



Leitfaden Chlorierte Kohlenwasserstoffe (CKW)

Stoffeigenschaften

ChloroNet, ein Projekt des Bundesamtes für Umwelt und der Kantone Zürich und St.Gallen

Mai 2008 (aktualisierte Version September 2009)

Impressum

Autoren BMG Engineering AG, Schlieren: C. Munz, A. Häner
im Auftrag des Bundesamtes für Umwelt BAFU

Jahr Mai 2008 (aktualisiert: September 2009)

Inhalt

Vorwort	1
1 Einsatz von chlorierten Kohlenwasserstoffen (CKW).....	1
1.1 Geschichtliches und Produktionsmengen	1
1.2 Anwendungen von CKW	3
2 Stoffeigenschaften von CKW	6
2.1 Molare Masse	6
2.2 Dichte	6
2.3 Dampfdruck	7
2.4 Wasserlöslichkeit.....	7
2.5 Luft/Wasser Verteilung	7
2.6 Feststoff/Wasser Verteilung	8
2.7 Übersichtsdiagramme Stoffeigenschaften.....	9
3 Umweltverhalten	13
3.1 Verteilung im gesättigten und ungesättigten Untergrund	13
3.1.1 Ungesättigte Zone	15
3.1.2 Gesättigter Untergrund (Grundwasser)	17
3.2 Transportverhalten	18
3.2.1 Infiltration und Verflüchtigung (ungesättigter Untergrund).....	18
3.2.2 Transport im Grundwasser	20
3.2.3 DNAPL.....	21
3.3 Biologische Abbaubarkeit.....	23
3.3.1 Erforderliche Randbedingungen.....	24
3.3.2 Abbauwege.....	24
3.3.3 Kinetik.....	26
3.4 Empfehlungen für Felduntersuchungen	28
4 Richt- und Grenzwerte	28
4.1 Grundlagen und Herleitung	29
4.1.1 Slope Factor	30
4.1.2 Reference Dose.....	30
4.1.3 MAK-Schweiz	31
4.1.4 Ökotoxikologie (PNEC).....	31
5 Empfohlene Informationsquellen.....	33
6 Stoffdatenblätter	34

Vorwort

Mit chlorierten Kohlenwasserstoffen sind in diesem Leitfaden die aliphatischen chlorierten Kohlenwasserstoffe des Anhangs 1 der Altlastenverordnung gemeint, d.h die „klassischen“, meist leichtflüchtigen Halogenkohlenwasserstoffe (LHKW), inkl. 1,2-Dibromethan. Nicht behandelt werden chlorierte aromatische Verbindungen (z.B. Chlorbenzole, PCB) sowie mit anderen funktionellen Gruppen (z.B. Amine) substituierte aliphatische chlorierte Verbindungen.

1 Einsatz von chlorierten Kohlenwasserstoffen (CKW)

Dieses Kapitel vermittelt einen Einblick in die Umstände, unter welchen Belastungen mit CKW im Untergrund und im Grundwasser entstanden sind. Es wird über die Geschichte, den zeitlichen Verlauf der Produktionsmengen sowie die häufigsten Anwendungen der CKW berichtet. Dies ist hilfreich, um das Risiko bzw. die Wahrscheinlichkeit des Vorhandenseins von CKW-Belastungen im Untergrund eines Standorts aufgrund der früheren Nutzungen abzuschätzen.

1.1 Geschichtliches und Produktionsmengen

Einige wenige CKW wurden erstmals bereits im 19. Jahrhundert synthetisiert (z.B. Tetrachlorethen wurde 1821 von Michael Faraday synthetisiert). Die kommerzielle Nutzung von CKW erfolgte in Europa erst etwa ab den 1920er Jahren.

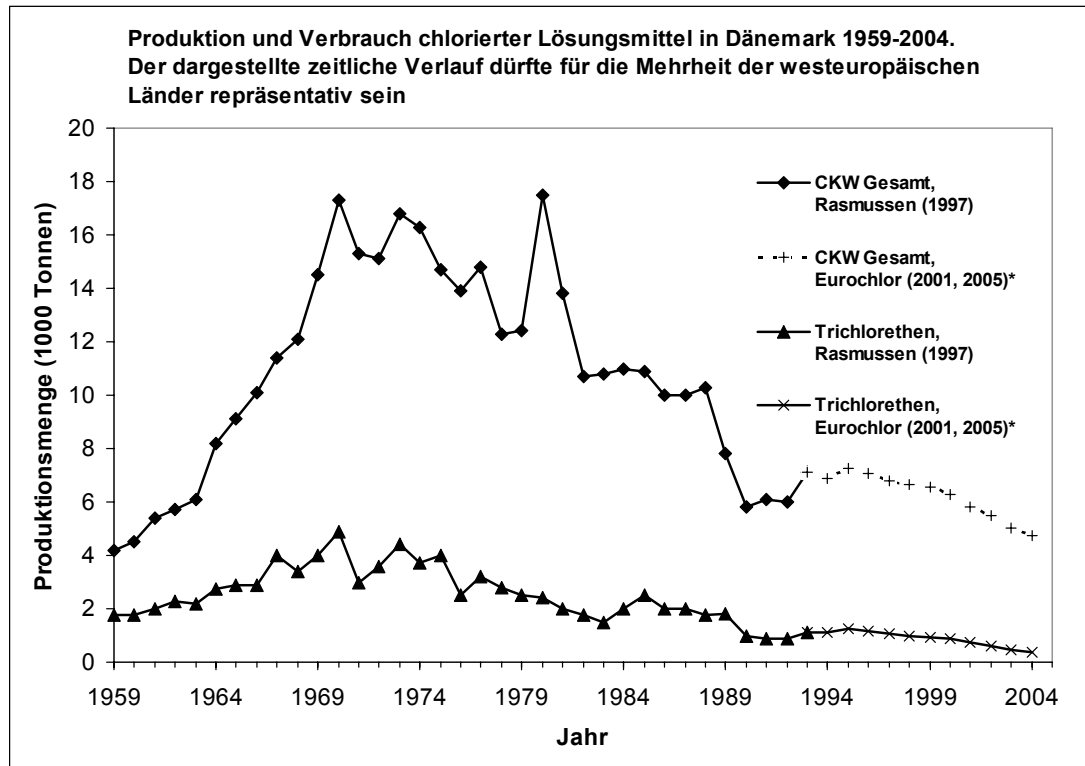
Die vorzüglichen Eigenschaften der CKW als gute Lösungsmittel für Fette, Öle und andere Organika wurden schnell erkannt und mehr und mehr in kommerziellen Anwendungen umgesetzt (z.B. Metallentfettung und chemische Reinigung). Hinzu kam, dass die CKW (insbesondere im Vergleich zu Benzin) keinen unangenehmen Geruch aufweisen, farblos sind, unter normalen Bedingungen kaum feuergefährlich und trotz ihrer Flüchtigkeit relativ einfach handhabbare Flüssigkeiten (Ausnahme: Vinylchlorid) sind und darüber hinaus auch noch kostengünstig waren und weiterhin sind.

Insbesondere ab ca. 1940 bis etwa Ende der 1970er Jahre ist die Produktion von CKW stark gestiegen (siehe Abb. 1, unten). Dies u.a. weil auch die chemische, die pharmazeutische sowie die Lebensmittelindustrie die Vorzüge der CKW als Lösungsmittel zur Extraktion und Synthetisierung vieler anderer Stoffe verwendet(e) (Bsp: Extraktion von Koffein aus Kaffeebohnen, Extraktion von Duftstoffen aus Pflanzen, Verarbeitung von Ölen und Fetten, Synthetisierung von Schädlingsbekämpfungsmitteln, etc.). Chloroform wurde in dieser Periode sogar als Narkosemittel verwendet.

Bis zu diesem Zeitpunkt (Ende 1970er Jahre) wurden CKW häufig in mehr oder weniger offenen Systemen verwendet. Eine aus heutiger Sicht umweltgerechte Handhabung und Entsorgung der Stoffe kann daher im Allgemeinen kaum angenommen werden. Denn es war ebenfalls erst in den 1970er Jahren, in denen die möglichen Gefahren von CKW gegenüber Mensch und Umwelt (insbesondere hinsichtlich des

Arbeitsschutzes und der Emissionen bzw. Immissionen in Luft und Gewässer) erkannt wurden.

Ab ca. 1980 wurden die CKW mehr und mehr in geschlossenen Systemen (im Kreislauf) angewendet oder sie wurden teilweise auch durch andere, weniger problematische Lösungsmittel ersetzt (z.B. superkritisches Kohlendioxid, synthetische Paraffine, Alkohole, Ester, etc.). Einige CKW wurden in der Zwischenzeit verboten (z.B. die Verwendung von Tetrachlormethan und 1,1,1-Trichlorethan ist seit 1996 mit wenigen Ausnahmen verboten, da diese Stoffe zu einem signifikanten Abbau der Ozonschicht führen).



* Die Daten für Dänemark ab 1994 wurden aus den Produktionsdaten (= Summe DCM, TCE und PER) für West-Europa für die gleiche Zeitperiode geschätzt unter der Annahme, dass das Verhältnis von 1993 zwischen den zwei Datensätzen konstant bleibt.

Als eine Konsequenz davon ist die Produktion (und Verbrauch) von CKW in Europa seit Mitte der achtziger Jahre am Sinken (vgl. Abb. oben).

Mit dem steigenden Einsatz geschlossener Geräte mit Rückgewinnung und Recycling der CKW sowie mit dem Inkrafttreten relevanter Umweltvorschriften (USG ab 1. Jan. 1985) ist das Risiko der Entstehung neuer Untergrund- und Grundwasserkontaminationen während der 1980er und 1990er Jahre signifikant gesunken.

Aus Sicht der Altlastenbearbeitung: Wichtig sind Standorte mit relevanten Betriebs-tätigkeiten zwischen etwa 1920 bis maximal 1990, die kritischste Periode ist die Zeit von 1950 - 1985.

1.2 Anwendungen von CKW

Die Anwendungen von CKW können in die folgenden 4 Hauptgruppen eingeteilt werden:

- Als Reinigungs- und Lösungsmittel (Entfetten, Chemische Reinigung)
- Als Lösungsmittel in der chemischen Produktion
- Als Lösungsmittel in Produkten (z.B. Farben, Klebstoffe)
- Zur Herstellung von Kunststoffen (PVDC (Polyvinylidenchlorid) und insbesondere PVC (Polyvinylchlorid))

Eine Übersicht der möglichen CKW-Anwendungen nach Branchen bzw. nach Prozessen ist aus den folgenden zwei Tabellen zu entnehmen.

Es ist zu beachten, dass einerseits in einer Branche verschiedene Prozesse vorkommen können und andererseits bei einzelnen Prozessen verschiedene bzw. mehrere CKW eingesetzt werden können.

Aus diesem Grund ist es empfehlenswert, immer möglichst präzise Informationen über die früheren Tätigkeiten eines Betriebes einzuholen. Sehr wertvoll sind direkte Auskünfte von langjährigen oder ehemaligen Mitarbeitern, die auch über die damalige Handhabung und den effektiven Verbrauch der Lösungsmittel Bescheid wissen. Wenn solche detaillierten Informationen nicht verfügbar sind, führt die Einschätzung von möglichen Belastungen des Untergrundes über Prozesse meist zu einem genaueren Bild als die Branchenzugehörigkeit.

Übersicht der möglichen CKW Anwendungen nach Branchen

Branchen*	1,2-Dibromethan	1,1-Dichlorethan	1,2-Dichlorethan	1,1-Dichlorethen	Cis-1,2-Dichlorethen	Trans-1,2-Dichlorethen	Dichlormethan	1,2-Dichlorpropan	1,1,2,2,-Tetrachlorethan	Tetrachlorethen	Tetrachlormethan	1,1,1-Trichlorethan	Trichlorethen	Trichlormethan	Vinylchlorid
Allgemeines Autogewerbe	+	+	+	+			+	+	+	++	+	++	++		
Einzel- und Detailhandel mit flüssigen Brenn- u. Treibstoffen, Tankstellen	+		+					+		+					
Grosshandel mit flüssigen Mineralölerzeugnissen	+		+					+		+					
Mineralölindustrie	+	+	+	+			+	+	+	+	+	++	++		
Herstellen von Textilien Bekleidung und Wäsche		+		+	+	+	++	+	+	++	+	++	++		
Wäschereien, Glättereien, chemische Reinigungen					+	+	+	+		++	+	+	+		
Holzbearbeitungsindustrie		+		+			+	+	+	+	+	++	+		
Herstellung und Verarbeitung von Kunststeinen, Tiefbau, Hochbau, allgemeines Bauhauptgewerbe, Werkhöfe	+	+	+	+	+	+	+	+	+	++	+	++	+		
Kachelofen und Cheminéebau		+		+	+	+	+	+	+	++	+	++	++		
Herstellen von Keramischen Erzeugnissen, Herstellung und Verarbeitung von Glas	+	+	+	+			+	+	+	+	+	+	+		
Herstellung von Uhren, Herstellung von Maschinen und Präzisionswerkzeuge		+		+	+	+	+	+	+	++	+	++	++		
NE-Metallerzeugung und -Verarbeitung, Giessereien und Umschmelzwerke	+	+	+	+			+	+	+	++	+	++	++		
Eisen- und Stahlwerke, Walzwerke	+	+	+	+			+	+	+	++	+	++	++		
Grosshandel/ Detailhandel	siehe Tabellenfusnote														
Reparatur von Gebrauchsgütern		+		+	+	+	+		+	++	+	++	++		
Grosshandel mit Stahl, NE-Metallen, Metallhalbfabrikaten, Metallwaren	+	+	+	+	+	+	+	+	+	++	+	++	++		
Elektrotechnik, Elektronik, Feinmechanik, Optik		+		+	+	+	++	+	+	++	+	++	++	+	
Herstellung von Produktionsmaschinen, Herstellung von Büromaschinen, EDV-Geräten und -Einrichtungen		+		+	+	+	++	+	+	++	+	++	++	+	
Handel mit Reststoffen	siehe Tabellenfusnote														
Maschinen und Fahrzeugbau, Herstellung von landwirtschaftlichen Maschinen und Baumaschinen	+	+	+	+			+	+	+	++	+	++	++		
Satz und Reproduktionsbetriebe, Druckereibetriebe, Buchbindereien		+		+	+	+	++	+	+	++	++	++	++		
Oberflächenveredelung, Härtung	+	+	+	+			+	+	+	++	+	++	++		
Herstellung von chemischen Erzeugnissen, Kunststoff und Kautschukwaren	+	+	++	+	+	+	++	+	+	+	+	+	+	+	+
Herstellung von Lederwaren und Schuhen		+		+			+		+	++	+	++	++		
Herstellung von Papier und Papierwaren	+	+	+	+	+	+	+	+	+	++	+	++	++		

++ wahrscheinlich

+ möglich

leer unwahrscheinlich

* Quellenangabe: Branchenliste gemäss Vollzugshilfe BUWAL „Erstellung des Katasters der belasteten Standorte“, BUWAL (2001)

Beim Gross-/Detailhandel und Handel mit Reststoffen ist die mögliche Anwendung von CKW sehr unterschiedlich, da diese direkt abhängig von den gehandelten Stoffen und Produkten ist. Allgemein gilt, die Relevanz der CKW-Anwendung ist analog der Branchen mit denen die Firma gehandelt hat. Z.B. Grosshandel von Farben (Herstellung von chemischen Erzeugnissen), Druckereiprodukte (Druckerei) oder Handel mit Reststoffen aus dem Autogewerbe (Autogewerbe).

Übersicht der möglichen CKW Anwendungen nach Prozessen

Prozesse	AWEL Prozess Nr. #	1,2-Dibromethan	1,1-Dichlorethan	1,2-Dichlorethan	1,1-Dichlorethen	Cis-1,2-Dichlorethen	Trans-1,2-Dichlorethen	Dichlormethan	1,2-Dichlorpropan	1,1,2,2-Tetrachlorethan	Tetrachlorethen	Tetrachlormethan	1,1,1-Trichlorethan	Trichlorethen	Trichlormethan	Vinylchlorid
Mechanisch Bearbeiten (Bohren, Drehen)	9		+		+			+		+	++	+	++	++		
Malen, Lackieren, Spritzen, Tauchen, Coaten	14				+					+			++	++		
Entfetten, Reinigen, Waschen	17		+		+			+		+	++	+	++	++		
Herstellung u. Bestückung von Leiterplatten	26							++			+		++		+	
Druckplatten, Clichés, Filme herstellen	31							++		+	++		+			
Relais und Schalter herstellen	32							+			+		+		+	
Tankanlagen, Umfüllstationen, Rohrleitungen	37	++		++					+		+					
Kälte erzeugen	39					+	+	+	+							+
Altöle aufbereiten	43					+	+	+			+					+
Färben (Textilien, Papier, Leder)	48					+	+			+			++	++		
Bedrucken (Papier, Textilien)	49					+	+			+	+		++	++		
Chem. Ausrüsten, Konservieren, Imprägnieren	50				+								+	+		
Aussenanlagen von Bewuchs freihalten	51					+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Film- und Bildverarbeitung	56							++		+						
Umgang mit verbleitem Benzin	-	++		++					+							
Bekämpfung von Schädlingen mit gasförmige Insektizide	-	++	+					+	+			+		+	+	
Chemische Produktion	-	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Abbeizen von Farben	-		+		+			+	+	+	+					
Herstellung von PVC u. PVDC	-				+											++
Extraktion von wärmeempfindlichen Stoffen z.B. Koffein	-					+	+	++			+			+	+	
Fette und Oele Aufbereiten	-					+	+	+		+	++			++		

++ Wahrscheinlich (bzw. wurde primär bei diesen Prozessen eingesetzt)

+ möglich

leer unwahrscheinlich

Quellenangabe: Nummerierte Prozesse aus AWEL (2004), Baudirektion Kt. ZH: Anleitung zur Erfassung und Beurteilung der Betriebsstandorte: Verfahrensablauf, Prozesstypen und Kriterienkatalog

2 Stoffeigenschaften von CKW

Das Verhalten eines Stoffes in der Umwelt ist bestimmt durch seine chemischen und physikalischen Eigenschaften. In diesem Kapitel werden die folgenden Stoffeigenschaften definiert, kurz erläutert und deren Relevanz aus Sicht der Altlastenbearbeitung von CKW-belasteten Standorten aufgezeigt:

- Molare Masse
- Dichte
- Dampfdruck
- Wasserlöslichkeit
- Luft/Wasser Verteilung (Henry Konstante)
- Wasser/Feststoff Verteilung

Die wichtigsten Stoffeigenschaften der CKW werden in vier Übersichtsdiagrammen zusammengefasst.

2.1 Molare Masse

Molare Masse (g/mol) (auch Molekulargewicht genannt): Die Molare Masse einer Substanz ist die Masse (in Gramm) eines Mols der Substanz.

Ein Mol enthält eine definierte Anzahl Moleküle (6.02×10^{23}) einer beliebigen Substanz. Chemische Reaktionen werden normalerweise in Mol ausgedrückt, z.B. $1 \text{ Mol A} + 1 \text{ Mol B} \rightarrow 1 \text{ Mol C}$. Der Umrechnungsfaktor, um die erforderliche Masse (g) der Ausgangsstoffe A und B sowie die Masse von Stoff C zu berechnen ist die molare Masse.

Beispiel: Um den biologischen Abbau richtig (und schneller) zu interpretieren, sollten vorzugsweise molare (z.B. Mol/L) statt klassische Massen-Konzentrationen (z.B. g/L) verwendet werden. So wird z.B. der (kumulative) Abbau eines Mols Tetrachlorenchen (PER) insgesamt zu einem Mol Trichlorethen (TRI) führen, dies wiederum zu einem Mol 1,2-cis- und 1,2-trans-Dichlorethen (DCE), anschliessend zu einem Mol Vinylchlorid (VC), usw. Andererseits führt der (kumulative) Abbau eines Gramms PER

- zu 0.79 g TRI (= $131/165 = \text{Molare Masse TRI} / \text{Molare Masse PER}$) bzw.
- zu 0.58 g Cis- & Trans-DCE (= $96/165 = \text{Molare Masse DCE} / \text{Molare Masse PER}$) bzw.
- zu 0.38 g VC (= $62/165 = \text{Molare Masse VC} / \text{Molare Masse PER}$), usw.

2.2 Dichte

Dichte (kg/L): Die Dichte ist die Masse einer Substanz in einem definierten Volumen. Z.B. ein Liter Wasser hat eine Masse von rund einem kg und daher eine Dichte von 1 kg/L.

Die Dichte ist temperaturabhängig und nimmt mit steigender Temperatur fast immer

ab. In der Regel haben chlorierte Kohlenwasserstoffe eine grössere Dichte als jene von Wasser (>1 kg/L). Wenn die maximale Aufnahme eines Stoffes in Wasser überschritten wird (\geq Wasserlöslichkeit), verbleibt eine nicht-wässrige organische Phase von CKW (auch DNAPL genannt), welche auf Grund der grösseren Dichte sinkt (umgekehrte Situation wie bei den Mineralölen).

2.3 Dampfdruck

Dampfdruck (Pa): Der Dampfdruck ist ein Mass für die Tendenz einer Substanz in die Gasphase zu gehen. Anders ausgedrückt ist es der Gasdruck (bzw. die Konzentration in der Gasphase), welcher die Substanz in einem geschlossenen Zweiphasen-System, bestehend aus der reinen Substanz und Luft, ausübt.

Der Dampfdruck sollte in Pascal ($\text{Pa} = \text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$) angegeben werden. Oft werden weiterhin Torr ($1 \text{ Torr} = 1 \text{ mm Hg} = 133.332 \text{ Pa}$) oder atm bzw. bar ($1 \text{ atm} = 101'325 \sim 10^5 \text{ Pascal}$) verwendet. Eine Substanz siedet wenn ihr Dampfdruck den Umgebungsdruck erreicht (Wasser hat einen Dampfdruck von etwa 1 Atmosphäre bei 100°C). Weist eine Substanz (bei atmosphärischem Druck) einen Dampfdruck $>10^5 \text{ Pa}$ auf, bedeutet dies, dass der Stoff bei der gegebenen Temperatur als Gas existiert, wie z.B. Vinylchlorid. Der Dampfdruck einer Substanz ist stark temperaturabhängig.

2.4 Wasserlöslichkeit

Wasserlöslichkeit (mg/L): Die Wasserlöslichkeit ist die maximale Menge einer Substanz (in Gramm bzw. in Mol), die sich in einem gegebenen Volumen reinem Wassers vollständig auflösen kann.

Im Temperaturbereich von $10 - 25^\circ\text{C}$ ändert sich die Wasserlöslichkeit der einzelnen CKW nicht signifikant. Wird die Wasserlöslichkeit überschritten, besteht nebst der wässrigen Phase eine getrennte (meist durchsichtige aber sichtbare) organische Phase (DNAPL). Im Allgemeinen gilt: mit zunehmender Anzahl Chloratome sinkt die Wasserlöslichkeit. **Chlorethene** sind weniger wasserlöslich als **Chlorethane**, und die Mobilität nimmt mit zunehmender Wasserlöslichkeit ebenfalls zu.

2.5 Luft/Wasser Verteilung

Luft/Wasser Verteilung: Die Verteilung einer Substanz zwischen der Luftphase und der Wasserphase (eines Zweiphasen System) im Gleichgewichtszustand wird durch die **Henry-Konstante (H, oder auch K_H)** oder den Luft/Wasser Verteilungskoeffizienten beschrieben. Die Henry-Konstante wird meistens als dimensionsloser Parameter angegeben:

$$H = \frac{[\text{Gleichgewichtskonzentration in der Luftphase (Mol/L)}]}{[\text{Gleichgewichtskonzentration in der Wasserphase (Mol/L)}]} \quad [-]$$

Je grösser der Wert der Henry-Konstante, desto „flüchtiger“ ist der Stoff in einer wässrigen Lösung bzw. desto einfacher kann dieser aus dem Wasser ausgetrieben bzw. aus dem ungesättigten feuchten Untergrund entfernt werden (Sanierungsverfahren: Strippen, Bodenluftabsaugung). Für beschränkt wasserlösliche Stoffe (Was-

serlöslichkeit $\sim <10'000$ mg/L) wie die meisten CKW, lässt sich die Henry Konstante wie folgt berechnen:

$$H = \frac{[\text{Dampfdruck} (Pa)]}{[\text{Wasserlöslichkeit} (mol/m^3)]} \cdot \frac{1}{RT} [-]$$

Wobei R = universelle Gaskonstante ($\text{Joule} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = \text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$) und T = absolute Temperatur in Grad Kelvin. Dementsprechend bzw. ähnlich dem Dampfdruck weist die Henry Konstante eine relativ starke Temperaturabhängigkeit auf (Faustregel für leichtflüchtige CKW: ca. Faktor 1.6 zwischen 10 und 20°C). Da viele CKW im Vergleich zu anderen Stoffgruppen (z.B. PAK) sowohl einen hohen Dampfdruck wie auch hohe Henry Konstanten aufweisen, werden diese oft als leichtflüchtige chlorierte Kohlenwasserstoffe (LCKW) bezeichnet.

Die Henry Konstante ist ein wichtiger Parameter um die Verteilung und das Transportverhalten eines Schadstoffes im ungesättigten Untergrund zu ermitteln bzw. abzuschätzen.

2.6 Feststoff/Wasser Verteilung

Feststoff/Wasser Verteilung: Der Verteilungskoeffizient (K_{OC}) beschreibt die Verteilung einer Substanz im Gleichgewicht zwischen dem organischen Kohlenstoff (vgl. Englisch Organic Carbon) des Bodens oder Untergrundmaterials und der umliegenden Wasserphase. Die Adsorption von CKW an den mineralischen Phasen ist meistens schwach und wird in der Regel vernachlässigt. Der Verteilungskoeffizient ist wie folgt definiert:

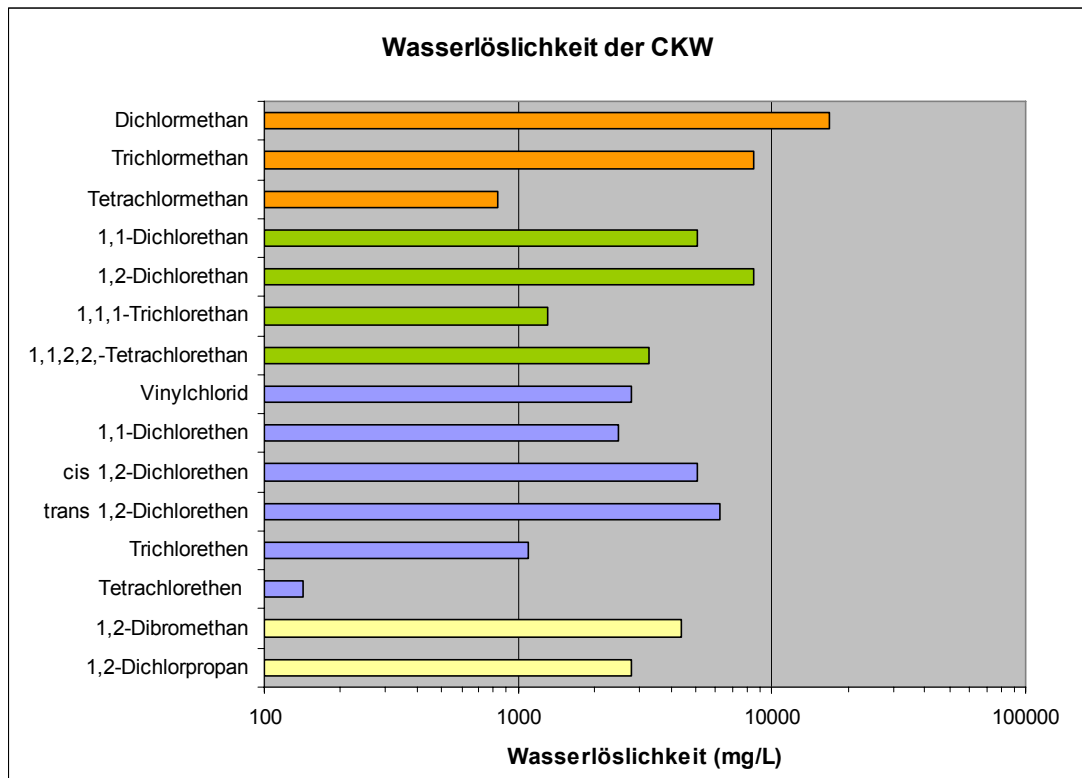
$$K_{oc} = \frac{[\text{Gleichgewichtskonzentration in organischem Kohlenstoff} (Mol/kg)]}{[\text{Gleichgewichtskonzentration in der Wasserphase} (Mol/L)]}$$

Die häufigsten Einheiten für K_{OC} sind daher kg/L. Mit dem K_{OC} wird die so genannte Adsorptionsfähigkeit oder –Kapazität eines Stoffes charakterisiert. Je grösser der K_{OC} , desto stärker adsorbiert der Stoff am organischen Kohlenstoff bzw. am Untergrundmaterial; d.h. je geringer die Mobilität desto langsamer das Transportverhalten im Untergrund. Als Faustregel gilt ferner: je kleiner die Wasserlöslichkeit desto grösser der K_{OC} . Der K_{OC} weist keine signifikante Temperaturabhängigkeit auf.

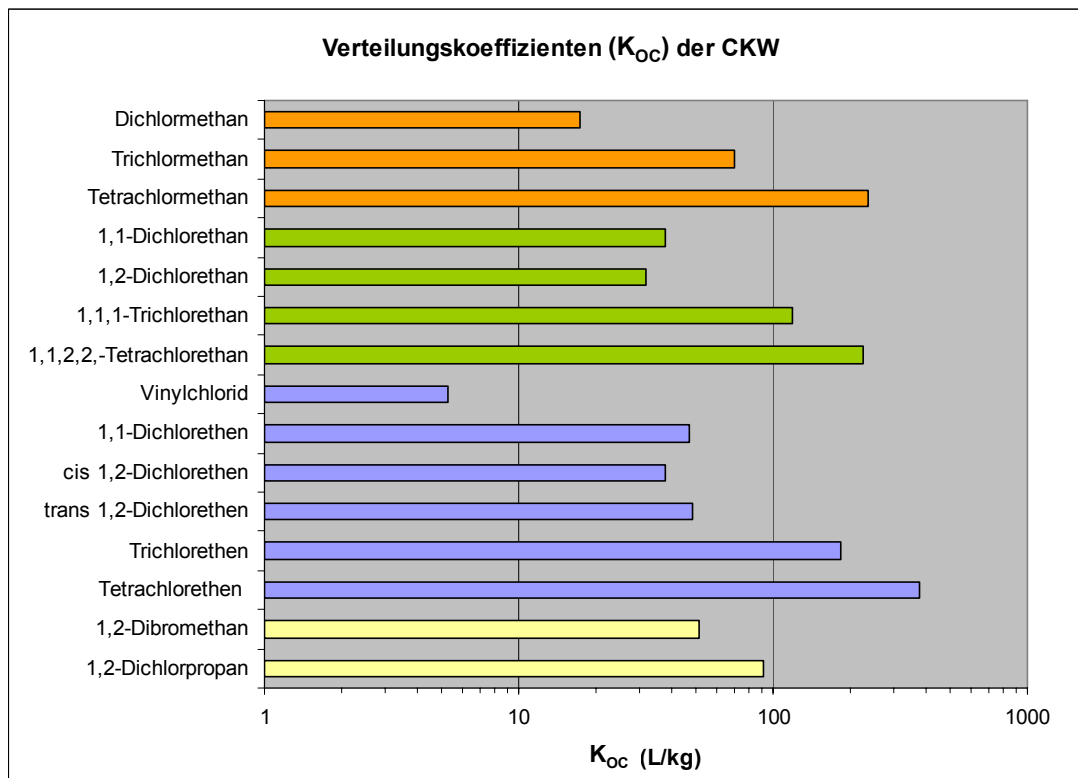
2.7 Übersichtsdiagramme Stoffeigenschaften

Auf den folgenden Seiten werden die für das Umweltverhalten wichtigsten Stoffeigenschaften der CKW mit Hilfe von vier Abbildungen zusammengefasst. In den Abbildungen sind die Stoffe nach Stoffklasse (Chlormethane, Chlorethane, Chlorethene und sonstige Stoffe) sortiert. Aus den Abbildungen können daher die groben Unterschiede zwischen den Stoffklassen sowie der Einfluss der Anzahl Chlor-Atome auf die Stoffeigenschaften abgeleitet werden.

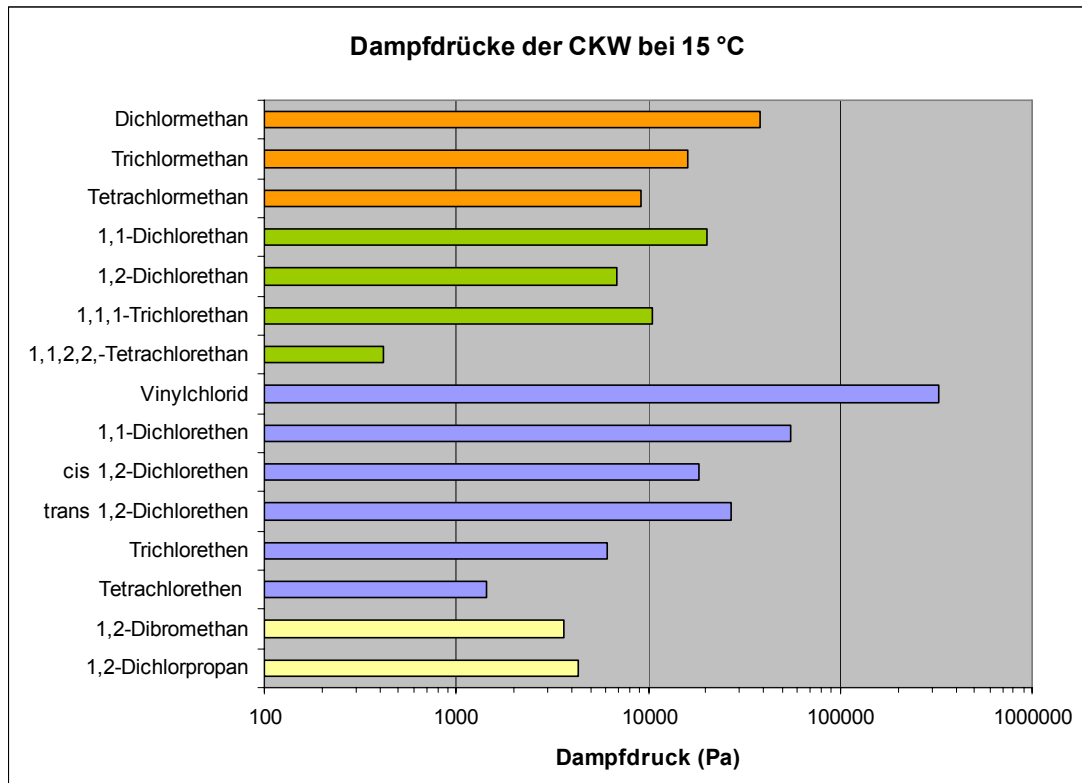
In der Regel gilt, dass Verbindungen, die eine grössere Anzahl Chlor-Atome enthalten, tiefere Dampfdrücke und Wasserlöslichkeiten und höhere K_{oc} -Werte haben. Trotzdem gibt es für solche Faustregeln wichtige Ausnahmen, da die Stoffeigenschaften auch stark von den strukturellen Einzelheiten der Moleküle geprägt sind.



Die höchsten Wasserlöslichkeiten weisen die Chlormethane auf, gefolgt von den Chlorethanen und Chlorethenen. Die tiefsten Löslichkeiten haben die voll-chlorierten Verbindungen Tetrachlorethen und Tetrachlormethan.

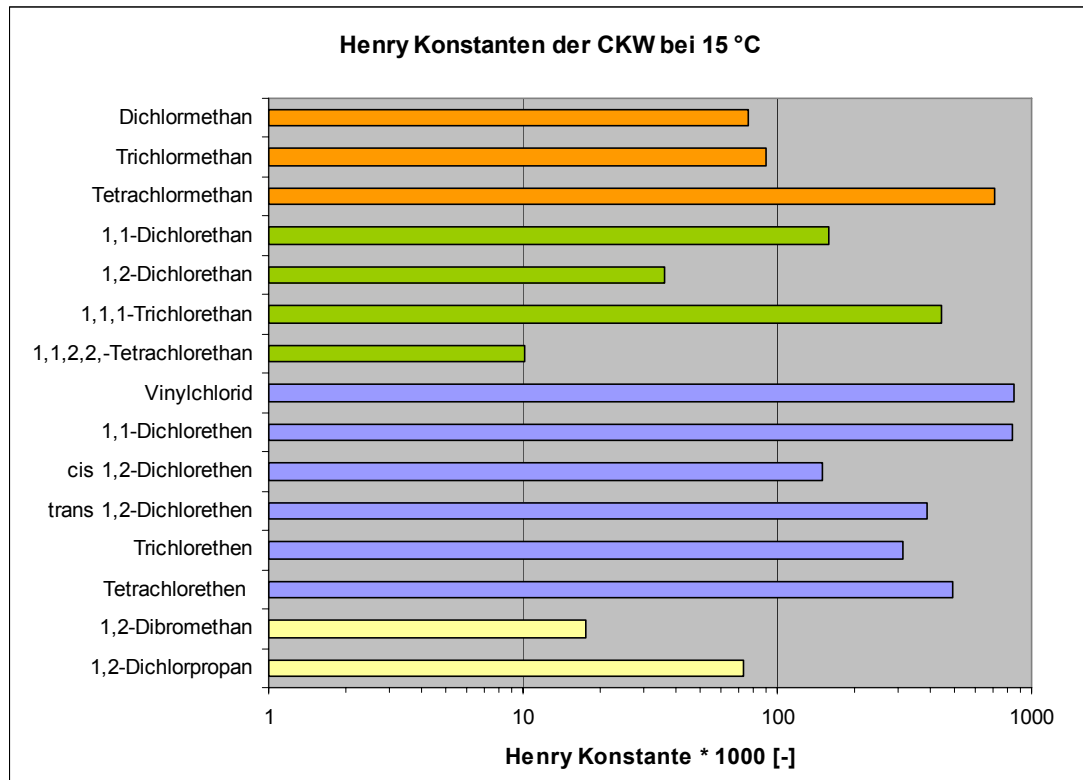


Bei den Verteilungskoeffizienten (Feststoff/Wasser Verteilung) ist der Einfluss der Molekülgröße und der Anzahl-Chloratome sehr wichtig. Die tiefsten K_{OC} Werte haben die Stoffe mit einer kleinen Anzahl Chlor-Atome und einer entsprechend kleinen molaren Masse.



Im Allgemeinen ist der Dampfdruck hoch, wenn die molare Masse des Stoffes sowie die Anzahl Chlor-Atome klein ist. Die molekulare Struktur der einzelnen Verbindungen spielt aber auch bei diesem Parameter eine grosse Rolle.

Ein Vergleich zwischen 1,1-Dichlorethen, cis- und trans-1,2-Dichlorethen, die alle die gleiche molare Masse und Anzahl Chlor-Atome haben, jedoch unterschiedliche Dampfdrücke aufweisen, zeigt den Einfluss von strukturellen Einzelheiten der CKW auf den Dampfdruck.



Von allen vier ausgewählten Stoffeigenschaften ist die Henry Konstante diejenige mit der höchsten Komplexität. Dies, weil diese Konstante sowohl eine Funktion des Dampfdrucks als auch der Löslichkeit ist. CKW mit tiefen Löslichkeiten weisen teilweise auch tiefe Dampfdrücke auf. Diese Tatsache führt zu einer Verkleinerung der Unterschiede zwischen den Stoffen im Vergleich zu manchen der anderen Stoffeigenschaften.

3 Umweltverhalten

Das Umweltverhalten einer Verbindung wird bzw. kann durch eine Vielzahl von Prozessen bestimmt werden. Im Wesentlichen handelt es sich hierbei um Verteilungsprozesse zwischen Phasen (Wasser, Luft, Festphase, organische Phasen), um Transportprozesse (gelöst im Wasser oder in der Porenluft, oder als reine, flüssige organische Phase (DNAPL)) sowie um Abbauprozesse (biologischer Abbau und/oder chemische Reaktionen). In diesem Kapitel werden folgende Themen erläutert:

- Verteilung einer Verbindung im Untergrund
- Transportverhalten
- Biologische Abbaubarkeit
- Empfehlungen für Felduntersuchungen

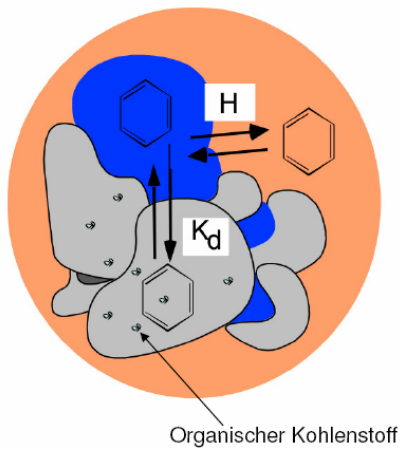
3.1 Verteilung im gesättigten und ungesättigten Untergrund

Dieses Kapitel enthält Hinweise zur Berechnung der Verteilung eines organischen Stoffs im ungesättigten und gesättigten Untergrund. Es zeigt somit die Grundlagen auf, wie z.B. auf Basis eines einzigen Messwertes (z.B. Feststoffgehalt oder Porenluftgehalt) andere relevante Parameter (in einem stabilen bzw. stationären System) abgeschätzt werden können (z.B. die Konzentration in einem Eluat gemäss AltIV) [Quellenangabe: BUWAL-Vollzugshilfe, März 2000 „Richtlinie für die Durchführung von Eluattests gemäss AltIV„].

Um die Massenbilanz bezüglich CKW z.B. in 1 m^3 Untergrund abzuschätzen und gleichzeitig die Verteilung eines Stoffs in den verschiedenen Phasen des Untergrundes (Feststoff, Wasser, Porenluft) zu berechnen, wird ein Gleichgewichtszustand zwischen dem organischen Stoff (CKW) und den drei Phasen angenommen (vgl. Grafik unten).

Das Gleichgewicht des Stoffs wird einerseits durch die Henry Konstante, H (Luft/Wasser) und andererseits durch den K_{OC} - bzw. dem K_d -Wert (Feststoff/Wasser) definiert. Die Beschaffenheit der Feststoffphase bzw. des Untergrundes wird durch die Dichte ($\rho \sim 1.8 - 2.0 \text{ kg/L}$), die luft- und wassergefüllte Porosität (Φ) sowie den Anteil des organischen Kohlenstoffs im Feststoff, f_{OC} , definiert.

Berechnung der Phasenverteilung von CKW im ungesättigten Untergrund



Virtuelles Eluat (Siehe Vollzugshilfe BUWAL):
Richtlinie für die Durchführung von Eluattests
gemäss Altlastenverordnung, BUWAL, März 2000

Phasengleichgewicht

$$H = \frac{C_g}{C_w} \quad K_d = \frac{C_s}{C_w} = f_{oc} \cdot K_{oc}$$

Massenbilanz

$$C_t = (C_s \cdot \rho + C_w \cdot \Phi_w + C_g \cdot \Phi_g) / \rho$$

- C_t = Gesamtgehalt (mg/kg)
- C_s = Gehalt im Feststoff (mg/kg)
- C_w = Konzentration im Porenwasser (mg/L)
- C_g = Konzentration in der Porenluft (mg/L)
- H = Henry-Konstante (-)
- K_d = Verteilungskoeffizient Feststoff/Wasser (L/kg)
- ρ = Dichte des Untergrunds (kg/L)
- Φ_w = Wassergefüllte Porosität (-)
- Φ_g = Luftgefüllte Porosität (-)
- K_{oc} = Verteilungskoeffizient
Org. Kohlenstoff/Wasser (L/kg)
- f_{oc} = Anteil organischer Kohlenstoff
im Feststoff (-)

Diese Grundlagen gelten nicht, wenn organische Phasen (DNAPL) vorhanden sind, können jedoch verwendet werden, um die Wahrscheinlichkeit des Vorhandeneins von DNAPL abzuwägen.

Der Anteil organischer Kohlenstoff (f_{oc}) kann im Prinzip Werte von 0 bis 50% annehmen und hat einen starken Einfluss auf die Phasenverteilung von CKW im Untergrund. In der Regel weisen grobkörnige (kiesige) Materialien kleinere f_{oc} Werte auf als feinkörnige (schluffige oder tonige) Materialien. Der f_{oc} nimmt in der Regel mit tiefer liegenden Horizonten (A > B > C) stark ab. Die nachfolgende Tabelle enthält Erfahrungswerte für f_{oc} in Böden und Untergrund.

Typische Werte für den organischen Kohlenstoffanteil, f_{OC} , in Boden- und Untergrundmaterial

Material	Spannbreite typischer f_{OC} Werte (%)	Typische Tiefe (m)	Bemerkungen
Oberboden „A-Horizont“	1 - 10	0 – 0.2	Auch höhere Werte sind möglich, z.B. Torf.
Unterboden „B-Horizont“	0.1 – 2.0	0.2-0.7	Definitionsgemäss weist der B-Horizont einen kleineren org. Kohlenstoffanteil auf, als der A-Horizont
Untergrund „C-Horizont“	0.01 - 0.5	> 0.7m	Obwohl die absoluten Werte klein sind, sind Unterschiede von einem Faktor 50 von Standort zu Standort nicht unüblich.

Die in der vorliegenden Tabelle aufgelisteten Werte können für grobe Schätzungen der Verteilung von Stoffen verwendet werden. (Besser wäre im Rahmen von technischen Standort-Untersuchungen auch die analytische Bestimmung des tatsächlich vorhandenen organischen Kohlenstoffgehalts im Feststoff (TOC) zu veranlassen oder gar mittels neutralen Eluatversuchen direkt den effektiven K_d -Wert zu bestimmen.) Ferner ist zu beachten, dass für f_{OC} Werte kleiner als ca. 0.001 (0.1%) die Sorption auf Mineraloberflächen eine bedeutende Rolle spielen kann. Daher kann die Verwendung der Gleichung $K_d = f_{OC} \cdot K_{OC}$ in Systemen mit sehr tiefen f_{OC} Werten zu einer Unterschätzung von K_d führen.

Für einen gut durchlässigen, grobkörnigen Grundwasserleiter des Mittellandes dürfte ein f_{OC} -Wert von 0.1% in erster Näherung einen vernünftigen Ausgangswert darstellen, für feinkörnigere Untergrundschichten vielleicht das Zwei- bis Fünffache.

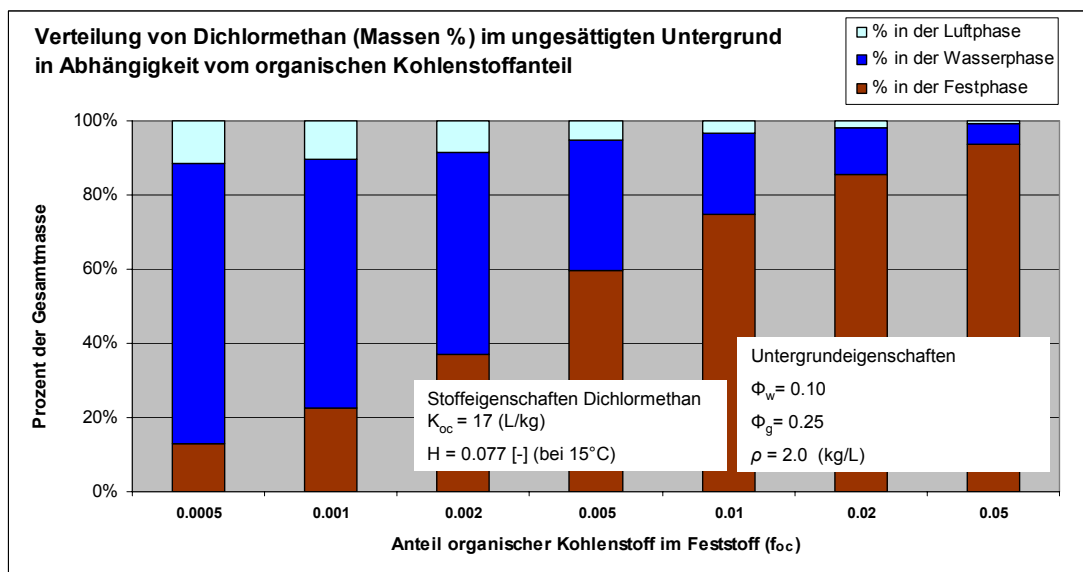
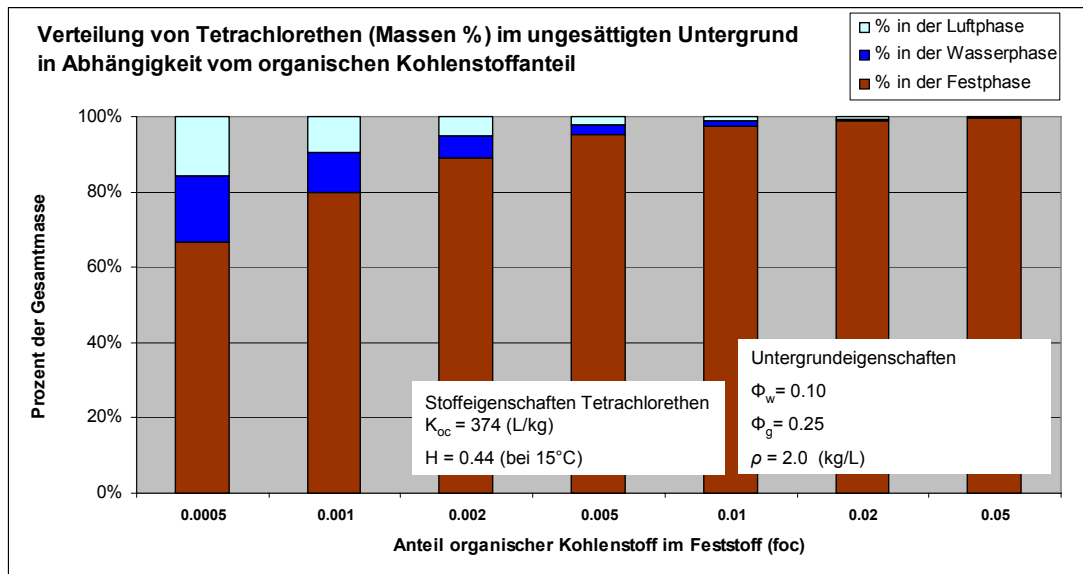
3.1.1 Ungesättigte Zone

Dieses Unterkapitel zeigt exemplarisch die erwartete Stoffverteilung von CKW im ungesättigten Untergrund auf (ohne biologischen Abbau), bei Anwendung der in Kapitel 3.1 aufgezeigten Grundlagen und der entsprechenden Stoff- und Untergrundeigenschaften (f_{OC}).

Hierfür wurden 2 CKW-Verbindungen mit relativ unterschiedlichen Stoffeigenschaften, nämlich Tetrachlorethen und Dichlormethan, gewählt. Die nachfolgenden zwei Grafiken zeigen die Massenverteilung der Verbindung in den 3 Phasen des ungesättigten Untergrundes als Funktion des organischen Kohlenstoffgehaltes des Untergrundes auf. Die Werte ganz links ($f_{OC} = 0.0005$) entsprechen einem sehr grobkörnigen Untergrund, während die Werte ganz rechts ($f_{OC} = 0.05$) einem sehr nährstoffreichen (schwarzen) Oberboden entsprechen.

Die unterschiedlichen Stoffeigenschaften von Tetrachlorethen und Dichlormethan, insbesondere die Wasserlöslichkeit und der Feststoff/Wasser Verteilungskoeffizient,

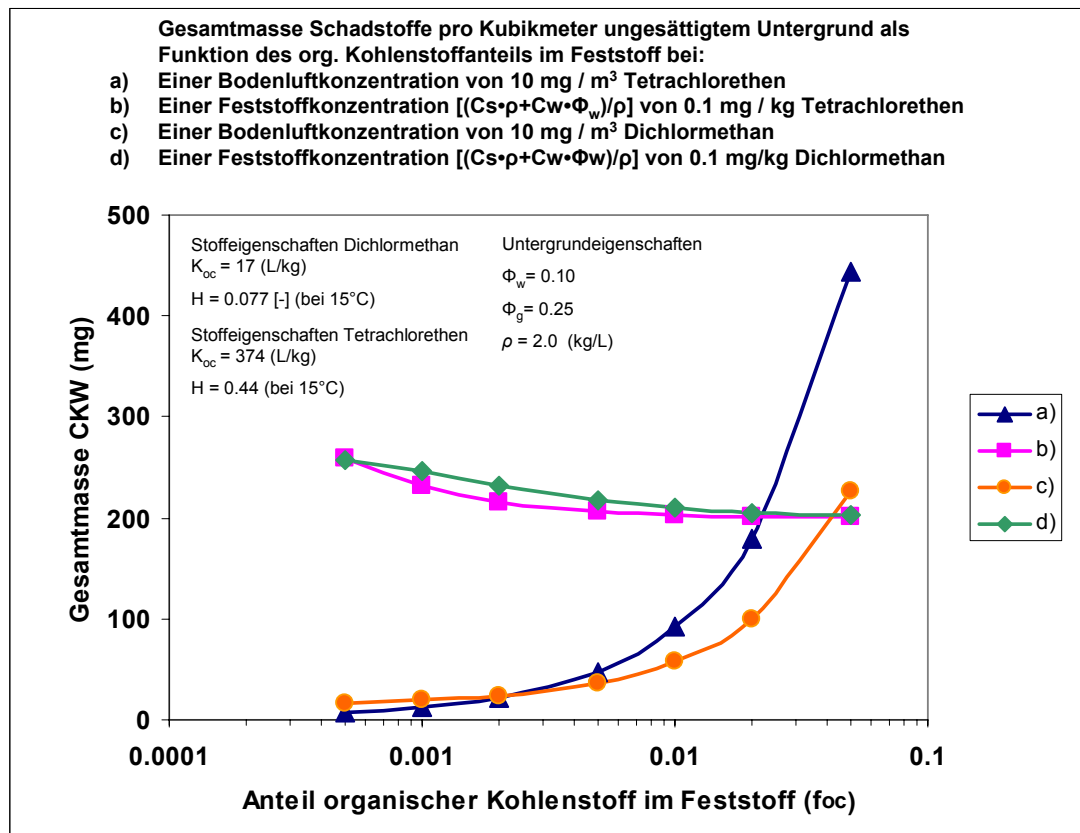
sind vor allem bei kleinen f_{OC} -Werten deutlich erkennbar: Der Massenanteil Tetrachlorethen in der Wasserphase ist im Vergleich zu jenem von Dichlormethan klein.



Bei der Untersuchung von belasteten Standorten werden aus dem ungesättigten Untergrund manchmal Feststoffproben, manchmal Bodenluftproben entnommen und analysiert. Die nachfolgende Grafik zeigt für die zwei gleichen Verbindungen, Tetrachlorethen und Dichlormethan, welche Masse CKW im ungesättigten Untergrund pro m^3 bei einem gegebenen Messwert in Abhängigkeit des f_{OC} zu erwarten ist.

Es ist zu beachten, dass als „Feststoffkonzentration“ die Summe sowohl der Feststoff- als auch der Wasserkonzentration verwendet wurde. Dies, weil in der Praxis eine Feststoffprobe zur CKW-Analyse vorgängig nicht getrocknet werden darf, und

somit die Feuchtigkeit mitanalysiert wird. Deshalb sind die Unterschiede in der Abbildung zwischen b) und d) sehr klein.



3.1.2 Gesättigter Untergrund (Grundwasser)

In diesem Unterkapitel wird die erwartete Stoffverteilung von gelösten CKW im Grundwasser im Gleichgewicht mit dem Feststoff (ohne biologischen Abbau) erläutert. Die Basis für die Abschätzungen der Verteilung der CKW im gesättigten Untergrund sind im Kapitel 3.1 aufgezeigt. Ohne Luftphase lautet die Beziehung zwischen CKW-Konzentration in der Wasserphase, C_w, und jener des Gesamtgehaltes (bzw. Feststoffgehalt), C_t, wie folgt:

$$C_w = \frac{C_t}{\left(K_d + \frac{W}{F}\right)}$$

dabei ist W/F das Wasser/Feststoff-Verhältnis (L/kg) des betrachteten Systems (z.B. ein m³ gesättigter Untergrund). In einem gesättigten Grundwasserleiter beträgt W/F rund 0.25 L/kg.

Da die K_d-Werte (= f_{oc} • K_{oc}) der CKW in einem gesättigten natürlichen Untergrund i.d.R. <1 sind, ist auch der Parameter W/F von Bedeutung bei der Abschätzung des Feststoff/Wasser-Gleichgewichts.

Mit obiger Gleichung wird das virtuelle Eluat gemäss AltIV ermittelt [Quelle: Vollzugshilfe BUWAL: Richtlinie für die Durchführung von Eluattests gemäss Altlastenverordnung, März 2000]. Da alle hier betrachteten CKW als „leichter lösliche organische Stoffe“ (Wasserlöslichkeit >100 mg/L) gelten, ist bei der Abschätzung des virtuellen Eluats gemäss AltIV ein $W/F = 0.25$ L/kg zu verwenden.

Durch einsetzen eines $W/F = 10$ L/kg kann z.B. aber auch die wässrige Konzentration eines (neutralen) Eluattests gemäss der Technischen Verordnung über Abfälle (TVA) abgeschätzt werden.

Das Prinzip des immer und überall herrschenden Gleichgewichts zwischen der Wasser und Feststoffphasen (vgl. obige Gleichung) wird auch in einem dynamischen System, d.h. beim Transport im Grundwasser verwendet.

3.2 Transportverhalten

Dieses Unterkapitel beschreibt die Prozesse, die für die Ausbreitung von CKW im ungesättigten Untergrund und im Grundwasser verantwortlich sind. Die im vorangehenden Kapitel 3.1 beschriebenen Grundlagen zur Verteilung von gelösten Stoffen (es herrscht immer und überall thermodynamisches Gleichgewicht) in einem statischen Untergrundsystem, gelten auch beim „dynamischen“ Untergrundsystem mit Wasser und/oder Luft als Transportmittel.

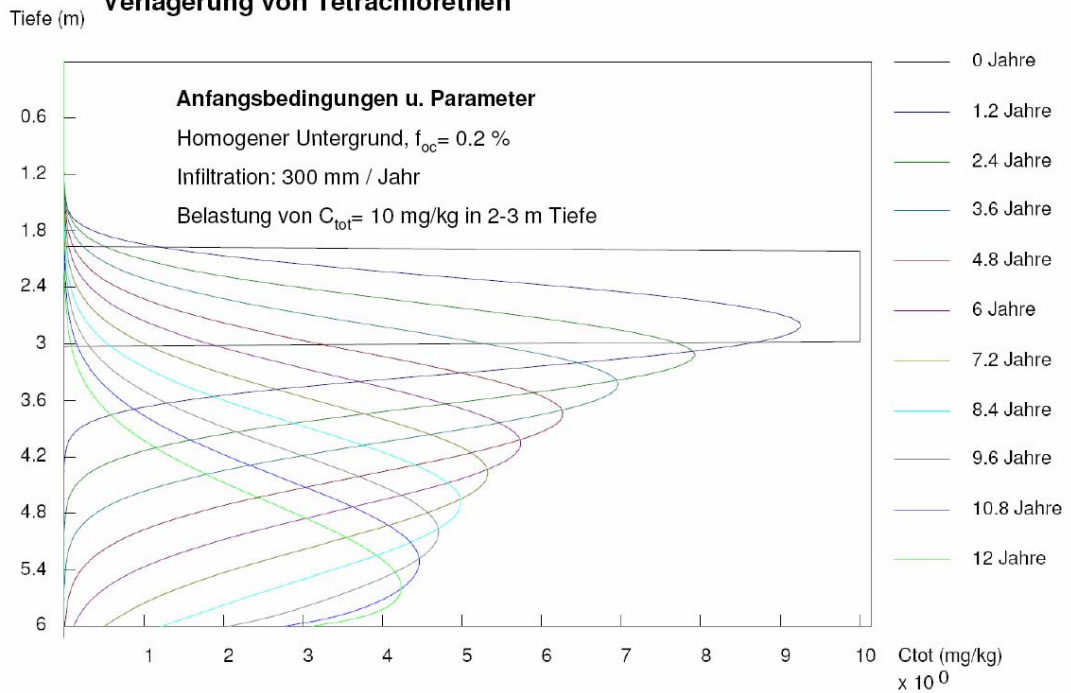
In der ungesättigten Zone sind Infiltration und Verflüchtigung die relevanten Transportprozesse. Nach der Infiltration und Verteilung im ungesättigten Untergrund gelangen die CKW in das Grundwasser. Wenn grössere Mengen von CKW plötzlich in den Untergrund gelangen, oder über längere Zeit am gleichen Ort kontinuierlich geringe Mengen in den Untergrund gelangen, so werden sich diese CKW oft nicht schnell genug auflösen oder verflüchtigen können. Dann bleiben Rückstände von reinen CKW-Phasen oder so genannten DNAPL zurück.

3.2.1 Infiltration und Verflüchtigung (ungesättigter Untergrund)

Der Transport von gelösten CKW im ungesättigten Untergrund in das Grundwasser erfolgt i.d.R. massgeblich über die Infiltration von (Niederschlags-)Wasser. Der natürliche Wassertransport nimmt unterwegs am Feststoff adsorbierte CKW auf und transportiert diese in tiefere Schichten. Die unten stehenden Abbildungen für Tetrachlorethen und Dichlormethan zeigen auf, wie dieser dynamische Prozess (ohne biologischen Abbau und ohne präferentielle Fliesswege) in einem homogenen Untergrund abläuft. Auch hier ist der Einfluss der unterschiedlichen Stoffeigenschaften, insbesondere K_{OC} [Link zu Grafik Verteilungskoeffizienten, Kap. 2.7, klar ersichtlich: während Tetrachlorethen ab rund 5 Jahren in den Grundwasserbereich eingetragen wird, ist Dichlormethan bereits nach 2 Jahren fast vollständig in das Grundwasser „ausgewaschen“ worden.

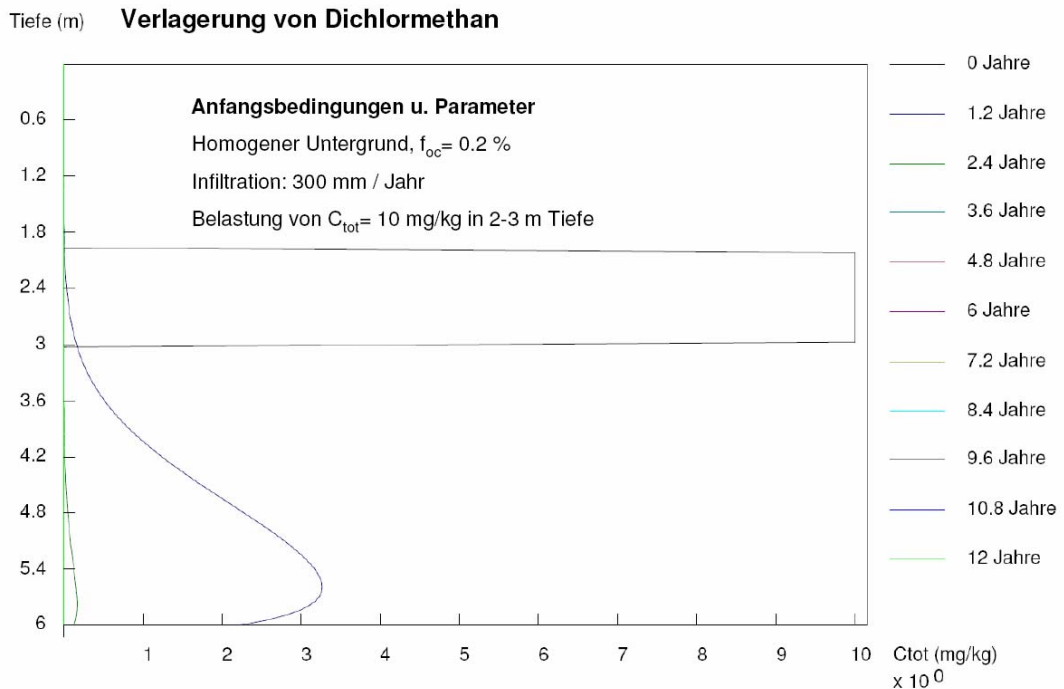
Transport im ungesättigten Bereich durch Infiltration:

Verlagerung von Tetrachlorethen



Transport im ungesättigten Bereich durch Infiltration:

Verlagerung von Dichlormethan



Solche groben Abschätzungen lassen sich mit dem Modell TransSim [Quelle: Vollzugshilfe TransSIM, BAFU, 2002] berechnen. Mit TransSim können mehrere Untergrundsichten mit verschiedenen Eigenschaften (f_{oc} , Mächtigkeiten, Durchlässigkeiten) berücksichtigt werden, aber auch einfache präferentielle Fließwege sowie

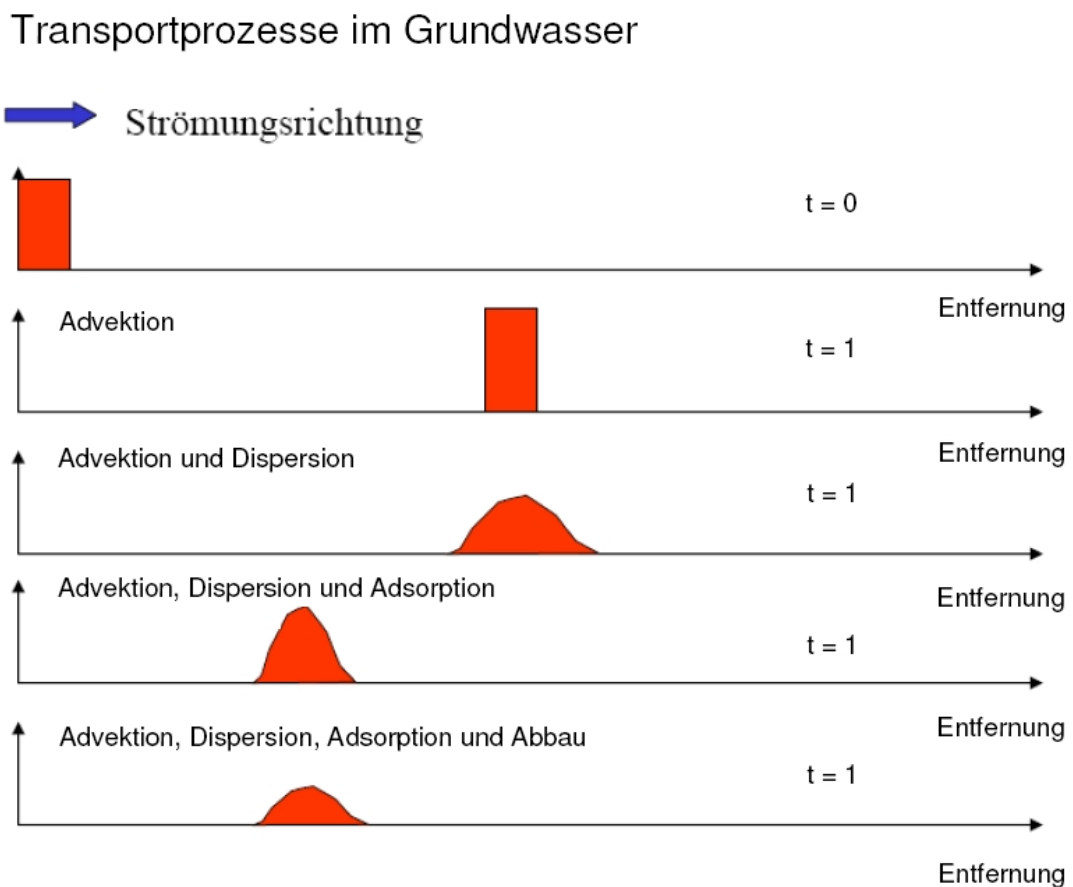
einen biologischen Abbauberm (letztere zwei Parameter sind jedoch mit Vorsicht anzuwenden).

Einen relevanten aktiven Transport der CKW Richtung Atmosphäre findet wohl nur in den obersten 1 ev. 2 Meter statt. Diese „aktive“ Verflüchtigung erfolgt auf Grund des natürlich schwankenden atmosphärischen Drucks. Bei steigendem Druck dringt frische Luft in den ungesättigten Untergrund ein. Bei sinkendem Druck wird diese, nun leicht mit CKW-belastete Luft, wieder in die Atmosphäre abgegeben.

Befinden sich CKW in tieferen Schichten, erfolgt der Transport von flüchtigen Stoffen über den Luftpfad i.d.R. nur auf Grund von diffusiven Vorgängen (z.B. durch Ausgleich von unterschiedlichen Konzentrationen). Im Gegensatz zum advektiven Transport, z.B. der natürlichen Infiltration von Niederschlagswasser, ist dieser Transportmechanismus meist vernachlässigbar. Der diffusive Transport über die Luftphase kann ebenfalls mit TransSim [Quelle: Vollzugshilfe TransSIM, BAFU, 2002] quantitativ abgeschätzt werden.

3.2.2 Transport im Grundwasser

Die wichtigsten Transportmechanismen für die Ausbreitung gelöster Stoffe im Grundwasser werden im nachfolgenden Diagramm aufgezeigt (adaptiert aus den Vorlesungsunterlagen von W. Kinzelbach und F. Stauffer, ETH Zürich):



Advektion: Transport gelöster Stoffe aufgrund der Grundwasserströmung. Die Fracht ist proportional zur Fließgeschwindigkeit des Grundwassers (v_w) und der Schadstoffkonzentration und findet in die Richtung der Grundwasserströmung statt.

Dispersion: Transport gelöster Stoffe aufgrund der strömungsbedingten Mischung des Grundwassers. Die Fracht eines gelösten Stoffs ist proportional zur Fließgeschwindigkeit des Grundwassers (v_w) und des Konzentrationsgradienten. Der Stofftransport findet nicht nur in die Fließrichtung des Grundwassers statt, sondern auch in Richtung abnehmender Konzentration.

Adsorption: Der (meist reversible) Transfer von im Grundwasser gelösten Stoffen auf die Festphase bremst den Transport gelöster Stoffe durch Verminderung der Konzentration im Grundwasser.

Abbau: Die Umwandlung oder Zerstörung von Schadstoffen durch chemische und/oder biologische Prozesse. Abbau ist der einzige der abgebildeten Prozesse, der zu einer Verminderung der Schadstoffmasse führt.

Advektion und Dispersion beschreiben den Transport des Grundwassers selbst bzw. derjenige eines gelösten konservativen oder inerten Stoffs, der weder adsorbiert (K_{OC} bzw. $K_d = 0$) noch abgebaut wird (Tracer). Die Fließgeschwindigkeit eines gelösten CKW wird durch dessen Adsorption am Feststoff im Vergleich zur Fließgeschwindigkeit des Grundwassers retardiert d.h. verlangsamt. Dieser Vorgang wird durch den sog. Retardationsfaktor R beschrieben und wird wie folgt ermittelt:

$$R = \frac{v_w}{v_{CKW,w}} = 1 + \frac{\rho \cdot K_d}{\Phi_w} [-]$$

Werden die entsprechenden Stoffeigenschaften der CKW (K_{OC}) sowie die Eigenschaften eines typischen Grundwasserleiters (ρ , Φ_w , f_{OC} in obiger Gleichung eingesetzt, bewegt sich der Retardationsfaktor der CKW im Bereich von rund 1.1 bis 3. D.h. die CKW fließen - je nach Stoff - um den Faktor 1.1 bis ca. 3 langsamer als das Grundwasser selbst.

3.2.3 DNAPL

DNAPL (Dense Non-Aqueous Phase Liquid) ist eine nicht-wässrige, organische flüssige Phase, welche dichter bzw. schwerer als Wasser ist. Mit Ausnahme von Vinylchlorid (= Gas) sind alle betrachteten CKW organische Flüssigkeiten mit Dichten zwischen 1.2 und 1.6 kg/L (Dichte 1,2-Dibromethan = 2.5 kg/L).

Wenn grössere Mengen von CKW als reine organische Phase plötzlich in den Untergrund gelangen oder über längere Zeit (Monate, Jahre) am gleichen Ort kontinuierlich geringe Mengen als reine organische Phase in den Untergrund sickern, so werden sich diese CKW-Phasen oft nicht schnell genug auflösen oder verflüchtigen können. Dann bleiben Rückstände von reinen CKW-Phasen oder so genannte DNAPL zurück.

Auf Grund der grösseren Dichte sowie der meist geringeren Viskosität und Oberflächenspannung der DNAPL gegenüber Wasser können sich diese von Fall zu Fall teilweise rasch und auch über präferentielle Fließwege sowohl vertikal wie horizontal im Untergrund ausbreiten. Die CKW-Phasen werden senkrecht von weniger durchlässigen (Zwischen-)Schichten zurückgehalten, wo sie geringmächtige (einige cm bis maximal wenige dm) Lachen bilden können. (Achtung: bei DNAPL-Verdacht Vorsicht beim Bohren durch wenig durchlässige Schichten!) Horizontal können die DNAPL in durchlässigere Linsen eindringen. Somit können auf diesem Transportweg, mehr oder wenig dispers, Tropfen oder Ganglien von CKW-Phasen in den Poren des Untergrundes zurückbleiben.

Die quantitative Erfassung des DNAPL-Transports im Untergrund ist praktisch nicht möglich. Selbst die Abschätzung des Schadstoffpotentials (Masse) einer DNAPL-Quelle im Untergrund gestaltet sich schwierig.

Als Faustregel für das Vorhandensein von DNAPL in der Nähe einer Grundwassermessstelle auf Basis der beobachteten Konzentration im Grundwasser, c_w , gilt:

- $c_w > 10$ % der Wasserlöslichkeit → DNAPL praktisch sicher vorhanden
- c_w zwischen 1 - 10 % der Wasserlöslichkeit → DNAPL wahrscheinlich vorhanden
- c_w zwischen 0.1 – 1 % der Wasserlöslichkeit → DNAPL möglich

Auch ausgehend von einer Feststoffkonzentration lässt sich abschätzen, ob DNAPL vorhanden sind oder nicht (vgl. Kap. 3.1 bzw. Gleichung in Kap 3.1.2). Z.B. ein gemessener Feststoffgehalt von 100 mg/kg Tetrachlorethen bedeutet, dass die Porenwasserkonzentration bei einem $f_{oc} = 0.2\%$ rund 50 % der Wasserlöslichkeit beträgt.

Diese meistens isolierten und somit weitgehend immobilen DNAPL-Ganglien und/oder –Lachen können im Grundwasser relevante Belastungen über sehr lange Zeiträume (Jahre bis Jahrzehnte) zur Folge haben. Grund dafür ist die oft stark limitierte „Verfügbarkeit“ der DNAPL, bzw. die sehr langsame Auflösung der DNAPL im Porenwasser und des anschliessend durch Diffusion stark limitierten Transports von den Poren zum freien bzw. mobilen Grundwasserbereich.

Es ist darauf hinzuweisen, dass eine CKW-Fahne, d.h. im Wasser gelöste CKW, mit Konzentrationen von einigen hundert $\mu\text{g/L}$ oder gar einige mg/L nicht schwerer ist als Wasser und somit auch nicht auf den Grundwasserstauer sinkt.

Wenn im Wasser gelöste CKW in den ungesättigten oder gesättigten Untergrund eingetragen werden, kann sich nachträglich kein DNAPL im natürlichen Untergrund bilden.

3.3 Biologische Abbaubarkeit

Es ist heute bekannt, dass praktisch alle CKW (gemäss Anhang 1, AltIV) bei idealen Randbedingungen grundsätzlich abbaubar sind. Auch im Feld kann ein Abbau stattfinden. Dieser ist jedoch oft ungenügend, weil die Prozesse zu langsam oder unvollständig ablaufen, bzw. weil im Feld selten die notwendigen idealen Randbedingungen vorliegen.

Manche Stoffe sind nur anaerob, d.h. unter Ausschluss von Sauerstoff (O₂) abbaubar. Andere CKW werden unter aeroben Bedingungen (mit O₂) schneller abgebaut. Einige Stoffe sind sowohl unter anaeroben als auch unter aeroben Bedingungen abbaubar.

Beim biologischen Abbau können CKW entweder die Rolle eines Elektronendonors (ED - d.h. eine Kohlenstoff- und Energiequelle analog zu Zucker) oder eines Elektronenakzeptors (EA – entspricht der Atmung mit Sauerstoff / Nitrat, etc. (Dehalorespiration)) einnehmen.

Unter bestimmten Bedingungen kann es auch zu einem gelegentlichen Abbau von CKW durch Enzyme kommen, welche in den Bakterien durch den Abbau anderer Verbindungen, z.B. Toluol, "produziert" worden sind. Dieser sog. „Co-Metabolismus“ ist in der Regel nicht mit Bakterienwachstum verbunden und verschwindet mit der Zeit, wenn das eigentliche Substrat für das verantwortliche Enzym nicht mehr vorhanden ist.

Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über die biologische Abbaubarkeit verschiedener CKW unter aeroben und anaeroben Bedingungen.

Biologische Abbaubarkeit der CKW

Stoff	aerob		anaerob		
	ED	CoM	ED	EA	CoM
Dichlormethan	++	++	++	?	?
Trichlormethan	-	++	-	?	++
Tetrachlormethan	-	-	-	?	++
1,1-Dichlorethan	?	++	-	?	++
1,2-Dichlorethan	++	++	-	++	++
1,1,1-Trichlorethan	-	++	-	++	++
1,1,2,2-Tetrachlorethan	-	+	-	?	++
Vinylchlorid	++	++	+/-	++	++
1,1-Dichlorethen	?	++	-	++	++
Cis-1,2-Dichlorethen	+	++	+/-	++	++
Trans-1,2-Dichlorethen	?	++	-	+	++
Trichlorethen	-	++	-	++	++
Tetrachlorethen	-	+/-	-	++	++

ED = Bakterienwachstum verbunden mit Verwendung der Verbindung als Elektronendonator

EA = Bakterienwachstum verbunden mit Verwendung der Verbindung als Elektronenakzeptor

CoM = Cometabolismus (ohne Bakterienwachstum)

(-) = Kein biologischer Abbau beobachtet

(+/-) = In vielen Fällen wird kein biologischer Abbau beobachtet

(+) = Biologischer Abbau vereinzelt beobachtet

(++) = Biologische Abbau wiederholt beobachtet

(?) = Keine Studien vorhanden

In der Regel sind die hochchlorierten Verbindungen fast ausschliesslich unter anaeroben Bedingungen abbaubar. Die weniger chlorierten Verbindungen sind meistens auch aerob abbaubar.

In den folgenden Abschnitten wird der biologische Abbau von CKW beschrieben. Insbesondere werden die erforderlichen Randbedingungen für den biologischen Abbau sowie die entsprechenden Limitationen aufgezeigt. Die Abbauewege einiger Einzelverbindungen werden exemplarisch aufgezeigt.

3.3.1 Erforderliche Randbedingungen

Damit ein biologischer Abbau von CKW überhaupt ablaufen kann, müssen am Standort gewisse Randbedingungen erfüllt sein:

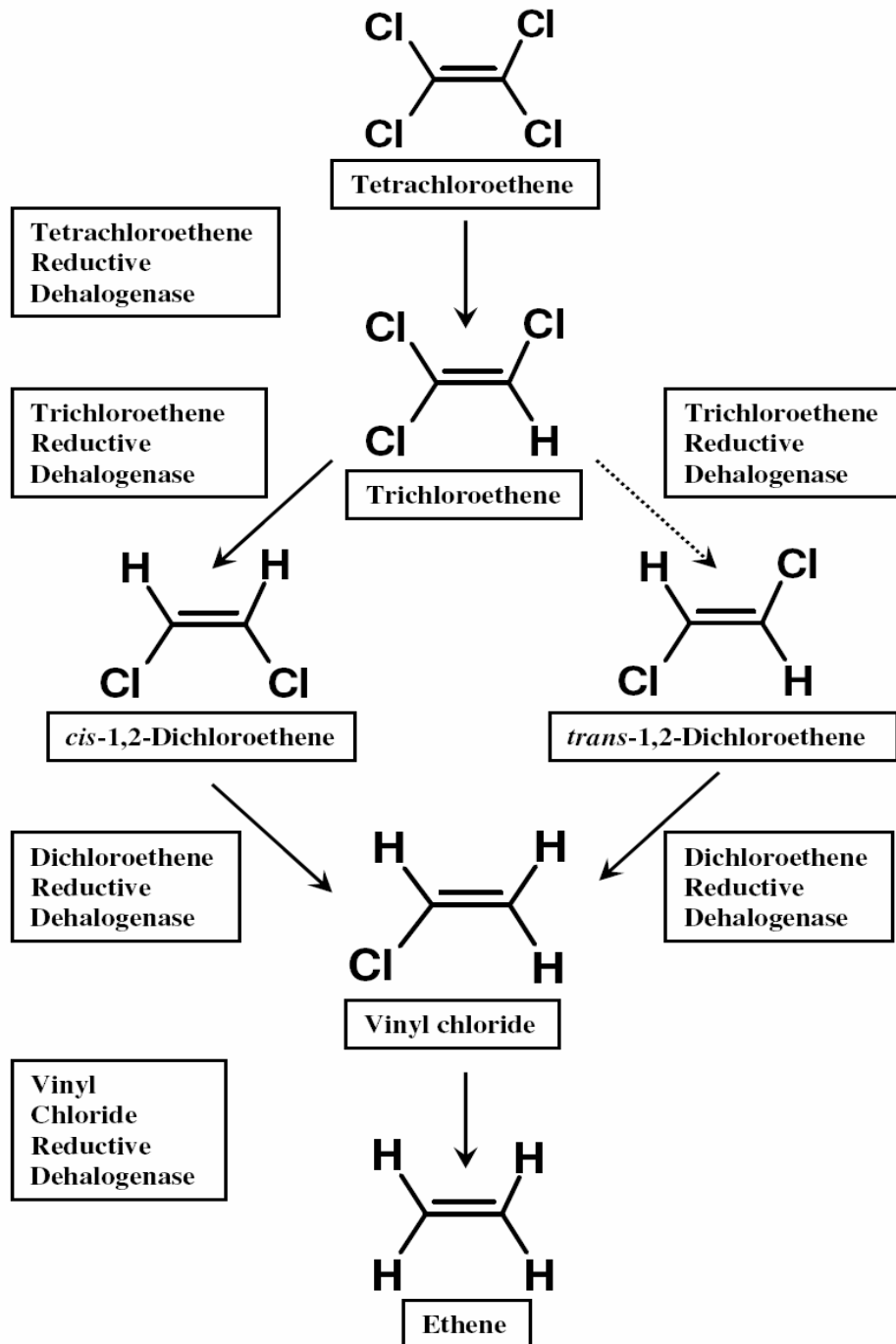
- Geochemische Verhältnisse: In reduktiven anaeroben Prozessen agieren die hoch oxidierten CKW, wie Tetrachlorethen, Trichlorethen und cis-1,2-Dichlorethen als Elektronenakzeptoren. Die Elektronendonoren sind natürliche organische Verbindungen (u.a. Huminsäuren) oder eine überlagerte Kontamination mit z.B. Kohlenwasserstoffen. Bevor die CKW von den natürlich vorkommenden Bakterien als Elektronenakzeptoren verwendet werden, müssen die weiteren vorhandenen Elektronenakzeptoren, wie Sauerstoff, Nitrat, Sulfat und Eisen(III) aufgebraucht sein. Dementsprechend sollten diese erfasst und charakterisiert werden. Eine Altlast entsteht also, wenn keine Elektronenakzeptoren mehr vorhanden sind und organische Substrate (C-Quellen) aufgebraucht sind. Die Mikroorganismen sterben ab bzw. befinden sich in einem Ruhestadium. Wenn sich die Randbedingungen ändern (z.B. Zufuhr von Sauerstoff) vermehren sich und wachsen Mikroorganismen wieder.
- Elektronendonoren (=organisches Substrat): Die CKW-Menge bestimmt zusammen mit den (noch) vorhandenen Elektronenakzeptoren die Menge an organischem Substrat, das für eine vollständige reduktive Dechlorierung benötigt wird. Oft sind die natürlich vorkommenden Huminsäuren (gemessen als gelöster organischer Kohlenstoff, DOC) nicht in einem ausreichenden Mass vorhanden, was das anaerobe biologische Abbaupotential einschränkt.
- Für den aeroben Abbau für wenig chlorierte Verbindungen wie z.B. Vinylchlorid ist das Vorhandensein von gelöstem Sauerstoff notwendig.

3.3.2 Abbauewege

Der biologische Abbau der CKW läuft in der Regel in mehreren einfachen Schritten ab. Häufig kann ein bestimmter Abbauschritt zu verschiedenen Abbauprodukten führen. Meistens entsteht jedoch ein bevorzugtes Abbauprodukt. Das in der folgenden Abbildung dargestellte Abbauschema zeigt als Beispiel, wie aus Tetrachlorethen zunächst Trichlorethen entsteht und dieses entweder in cis- oder trans-1,2-Dichlorethen abgebaut werden kann; mehrheitlich wird jedoch Trichlorethen zum cis-Isomer abgebaut.

Da der Abbau der CKW meistens zur Entstehung eines anderen CKW führt, kann das Vorhandensein mehrerer CKW (insbesondere bei Vertretern innerhalb einer Abbausequenz) ein Hinweis auf einen biologischen Abbau sein.

Abbauweg der chlorierten Ethene unter anaeroben Bedingungen

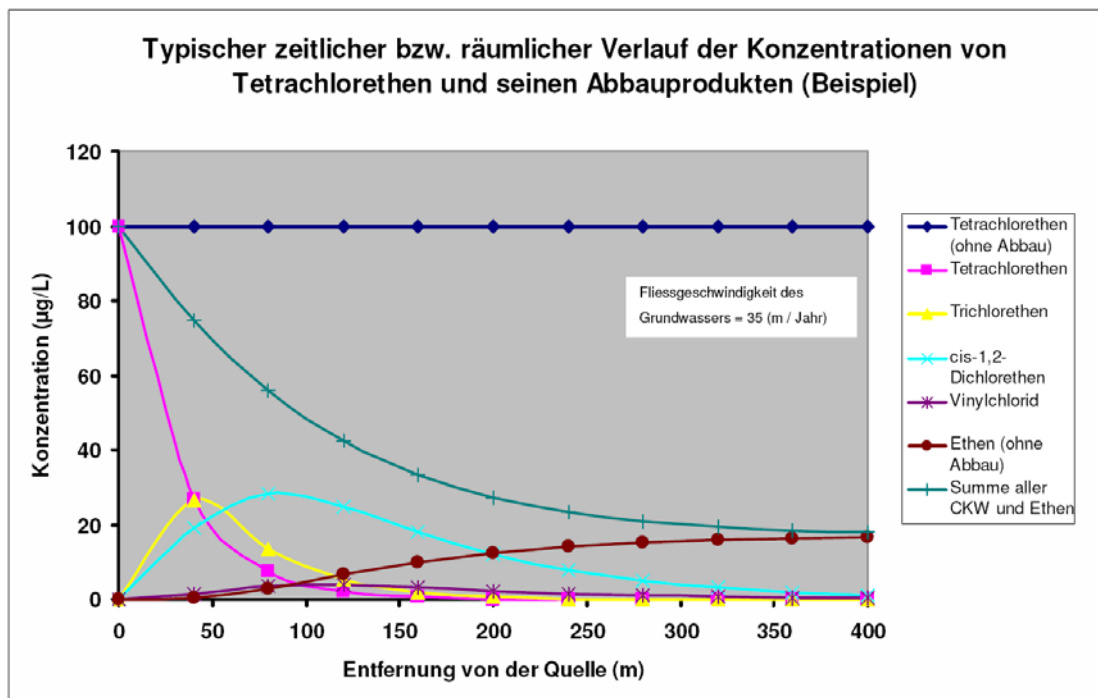


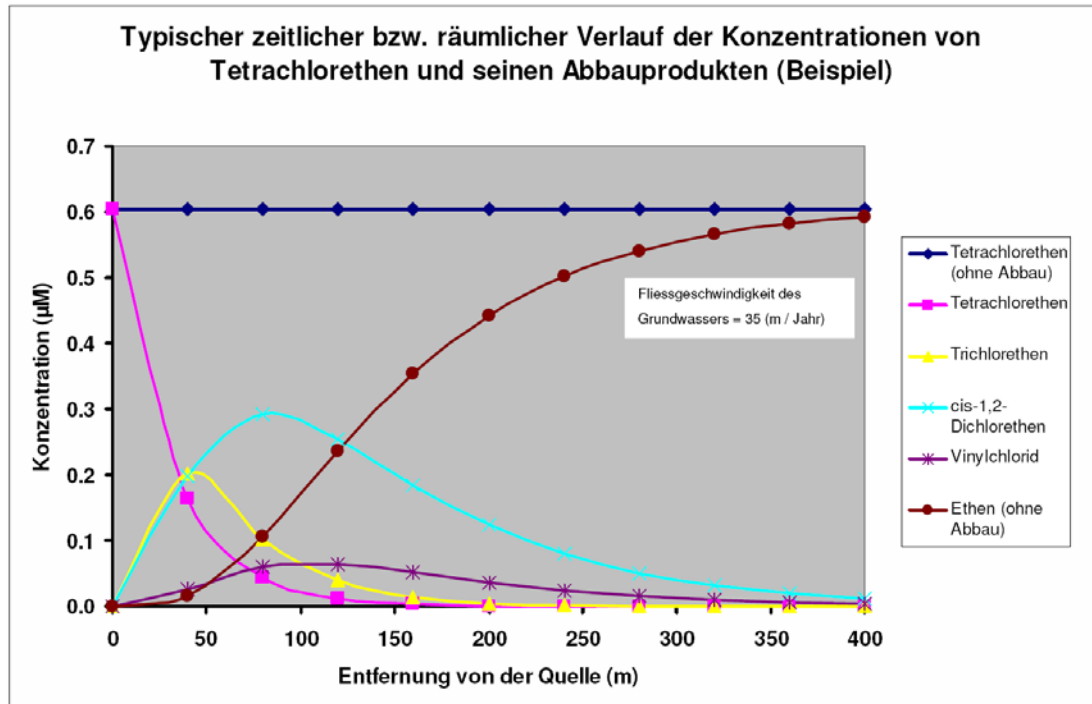
Reduktive Dechlorierung bis am VC ist möglich. VC kann aber auch die Transformation von Tetrachlorethen hemmen. Ein signifikanter Abbau von VC erfolgt meistens nur unter aeroben Bedingungen (oxidative Dechlorierung).

3.3.3 Kinetik

Je nach Stoff laufen die biologischen Abbauprozesse trotz gleicher Bedingungen schneller oder langsamer ab. Diese Tatsache ist von besonderem Interesse, weil beim Abbau von CKW teilweise andere CKW entstehen, die problematischer als der Ausgangsstoff sein können. Dieses Phänomen ist z.B. beim Abbau von Tetrachlorethen von Bedeutung. Der anaerobe Abbau von Tetrachlorethen zu Trichlorethen und von Trichlorethen zu cis-1,2-Dichlorethen läuft i.d.R. deutlich schneller ab als der von cis-1,2-Dichlorethen zu Vinylchlorid. Dieser Unterschied in den Abbaugeschwindigkeiten führt nicht selten zu einer lokalen und/oder vorübergehenden Akkumulation von cis-1,2-Dichlorethen in Grundwässern, in denen ein Abbau von Tetra- und/oder Trichlorethen stattfindet.

Die beiden nachfolgenden (identischen) Abbildungen illustrieren diese Vorgänge, einmal dargestellt mittels Massenkonzentrationen ($\mu\text{g/l}$) und einmal mittels molaren Konzentrationen ($\mu\text{M} = \mu\text{Mol/l}$).





Wie das obige Beispiel zeigt, kann sich die Zusammensetzung der gelösten CKW im Grundwasser in Abhängigkeit der Entfernung der Tetrachlorethen-Quelle und natürlich der Abbaukinetik massiv ändern. Bis ca. 40 m im Abstrom dominiert Tetrachlorethen, ab ca. 70 m weist dann cis-1,2-DCE die höchsten Belastungen auf.

Zu beachten ist, dass die Summe der molaren Konzentrationen des Ausgangsstoffs Tetrachlorethen und dessen Abbauprodukte inkl. Ethen (oder auch dessen mögliches Abbauprodukt CO_2) über die gesamte Transportdistanz konstant bleibt. Dieses Merkmal ist bei der Betrachtung der üblichen Massenkonzentrationen nicht vorhanden.

Der biologische Abbau von CKW kann durch technische Massnahmen (Sanierungsverfahren) stimuliert bzw. beschleunigt werden.

3.4 Empfehlungen für Felduntersuchungen

Auf Grund der Eigenschaften der CKW, insbesondere wegen deren Flüchtigkeit (hoher Dampfdruck bzw. Henry Konstanten), sind bei der Durchführung von Probenahmen im Feld und der Probenaufbereitung besondere Vorsichtsmassnahmen zu befolgen, um repräsentative Ergebnisse zu erhalten:

- Das gewonnene Probenmaterial (Wasser wie Feststoff) ist möglichst direkt und sofort in die Probennamebehälter zu transferieren. Diese sind randvoll zu füllen (ausser bei sog. Head-space Vials), müssen dicht sein, kühl zwischengelagert und transportiert werden und möglichst rasch analysiert werden.
- Das Zusammenstellen von Mischproben aus verschiedenen Feststoffproben ist nicht empfehlenswert, da grössere CKW-Verluste beim Handling möglich sind. Gleiches gilt bei der Vorbereitung für die Durchführung von Eluattests, insbesondere Säuleneluattests nach AltIV.

Hingegen ist die analytische Bestimmung von f_{OC} in verschiedenen Horizonten von Fall zu Fall empfehlenswert. Solche Bestimmungen können auch erst nachträglich bei Bestätigung einer wahrscheinlich relevanten Belastung in Auftrag gegeben werden. Im Grundwasserbereich sind Analysen von Sauerstoff, Nitrat, Sulfat und ggf. von Fe(II) (Redoxbedingungen) oft sehr hilfreich, um das lokale biologische Abbau-potenzial von CKW besser einzuschätzen.

Bei DNAPL-Verdacht ist auf Grund der grösseren Dichte der CKW z.B. das Bohren durch wenig durchlässige Schichten entweder zu vermeiden oder nur unter speziellen Vorsichtsmassnahmen zu treffen. Dies, um den Transport in tiefere Schichten oder gar tiefere Grundwasserleiter zu vermeiden.

4 Richt- und Grenzwerte

In der nachfolgenden Tabelle sind die relevanten Konzentrationswerte der AltIV (Anhang 1 und 2) sowie weitere Richt- und Grenzwerte für die CKW in (Trink-)Wasser und Luft aufgelistet. Diese Richt- und Grenzwerte beruhen auf der Grundlage toxikologischer Basisdaten in Kombination mit entsprechenden Expositionsszenarien für den Menschen. Je kleiner der Richt- oder Grenzwert desto toxischer ist der Stoff.

Übersichtstabelle Grenzwerte

Stoff	K-Wert AltIV Wasser (mg/L)	Trinkwasser- Grenzwert FIV (mg/L)	Trinkwasser- Grenzwert WHO (mg/L)	Trinkwasser- Grenzwert US-EPA (mg/L)	K-Wert AltIV Luft (mL/m ³)	MAK- Wert CH (mg/m ³)
1,2-Dibromethan	0.00005	-	0.0004	-	-	0.8
1,1-Dichlorethan	3	-	-	-	100	400
1,2-Dichlorethan	0.003	0.003	0.03	0.005	5	20
1,1-Dichlorethen	0.03	0.03	-	0.007	2	8
cis 1,2-Dichlorethen	0.05*	0.05*	0.05*	0.07	200	790*
trans 1,2-Dichlorethen	0.05*	0.05*	0.05*	0.1	200	790*
Dichlormethan	0.02	0.02	0.02	0.005	100	360
1,2-Dichlorpropan	0.005	-	0.04	0.005	75	350
1,1,2,2,-Tetrachlorethan	0.001	-	-	-	1	7
Tetrachlorethen	0.04	0.04	0.04	0.005	50	345
Tetrachlormethan	0.002	0.002	-	0.005	5	3.2
1,1,1-Trichlorethan	2	2	-	0.2	200	1080
Trichlorethen	0.07	0.07	0.02	0.005	50	260
Trichlormethan	0.04	0.04	0.3	0.08**	10	2.5
Vinylchlorid	0.0001	-	0.0003	0.002	2	5.2

* Grenzwert bezieht sich auf die Summe von cis- und trans-1,2-Dichlorethen

** Grenzwert bezieht sich auf die Summe aller Trihalomethane

Ist in der FIV (Fremd- und Inhaltsstoffverordnung) oder im LMB (Schweizerisches Lebensmittelbuch) ein Grenz- oder Toleranzwert für einen Einzelstoff im Trinkwasser vorhanden, wird dieser als Konzentrationswert in Anhang 1 der AltIV übernommen. Die MAK-Werte werden als Konzentrationswerte für die Porenluft im Anhang 2 der AltIV übernommen.

Im folgenden Kapitel Grundlagen und Herleitung werden die toxikologischen Grundlagen, welche für die Berechnung solcher Richt- und Grenzwerte nötig sind, beschrieben und erläutert.

4.1 Grundlagen und Herleitung

Bei der Human-Toxikologie wird zwischen chronisch-toxischen und karzinogenen Wirkungen unterschieden. Die Toxizität von Stoffen bezüglich dieser zwei Wirkungsmechanismen ist die Basis für die Herleitung der Konzentrationswerte in Anhang 1 der Altlastenverordnung (AltIV). Bei einer lebenslangen Aufnahme von 2 Liter (Trink-)Wasser pro Tag und bei einem Körpergewicht von 70 kg wird pro Stoff und Wirkungspfad eine Konzentration berechnet, bei der keine schädlichen Wirkungen zu erwarten sind resp. bei der das zusätzliche Krebsrisiko tolerabel ist. Letzteres wird üblicherweise in Europa und in Übersee als $\leq 10^{-5}$ definiert. Der kleinere der zwei Konzentrationswerte wird (gerundet) als Grenzwert in Anhang 1 AltIV verwendet. Für Stoffe, die sowohl karzinogene als auch nicht-karzinogene Wirkungen aufweisen, ist meistens die karzinogene Wirkung massgebend.

Bei der Ökotoxikologie werden verschiedene Testorganismen als Indikator verwendet, um die Toxizität von Verbindungen in natürlichen Ökosystemen abzuschätzen (in der Regel Toxizität auf Wasserorganismen wie Algen, Daphnien, Fische). Aus der Ökotoxikologie abgeleitete unbedenkliche Konzentrationen für Oberflächengewässer (Predicted-No-Effect-Concentration, PNEC) dienen der Überprüfung, dass bei entsprechender Einleitung in ein Gewässer keine unerwünschten Effekte auftreten.

In den folgenden Abschnitten werden einige toxikologische Begriffe erläutert und der Zusammenhang mit der Herleitung der Konzentrationswerte der AltIV wird aufgezeigt:

- Slope Factor
- Reference Dose
- Maximale Arbeitsplatzkonzentration MAK-CH
- Predicted No Effect Concentration (PNEC)

4.1.1 Slope Factor

Slope Factor, oral/inhalativ: Die mittlere tägliche Dosis eines Schadstoffs multipliziert mit dem SF ergibt das statistische Risiko, über einen Zeitraum von 30 Jahren (Szenario der amerikanischen Umweltbehörde, U.S. EPA) an Krebs zu erkranken. Je grösser der SF einer Substanz, desto grösser ist das Risiko bei der gleichen Dosis. Die Einheiten des Parameters SF sind $(\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1})^{-1}$. Je nach Expositionsweg (oral, inhalativ) hat der SF einen anderen Wert für denselben Stoff.

Um aus einem SF ein Risiko zu berechnen, müssen Annahmen über die Menge an Luft oder Wasser getroffen werden, die während eines Tages aufgenommen wird. Mithilfe eines solchen Expositionsszenarios können Konzentrationen im Wasser oder Luft in eine tägliche Dosis umgewandelt werden, die nach Multiplizierung mit dem entsprechenden Slope Factor das zusätzliche Krebsrisiko ergibt.

Das Expositionsszenario, welches das BAFU für die Herleitung der Konzentrationswerte nach AltIV verwendet, berücksichtigt ausschliesslich die orale Aufnahme von 2 L Trinkwasser/Tag über 70 Jahre Exposition bei einem konstanten Körpergewicht von 70 kg sowie einem tolerablen Risiko von 10^{-5} .

Zum Beispiel für 1,1,2,2-Tetrachlorethan (kein Trinkwasserwert in der FIV oder im LMB vorhanden) liegt von der U.S. EPA ein SF_o von $0.2 (\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1})^{-1}$ vor.

Der K-Wert nach AltIV für 1,1,2,2-Tetrachlorethen beträgt demnach:

$$\text{K-Wert} = 10^{-5} \cdot 70 \text{ kg} / 0.2 (\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1})^{-1} \cdot 2 \text{ L/d} = 0.0018 \text{ mg/L} ;$$

→ gerundet nach BAFU = 0.001 mg/L

(Der entsprechende K-Wert für 1,1,2,2-Tetrachlorethan auf Basis RfD_o berechnet, ist deutlich grösser, weshalb der oben berechnete Wert von 0.001 mg/L gilt.)

4.1.2 Reference Dose

RfD, Reference Dose (mg/kg·d): Der RfD-Wert ist diejenige tägliche Dosis eines

Schadstoffes, die ein Mensch ein Leben lang aufnehmen kann, ohne dass er dadurch nachteilige Wirkungen auf seine Gesundheit zu erwarten hat. Die Einheiten des Parameters RfD sind mg Schadstoff pro Kilogramm Körpergewicht pro Tag ($\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$), d.h. je kleiner der Wert, desto toxischer ist eine Verbindung.

Die Bezeichnung RfD wird von der amerikanischen Umweltbehörde (Environmental Protection Agency, U.S. EPA) verwendet. Die Weltgesundheitsorganisation, WHO, verwendet für den gleichen Wert den Begriff TDI (Tolerable Daily Intake).

Zum Beispiel für 1,1,2,2-Tetrachlorethan (kein Trinkwasserwert in der FIV oder im LMB vorhanden) liegt von der U.S. EPA ein RfD_0 von 0.06 ($\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$) vor.

Der K-Wert nach AltIV für 1,1,2,2-Tetrachlorethan auf Basis RfD_0 beträgt demnach:

$$\text{K-Wert} = 0.06 (\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}) \cdot 70 \text{ kg} / 2 (\text{L/d}) = 2.1 \text{ mg/L}$$

Da der entsprechende K-Wert für 1,1,2,2-Tetrachlorethan auf Basis SF_0 berechnet, deutlich kleiner ist, nämlich 0.0018 mg/L (auf 0.001 mg/L nach BAFU gerundet), gilt dieser kleinere Wert als der K-Wert nach AltIV.

4.1.3 MAK-Schweiz

Maximale Arbeitsplatz-Konzentration Schweiz (MAK-CH): Der MAK-Wert ist die höchstzulässige Durchschnittskonzentration eines gas-, dampf- oder staubförmigen Arbeitsstoffes in der Luft, die nach derzeitiger Kenntnis in der Regel bei Einwirkung während einer Arbeitszeit von 8 Stunden täglich und 42 Stunden pro Woche auch über längere Perioden bei der stark überwiegenden Zahl der gesunden, am Arbeitsplatz Beschäftigten die Gesundheit nicht gefährdet.

4.1.4 Ökotoxikologie (PNEC)

Predicted No Effect Concentration (PNEC): Unterhalb dieser Konzentration sind keine negativen Einwirkungen auf das aquatische Ökosystem zu erwarten.

Die Basis für die Ableitung der PNEC liefern die Ergebnisse von normierten Laborversuchen mit verschiedenen aquatischen Testorganismen. Diese Ergebnisse werden als Effekt-Konzentration EC_{50} , Letale Konzentration LC_{50} (Konzentration bei der 50% der Tiere einen Effekt zeigen bzw. sterben) oder NOEC (Konzentration, bei der keine Effekte festgestellt werden konnten) angegeben. Für die Ableitung der PNEC wird - je nach Anzahl und Art der Testorganismen - diese Konzentration (L(E)C_{50} , NOEC) mit einem Sicherheitsfaktor gemäss der nachfolgenden Tabelle dividiert.

Faktoren für die Ableitung der PNEC bei aquatischen Effekten ¹⁾

Verfügbare Information	Faktoren für die Ableitung der PNEC
niedrigster akuter L(E)C ₅₀ in einem Set mit Daten für Algen, Daphnie und Fisch	1'000
1 chronischer NOEC (Fisch oder Daphnie)	100
2 chronische NOEC in einem Set mit Daten für Fisch und/oder Daphnie und/oder Alge	50
Chronische NOEC in einem Set mit Daten für Fisch, Daphnie und Alge	10
Methode der "Species sensitivity distribution (SSD)" ²⁾	5-1 (nur fallweise gerechtfertigt)
Felddaten oder Modellökosysteme	Review von Fall zu Fall notwendig

PNEC Predicted no effect concentration

NOEC No observed effect concentration

¹⁾ European Communities, 2003. Technical guidance document in support of commission directive 93/67/EEC on risk assessment for new notified substances, of commission regulation (EC) No.1488/94 on risk assessment for existing substances and of Directive 98/8/EC of the European Parliament and of the Council concerning the placing of biocidal products on the market.

²⁾ In sog. SSD-Kurven wird die Verteilung der NOEC-Daten logarithmisch gegen den Prozentsatz der geschädigten Arten aufgetragen. Der normalerweise aus einer solchen Kurve abgeleitete PNEC lässt eine Gefährdung von 5 % der Arten zu, während der Schutz von 95 % der Arten erreicht wird.

Zum Beispiel für 1,1,2,2-Tetrachlorethan wurden 14 Studien zur Ökotoxizität in der Literatur gefunden, jeweils 2 für Algen, 7 für Fische und 5 für verschiedene Wirbellose/Krebstiere (inkl. 3 für Daphnien). Der Datensatz enthält Daten guter Qualität für Algen, Daphnien und Fisch und genügt somit den Anforderungen für die Berechnung eines PNEC-Werts.

Der tiefste EC₅₀-Wert von 0.84 mg/L (für der Wirbellose/Krebstier *Artemia salina*), geteilt durch den Sicherheitsfaktor 1000, liefert den massgebenden PNEC-Wert für 1,1,2,2-Tetrachlorethan von 0.00084 mg/L.

5 Empfohlene Informationsquellen

- [1] Eurochlor (2001) Chlorinated Solvents Digest no. 20
<http://www.eurochlor.org/index.asp?page=358>
- [2] Eurochlor (2005) Chlorinated Solvents Digest no. 27
<http://www.eurochlor.org/upload/documents/document201.pdf>
- [3] Stupp, H.D. (2001) DNAPL in Boden und Grundwasser Verhalten von LCKW und PAK Öle.
<http://www.dscweb.de/Publikationen/DNAPL%20in%20Boden/paper8.html>
- [4] Homepage der deutschen Zeitschrift „Altlasten Spektrum“
<http://altlastendigital.de/homepage.html>:
- [5] Wiedemeier T.H. et. al. (1999) Natural Attenuation of Fuels and Chlorinated Solvents in the Subsurface, ISBN 0-471-19749-1
- [6] United States Environmental Protection Agency (US-EPA) (1998), Technical protocol for evaluating natural attenuation of chlorinated solvents in groundwater, EPA/600/R-98/128
http://www.epa.gov/correctiveaction/resource/guidance/rem_eval/protocol.pdf:
- [7] European chemical Substances Information System (ESIS)
<http://ecb.jrc.it/esis/>
- [8] UK Environment Agency (2003), An illustrated handbook of DNAPL fate and transport in the subsurface, ISBN 1-844-32066-9
<http://publications.environment-agency.gov.uk/epages/eapublications.storefront/47e1410a00dc1ed2273fc0a80296065f/Search/Run>
- [9] U.S. EPA Region 9: Superfund, Preliminary Remediation Goals,
<http://www.epa.gov/region09/waste/sfund/prg/index.html>
- [10] Bundesamt für Umwelt (BAFU) (2000); Richtlinie für die Durchführung von Eluattests gemäss Altlastenverordnung. VU-3409-D
http://www.bafu.admin.ch/publikationen/index.html?action=show_publ&lang=de&id_thema=5&series=VU&nr_publ=3409:
- [11] Altlastenseite des deutschen Bundeslandes Sachsen
http://www.umwelt.sachsen.de/de/wu/umwelt/lfug/lfug-internet/abfall-altlasten_8446.html
- [12] International Agency for Research on Cancer (IARC) (2007), Overall evaluations of carcinogenicity to humans: List of all agents, mixtures and exposures evaluated to date. <http://monographs.iarc.fr/ENG/Classification/crthall.php>:
- [13] Rasmussen, K. (1997), Chlorinated solvents, health effects after long-term exposure, public health perspectives. Doktorarbeit der Universität Århus, Dänemark. http://diggy.ruc.dk:8080/bitstream/1800/500/1/Chlorinated_solvents.pdf
- [14] Michels, J. Track, T. Gehrke, U. Sell, D., (2001) Leitfaden: Biologische Verfahren zur Bodensanierung. Deutsches Umweltbundesamt, Förderkennzeichen 1491064 <http://www.ufz.de/index.php?de=15535>

6 Stoffdatenblätter

Die wichtigsten Eigenschaften, Kennzeichnungen und geltenden Richtwerte der aufgelisteten 15 CKW sind in den nachfolgenden Stoffdatenblättern zusammengefasst:

- 1,2-Dibromethan
- 1,1-Dichlorethan
- 1,2-Dichlorethan
- 1,1-Dichlorethen
- Cis-1,2-Dichlorethen
- Trans-1,2-Dichlorethen
- Dichlormethan
- 1,2-Dichlorpropan
- 1,1,2,2-Tetrachlorethan
- Tetrachlorethen
- Tetrachlormethan
- 1,1,1-Trichlorethan
- Trichlorethen
- Trichlormethan
- Vinylchlorid

Die Zahlenwerte wurden nach bestem Wissen und Gewissen zusammengetragen und auf deren Richtigkeit bzw. Plausibilität, so weit möglich überprüft. Grössere Abweichungen zu Literaturangaben insbesondere bei der Wasserlöslichkeit, Henry Konstante und K_{OC} sind bei einzelnen Stoffen nicht auszuschliessen. Es ist zu beachten, dass die toxikologischen Angaben bei neuen Erkenntnissen von Zeit zu Zeit angepasst werden. Gleiches gilt für die Richt- und Grenzwerte.

Die Einstufung von Stoffen durch die IARC (International Agency for Research on Cancer) ist nur ein Mass für die Wahrscheinlichkeit, dass ein Stoff beim Menschen eine karzinogene Wirkung hat. Die IARC-Einteilung beschreibt nicht die Stärke der karzinogenen Wirkung. Die IARC-Einteilung ist auch stark abhängig von der Menge an verfügbaren bzw. validierten Daten.

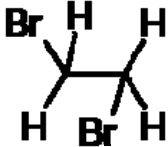
Die IARC-Gruppen sind wie folgt definiert:

- 1 Der Stoff hat eine karzinogene Wirkung auf Menschen.
- 2a Der Stoff hat wahrscheinlich eine karzinogene Wirkung auf Menschen.
- 2b Der Stoff hat möglicherweise eine karzinogene Wirkung auf Menschen.

- 3 Der Stoff ist nicht klassierbar bezüglich Karzinogenität (zu wenig Daten)
- 4 Der Stoff hat wahrscheinlich keine karzinogene Wirkung auf Menschen

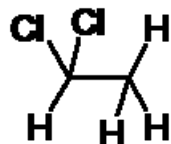
Aufgrund der begrenzten Verfügbarkeit von Daten sind sehr viele Stoffe in der Gruppe 3 eingestuft.

1,2-Dibromethan

Strukturformel		
Synonyme, Abkürzungen	Ethylendibromid (EDB), Ethylenbromid	
CAS Nr.	106-93-4	
Stoffeigenschaften		
Molare Masse (g/mol)	187.9	
Dichte bei 20°C (kg/L)	2.50	
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	1622	
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	4400	
Henry Konstante 25 °C (-)	0.028	
K _{oc} (L/kg)	51	
Biologische Abbaubarkeit		
Aerob (-,+,++)	+	
Anaerob (-,+,++)	+ (nur cometabolisch)	
Toxikologie		
Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	2.0	
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.009	
Slope Factor, inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	2.0	
RfD (oder TDI), inhalativ (mg/kg/Tag)	0.0026	
IARC-Gruppe	2A	
Ökotox.: PNEC (mg/L)	0.004*	
Richt- u. Grenzwerte		
K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.00005	
Trinkwassergrenzwerte (mg/L)	FIV: -	WHO: 0.0004
	EU: -	US-EPA: -
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	-	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration: MAK-CH (mg/m ³ Luft)	0.8	
Verwendung		
Verwendet als (Prozesse, Branche)	Zusatzstoff in bleihaltigem Benzin, Schädlingsbekämpfung, in der chemischen Produktion, als Lösungsmittel	
Bemerkungen		
Diese Verbindung ist prinzipiell abbaubar, ist aber im Untergrund und im Grundwasser eher persistent		
* Wert mit Vorbehalt, vorhandene Daphniendaten entsprechen nicht den Qualitätskriterien		

1,1-Dichlorethan

Strukturformel



Synonyme, Abkürzungen

Ethylidendichlorid, 1,1-DCA

CAS Nr.

75-34-3

Stoffeigenschaften

Molare Masse (g/mol)	98.96
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.18
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	30900
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	5080
Henry Konstante 25 °C (-)	0.245
K _{OC} (L/kg)	38

Biologische Abbaubarkeit

Aerob (-,+,++)	+
Anaerob (-,+,++)	+

Toxikologie

Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	Keine karzinogene Wirkung bekannt
RfD (oder TDI),oral (mg/kg/Tag)	0.1
Slope Factor , inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	Keine karzinogene Wirkung bekannt
RfD (oder TDI), inhalativ (mg/kg/Tag)	0.14
IARC-Gruppe	-
Ökotox.: PNEC (mg/L)	0.2-0.02*

Richt- u. Grenzwerte

K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	3	
Trinkwassergrenzwerte (mg/L)	FIV: -	WHO: -
	EU: -	US-EPA: -
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	100	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	400	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		

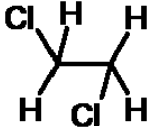
Verwendung

Verwendet als (Prozesse, Branche)	Entfettung u. Reinigung, chem. Produktion, Schädlingsbekämpfung, Abbeizen von Farben
-----------------------------------	--

Bemerkungen

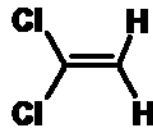
* Nur Fischdaten vorhanden. Wert geschätzt unter der Annahme des Wirkmechanismus Narkose/Basistoxizität. Bereich entspricht zusätzlichem Sicherheitsfaktor von 10.

1,2-Dichlorethan

Strukturformel		
Synonyme, Abkürzungen	Ethylendichlorid (EDC), 1,2-DCA	
CAS Nr.	107-06-2	
Stoffeigenschaften		
Molare Masse (g/mol)	98.96	
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.25	
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	11200	
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	8430	
Henry Konstante 25 °C (-)	0.053	
K _{OC} (L/kg)	31	
Biologische Abbaubarkeit		
Aerob (-,+,++)	+	
Anaerob (-,+,++)	+	
Toxikologie		
Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.091	
RfD (oder TDI),oral (mg/kg/Tag)	0.02	
Slope Factor, inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.091	
RfD (oder TDI), inhalativ (mg/kg/Tag)	0.0014	
IARC-Gruppe	2B	
Ökotox.: PNEC (mg/L)]	1.1	
Richt- u. Grenzwerte		
K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.003	
Trinkwassergrenzwerte (mg/L)	FIV: 0.003	WHO: 0.03
	EU: 0.003	US-EPA: 0.005
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	5	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	20	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		
Verwendung		
Verwendet als (Prozesse, Branche)	Lösungsmittel, Chem. Produktion, Zusatzstoff in verbleitem Benzin, Zwischenprodukt bei der Herstellung von Vinylchlorid,	
Bemerkungen		

1,1-Dichlorethen

Strukturformel



Synonyme, Abkürzungen

1,1-Dichlorethylen (1,1-DCE), Vinylidendichlorid

CAS Nr.

75-35-4

Stoffeigenschaften

Molare Masse (g/mol)	96.94
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.22
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	79400
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	2490
Henry Konstante 25 °C (-)	1.25
K _{oc} (L/kg)	47

Biologische Abbaubarkeit

Aerob (-,+,++)	+ (nur cometabolisch)
Anaerob (-,+,++)	+

Toxikologie

Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	Keine karzinogene Wirkung bekannt
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.05
Slope Factor, inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	Keine karzinogene Wirkung bekannt
RfD (oder TDI), inhalativ (mg/kg/Tag)	0.057
IARC-Gruppe	3
Ökotox.: PNEC (mg/L)	0.0009

Richt- u. Grenzwerte

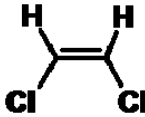
K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.03	
Trinkwassergrenzwerte (mg/L)	FIV: 0.03	WHO: -
	EU: 0.003	US-EPA: 0.007
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	2	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	8	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		

Verwendung

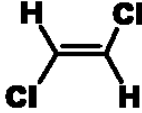
Verwendet als (Prozesse, Branche)	Als Farbenabbeizmittel, Entfettung u. Reinigung, Schädlingsbekämpfung, chem. Produktion, Herstellung des Kunststoffes PVDC
-----------------------------------	--

Bemerkungen

Cis-1,2-Dichlorethen

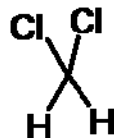
Strukturformel		
Synonyme, Abkürzungen	Acetylendichlorid, Cis-DCE, Cis	
CAS Nr.	156-59-2	
Stoffeigenschaften		
Molare Masse (g/mol)	96.94	
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.27	
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	28100	
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	5090	
Henry Konstante 25 °C (-)	0.219	
K _{oc} (L/kg)	38	
Biologische Abbaubarkeit		
Aerob (-,+,++)	+ (langsam**)	
Anaerob (-,+,++)	+ (langsam**)	
Toxikologie		
Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	Keine karzinogene Wirkung bekannt	
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.01	
Slope Factor, inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	Keine karzinogene Wirkung bekannt	
RfD (oder TDI), inhalativ (mg/kg/Tag)	0.01	
IARC-Gruppe	-	
Ökotox.: PNEC (mg/L)	Keine Angabe: Zu wenig Daten vorhanden	
Richt- u. Grenzwerte		
K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.05*	
Trinkwassergrenzwerte (mg/L)	FIV: 0.05*	WHO: 0.05*
	EU: -	US-EPA: 0.07
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	200	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	790*	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		
Verwendung		
Verwendet als (Prozesse, Branche)	Lösungsmittel für Farben, Tinten, Extraktionen, und Pflanzenschutzmittel, Kühlmittel.	
Bemerkungen		
* Diese Werte beziehen sich auf die Summe von cis- und trans-1,2-Dichlorethen		
** Bevorzugtes Produkt des anaeroben biologischen Abbaus von Tetrachlorethen und Trichlorethen; da die erforderlichen Randbedingungen im Untergrund oft suboptimal sind, wird demzufolge oft eine lokale oder vorübergehende Akkumulation dieses Stoffs beobachtet.		

Trans-1,2-Dichlorethen

Strukturformel		
Synonyme, Abkürzungen	Acetylendichlorid, Trans-DCE, Trans	
CAS Nr.	156-60-5	
Stoffeigenschaften		
Molare Masse (g/mol)	96.94	
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.27	
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	40700	
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	6260	
Henry Konstante 25 °C (-)	0.257	
K _{OC} (L/kg)	48	
Biologische Abbaubarkeit		
Aerob (-,+,++)	+	
Anaerob (-,+,++)	+	
Toxikologie		
Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	Keine karzinogene Wirkung bekannt	
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.02	
Slope Factor, inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	Keine karzinogene Wirkung bekannt	
RfD (oder TDI), inhalativ (mg/kg/Tag)	0.02	
IARC-Gruppe	-	
Ökotox.: PNEC (mg/L)	Keine Angabe: Zu wenig Daten vorhanden	
Richt- u. Grenzwerte		
K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.05*	
Trinkwassergrenzwerte (mg/L)	FIV: 0.05*	WHO: 0.05*
	EU: -	US-EPA: 0.1
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	200	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	790*	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		
Verwendung		
Verwendet als (Prozesse, Branche)	Lösungsmittel für Farben, Tinten, Extraktionen, und Pflanzenschutzmittel als Kühlmittel.	
Bemerkungen		
* Diese Werte beziehen sich auf die Summe von cis- und trans-1,2-Dichlorethen meist sehr untergeordnetes Produkt des anaeroben biologischen Abbaus von Tetrachlorethen und Trichlorethen.		

Dichlormethan

Strukturformel



Synonyme, Abkürzungen

Methylenchlorid, Methylendichlorid, DCM

CAS Nr.

75-09-2

Stoffeigenschaften

Molare Masse (g/mol)	84.93
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.33
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	57500
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	16900
Henry Konstante 25 °C (-)	0.117
K _{oc} (L/kg)	17

Biologische Abbaubarkeit

Aerob (-,+,++)	++
Anaerob (-,+,++)	+

Toxikologie

Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.0075
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.06
Slope Factor, inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.0016
RfD (oder TDI), inhalativ (mg/kg/Tag)	0.86
IARC-Gruppe	2B
Ökotox.: PNEC (mg/L)	0.830

Richt- u. Grenzwerte

K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.02	
Trinkwassergrenzwerte (mg/L)	FIV: 0.02	WHO: 0.02
	EU: -	US-EPA: 0.005
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	100	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	360	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		

Verwendung

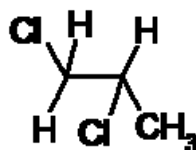
Verwendet als (Prozesse, Branche)

Bei der Herstellung von Leiterplatten, Druckplatten u. Filme. Film/Bildverarbeitung, chem. Produktion, als Kühlmittel, Schädlingsbekämpfung.

Bemerkungen

1,2-Dichlorpropan

Strukturformel



Synonyme, Abkürzungen

Propylenchlorid, 1,2-DCP

CAS Nr.

78-87-5

Stoffeigenschaften

Molare Masse (g/mol)	113.0
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.2
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	6900
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	2800
Henry Konstante 25 °C (-)	0.114
K _{oc} (L/kg)	92

Biologische Abbaubarkeit

Aerob (-,+,++)	-
Anaerob (-,+,++)	+

Toxikologie

Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.068
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.0011
Slope Factor, inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.068
RfD (oder TDI), inhalativ (mg/kg/Tag)	0.0011
IARC-Gruppe	3
Ökotox.: PNEC (mg/L)	0.041

Richt- u. Grenzwerte

K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.005	
Trinkwassergrenzwerte (mg/L)	FIV: -	WHO: 0.04
	EU: -	US-EPA: 0.005
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	75	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration: MAK-CH (mg/m ³ Luft)	350	

Verwendung

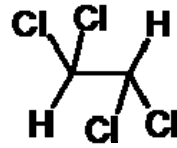
Verwendet als (Prozesse, Branche)	Zusatzstoff bei verbleitem Benzin, Schädlingsbekämpfung, Abbeizen von Farben
-----------------------------------	--

Bemerkungen

WHO Trinkwassergrenzwert gilt als provisorisch aufgrund der begrenzten Verfügbarkeit von Information über diese Verbindung.

1,1,2,2-Tetrachlorethan

Strukturformel



Synonyme, Abkürzungen

Acetylen Tetrachlorid, 1,1,2,2-TCA. R-130

CAS Nr.

79-34-5

Stoffeigenschaften

Molare Masse (g/mol)	167.8
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.60
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	794
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	3270
Henry Konstante 25 °C (-)	0.0166
K _{oc} (L/kg)	225

Biologische Abbaubarkeit

Aerob (-,+,++)	-
Anaerob (-,+,++)	+

Toxikologie

Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.2
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.06
Slope Factor, inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.2
RfD (oder TDI), inhalativ (mg/kg/Tag)	0.06
IARC-Gruppe	3
Ökotox.: PNEC (mg/L)	0.00084

Richt- u. Grenzwerte

K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.001	
Trinkwassergrenzwerte (mg/L)	FIV: -	WHO: -
	EU: -	US-EPA: -
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	1	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	7	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		

Verwendung

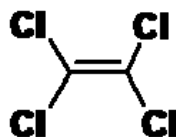
Verwendet als (Prozesse, Branche)	Chem. Produktion, Abbeizen von Farben, Filme u. Druckplatten herstellen, Lösungsmittel für Farben u. Tinten
-----------------------------------	---

Bemerkungen

Zwischenprodukt bei der Herstellung anderer CKW; häufig als Verunreinigung in anderen CKW Produkten

Tetrachlorethen

Strukturformel



Synonyme, Abkürzungen

Perchlorethen, Perchlorethylene,
Tetrachloroethylene, PCE, PER

CAS Nr.

127-18-4

Stoffeigenschaften

Molare Masse (g/mol)	165.8
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.62
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	2500
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	141
Henry Konstante 25°C (-)	0.730
K _{oc} (L/kg)	374

Biologische Abbaubarkeit

Aerob (-, +, ++)	-
Anaerob (-, +, ++)	++ (wird zu Trichlorethen abgebaut)

Toxikologie

Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.54
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.01
Slope Factor, Inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.021
RfD (oder TDI), Inhalativ (mg/kg/Tag)	0.01
IARC-Gruppe	2A
Ökotox.: PNEC (mg/L)	0.051

Richt- u. Grenzwerte

K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.04	
Trinkwassergrenzwerte: (mg/L)	FIV: 0.04	WHO: 0.04
	EU: 0.01*	US-EPA: 0.005
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	50	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	345	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		

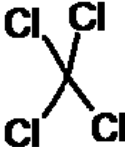
Verwendung

Verwendet als (Prozesse, Branche)	Entfettungsmittel (Metallbearbeitung, Werkstätten Uhren), Reinigungsmittel (chemische Reinigung), Lösungsmittel (chemische Industrien), Herstellung von Druckplatten u. Filme
-----------------------------------	--

Bemerkungen

* Diese Grenzwert bezieht sich auf die Summe von
Tetrachlorethen und Trichlorethen

Tetrachlormethan

Strukturformel	
Synonyme, Abkürzungen	Tetrachlorkohlenstoff, Kohlenstoff Tetrachlorid, R-10, Tetra
CAS Nr.	56-23-5

Stoffeigenschaften

Molare Masse (g/mol)	153.8
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.59
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	14500
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	826
Henry Konstante 25°C (-)	1.10
K _{oc} (L/kg)	238

Biologische Abbaubarkeit

Aerob (-,+,++)	-
Anaerob (-,+,++)	+ (nur cometabolisch)

Toxikologie

Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.013
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.0007
Slope Factor, Inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.053
RfD (oder TDI), Inhalativ (mg/kg/Tag)	0.0007
IARC-Gruppe	2B
Ökotox.: PNEC (mg/L)	0.007

Richt- u. Grenzwerte

K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.002	
Trinkwassergrenzwerte: (mg/L)	FIV: 0.002	WHO: -
	EU: -	US-EPA: 0.005
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	5	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	3.2	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		

Verwendung

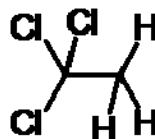
Verwendet als (Prozesse, Branche)	In die Vergangenheit als Lösungsmittel, für Entfettung von Metallteilen in letzter Zeit als Zwischenprodukte in den chemischen Industrien
-----------------------------------	---

Bemerkungen

In Europa seit 1996 verboten

1,1,1-Trichlorethan

Strukturformel



Synonyme, Abkürzungen

Ethyltrichlorid, Methylchloroform, TCA, 1,1,1-TCA

CAS Nr.

71-55-6

Stoffeigenschaften

Molare Masse (g/mol)	133.4
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.34
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	16600
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	1300
Henry Konstante 25°C (-)	0.663
K _{oc} (L/kg)	119

Biologische Abbaubarkeit

Aerob (-,+,++)	-
Anaerob (-,+,++)	+

Toxikologie

Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.057
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.004
Slope Factor, Inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.056
RfD (oder TDI), Inhalativ (mg/kg/Tag)	0.004
IARC-Gruppe	3
Ökotox.: PNEC (mg/L)	0.021

Richt- u. Grenzwerte

K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	2	
Trinkwassergrenzwerte: (mg/L)	FIV: 2	WHO: -
	EU: -	US-EPA: 0.2
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	200	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	1080	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		

Verwendung

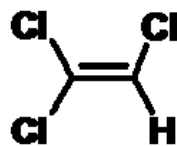
Verwendet als (Prozesse, Branche)	Entfettung von Metallteilen, chemische Reinigung, Herstellung von Farben und Klebstoffen und als Zwischenprodukt in der chemischen Industrie
-----------------------------------	--

Bemerkungen

Verwendung wurde ab 1996 (Montreal Protokoll) stark eingeschränkt, da TCA- Emissionen zum Abbau des stratosphärischen Ozon führen.

Trichlorethen

Strukturformel



Synonyme, Abkürzungen

Trichlorethylen, Ethylentrichlorid
Acetylentrichlorid, Tri, TCE

CAS Nr.

79-01-6

Stoffeigenschaften

Molare Masse (g/mol)	131.4
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.46
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	10000
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	1090
Henry Konstante 25°C (-)	0.490
K _{OC} (L/kg)	185

Biologische Abbaubarkeit

Aerob (-,+,++)	-
Anaerob (-,+,++)	+

Toxikologie

Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.4
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.0003
Slope Factor, Inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.4
RfD (oder TDI), Inhalativ (mg/kg/Tag)	0.01
IARC-Gruppe	2A
Ökotox.: PNEC (mg/L)	0.15

Richt- u. Grenzwerte

K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.07	
Trinkwassergrenzwerte: (mg/L)	FIV: 0.07	WHO: 0.02
	EU: 0.01*	US-EPA: 0.005
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	50	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	260	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		

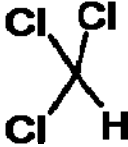
Verwendung

Verwendet als (Prozesse, Branche)	Entfettung Metallteile, Lösungsmittel für Farben u. Tinten, chem. Produktion, chem. Reinigung, Herstellung von Klebstoffen.
-----------------------------------	---

Bemerkungen

* Dieser Grenzwert bezieht sich auf die Summe von Tetrachlorethen und Trichlorethen

Trichlormethan

Strukturformel	
Synonyme, Abkürzungen	Chloroform, Methenylchlorür, Chloretherid, CF, Methinchlorid
CAS Nr.	67-66-3

Stoffeigenschaften

Molare Masse (g/mol)	119.4
Dichte bei 20°C (kg/L)	1.48
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	25100
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	8450
Henry Konstante 25°C (-)	0.144
K _{oc} (L/kg)	71

Biologische Abbaubarkeit

Aerob (-,+,++)	-
Anaerob (-,+,++)	+

Toxikologie

Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	-
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.01
Slope Factor, Inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.081
RfD (oder TDI), Inhalativ (mg/kg/Tag)	0.014
IARC-Gruppe	2B
Ökotox.: PNEC (mg/L)	0.072

Richt- u. Grenzwerte

K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.04	
Trinkwassergrenzwerte: (mg/L)	FIV: 0.04	WHO: 0.3
	EU: 0.1*	US-EPA: 0.08**
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	10	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	2.5	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		

Verwendung

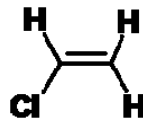
Verwendet als (Prozesse, Branche)	Chem. Produktion, Lösungsmittel für Pflanzenschutzmittel, Aromen, Arzneimittel usw., Herstellung Leiterplatten usw., Anästhetikum, Schädlingsbekämpfung
-----------------------------------	---

Bemerkungen

* Grenzwert für die Summe: Trichlormethan, Tribrommethan, Dibromchloromethan und Bromdichlormethan
 ** für die Summe aller Trihalomethane

Vinylchlorid

Strukturformel



Synonyme, Abkürzungen

Chlorethen, Chlorethylen, VC, VCM

CAS Nr.

75-01-4

Stoffeigenschaften

Molare Masse (g/mol)	62.50
Dichte bei 20°C (kg/L)	0.91
Dampfdruck bei 25°C (Pa = kg m ⁻¹ s ⁻²)	4.00×10 ⁵
Wasserlöslichkeit 25°C (mg/L)	2800
Henry Konstante 25 °C (-)	1.10
K _{oc} (L/kg)	5

Biologische Abbaubarkeit

Aerob (-,+,++)	++
Anaerob (-,+,++)	+

Toxikologie

Slope Factor, oral (mg/kg/Tag) ⁻¹	1.5
RfD (oder TDI), oral (mg/kg/Tag)	0.003
Slope Factor, Inhalativ (mg/kg/Tag) ⁻¹	0.031
RfD (oder TDI), Inhalativ (mg/kg/Tag)	0.029
IARC-Gruppe	1
Ökotox: PNEC (mg/L)	0.210

Richt- u. Grenzwerte

K-Wert, AltIV (mg/L Wasser)	0.0001	
Trinkwassergrenzwerte (mg/L)	FIV: -	WHO: 0.0003
	EU: 0.0005	US-EPA: 0.002
Anforderung an Grundwasser: GSchV (mg/L)	<0.001 (je Einzelstoff)	
K-Wert AltIV, (mL/m ³ Porenluft)	2	
Maximale Arbeitsplatz Konzentration:	5.2	
MAK-CH (mg/m ³ Luft)		

Verwendung

Verwendet als (Prozesse, Branche)	Herstellung von Kunststoff (PVC)
-----------------------------------	----------------------------------

Bemerkungen

Produkt des anaeroben biologischen Abbaus von Tetrachlorethen, Trichlorethen und cis-/trans-1,2-Dichlorethen.