikobewertungen wurden für weniger als 100 Altstoffe durchgeführt. Es besteht also ein grosser Bedarf an praktikablen und aussagekräftigen Bewertungsmethoden für chemische Produkte. Mit dieser Fragestellung beschäftigt sich die

Arbeitsgruppe für Umwelt- und Sicherheitstechnologie am Laboratorium für Technischen Chemie der ETH Zürich. Die Wissenschaftler suchen nach Indikatoren, die umwelt-, gesundheits- und sicherheitsrelevante Eigenschaften von Chemikalien beschreiben und entwickeln Methoden zu ihrer Berechnung. Zwei wichtige Indikatoren, Persistenz und räumliche Reichweite, zeigen an, wie lange eine Substanz nach der Emission in der Umwelt verbleibt, beziehungsweise wie weit sie durch Wind- und Wasserströmungen transportiert wird.

1. Jede Fragestellung erfordert unterschiedlich viele Untersuchungsdetails

Um **Persistenz** und **Reichweite** zu bestimmen, verwenden die ETH Forscher Computermodelle, mit denen sich das Verteilungsverhalten von Stoffen in der Umwelt berechnen lässt. Solche Modelle bilden die Umweltmedien Boden, Wasser und Luft und die darin stattfindenden Prozesse in vereinfachter Weise ab. Wichtige Prozesse sind biologischer und chemischer Abbau, Austausch zwischen den Umweltmedien wie Verdampfung vom Boden in die Luft oder Deposition (Ablagerung) aus der Luft auf Blattoberflächen sowie der Transport mit Wind und Wasser. Die Modelle benötigen physikalisch-chemische Stoffeigenschaften wie Dampfdruck und Wasserlöslichkeit einschliesslich Abbauraten für die wichtigsten Abbauprozesse als Eingabedaten. Hinzu kommen Parameter, die die Umweltsysteme beschreiben. Das können die Regenrate in der Schweiz, der Kohlenstoffgehalt im Boden oder die Konzentration von Schwebstoffen im Wasser sein.

Sehr **hoch aufgelöste Modelle** beziehen viele unterschiedliche Prozesse und unterschiedliche lokale Umweltbedingungen ein und benötigen zur Quantifizierung sehr viele Stoff- und Umweltparameter. Umgekehrt lassen sich die Modelle auch sehr stark vereinfachen; zum Beispiel kann die ganze Schweiz zu einer einzigen "Box" reduziert werden. [Satz stimmt sonst nicht, da das Subjekt wechselt] Eine derartige Betrachtungsweise erfordert dann nur wenige Durchschnittswerte für Parameter wie die Regenrate und erzielt umgekehrt nur einen groben Durchschnittswert für die Stoffkonzentrationen. Welcher "Detaillierungsgrad" sowohl aussagekräftig genug als auch noch praktikabel ist, muss von Fall zu Fall bestimmt werden. Für diese Entscheidung sind neben den eigentlichen Modellrechnungen auch noch Unsicherheitsbetrachtungen notwendig, die Informationen über die Bandbreite der Resultate und die wichtigsten Einflussgrößen geben.



2. Hilfreiche Modelle für langlebige organische Schadstoffe

Bisher wurden in den meisten Fällen bei der Bewertung von Industriechemikalien wie beispielsweise Farbstoffe, Lösungsmittel und Detergenzien nur die Stoffe selbst beurteilt, nicht aber ihre Umwandlungsprodukte. (Bei Pflanzenschutzmitteln hingegen ist es gesetzlich vorgeschrieben, dass auch die Umwandlungsprodukte bewertet werden.) Viele organische Chemikalien bilden jedoch strukturell ähnliche Umwandlungsprodukte, bevor sie komplett zu Wasser, Kohlendioxid und Salzen mineralisiert werden. An der ETH wurde ein Modell zur Berücksichtigung solcher Umwandlungsprodukte in der Stoffbewertung ermittelt. Im Fall der Nonylphenol- Ethoxylate (**industrielle Detergenzien**) steigert sich die Persistenz von etwa 20 Tagen für den Ausgangsstoff allein auf ungefähr 100 Tage für die ganze Familie aus Ausgangsstoff und Umwandlungsprodukten.

Ein anderes Beispiel, bei dem Modellrechnungen mit einem globalen Verteilungsmodell hilfreich sein können, ist die Beurteilung von

existierenden **POPs (Persistent Organic Pollutants)**, an der die ETH in Kooperation mit dem BUWAL (Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft) beteiligt ist. Bei diesen Substanzen handelt es sich um sehr langlebige organische Schadstoffe, die innerhalb der Biosphäre zu toxischen Wirkungen führen oder führen können. Ein besonderes Problem ist die Akkumulation von POPs in arktischen Ökosystemen und in der Nahrung der arktischen Bevölkerung.

(Die FCKW - Fluorchlorkohlenwasserstoffe - fallen nicht unter die Bezeichnung POPs. Sie gehören zwar ebenfalls zu den persistenten organischen Verbindungen, entfalten aber ihre problematische Wirkung nicht innerhalb der Biosphäre, sondern in der Stratosphäre durch den Ozonabbau.)

In den letzten Jahren fanden unter der Federführung von UNEP (United Nations Environment Programme) Verhandlungen zur Formulierung einer internationalen Konvention über den Verzicht auf POPs statt. Darin eingeschlossen sind 9 Pestizide wie beispielsweise Aldrin, Chlordan und DDT, weiterhin polychlorierte Biphenyle und polychlorierte Dibenzodioxine und -furane. Im Mai 2001 wurde die Konvention in Stockholm unterzeichnet, und die Ratifizierung ist voraussichtlich 2004 abgeschlossen. Die Modellrechnungen ermöglichen es, die kritischen Eigenschaften der existierenden POPs wie auch weiterer POP-Kandidaten besser zu verstehen.

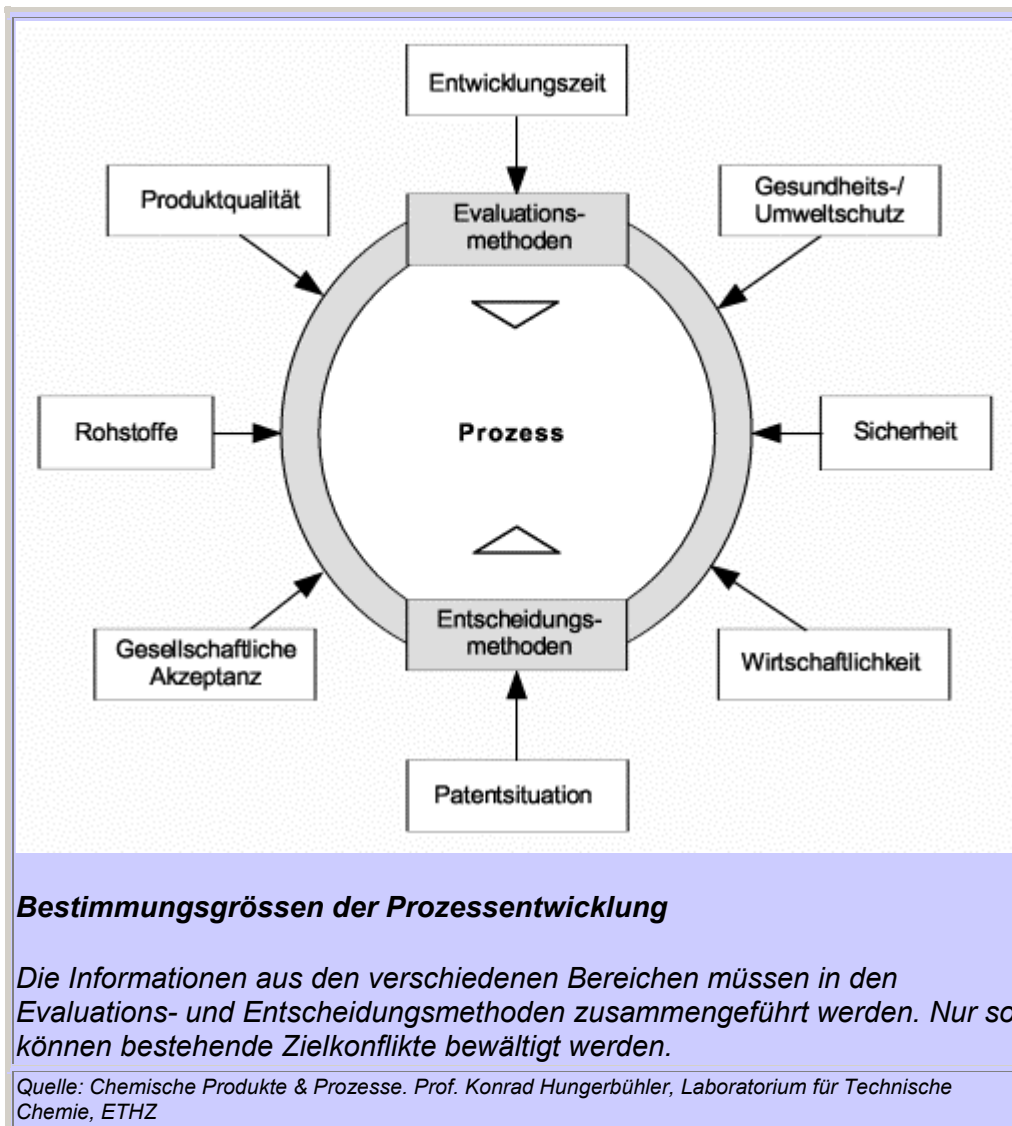
3. Umweltbezug als wichtige Dimension in Entscheidungsprozessen und Kommunikation

In der pharmazeutischen und agrochemischen Produktion werden meist unter grossem Einsatz von Rohstoffen und Energie relativ kleine Mengen wertvoller Wirksubstanzen mit möglichst grossem Wirkungspotential hergestellt. Dabei beträgt das Verhältnis der erzielten Produkteinheiten zu aufgewendeten Roh- und Hilfsstoffen bei der Herstellung von Grundchemikalien näherungsweise 1 zu 10, von Feinchemikalien etwa 1 zu 100, von Pharmazeutika 1 zu 1000.

Vorausschauende Risikoabschätzungen machen sich schon deshalb bezahlt, da die Kosten für ein neues Produkt von der Entwicklung bis zur Marktreife im Sektor Agrochemikalien etwa 200 Millionen Franken und im Bereich Pharmazeutika schätzungsweise bis zu einer Milliarde Franken betragen können. Üblicherweise nimmt der Freiraum für das Design eines Produktes vom Beginn der Entwicklungsarbeiten bis zum Zeitpunkt der beabsichtigten Markteinführung immer weiter ab. Parallel dazu steigen dann die Kosten für auftretende Fehler während des Entwicklungsgangs. Bei der Gestaltung und Bewertung chemischer Produkte und Technologien sollte daher von Anfang an die Bewertung der Umweltrelevanz in die Entwicklung eines industriellen Prozesses,

den Bau einer Anlage oder bei der Auswahl eines Produktes mit einbezogen werden.

Die Fortschritte der chemischen Industrie bei der Entwicklung umweltverträglicher und sicherer Prozesse und Produkte werden in den **GSU (Gesundheit, Sicherheit, Umwelt)-Berichten** der Unternehmen dokumentiert: Diese geben Auskunft über Stoff- und Energieströme, über den Verbrauch an Ressourcen wie Wasser und Energie sowie an Rohmaterial, über Emissionswerte, Abfall- und Abwasseraufkommen, Recycling-Daten und informieren u.a. mit Statistiken zur Unfallhäufigkeit über die Bereiche Gesundheit und Sicherheit. Um die Hauptauswirkungen einer Unternehmenstätigkeit auf die Umwelt abschätzen zu können, müssen die Zusammenhänge einer durch die Produktion verursachten Umweltveränderung richtig erkannt und der Zustand von Umweltsystemen sowie die Beteiligung Einzelner an der Umweltproblematik beschrieben werden.



4. Begriffserläuterungen von der integrierten Entwicklung bis zur Ökobilanz

In der chemischen Produktion wird mit unterschiedlichsten Stoffen unter vielfältigen chemischen und physikalischen Bedingungen gearbeitet, und häufig sind eingesetzte Stoffe giftig, korrosiv, brennbar oder explosionsgefährlich. Produktion, Lagerung und Transport erfolgen in Prozessen und Anlagen, in denen eine Vielzahl von technischen Störungen und menschliches Fehlverhalten denkbar sind. Jede chemische Produktion ist selbst im Normalbetrieb eine Quelle für umweltbelastende Abfälle und Emissionen, und viele chemische Produkte gelangen nach dem Gebrauch in die Umwelt.

Da zur Bearbeitung der Themen Umwelt und Sicherheit spezifische **Begriffe** in Gebrauch sind, sollen diese in diesem Kapitel kurz erläutert werden:

Ein **Umweltchemiker** beschäftigt sich mit der Verteilung, Umwandlung und Abbau anthropogener Chemikalien in der Umwelt wie auch mit ihrer analytischen Erfassung, ihrer Reaktivität unter unterschiedlichen Umweltbedingungen sowie ihrer Zirkulation zwischen den Umweltmedien. Zur Umweltchemie zählen auch die Identifikation und Charakterisierung der Umwandlungsprodukte sowie der Aufnahmewege in die Organismen und der Bioakkumulation. Neben Untersuchungen im Feld werden Laborexperimente und Computermodellierungen durchgeführt, in denen die Umweltbedingungen vereinfacht werden.

Bei der **Green Chemistry (Nachhaltige Chemie)** geht es um Forschung zur Optimierung chemischer Produkte und Prozesse mit dem Ziel, Umweltbelastungen von Beginn an zu vermeiden. Es handelt sich hierbei um ein Konzept, welches neben der Umweltchemie auch die Synthesewege und die Prozessführung einbezieht.

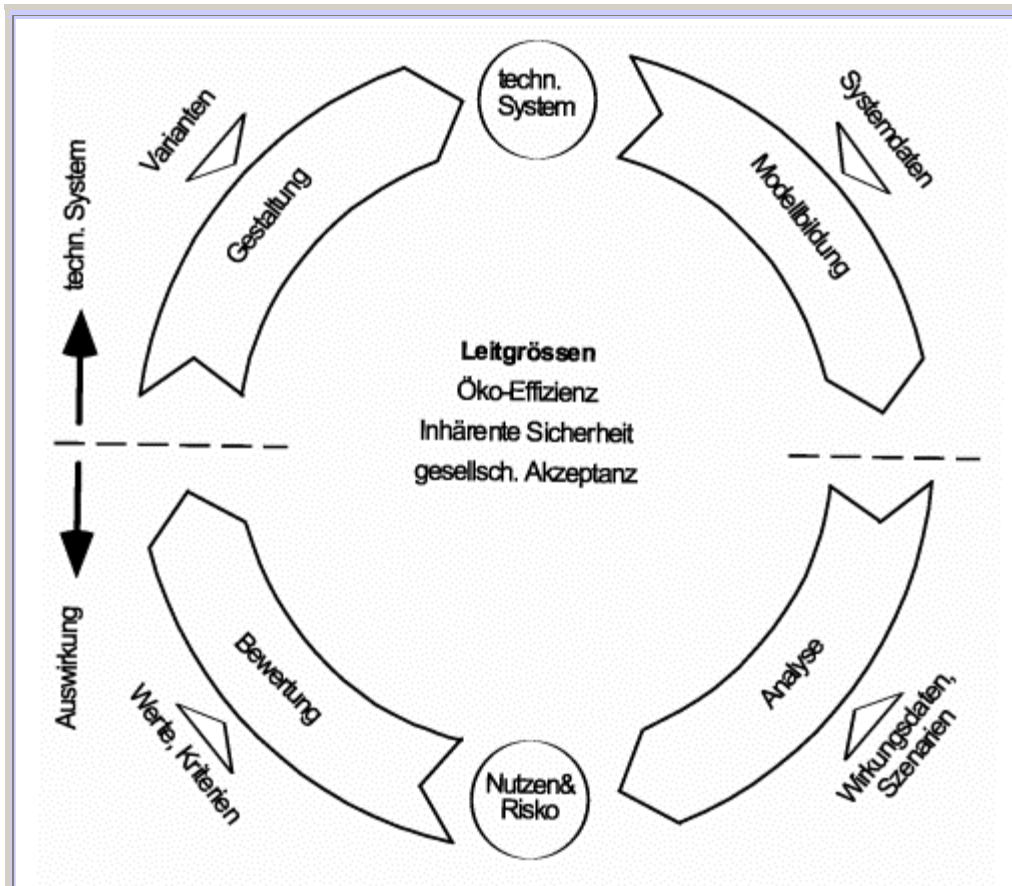
Die **integrierte Entwicklung** ist eine systemorientierte Methode, die von Anfang an Sicherheit und Umweltschutz neben Qualität und Ökonomie in das Produkt- und Prozessdesign einzufügen sucht. Drei Schlüsselgrößen spielen dabei eine wichtige Rolle: Die **Ökoeffizienz** beschreibt das Verhältnis von Ökonomie zu Ökologie. Ihr Mass hängt von der Höhe der Wertschöpfung pro belasteter Umwelt ab. Anstatt resultierende Abfälle und Emissionen später durch Umwelttechnik zu entsorgen, sollte bereits der Ressourceneinsatz minimiert werden.

Die **inhärente Sicherheit** stellt eine Produkt- bzw. Prozesseigenschaft dar, die eine Gefahr zwingend auf ein durch das Design vorbestimmtes und als tragbar erachtetes Mass begrenzt. Dieses wird durch die Grösse des verbleibenden Gefahrenpotentials bestimmt. Auch hier geht es darum, Gefahren zu eliminieren anstatt diese nachfolgend durch Kontroll- und Sicherheitsmassnahmen zu überwachen. Die

gesellschaftliche Akzeptanz kann als sozialer Konsens bezüglich der Akzeptabilität eines Risikos verstanden werden. Bei akzeptierten Risiken wird der erwartete Nutzen grösser eingeschätzt als der erwartete Schaden. Im Gegensatz zur rein technischen Risikoperspektive hängt die gesellschaftliche Risikoeinschätzung auch von der individuellen und der kollektiven Risikowahrnehmung ab, die stark von der persönlichen Situation und vom sozialen Kontext der Bewertung geprägt ist. Gesellschaftsrelevante Risiken sollten vorab mit Betroffenen diskutiert werden, damit Widerstände ein Projekt nicht nachträglich in Frage stellen.

Zur Handhabung dieser Leitgrössen braucht es ausserdem Umsetzungsinstrumente wie die **Ökobilanz**. Sie wird als systematisches Verfahren zur möglichst quantitativen Bestimmung der Umweltauswirkungen von Produkten und Prozessen im Betrachtungsrahmen ihres Lebenszyklus verstanden. Grundlage dieses Bewertungsinstrumentes ist die Bilanzierung von Stoff- und Energieverbrauch (Input) sowie den resultierenden Abfällen und Emissionen (Output) über den Lebenszyklus eines Produktes. Mit Hilfe der **Risikoanalyse** können vorausschauend Gefahren einbezogen und durch Analyse von möglichen Ursachen und Wirkungen das entsprechende Risiko ermittelt werden. Es folgt eine Risikobewertung und allenfalls eine Risikoreduktion durch gezielte Schutzmassnahmen. Dabei werden häufig Szenarien modelliert und auf Eintrittswahrscheinlichkeit und Schadenspotential hin analysiert und bewertet. Der **Nutzen-Risiko-Dialog** schliesslich ermöglicht in diesem Zusammenhang einen zielgerichteten Informationsaustausch bezüglich Risiko und einbezogenem Nutzen. Er betrifft sowohl Wahrnehmung und Bewertung von Risiken als auch die beim Risikomanagement notwendigen Gegen-Massnahmen.

Barbara Brauckmann



Modell der integrierten Entwicklung als iterativer Prozess.

Im Kontext der chemischen Industrie ist ein technisches System ein chemischer Produkt- oder Prozesslebenszyklus.

Quelle: Chemische Produkte & Prozesse. Prof. Konrad Hungerbühler, Laboratorium für Technische Chemie, ETHZ

Kasten: Fallstudien an der ETHZ zu Sicherheit und Umweltschutz in der Chemie

Seit dem Wintersemester 1994/95 wird an der ETH Zürich eine Vorlesung "Umweltchemie III: Sicherheit und Umweltschutz in der Chemie" gehalten. Der thematische Schwerpunkt der Vorlesung liegt bei der integrierten Produkt- und Prozessentwicklung. Parallel zur Vorlesung werden jeweils zwei bis drei Fallstudien durchgeführt, damit die Studenten der Fachrichtungen Chemie, Chemieingenieurwesen und Umweltwissenschaften lernen, die vorgestellten Methoden anzuwenden.

Als Themen werden möglichst reale Problemstellungen mit hohem Aktualitätswert für Industrie und Gesellschaft ausgewählt. Ausserdem werden Sicherheit und Umweltschutz vor allem aus der Perspektive der industriellen Entwicklung neuer Produkte und Prozesse thematisiert, was eine wichtige Ergänzung zur regulatorischen Perspektive ergibt.

Beispiele sind: Selektives Insektizid mit neuem Wirkungsmodus, Farbstoff für Baumwolle mit bi-reaktiver Matrixkopplung, Rotes Pigment für Autolacke, Identifizierung der Risiken im Lebenszyklus und Untersuchung der Risiken des Schienentransports von Reaktivstoffen, Tetrachlorethen als verbreitetes Lösungsmittel für die chemische Reinigung, Verbrennungsförderndes Benzinadditiv, Risikoabschätzung im Kontext der Produkthaftpflicht und Prozessrisikoanalyse für eine Kühlanlage mit Ammoniak sowie Energiebilanz und Emissionsbeurteilung für Produktionsprozesse von Farbstoffen und Pharmazeutika. Die Studierenden beginnen nach drei einführenden Vorlesungswochen mit der Fallstudie, die sich anschliessend über 9 Wochen erstreckt. Während dieser Zeit werden sie von einem Doktoranden der Arbeitsgruppe "Umwelt- und Sicherheitstechnologie" betreut. Als Fixpunkte gelten zwei Gruppenbesprechungen ("Milestones") und die Exkursion in die Unternehmen der Industriepartner mit Präsentation der eigenen Arbeit.

Als Datengrundlage dient ein Fallstudiendossier, welches den Terminkalender sowie die Beschreibung der Ausgangslage, der Aufgabenstellung und der Ziele enthält. Die Aufgabe der Studierenden besteht zunächst darin, anhand dieses Dossiers eine präzisierte Aufgabenstellung und einen gangbaren eigenen Lösungsweg zu erarbeiten. Zudem erhalten sie für ihre Arbeit teilweise Einsicht in weiterführende Daten aus den Unternehmen. Für Risikoanalysen und Ökobilanzen stehen Computerprogramme zur Verfügung.

Praktische Bearbeitung im Rahmen der Fallstudie "Pymetrozine"

Ein Beispiel einer Fallstudie stellt die Problematik des "Pymetrozine" dar, eines hochaktiven Insektizids zur Bekämpfung von Blattläusen, weissen Fliegen und Zikaden auf Kulturpflanzen. Wie die meisten Agrochemikalien steht auch Pymetrozine im Spannungsfeld zwischen nützlichen Eigenschaften und möglichen negativen Nebeneffekten für Mensch und Umwelt. Spezifische Probleme bei Pflanzenschutzmitteln sind mangelnde Selektivität, zu hohe Persistenz, Rückstände in Nahrungsmitteln und Umweltkompartimenten, Resistenz der Zielorganismen und das Auftreten von Folgeprodukten. Es sollte u.a. überprüft werden, inwieweit die Entwicklung von Pymetrozine die anvisierten Innovationsziele wie Schutz der Nützlinge, geringe Applikationsmengen, niedrige Toxizität, geringer Umwelteinfluss, sowie tiefe Kosten, aber auch soziale Akzeptanz, erreicht hat. Um dies besser beurteilen zu können, wurde die Substanz jeweils mit einem Referenzprodukt auf Carbamat-Basis mit dem fiktiven Namen "Sukmeron" verglichen.

In einem ersten Teil der Studie wurde anhand des Synthesediagramms von Pymetrozine eine qualitative Prozessrisikoanalyse vorgenommen. Dabei wurden u.a. Phosgen, Hydrazin und Chloraceton als kritische Stoffe identifiziert. Phosgen, das für den Ringschluss von Acetylhydrazid verwendet wird, ist sehr reaktiv und toxisch. Anhand einer Fehlerbaumanalyse mit Phosgenaustritt als Top-Ereignis wurden mehrere Sicherheitsmassnahmen vorgeschlagen wie die in situ Produktion von Phosgen, das Arbeiten mit zweiten Barrieren, die Installation von Gasetektoren, sowie die Verwendung von unabhängigen Belüftungssystemen. Davon war die in situ Produktion die einzige Massnahme, die der inhärenten Prozesssicherheit dient.

In einem zweiten Teil musste das Produkt anhand verschiedener Schlüsselparameter wie Austragsmenge, Wasserlöslichkeit, K_H , K_{ow} , Selektivität, Akuttoxizität hinsichtlich der Sicherheit für Mensch und Umwelt geprüft werden. Pymetrozine stach dabei durch seine hohe Selektivität sowie die geringen Konzentrationen hervor, die zur Schädlingsbekämpfung eingesetzt werden müssen. Aus diesem Grund ist der Schutz der Nützlinge überdurchschnittlich gut gewährleistet. Weiter zeigte Pymetrozine aufgrund seines Wirkmechanismus keine Kreuzresistenzen und erreichte so eine hohe Aktivität und Effizienz. Als weitere positive Eigenschaften galten tiefe chronische und akute Toxizität, die geringe Persistenz, sowie die kleine Bioakkumulations-Wahrscheinlichkeit mit einem $\log K_{ow}$ unter 3.

Aufbauend auf der Analyse der Schlüsselparameter wurde anschliessend eine möglichst vollständige Risikobeurteilung von _____

Pymetrozine bezüglich der Konsumenten- und Umweltsicherheit erstellt und mit der Risikobeurteilung für Sukmeron verglichen. Die dazu benötigten PEC/PNEC-Berechnungen wurden mit einem Level-III-Fugazitätsmodell durchgeführt. Dabei wurden die Ergebnisse einer eingehenden Sensitivitätsanalyse zur Identifizierung der einflussreichsten Eigenschaften von Pymetrozine unterzogen. Die Untersuchungen ergaben, dass das Produkt sowohl hinsichtlich Konsumenten- als auch Umweltschutz als weitgehend unbedenklich eingestuft werden kann.

Im letzten Teil der Arbeit sollten sich die Studenten anhand des gesammelten Wissens Überlegungen zu Grundsatzfragen der Nachhaltigkeit und der Eigenverantwortung von Herstellern von Insektiziden machen, inwiefern die gesetzten Innovationsziele erreicht wurden, und ein Argumentenkatalog mit den Vor- und Nachteilen von Pymetrozine erstellen. Als Fazit kann die Substanz aufgrund ihrer Eigenschaften als Innovation auf dem Gebiet der Insektizide betrachtet werden. Einziger Kritikpunkt war der vergleichsweise hohe Preis, der auf die Frage führt, ob ein innovatives Produkt schliesslich auch für die 3. Welt verfügbar und bezahlbar ist.

Literatur

- Scheringer, M.: Persistenz und Reichweite von Umweltchemikalien, Wiley-VCH, Weinheim (1999; erweiterte englische Auflage 2002).
- Hungerbühler, K., Scheringer, M.: mündliche Mitteilungen.
- Hungerbühler, K.: Fallstudien an der ETH Zürich (s.u.).
- Hungerbühler, K., Ranke, J., Mettier, T.: Chemische Produkte und Prozesse - Grundkonzepte zum umweltorientierten Design. Springer, Heidelberg (1998).