MODULARES SYSTEM ZUR BEWERTUNG GESUNDHEITLICHER RISIKEN VON UMWELTKONTAMINANTEN IN TRINKWASSER

vorgelegt von

Diplom Ingenieur
Hans-Martin Mulisch
Beratender Ingenieur in Potsdam

Von der Fakultät III – Prozesswissenschaften
der Technische Universität Berlin

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften
- Dr.-Ing. -

genehmigte Dissertation

Berlin 2004

D 83

MODULARES SYSTEM ZUR BEWERTUNG GESUNDHEITLICHER RISIKEN VON UMWELTKONTAMINANTEN IN TRINKWASSER

vorgelegt von

Diplom Ingenieur
Hans-Martin Mulisch
Beratender Ingenieur in Potsdam

Von der Fakultät III - Prozesswissenschaften
Technische Universität Berlin

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften
- Dr.-Ing. -

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr. Wolfgang Rotard

Berichter: Prof. Dr.-Ing. Martin Jekel

Prof. Dr. Peter Werner

Privat Dozent Dr. Hermann H. Dieter

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 16.08.2004

Berlin 2004
D 83

Mulisch, Hans-Martin

Modulares System zur Bewertung gesundheitlicher Risiken von Umweltkontaminanten in Trinkwasser

ZUSAMMENFASSUNG

Dem Vorsorgeanspruch der Trinkwasserhygiene entsprechend wurde ein Verfahrenskonzept entwickelt, das eine prospektive Bewertung potentieller Umweltkontaminationen zulässt. Die Problematik wurde zunächst am Beispiel militärischer Altlasten dargestellt und darauf aufbauend in ein umfassend anwendbares Bewertungssystem für Böden und Gewässer verallgemeinert. Über die Beschreibung der stofflichen Eigenschaften von Umweltkontaminanten wurden Werte der Stoffcharakteristiken (SC-Werte) berechnet, die in ihrer Kombination eine mögliche Exposition und Gefahr (Risiko) bei der Trinkwassergewinnung aus Grund- oder Oberflächenwasser aufzeigen.

Für die Gefahrenfeststellung wurden in einem zweiten Schritt eindeutige gesundheitsbezogene Expositionsgrenzen in Form von Maßnahmewerten (kurzfristige gesundheitliche Leitwerte LW_{KE}) im Rahmen von humantoxikologischen Bewertungen sowie zulässige Höchstkonzentrationen (HZK) durch aquatoxikologische Bewertungen erarbeitet. Mit ihrer Hilfe kann darüber entschieden werden, ob die chemische Qualität eines kontaminierten Trinkwassers (noch) gesundheitlich sicher ist und ob die chemische Qualität eines kontaminierten Gewässers die aquatische Biozönose nachteilig beeinflussen könnte.

MODULARES SYSTEM ZUR BEWERTUNG GESUNDHEITLICHER RISIKEN VON UMWELTKONTAMINANTEN IN TRINKWASSER

INHALT

1 Einleitung und Fragestellung 1

Erster Teil: Anlass und Grundlagen der Risikobetrachtung 3

2 Risiken aus militärischen Aktivitäten und Altlasten 3

2.1 Umweltrelevante Emissionen aus militärischen Altlasten 3

2.1.1 Altstandorte der Militärproduktion 4

2.1.2 Altstandorte des Militärbetriebes 6

2.2 Rechtliche Grundlagen 7

2.3 Sofortmaßnahmen und Defizite 12

3 Grundlagen der Risikoabschätzung 13

3.1 Risikobewertung in den Bereichen Umwelt und Gesundheit - Ansätze und Erfahrungen 13

3.2 Betrachtung bisheriger Lösungsvorschläge zur Bewertung gesundheitlicher Risiken durch Umweltchemikalien 15

3.2.1 Identifikation der Gefahr 16

3.2.2 Bestimmung der Toxizität 18

3.2.3 Bewertung der Exposition 19

3.2.4 Charakterisierung des Risikos 20

Zweiter Teil: Bewertungsmethodik für Trinkwasser 21

4 Methodik zur Feststellung von Gefahren für Trinkwasser 21

4.1 Der Bewertungskomplex 23

4.2 Die Datensätze der Bewertungskomplexteile A, B und C 24

4.2.1 Bewertungskomplexteil A 26

4.2.2 Bewertungskomplexteil B 28

4.2.3 Bewertungskomplexteil C 30

4.3 Das Bewertungsraster der Gefährdungsstufen für Trinkwasser (GS) 31

4.4 Arbeitsschritte des Bewertungsrasters für die Komplexteile A, B und C 34

4.4.1 Arbeitsschritte von Bewertungskomplexteil A 37

4.4.2 Arbeitsschritte von Bewertungskomplexteil B 38

4.4.3 Arbeitsschritte von Bewertungskomplexteil C 40

5 Feinstruktur von Bewertungskomplexteil C: Stoffcharakterisierungssystem zur Bewertung von Umweltkontaminanten (SCS) 42

5.1 Herkunftsbereiche und Gruppencharakteristik 42

5.2 Expositions- und Gefährdungspotential für den Menschen 44

5.2.1 Stoffcharakteristik der Toxizität - SC_{TOX} 44

5.2.2 Voraussage der Toxizität aus Struktur-Wirkungsbeziehungen - SC_{TOX-Y} 47
5.2.3 Stoffcharakteristik der biochemischen Abbaubarkeit - SC_{BIO} 52
5.2.4 Voraussage der biochemischen Abbaubarkeit aus Struktur-Aktivitäts-Beziehungen - SC_{BIO-Y} 60
5.2.5 Stoffcharakteristik des abiotischen Abbaus von Umweltsubstanzen - SC_{HYD}, SC_{FOT} 62
5.2.6 Stoffcharakteristik der umwelttoxikologischen Relevanz - SC_{TOR} 62
5.3 Stoffliche Mobilität - SC_{MOB} 63
5.4 Stoffliche Aquatoxizität - SC_{AQU} 69
5.5 Übersicht über das Substanz-Charakterisierungs-Systems (SCS) 73

6 Bewertungskomplexteile D und E: Gefahrenfeststellung für Sanierungsentscheidungen 75

6.1 Feststellung von Risiken bzw. Gefahren für aquatische Organismen 75
6.2 Feststellung von Risiken bzw. Gefahren für den Menschen 76
6.3 Gesundheitlich motiviertes Risiko- bzw. Gefahrenmanagement 82

Dritter Teil: Ergebnisse der Bewertung und Diskussion 83

7 Untersuchungsergebnisse zur Gefahrenfeststellung von militärischen Altlasten auf die Trinkwasserversorgung in den neuen Bundesländern 83

7.1 Die Westgruppe der Truppen (WGT) der Sowjetunion bzw. der Gemeinschaft Unabhängiger Staaten (GUS) 83
7.1.1 Bestandsaufnahme 83
7.1.2 Bewertung 83
7.2 Die deutschen Truppen der Nationalen Volksarmee (NVA) 89
7.2.1 Bestandsaufnahme 89
7.2.2 Bewertung 90

8 Stoffcharakterisierung und Risikoquantifizierung am Beispiel von Hexogen 93

8.1 Stoffcharakterisierung 93
8.1.1 Herkunftsbereich und Gruppencharakteristik 94
8.1.2 Stoffliche Mobilität - SC_{MOB} 94
8.1.3 Aquatoxizität - SC_{AQU} 97
8.1.4 Toxizität - SC_{TOX} 99
8.1.5 Biochemischer Abbau - SC_{BIO} 102
8.1.6 Umwelttoxikologische Relevanz - SC_{TOR} 104
8.2 Feststellung von Risiken bzw. Gefahren für die aquatische Umwelt 104
8.3 Feststellung von Risiken bzw. Gefahren für den Menschen 105
8.4 Diskussion und Schlussfolgerungen 106

9 Zusammenfassung 109

10 Verzeichnisse 111

10.1 Tabellen 112
10.2 Bilder 117

10.4 Abkürzungen und Glossar 118

11 Anhang 127

11.1 Auswahl von Altlasten-relevanten militärischen Kampfmitteln und Daten für die Erstbewertung zur Feststellung einer Anscheinsgefahr 128

11.1.1 Chemische Kampfstoffe 128

Hautkampfstoffe 128

Erstickende Kampfstoffe / Blut- und Nervenkampfstoffe 129

Nasen- Rachenreizstoffe 129

Augenreizstoffe 130

11.1.2 Explosivstoffe 136

11.2 Leistungsbild für Planer- und Gutachterleistungen mit Ergänzungen 141

11.3 Aus der Nutzungshistorie militärischer Liegenschaften abgeleitete kontaminationsverdächtige Nutzungsbereiche (KVN) und Verdachtskontaminanten (Targetstoffe) aus umweltrelevanten Vorgängen 148

11.4 Kurzdarstellung des Bewertungssystems BZ_{TOX} nach DIETER 159

11.5 Aquatoxizität SC_{LOEC} - Beispiele für einige Umweltchemikalien 162

11.6 Stoffcharakterisierung und Risikoquantifizierung von Umweltkontaminanten für die aquatische Umwelt und die menschliche Gesundheit 163

11.6.1 Kriterien der Stoffcharakteristik für die trinkwasserhygienische Bewertung 163

- Nitrofen [1836-75-5] 163
  - Herkunftsbereich und Gruppencharakteristik 163
  - Stoffliche Mobilität - SC_{MOB} 165
  - Aquatoxizität - SC_{AQU} 168
  - Toxizität - SC_{TOX} 170
  - Biochemischer Abbau - SC_{BIO} 174
  - 8.1.1.6 Umwelttoxikologische Relevanz – SC_{TOR} 176
- Dodecylbenzolsulfonat [25155-30-0] 177
  - Herkunftsbereich und Gruppencharakteristik 178
  - Stoffliche Mobilität - SC_{MOB} 178
  - Aquatoxizität - SC_{AQU} 181
  - Toxizität - SC_{TOX} 183
  - Biochemischer Abbau - SC_{BIO} 186
  - Umwelttoxikologische Relevanz - SC_{TOR} 189
- Toxaphen [8001-35-2] 190
  - Herkunftsbereich und Gruppencharakteristik 190
  - Stoffliche Mobilität - SC_{MOB} 191
  - Aquatoxizität - SC_{AQU} 194
  - Toxizität - SC_{TOX} 196
  - Biochemischer Abbau - SC_{BIO} 200
  - Umwelttoxikologische Relevanz - SC_{TOR} 202
- Ethylenglykol [107-21-1] 203
  - Herkunftsbereich und Gruppencharakteristik 203
  - Stoffliche Mobilität - SC_{MOB} 204
  - Aquatoxizität - SC_{AQU} 206
  - Toxizität - SC_{TOX} 208

- Biochemischer Abbau - SC_{BIO} 212
- Umwelttoxikologische Relevanz - SC_{TOR} 214

• Röntgenkontrastmittel (RKM) Iopromid [73334-07-3] 214
- Herkunftsbereich und Gruppencharakteristik 215
- Stoffliche Mobilität - SC_{MOB} 215
- Aquatoxizität - SC_{AQU} 218
- Toxizität - SC_{TOX} 220
- Biochemischer Abbau - SC_{BIO} 225
- Umwelttoxikologische Relevanz - SC_{TOR} 227

11.6.2 Feststellung von Risiken bzw. Gefahren für die aquatische Umwelt 227
• Nitrofen 227
• Dodecylbenzolsulfonat 228
• Toxaphen 228
• Ethylenglykol 228
• Iopromid 229

11.6.3 Feststellung von Risiken bzw. Gefahren für den Menschen 229
• Nitrofen 229
• Dodecylbenzolsulfonat 231
• Toxaphen 231
• Ethylenglykol 232
• Iopromid 233

12 Literaturverzeichnis 235

1 EINLEITUNG UND FRAGESTELLUNG

Die Exposition des Menschen gegenüber chemischen Substanzen, freigesetzt durch anthropogenen Einfluss, ist aufgrund des jahrzehntelangen Einsatzes dieser Stoffe und der qualitativ und quantitativ zunehmenden chemischen Produktion insgesamt - trotz verstärkter gegenläufiger Anstrengungen[1] - als ansteigend einzustufen **(INC 5 2000)**. Zu unterscheiden sind diese Umweltchemikalien hinsichtlich ihrer Herkunftsbereiche (vgl. Kapitel 5) in solche, die absichtlich und nutzenorientiert in die Umwelt gelangen - z.B. Pflanzenbehandlungsmittel (vor allem Herbizide, Insektizide und Fungizide) sowie Antibiotika, (z.B. Penicilline, Chloramphenicol) und in solche, die ungewollt, fahrlässig oder aus mangelhafter Vorsorge (z.B. polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe und Dioxine) in die Umwelt gelangt sind oder noch gelangen. Dabei stellen die in der Vergangenheit verursachten Altlasten einen erheblichen Anteil dieser Umweltkontaminationen. Bei der Bewertung der Gefährlichkeit der Stoffe gilt für Stoffe des erstgenannten Herkunftsbereichs das Vorsorgeprinzip. Umweltrelevanten Altlasten lässt sich hingegen nur durch Nachsorge begegnen. Zu beachten sind dabei mögliche und reale Kontaminationen bezüglich der Nahrungskette und der Trinkwasserressourcen.

Die Abgabe von Stoffen aus Altlasten über die Umweltmedien Wasser, Boden und Luft in die menschliche Nahrungskette bedeutet insbesondere dann ein gesundheitliches Risiko[2], wenn die Stoffe toxisch und in der Umwelt biochemisch stabil sind oder wenn deren Metabolite toxikologisch noch kritischer zu bewerten sind als die Ausgangssubstanzen. Toxizität und Abbaubarkeit bilden somit die Schlüsselkriterien der Risikobewertung.

Die unterschiedlichen Zielsetzungen von Vorsorge und Nachsorge werden bei militärischen Aktivitäten besonders deutlich: In Friedenszeiten gilt auch beim Militär das Vorsorgeprinzip, wenn vielleicht nicht uneingeschränkt, so doch in vieler Hinsicht (vgl. z.B. Minimierungsgebot TrinkwV). Kriegerische Auseinandersetzungen dagegen sind aufgrund ihrer zerstörerischen Zielstellung immer und selbstverständlich mit der Freisetzung von gefährlichen und toxischen Substanzen verbunden, die alle Umweltkompartimente einschließlich Grundwasser betreffen. Neben einer möglichen direkten und sofortigen Schadwirkung von Sabotagegiften, Kampfstoffen und sonstigen Kampfmitteln beim Menschen führen militärische Aktivitäten auch zu einer direkten bzw. indirekten Gefährdung von Trinkwasserressourcen. Als Folge der langfristigen Kontamination der Umweltkompartimente Wasser, Boden und Luft durch militärische Einsatzstoffe in Altlasten erreichen über die Zeit Einträge dieser Umweltchemikalien die menschliche Nahrungskette. Sollen Gefahren für Mensch und Natur weitestgehend vermieden werden, bleibt nur der Weg einer intensiven Nachsorge durch Sanierungsmaßnahmen.

Gegenstand dieser Arbeit ist die Darlegung von Kriterien zur Bewertung gesundheitlicher Risiken für den Menschen am Beispiel von Umweltkontaminanten im Trinkwasser. Die Bewertungskriterien werden zunächst am Beispiel militärischer Altlasten entwickelt und darauf aufbauend in ein umfassend anwendbares Bewertungssystem für Böden und Gewässer verallgemeinert. Die Feststellung möglicher gesundheitlicher Gefahren durch schädliche Wirkungen der Stoffe erfolgt über naturwissenschaftliche Methoden und Kriterien; sie sollen sowohl Wissenslücken berücksichtigen, als auch die Zusammenhänge zwischen Exposition und Wirkung von Schadstoffen in den Umweltmedien und dem Trinkwasser aufzeigen. Inhaltlich

[1] z.B. die seit 2001 in der INC 5 - POP-Konvention geächteten und mit einem Anwendungsverbot belegte Substanzen (als „...völkerrechtlich bindendes Instrument zur Implementierung internationaler Maßnahmen hinsichtlich bestimmter persistenter organischer Stoffe“ - POP-Konvention v. 10.12.2000 in Johannesburg; vgl. Umwelt Nr. 2 /2001, BMU, Berlin)

[2] Risiko „Wagnis, Gefahr; Verantwortung“: Im 16. Jh. aus gleichbd. *it.* riscio, risco (heute rischio) entlehnt; ... um 1800 folgt das Partizipialadj. riskant „gefährlich, gewagt“ (aus gleichbed. *fr.* risquant) **(Drosdowiski 1963)**.

werden in der vorliegenden Arbeit die für den Menschen gefahrbestimmenden Kriterien speziell für den Trinkwasserpfad systematisiert und die Kongruenz der rechtlich-normativen Maßstäben und der hieraus abzuleitenden Maßnahmen für die Umweltmedien (Boden, Grundwasser und Trinkwasser) mit einem Risikomanagement auf wissenschaftlicher Grundlage überprüft. Dazu wird eine Risikoabschätzung am Beispiel von Trinkwasserkontaminationen in Einzugsgebieten unternommen, die durch militärische Aktivitäten einer potentiellen Kontamination ausgesetzt sind. Dem Vorsorgeanspruch der Trinkwasserhygiene entsprechend wird ein Verfahrenskonzept entwickelt.

Der erste Teil der Arbeit beschreibt die Grundlagen zur Bewertung umweltrelevanter Emissionen aus militärischen Altstandorten und Altablagerungen der Militärproduktion, die geltenden rechtlichen Anforderungen, die Sofortmaßnahmen zur Gefahrenbeseitigung sowie die naturwissenschaftlichen Grundlagen und Methoden der Risikoabschätzung. Aus den beschriebenen Qualitätsanforderungen an Trinkwasser und der Divergenz zwischen Vorsorgeanspruch und Nachsorgeerfolg bei der Gefahrenabwehr werden die Defizite bisheriger Maßnahmen und die Zielbestimmung der Arbeit deutlich.

Im zweiten Teil werden, aufbauend aus diesen Erkenntnissen, die Kriterien der liegenschafts- und schadstoffbezogenen Risikobewertung für den Trinkwasserpfad aufgezeigt und in einem mehrteiligen Bewertungskomplex modular strukturiert dargestellt. Es wird angeregt, das Leistungsbild „Altlasten“ **(AHO e.V. 1996)** um die hier genannten trinkwasserrelevanten Bewertungsgrößen zu ergänzen, z.B. durch den Kriterienkatalog für die Erstbewertung von Trinkwassergefährdungen mittels Gefährdungsstufen von GS I bis GS VI. Vertiefend wird die schadstoffspezifische Bewertung zum umfassenden Stoff-Charakterisierungs-Systems (SCS) erweitert. Zu diesem Zweck werden die bestimmenden stoffspezifischen Parameter der Humantoxizität, der Abbaubarkeit und der Mobilität der Stoffe sowie aquatoxikologische Kriterien erfasst, quantifiziert und in Form von Koeffizienten miteinander verknüpft, so dass wissenschaftlich abgesicherte Gesamtaussagen zur Umwelt- bzw. (Trink-)Wasserrelevanz der Umweltchemikalien[3] entstehen.

Ziel der Arbeit „Modulares System zur Bewertung gesundheitlicher Risiken von Umweltkontaminanten in Trinkwasser“ ist die verstärkte Einbindung der Vorsorge in die Bewertung von Umweltschäden einschließlich der aus militärischen Altlasten. Je nach Bewertungsbedarf fasst das SCS die Bewertung gewässerhygienisch und humantoxikologisch relevanter Stoffeigenschaften in Form einer „prospektiven“ Bewertungszahl (Gefahrenvorhersage) oder einer „retrospektiven“ Höchstkonzentration (Gefahrenfeststellung) zusammen. Die Bewertungsergebnisse bilden somit eine Arbeitsgrundlage für gesetzliche Vorgaben wie die Trinkwasserverordnung und das Bundesbodenschutzgesetz.

[3] Mit Umweltchemikalien werden hier chemische Stoffe bezeichnet, die über verschiedene Pfade anthropogen in die Umwelt eingetragen wurden.

ERSTER TEIL: Anlass und Grundlagen der Risikobetrachtung

2 RISIKEN AUS MILITÄRISCHEN AKTIVITÄTEN UND ALTLASTEN

Eine wesentliche Gruppe gesundheitlich relevanter und persistenter Umweltkontaminanten bilden die militärchemischen Stoffe. Die weltweiten Kriege im 20. Jahrhundert hatten und haben schwerwiegende umweltrelevante Zerstörungen und langfristige Kontaminationen der Umweltkompartimente Boden und Grundwasser durch militärische Altlasten zur Folge. Die oft geäußerte Hoffnung, viele der als gefährlich eingestuften militärchemischen Stoffe im Boden bauten sich kurzfristig zu unwirksamen Konzentrationen ab, bestätigt sich i.d.R. nicht **(Mulisch 1999; Mulisch, Dieter et al. 1999)**.

Weltweit haben militärische Aktivitäten insbesondere auch in Form regionaler Konflikte um beschränkte Ressourcen, wie z.B. Trinkwasser, zugenommen **(Konfliktforschung 2000)**. Aktuelle Schlüsselereignisse wie die Kriege in Afghanistan, im Kosovo, in der Demokratischen Republik Kongo, Angola, Tschetschenien, Osttimor und in anderen Teilen der Welt **(Herbert Wulf und Brzoska 2000)** belegen Bedrohungen der menschlichen Gesundheit durch Umwelt(kriegs-)schäden über den Pfad Grund-, Roh-, Trinkwasser z.B. in Folge von

- Bombardierung von Industrieanlagen, wodurch große Mengen toxischer Einsatzstoffe und Umwandlungsprodukte freigesetzt werden und direkt in das Grundwasser gelangen können (dabei wurden z.B. im Kosovo-Krieg neben großen Mengen von Mineralölen, Ammoniak, Phenolen, Säuren und Alkalien sowie Schwermetallen wie Cadmium, Chrom, Kupfer, Zink und Quecksilber auch große Mengen von chlorierten Kohlenwasserstoffen wie Dichlorethylen sowie die kanzerogenen Substanzen Vinylchlorid und Dioxine freigesetzt),
- direkten Wasserverunreinigungen durch Explosivstoffreste, eingeschlossen die Verseuchung durch Bomben mit abgereichertem Uran, die zum großen Teil unbekannte Auswirkungen auf das Grundwasser und folglich die Nahrungskette in den betroffenen Regionen nach sich ziehen können,
- Schäden an Wasserversorgungs- und Abwassersystemen sowie von Energieversorgungseinrichtungen durch direkte Bombardierung (z.B. im Kosovo einschließlich Albanien und Montenegro);
- weiterhin wird in der Politik aktuell die weltweit zunehmende Sorge um eine Bedrohung von Trinkwasservorräten durch Sabotage und Terrorakte z.B. in Form von Brunnenvergiftungen geäußert.

In Deutschland konnte infolge der Entspannungspolitik und der Einigung Deutschlands verbunden mit dem Abzugs der westlichen Alliierten aus den alten Bundesländern sowie der Westgruppe der Truppen der ehemaligen Sowjetarmee und die Auflösung der DDR-Truppen in den neuen Bundesländern eine erste umweltwissenschaftliche Bestandsaufnahme des Altlastenspektrums auf den entsprechenden militärischen Flächen beginnen. Aufgrund der jahrzehntelangen Nutzung unter militärischer Geheimhaltung sind neben Bodenbelastungen auch Belastungen von Grund- und Trinkwasser zu verzeichnen **(FKST 1994)**.

2.1 Umweltrelevante Emissionen aus militärischen Altlasten

Bei der Klassifizierung von militärischen Altlasten - gemäß der Einteilung des Rates von Sachverständigen für Umweltfragen - in Altstandorte der Militärproduktion (Standorte der Rüstungsindustrie) und Altstandorte des Militärbetriebes (militärische Anlagen) sollen

Differenzierungen nach stofflichen Gesichtspunkten vorgenommen werden. [4] Bei den Altstandorten der Militärproduktion sind über branchentypische Inventarisierungen von Einsatzstoffen und deren Bilanzierung Aussagen zur stofflichen Zusammensetzung (Stoffspektren) potentieller Kontaminationen **(BMBau 1995)** möglich. Auf Altstandorten des Militärbetriebes erfolgt die Aufteilung der Flächen in Nutzungsbereiche, denen bestimmte Schadstoffe bzw. Schadstoffgruppen zugeordnet werden (z.B. Mineralölkohlenwasserstoffe bei Tankanlagen, Lösungsmittel, wie chlorierte Kohlenwasserstoffe, in Technikbereichen u.a.). Bei historischer Überlagerung verschiedener militärischer Nutzungen können Kontaminationsprofile für die jeweiligen Betriebsflächen erarbeitet werden **(Forsthofer et al. 1995)**.

Kontaminationen aus militärischen Altlasten betreffen hauptsächlich die Umweltmedien Boden und Grundwasser und hiermit direkt verbundene Systeme (Bodenluft, Oberflächenwasser, Vegetation, Trinkwasser). Die atmosphärische Luft ist aufgrund der in ihr stattfindenden schnellen chemischen Umsetzungsprozesse (unterstützt durch photochemische Reaktionen durch das Sonnenlicht und der Bildung freier Radikale) durch militärische Altlasten i.d.R. nicht mehr betroffen. Auch die hoch toxischen chemischen Kampfstoffe sind langfristig in der freien Atmosphäre wenig beständig.

2.1.1 Altstandorte der Militärproduktion

Altstandorte der Militärproduktion sind Sprengstoff-, Pulver-, Kampf- und Nebelstofffabriken, Füllstellen und Munitionsanstalten (MUNA), ebenso wie Plätze, auf denen nach dem Zweiten Weltkrieg Munition gelagert, gesprengt oder vergraben wurde. Bei den Altstandorten der Rüstungsindustrie ist zu unterscheiden zwischen den Produktions-, Lager- und Delaborierungsstätten der Rüstungsgüter. Die allgemein als Kampfmittel bezeichneten Produktgruppen sind im wesentlichen die Explosivstoffe (vgl. Tabelle 2.1) und die chemischen Kampfstoffe.

Die ehemaligen Rüstungskomplexe lagen produktionsbedingt in grundwasserreichen Gebieten und weisen daher im allgemeinen ein hohes Gefährdungspotential für Boden und Grundwasser auf. Kontaminationsrelevante Vorgänge haben insbesondere dort stattgefunden, wo Einsatzstoffe oder Produkte umgeschlagen bzw. verfüllt wurden bzw. bei der Reinigung oder Wartung von Maschinen oder Behältern. Die Reinigungsabwässer waren im allgemeinen durch Explosivstoffe wie vor allem Trinitrotoluol (TNT) hoch kontaminiert. Zu den für die Umwelt bedeutenden Altlastverdachtsflächen zählen insbesondere Brandplätze, auf denen Explosivstoffreste und Fehlchargen verbrannt wurden. Bei Kampfstoff- bzw. Kampfmittellagern sind aufgrund von strengen Kontrollmaßnahmen kontaminationsrelevante Vorgänge im allgemeinen geringer anzusetzen als z.B. in Füllstationen, bei denen allein aufgrund der damaligen Verfahrenstechnik mit Verlusten gerechnet wurde. Sprengungen der Siegermächte nach dem 2. Weltkrieg haben im Umfeld von ehemaligen Großanlagen zu weitflächigen Kontaminationen geführt.

Explosivstoffe

Als Explosivstoffe fanden hauptsächlich brisante Sprengstoffe Verwendung, da sie handhabungssicher sind und hohe Detonationsgeschwindigkeiten haben. Wichtige Vertreter sind 2,4,6-Trinitrotoluol (TNT) und 1,3 Dinitrobenzol (DNB) neben Hexogen (Cyclotrimethylentrinitramin, vgl. Kapitel 8) und Pikrinsäure (2,4,6-Trinitrophenol) sowie Nitropenta und Tetryl. Um zu detonieren, müssen die brisanten Sprengstoffe durch hochempfindliche Initialsprengstoffe gezündet werden. Hierzu gehören u.a. neben Nitropenta (Pentaerythrit-

[4] Für den Teilbereich der besonderen Belastungen durch konventionelle und chemische Kampfstoffe und -mittel schlägt der Sachverständigenrat für Umweltfragen im Sondergutachten "Altlasten II" die Bezeichnung "Militärchemische Altlasten" vor **(SfU 1995)**.

tetranitrat) und Tetryl (N-Methyl-2,4,6,N-Tetranitroanilin) vor allem Bleiazid, Quecksilberfulminat, Thalliumazid und Tetrazen. Als Füllmittel für Mienen dienen u.a. Sprengstoff-Treibmittel-Gemische wie Nitroguanidin-Ammoniumnitrat-Paraffin oder Nitroglycerin (Glyceroltrinitrat). Pulversprengstoffe sind Mischungen von Treibmitteln mit speziellen anderen Stoffen, z.B. Dynamit (Nitroglyzerin an Kieselgur adsorbiert). Bei der Pulverherstellung wurden der in Nitroglyzerin gelösten Nitrocellulose zur Stabilisierung Diphenylamin und als weitere Komponenten Nitroguanidin, Dinitrotoluol, Hexogen und TNT zugesetzt.

Tabelle 2.1 Rüstungsaltlasten: Beispiele von Explosivstoffen

Gruppen von Explosivstoffen	**Wirkung / Handhabung**	**Stoffe**
Brisante Sprengstoffe (hauptsächlich militärische Sprengstoffe)	Handhabungssicher, hohe Detonationsgeschwindigkeiten, müssen durch Initialsprengstoffe gezündet werden	Hauptsächlich: z.B. 2,4,6-TNT; 1,3-DNB; 2,4,6-Trinitrophenol (Pikrinsäure); Cyclotrimethylentrinitramin (Hexogen); Pentaerythrittetranitrat (Nitropenta); N-Methyl-N-2,4,6, -tetranitroanilin (Tetryl); untergeordnete Bedeutung: z.B. Nitroxylole; 1,3,5-Trinitrobenzol, Nitronaphthaline; Nitrokörpergemische; Guanidinnitrat
Initialsprengstoffe	Hochempfindlich, explodieren bereits bei schwachen mechanischen Stößen sowie bei Funken- und Flammenzündung	Pentaerythrittetranitrat (Nitropenta); N-Methyl-N-2,4,6, -tetranitroanilin (Tetryl), u.a.
Sprengstoff-Treibmittel-Gemische	Füllmittel für Minen	Nitroguanidin + Ammoniumnitrat + Paraffin; Nitroguanidin + Diethylenglykoldinitrat (DEGN) bzw. Nitroglycerin
Treibmittel (hauptsächlich im zivilen Bereich)	Pulversprengstoffe: Mischungen von Treibmitteln mit speziellen anderen Stoffen; flüssige Sprengstoffe: Mischungen von Treibmitteln unter Zusatz von Sprengölen	Natrium- bzw. Kaliumnitrat + Ammoniumnitrat (Wettersprengstoff); Dynamit (Nitroglycerin an Kieselgur adsorbiert); Ammoniumnitrat mit Sprengölen (flüssige Salpetersäureester) z.B. Glyzeroltrinitrat (Nitroglycerin); Diethylenglykoldinitrat (DEGN); Nitroglykol

Mengenmäßig am bedeutendsten wurde der Sprengstoff TNT hergestellt und in Gieß- bzw. Pressladungen für Bomben-, Minen-, Granatenfüllungen und für Torpedos (z.B. in Mischungen mit Ammoniumnitrat, Hexogen oder Hexanitrodiphenylamin) verwendet (vgl. auch Kapitel 11.1 Anhang).

Chemische Kampfstoffe (CW-Agenzien)

Heute sind Tausende von Stoffen durch ihre giftige Wirkung bekannt, aber nur einige werden als für die chemische Kriegsführung (CW = *chemical war*) als geeignet angesehen. Während des 20. Jahrhunderts wurden ca. 70 verschiedene Chemikalien als CW-Agenzien verwendet und gelagert. Die aufgrund ihrer wahrhaft grausamen Wirkung heute weltweit geächteten chemischen Kampfstoffe unterscheidet man z.B. nach der Hauptwirkung auf den menschlichen Organismus in

- Reizkampfstoffe als Augen- (z.B. Chloracetophenon), Nasen- und Rachenreizstoffe (z.B. Adamsit),
- Blutkampfstoffe (z.B. Blausäure, Chlorcyan),
- Hautkampfstoffe (z.B. Schwefel- und Stickstofflost),
- Lungenkampfstoffe (z.B. Phosgen, Diphosgen),
- Nervenkampfstoffe (z.B. Tabun, Sarin, Soman, VX),
- Psychokampfstoffe (z.B. LSD-25).

Die heute noch z.B. in Amerika oder Russland produzierten chemischen Kampfstoffe sind nur in Ausnahmefällen gasförmig. Normalerweise sind es Flüssigkeiten bzw. Feststoffe. Der wirksame Anteil der entsprechenden Substanz erreicht die Luft entweder in flüchtiger Form oder als Aerosol. Insbesondere die flüssigen chemische Kampfstoffe sind in der Lage, die Haut schnell zu durchdringen.

Die chemischen Kampfstoffe sind je nach Wasserlöslichkeit grundwasserrelevant und in Abhängigkeit vom pH-Wert hydrolytisch unterschiedlich stabil (vgl. Kapitel 11.1 Anhang) [5].

2.1.2 Altstandorte des Militärbetriebes

Auf den Altstandorten des Militärbetriebes erfolgte die Anwendung der militärischen bzw. sonstigen Einsatzstoffe insbesondere zu Übungszwecken. Die Altstandorte werden nach den ehemaligen Hauptnutzungen, z.B. als Truppenübungs- oder Standortübungsplätze, Kasernenanlagen, Technikstützpunkte, Flugplätze, Raketenstellungen usw. registriert. Auch auf Liegenschaften, deren Nutzungshistorie umweltrelevante Altlasten zunächst nicht vermuten lassen (z.B. Verwaltungsgebäude, Wohnunterkünfte u.a.), sind vereinzelt erhebliche Kontaminationen bis ins Grundwasser festgestellt worden, welche auch die Trinkwasserversorgung bedrohen können. Dies sind jedoch Ausnahmen. Auf Übungsplätzen ist hingegen aufgrund des direkten Einflusses militärischer Aktivitäten (z. B. Bombodrome, Panzerschießbahnen etc.) über diffuse Einträge mit flächig verteilten Altlasten durch Munition zu rechnen. Ebenso sind durch Betankungen im Feld flächige Kontaminationen mit Mineralölen in Boden und Grundwasser entstanden. Punktförmige Belastungen gehen von einzelnen Betriebsbereichen wie Technikbereichen, Brandmittelplätzen, Waschplätzen für militärisches Gerät usw. aus oder entstehen aufgrund von Einzelereignissen (Havarien).

Viele Altlastenstoffe auf militärischen Flächen finden sich analog auch in zivilen Altlasten, wie z.B. Mineralölprodukte aus Treibstofflagern für Kraftfahrzeuge und Flugzeuge (Vergaser- und Dieselkraftstoffe, Kerosin, vgl. Tabelle 2.2). Aufgrund bisheriger Ergebnisse durchgeführter Altlastenerkundungen stehen diese Mineralölkohlenwasserstoffe (MKW) quantitativ sogar an erster Stelle. Daneben finden sich hauptsächlich organische Lösemittel (z.B. chlorierte Kohlenwasserstoffe), wie sie in großen Mengen in Technikbereichen und in Panzerwaschanlagen angewendet wurden. Pflanzenbehandlungs- und Schädlingsbekämpfungsmittel (PBSM) sind als Totalherbizide zur flächigen Freihaltung von Pflanzenbewuchs z.B. auf dem innerdeutschen Grenzstreifen. bzw. als Entlaubungsmittel bei militärischen Einsätzen in großen Mengen verwendet worden.

Auf ABC-Ausbildungsplätzen (zur Abwehr atomarer, biologischer und chemischer Kampfstoffe) sind Kontaminationen vor allem bei der Anwendung von vorzugsweise radioaktiven und chemischen Imitationsstoffen und Dekontaminationsvorgängen sowie durch den Einsatz von Brand- und Nebelmitteln entstanden. Originalkampfstoffe wurden zu

[5] die hydrolytische Spaltung bewirkt zudem eine Absenkung der akuten Toxizität der arsenbasierten Kampfstoffe, schützt jedoch nicht vor der chronischen toxischen Wirkung des Arsens

Übungszwecken nur in sehr geringen Mengen eingesetzt (vorzugsweise Chloracetophenon, das sich aufgrund des hohen Dampfdruckes sehr rasch in der Atmosphäre verflüchtigt). Auf vielen militärischen Liegenschaften wurden wilde Müllkippen oft unbekannter Zusammensetzung und Nutzungsdauer angelegt. Dabei blieben die besonderen Randbedingungen für das Anlegen von Deponien und die Regelungen zu Nutzungsbeschränkungen für die Trinkwassergewinnung im Einzugsgebiet vielerorts unberücksichtigt **(DVGW 1991).**

Tabelle 2.2 Beispiele für grundwasserrelevante Schadstoffgruppen aus Rüstungs- und militärischen Altlasten

Militärspezifische Schadstoffgruppen	**Analog zivile Schadstoffgruppen**
u.a. anorganische und organische Nitroverbindungen und Schwermetallazide aus Explosivstoffen Treibmittel (z.B. Raketentreibstoffe), Sprengstoffe, Initialsprengstoffe (Zündstoffe), Schall-, Rauch- und Nebelsätze u.a. organische Phosphor- und Arsenverbindungen aus chemischen Waffen chemische Kampfstoffe (Gift-, Reiz-, Psychokampfstoffe, Nervenkampfstoffe), Nebel- und Rauchmittel, Brandmittel (z.B. Napalm), Pflanzenbehandlungs- und Schädlingsbekämpfungsmittel (PBSM) als Totalherbizide	Mineralölprodukte (MKW z.B. aus Ölen und Kraftstoffen) organische Lösemittel (z.B. chlorierte Kohlenwasserstoffe) Pflanzenbehandlungs- und Schädlingsbekämpfungsmittel (PBSM) Abwässer und Abfälle (z.B. Siedlungsabfälle, Sondermülldeponien, auch radioaktive Abfälle) aliphatische Kohlenwasserstoffe (z.B. aus Heizungsanlagen) polycyclische organische Kohlenwasserstoffe (PAKs, z.B. Benz(a)pyren) chlorierte Kohlenwasserstoffe (z.B. polychlorierte Biphenyle PCBs als Transformatorenöle)

2.2 Rechtliche Grundlagen

Zur Gefahrenfeststellung aus Umweltkontaminationen sind für die unterschiedlichen Umweltkompartimente Wasser, Boden, Luft bzw. die menschliche Gesundheit im Kontakt mit diesen Medien oder Umweltchemikalien verschiedene Rechtsnormen entwickelt worden. Zentraler Gegenstand dieser Rechtsnormen ist i.d.R. der Mensch in der Betrachtung

a) seiner Auswirkungen auf die Umwelt bzw.
b) von Folgewirkungen auf die schutzbedürftigen Rechtsgüter
    a. der menschlichen Gesundheit,
    b. von Sachgütern und
    c. der natürlichen Lebensgrundlagen.

Das gemeinsame Ziel dieser Rechtsnormen liegt sowohl in der Vermeidung von Gefahren für den Menschen als auch für die Umweltkompartimente selbst.

Kontaminationen der Umwelt durch Umweltchemikalien sind streng genommen alle stofflichen Belastungen der Umweltmedien Wasser, Boden oder Luft, die über die natürlichen regionalen geochemischen Konzentrationen hinausgehen. Diese natürlichen Konzentrationen (Hintergrundwerte) schwanken z.B. für Schwermetalle regional aufgrund unterschiedlicher geologischer Gegebenheiten (oder bestimmter Nutzungen) für Böden und Grundwässer mitunter erheblich.

Die Formulierung von umweltbezogenen Rechtsnormen ist bezüglich der Gefahrenfeststellung i.d.R. an den traditionell entstandenen polizeirechtlichen Gefahrenbegriff gebunden[6]. Eine Gefahr liegt vor, wenn eine Beeinträchtigung der öffentlichen Sicherheit und Ordnung noch nicht eingetreten, aber zu befürchten, d.h. mit Wahrscheinlichkeit zu erwarten ist. Umweltschutz ist aufgrund dieser Tradition definiert als ein Mittel zum Schutz von „Leib und Leben der Bürger" vor schädlichen anthropogenen Einflüssen des Menschen durch „den technischen Fortschritt" bzw. hierdurch verursachte Umweltkontaminationen (Sicherheitsbegriff).

Der polizeirechtliche Gefahrenbegriff schließt das Schutzgut Umwelt als „Gleichgewicht eines kinetisch-dynamischen Systems vieler komplex miteinander vernetzten Lebensgemeinschaften (einschließlich der Lebensgemeinschaft der Menschen)" nicht mit ein. Dieser so genannte ökozentrische Ansatz wird in der Rechtsgebung bzw. bei der Festlegung von Maßnahmen ausschließlich im Zusammenhang mit dem Vorsorgegedanken diskutiert.

Näher ist uns durch den Beschluss des Weltklimagipfels in Rio 1992 und der Agenda 21 der Gedanke der *Nachhaltigkeit* beim Umgang mit natürlichen (und beschränkten) Ressourcen gebracht worden. Im Zusammenhang mit der Feststellung von Gefahren aus Umweltkontaminationen gilt hier die Maxime, dass ... „das Kontaminationsmaß der natürlichen Ressourcen deren natürliche Selbstreinigungskraft nicht übersteigen darf". Der Begriff der „natürlichen Selbstreinigungskraft" ist in Rio nicht explizit ausformuliert worden „...", offen ist z.B. die Bestimmung des Zeitraums der natürlichen Selbstreinigungskraft, eine Angabe von Zielkonzentrationen des Selbstreinigungsprozesses usw. In Umsetzung bzw. für den Vollzug dieser und anderer Maximen sollen internationale bzw. nationale Umweltstandards bzw. dort festgelegte Werte dienen.

Sowohl auf Bundes- als auch auf Landesebene wird in der relevanten Gesetzgebung, die sich auf die Bewertung von Schadstoffen im Boden, im Grund- und im Trinkwasser bezieht, auf Vorsorge-, Richt-, Prüf-, Maßnahme- bzw. Grenzwerte[7] als Konzentrationswerte von Schadstoffen im Umweltmedium gezielt, unterhalb derer die Unbedenklichkeit bestimmter Nutzungen regulatorisch bescheinigt werden kann. Die Überschreitung dieser Werte kann zu gesundheitlichen Risiken führen und wäre dann im polizeirechtlichen Sinn mit Gefahrenabwehrmaßnahmen verknüpft. Die Festlegungen solcher Werte in Gesetzeswerken sind i.d.R. das Resultat einer Konsensfindung verschiedener gesellschaftlicher Belange und Interessen.

Die Konkretisierung dieser allgemeinen Maßstäbe über spezialgesetzliche Regelungen bereitet im Einzelfall beachtliche Schwierigkeiten. Während das Wasserrecht z.B. generell die Beeinträchtigung des Wohls der Allgemeinheit verhindern will (vgl. § 6 WHG) und damit den Vorsorgegedanken in den Gefahrenbegriff einführt, reicht bei Grundwassergefahren die bloße Besorgnis einer Verunreinigung aus (§ 34 (2) WHG). Mit der Einordnung einer konkret

[6] Die Abwehr von Gefahren und die Beseitigung von Störungen für die öffentliche Sicherheit und Ordnung sind im Polizeirecht und Ordnungsrecht geregelte Aufgaben der Polizei und der Ordnungsbehörden. Die Gefahr muss konkret sein, d.h. sie muss an Ort und Stelle drohen und nach allgemeiner Lebenserfahrung erwarten lassen, dass sie sich zu einer Beeinträchtigung der öffentlichen Sicherheit und Ordnung verdichten wird.

[7] *Vorsorgewerte* zielen auf eine wünschenswerte Qualität im Hinblick auf den Schadstoffgehalt eines Umweltmediums bzw. Lebensmittels; *Grenzwerte* sind Zahlenwerte in Rechtsnormen, die mit Messwerten auf Grundlage einer definierten Probenahme- und Analyseprozedur verglichen werden. Aus dem Vergleich ergeben sich Anweisungen für den Vollzug der Rechtsnorm. *Richtwerte* sind Zahlenwerte ohne zwingende Folgerungen für den Vollzug. Grenz- und Richtwerte werden unter dem international gebräuchlichen Oberbegriff „Standards" zusammengefasst. *Prüfwerte* im Sinne des Bundesbodenschutzgesetztes [BBodSchG] sind Werte, bei deren Überschreiten unter Berücksichtigung der Nutzung eine einzelfallspezifische Prüfung auf Schädlichkeit durchzuführen ist; *Maßnahmenwerte* sind Werte für Einwirkungen oder Belastungen, bei deren Überschreiten unter Berücksichtigung der jeweiligen Nutzung i.d.R. von einer schädlichen Bodenveränderung oder Altlast nach BBodSchG auszugehen ist, die durch geeignete Maßnahmen abzuwehren ist.

vorgefundenen Grundwasserbeschaffenheit in die vorgenannten Kriterien sind Behörden und Gerichte in vielen Fällen überfordert. Demnach besteht die Forderung der Praxis nach einfach zu handhabenden Maßstäben.

Für den Vollzug des Bodenschutzes gelten die Bestimmungen des Bundesbodenschutzgesetzes **(BBodSchG 1998)**. Im Rahmen der Nachsorge werden in der Verknüpfung mit dem polizeirechtlichen Gefahrenbegriff Grundstücke zu Altstandorten, wenn auf ihnen mit umweltgefährdenden Stoffen umgegangen wurde. Hieraus resultiert jedoch nur dann Handlungsbedarf, wenn von den Altstandorten bestimmte Wirkungen ausgehen, die eine *konkrete Gefahr* beinhalten (*Sicherheitsbegriff* und nicht Vorsorge). Altlastverdächtige Flächen im Sinne des BBodSchG sind Altablagerungen und Altstandorte, bei denen der Verdacht schädlicher Bodenveränderungen oder sonstiger Gefahren für den Einzelnen oder die Allgemeinheit besteht. Existiert auf Grund konkreter Anhaltspunkte ein hinreichender Anfangsverdacht, soll die zuständige Landesbehörde zur Ermittlung des Sachverhaltes die geeigneten Maßnahmen ergreifen. Sie kann anordnen, dass i.d.R. der Verursacher bzw. Grundstückseigentümer die notwendigen Untersuchungen zur Gefährdungsabschätzung durchführt. Demnach wird bei militärischen Altlasten nur dann von Kontaminationen gesprochen, wenn aus behördlich festgestellten Altlastverdachtsflächen Stoffkonzentrationen oder -frachten in die Umweltkompartimente eingetragen werden, die oberhalb von festgelegten Prüf- bzw. Maßnahmewerten liegen. Die 1999 erlassene Bundesbodenschutzverordnung (BBodSchV) nennt Prüfwerte für altlastenrelevante Schadstoffe zur Beurteilung von schädlichen Bodenveränderungen. Die Prüfwerte resultieren aus einem Vergleich der für einzelne Nutzungsszenarien (Kinderspielflächen, Wohnnutzung, Park- und Freizeitgelände, Industrie- und Gewerbeflächen) abgeschätzten Expositionen und toxikologisch begründeten Körperdosen. Die Prüfwerte sind verknüpft mit dem polizeirechtlichen Gefahrenbegriff, d.h. bei Erreichen der Exposition auf dem Niveau der Prüfwerte ist die Möglichkeit der hinreichenden Wahrscheinlichkeit eines Gefahreneintritts gegeben und es muss überprüft werden, ob die Möglichkeit im konkreten Fall gegeben ist. Falls ja, müssen Maßnahmen zur Expositionsminderung ergriffen werden. Im Falle von karzinogenen Stoffen wurde eine Risikohöhe von $5 \cdot 10^{-5}$ als Gefahrenniveau definiert **(Konietzka und Dieter 1998)**. Die Ableitung von Prüfwerten eines Stoffes findet für karzinogene und nicht-karzinogene Wirkungen getrennt statt. Der tiefere Bodenwert wird als Prüfwert vorgeschlagen, wenn nicht eine Plausibilitätsprüfung (zur Berücksichtigung des ubiquitären Hintergrundes in Boden und Nahrung, zu Ergebnissen aus Biomonitoring - Studien etc.) Modifikationen sinnvoll erscheinen lässt **(Bachmann 1999)**.

Die *Vorsorgepflicht* für das Grundwasser richtet sich entsprechend dem Wasserhaushaltsgesetz (WHG) grundsätzlich nach wasserrechtlichen Vorschriften **(WHG 1986)**. Da eine Kontamination von Grundwasser, welches als solches ein Schutzgut der öffentlichen Sicherheit und Ordnung darstellt, bereits eine Gefahr im ordnungsrechtlichen Sinn darstellt, erscheint es vom juristischen Standpunkt aus gesehen für die Auslösung von Maßnahmen zwar nicht notwendig, eine zusätzliche Gefahr für die menschliche Gesundheit oder ein bestimmtes Wasserwerk aufzuzeigen[2]. Es gilt aber als unstrittig, dass dort, wo Altlasten in Einzugsgebieten des sensiblen Nutzungsbereichs der Trinkwassergewinnung liegen, diese aus Gründen der Gesundheitsvorsorge und des Gesundheitsschutzes vorrangig zu untersuchen und, falls dies

[2] "Der Schutz des Grundwassers über § 34 WHG ist unabhängig von den speziell für die Beschaffenheit des Trinkwassers bestimmten Anforderungen. Die Annahme einer Gefährdung des Grundwassers setzt nicht voraus, dass eine unmittelbare Gefährdung des Trinkwassers festgestellt wird." (Leitsätze des Umweltbundesamtes). BVerwG, 24.8.98, 4 B 59.89. NVwZ, 1990, H.5, S. 474.

erforderlich ist, auch prioritär zu sanieren sind[3]. Für die Wasserwirtschaft ist diesbezüglich aus wirtschaftlicher Sicht eine Differenzierung der Ressourcennutzbarkeit nach Tabelle 2.3 sinnvoll **(Dörhofer 1998)**. Für diese abgestufte Betrachtungsweise gibt es aus der Zielstellung des flächendeckenden Grundwasserschutzes allerdings in Deutschland z.Z. keine normative Grundlage.

Tabelle 2.3 Differenzierung der Nutzbarkeit von Grundwasservorkommen in Deutschland zur Trinkwassergewinnung

Nutzbarkeit für Trinkwasserzwecke	Aussage
Hoch	Grundwasservorkommen mit sehr hoher Ergiebigkeit von überregionaler Bedeutung
Mittel	Grundwasser mit hoher Ergiebigkeit von regionaler Bedeutung
Gering	Grundwasser mit geringer Ergiebigkeit
Kein Nutzen	Flächenhaft mineralisiertes oder verunreinigtes Grundwasser

In der Diskussion, ob bzw. inwieweit Bewirtschaftungskonzepte des Grundwassers als Trinkwasser bei der Gefahrenbewertung berücksichtigt werden sollen, hatte der 60. Deutsche Juristentag bereits 1994 eindeutige Beschlüsse gefasst (Deutscher Juristentag 1994). Der Grad der Wahrscheinlichkeit, der für die Annahme einer Gefahr zu fordern ist, ist demgemäß abhängig von der Wertigkeit des Schutzgutes. Je höherwertig das Schutzgut, desto geringere Anforderungen müsse an die Wahrscheinlichkeit gestellt werden. Der menschlichen Gesundheit wird dabei (in Ableitung des polizeirechtlichen Gefahrenbegriffs) der höchste Rang als Schutzgut eingeräumt.

Die Güteanforderungen an die Trinkwasserqualität orientieren sich gemäß der **(DIN 2000)** an der Qualität eines aus genügender Tiefe und aus ausreichend filtrierenden Schichten gewonnenen Grundwassers von einwandfreier Beschaffenheit. Insofern ist der Qualitätsanspruch an Grundwasser und Trinkwasser identisch. Bei Verunreinigung der Wasserressource durch Altlasten müssen für die Auslösung von Maßnahmen zur Gefahrenbeseitigung zunächst die unterschiedlichen Expositionen als umwelthygienische Bewertungsgrundlage von Grundwasser- bzw. Roh-/Trinkwasserkontaminationen deutlich gemacht werden.

Qualitätsansprüche an Grundwässer orientieren sich an der natürlichen stofflichen Zusammensetzung, die sich aufgrund der spezifischen geologischen und hydrogeologischen Situation einer Region in langen Zeitabläufen gebildet hat (Hintergrundbeschaffenheit). Eine Gefährdung des Grundwassers und die damit verknüpfte Auslösung von Sicherungs- und Sanierungsmaßnahmen wäre aus umwelthygienischen Gesichtspunkten dann gegeben, wenn bei Überschreiten dieser Hintergrundwerte z.B. lokale natürliche Ökosysteme durch ökotoxische Wirkungen gestört werden. Der Gefahrenbezug ist auf das Schutzgut Grundwasser als Bestandteil unserer Umwelt gerichtet.

Eine Gefahr für die menschliche Gesundheit durch kontaminiertes Roh- bzw. Trinkwasser beurteilt sich nach der Wirkung der zu erwartenden Exposition, die in absehbarer Zeit eine Beeinträchtigung (einen Schaden) für diese Schutzgüter mit hinreichender Wahrscheinlichkeit erwarten lässt.

[3] "Eine Beeinträchtigung des Wohls der Allgemeinheit im Sinne des § 6 WHG ist regelmäßig zu erwarten, wenn die Nutzung des Wassers als Trinkwasser gesundheits- und seuchenpolizeiliche Bedenken auslösen kann." (Erweiterung gegenüber BVerwG 55, 220 (229)). BVerwG, 17.3.89, 4 C 30.88. Keppeler, J., NVwZ, 1992, H. 2, S. 137-141.

Die Qualität von Trinkwasser aus der öffentlichen Wasserversorgung in Deutschland ist in der Trinkwasserverordnung (TrinkwV) festgelegt. Die Grenzwerte der Trinkwasserverordnung sind das Resultat verschiedener Aspekte des Trinkwasserschutzes. Die Anforderungen an Trinkwasser, die u.a. durch die Trinkwassergrenzwerte definiert sind, orientieren sich neben toxikologischen weiterhin an ästhetischen, sensorischen und technischen Größen der Wasseraufbereitung, z.B. der Chlorung bei hygienisch nicht einwandfreiem Rohwasser. Die Trinkwassergrenzwerte eignen sich daher nicht immer zur Bewertung von Gefahren für die menschliche Gesundheit. Bei kanzerogenen Stoffen wie z.B. Vinylchlorid sind Krebsrisikobetrachtungen Bestandteil der Überlegungen zur Grenzwertfestlegung[8] **(Höll 2002)**.

Die für die Bewertung von Trinkwasserverunreinigungen zugrunde zu legende EU-Richtlinie 98/83/EC zur Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch und die hieraus in nationales Recht formulierte Trinkwasserverordnung **(TrinkwV 2001)** fordern Sanierungsmaßnahmen im Falle von Grenzwertüberschreitungen bzw. der Besorgnis auf Gefährdungen für die menschliche Gesundheit auch für Stoffe, die nicht dort explizit aufgeführt sind. (vgl. Artikel 9 (e) der Richtlinie 98/83/EC und § 9 der TrinkwV 2001).

Die Standards der EU-Richtlinie von 1998 orientieren sich stark an denen der Leitlinien der WHO für Trinkwasser (*Guidelines for drinking-water quality*) von 1993 **(WHO 1993)**. Hier werden gesundheitliche Richtwerte für anorganische und organische Schadstoffe im Trinkwasser angegeben. Für krebserzeugende Stoffe gibt die WHO als Rechenhilfe den Standard von 1 : 100.000 (10^{-5}) als rechnerisches Zusatzrisiko für die orale Exposition an, die dann entsprechend umgerechnet werden kann (vgl. auch Kapitel 6).

Die Auslösung von Sicherungs- und Sanierungsmaßnahmen bei Trinkwasserbelastungen ist durch den Gefahrenbezug auf das Schutzgut „Mensch" gegeben. Für die Gefahrenbewertung werden - neben den Grenzwerten der Trinkwasserverordnung - Parameterwerte benötigt, durch deren Unterschreitung eine direkte Abwehr von Gefahren für die menschliche Gesundheit im polizeirechtlichen Sinn gegeben ist.

Zum Risiko vom chemischen Substanzen hat die Europäische Union verschiedene Richtlinien und Verordnungen erlassen. Hierzu gehören die Richtlinie 92/32/EEC des Rates v. 30. April 1992 zur Anpassung der Richtlinie 67/548/EEC über die Klassifizierung, Verpackung und Beschriftung von Substanzen (*7th Amendment* **EEC 1992**) sowie die Verordnung 793/93/EEC des Rates bezüglich dem Risiko von neuen bzw. vorhandenen Substanzen **(EEC 1993b)**. Die allgemeinen Prinzipien der Risikobewertung sind in der Richtlinie der Kommission 93/67/EEC für neue Substanzen **(EEC 1993a)** und der Verordnung der Kommission (EC) No. 1488/94 für bestehende Substanzen **(EEC 1994)** dargelegt. Das offiziell etablierte Verfahren hierzu ist in „Technical Guidance Documents in Support of the Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for New Notified Substances and the Commission Regulation (EC) 1488/94 on Risk Assessment for Existing Substances" dargestellt.

Aufgrund der dargelegten Sachverhalte ist es erforderlich, dass bei Sanierungsentscheidungen zu Altlasten in Einzugsgebieten der Trinkwasserversorgung die Bewertung von Gefahren mit Hilfe stoffspezifischer gesundheitlicher Leitwerte für Roh-/Trinkwasser erfolgt, welche den Anforderungen der Trinkwasserhygiene genügen. Da es sich bei Altlasten um anthropogen eingetragene Stoffe handelt, können diese auf toxikologischer Basis mit bundesweit einheitlichen Werten in Einzugsgebieten der Trinkwasserversorgung die Auslösung notwendiger Sanierungsmaßnahmen bzw. deren zeitlich strukturierte Prioritätensetzung absichern.

[8] Dem Anspruch, eine Gefahr für die menschliche Gesundheit durch kontaminiertes Trinkwasser für jeden Einzelfall auszuschließen, kann spätestens hier nicht mehr entsprochen werden.

Das Sanierungsziel durchzuführender Maßnahmen liegt in der Wiederherstellung der Trinkwasserqualität, die sich dabei an den Güteanforderungen der DIN 2000 und dem Minimierungsgebot der Trinkwasserverordnung orientieren muss **(DIN 2000)**.[9]

2.3 Sofortmaßnahmen und Defizite

Seit Ende der 80er Jahre gibt es Bestrebungen der Bundesregierung und der Länder, Gefahren für Trinkwasserressourcen zu erfassen, die von Militärflächen in Deutschland ausgehen können **(Deutscher Bundestag 1992)**. In einer Bund-Länder-Arbeitsgruppe (AG) hatte die Fachkommission Soforthilfe Trinkwasser des Bundesministeriums für Gesundheit Gefahrerforschungsmaßnahmen für Trinkwasser auf den Liegenschaften der ehemaligen DDT-Truppen und der Westgruppe der Truppen der Sowjetarmee begonnen. In die Bewertungsarbeit der AG flossen alle Erkundungsergebnisse des Bundes und der neuen Länder ein. In ihrer fünfjährigen Tätigkeit konnte die AG verschiedene Belastungsschwerpunkte erkennen und in konsensualer Meinungsfindung erste Sofortmaßnahmen auslösen **(FKST 1996)**.

Auf der Grundlage weitergehender Recherchen von militärischen Liegenschaften der WGT und der NVA in Forschungsvorhaben des Umweltbundesamtes **(Mulisch 1999)** und des Freistaates Sachsen **(Mulisch 1998)** wurden Ursachen und potentielle Kontaminanten ermittelt. Aufbauend auf diesen Vorhaben wird nachfolgend ein Verfahrenskonzept zur Erkennung von Gefahren für Trinkwasserressourcen geschaffen. Die folgenden Kapitel entwickeln im zweiten Teil der Arbeit die Methodik zur Risikobewertung von Umweltchemikalien. Im dritten Teil wird die Methodik in Einzelstoffbewertungen angewendet und Leitwerte für ein Risikomanagement für Grund- und Trinkwasser im Umfeld von Altlasten - einschließlich militärischer Liegenschaften - abgeleitet.

[9] Wie oben dargestellt erscheint es jedoch nicht sinnvoll, Sanierungszielwerte für Grundwässer grundsätzlich an den Grenzwerten der Trinkwasserverordnung - soweit dort aufgeführt - zu orientieren. Diese liegen z.B. für chemische Parameter i.d.R. weit über den geogen bedingten Hintergrundwerten im Grundwasser.

3 GRUNDLAGEN DER RISIKOABSCHÄTZUNG

3.1 Risikobewertung in den Bereichen Umwelt und Gesundheit - Ansätze und Erfahrungen

Die Risiko-Begrifflichkeit hat ihre Wurzeln in der Entscheidungstheorie, der Ökonomie und in den Ingenieurwissenschaften. Im wissenschaftlichen Sinn bezeichnet die Risikobewertung Methoden bzw. Techniken zur Berechnung der Wahrscheinlichkeit von Schadensereignissen bzw. der Störung normalerweise zu erwartender bzw. erhoffter Geschehnisabläufe.

Techniken der Risikobewertung werden heute bereits in einem breiten Feld von unterschiedlichen Arbeitsgebieten angewendet. Sie sind eine wichtige Grundlage und ein Ansatzpunkt bei der Bewertung von Umweltproblemen unterschiedlichsten Ursprungs geworden, z.B. bei der Bewertung von Umweltrisiken durch Chemikalien, ionisierte Strahlung oder spezielle industrielle oder auch militärtechnische Anlagen. Die wesentlichen Anwendungsfelder sind insbesondere

- die Bewertung potentieller schädlicher Folgen, die sich aus der Vielfalt anthropogener und insbesondere industrieller Aktivitäten für die menschliche Gesundheit und für ökologische Systeme ergeben könnten,
- die Bewertung von mit neuen regulierenden Standards oder Richtlinien verbundenen potentiellen gesundheitlichen Risiken im Sinne ihrer richtigen Festsetzung und
- die Bestimmung des erforderlichen Umfangs der Sanierung eines kontaminierten Standortes.

Risikobewertungen verwenden wissenschaftliche Daten und Kompetenzen und sind Ausgangspunkt für eine regulative Entscheidungsfindung. Der risikobasierte Ansatz versucht, die von einem Geschehen tatsächlich anstehenden Risiken zu bewerten, falls sie sich aus potentiellen Gefahren ergeben können.

Die rein gefahrenbasierte Herangehensweise, z.B. im Altlastenbereich, identifiziert im Boden einen toxischen Stoff und leitet ab einem bestimmten Parameterwert entsprechende Maßnahmen ein, um die toxische Konzentration auf einen vereinbarten Standard zu reduzieren oder eine Exposition auf andere Art und Weise zu verhindern; durch die Abarbeitung dieser Schritte ist die Gefahr für die Allgemeinheit beseitigt (vgl. Kapitel 2.2).

Die risikobasierte Herangehensweise bei der Bewertung von Altlasten beginnt mit der Identifikation des Altlastenstoffes und dessen toxischer Wirkung auf den Menschen. Die Höhe des notwendigen Sanierungsbedarfs hängt weitestgehend von der Expositionswahrscheinlichkeit des Stoffes im Zusammenhang mit der weiteren Nutzung - bzw. dem gesundheitlichen Risiko[10] bei einer bestimmten zukünftigen Nutzung - der Altlastenfläche ab.

Ziel der Risikoabschätzung ist die systematische und rationale Ermittlung einer möglichst richtigen Aussage über die Wahrscheinlichkeit einer Gefährdung bzw. über die Risikohöhe einer Kontamination. Die Standardisierung der Abschätzungs- und Bewertungskriterien ist dabei eine wichtige Vorleistung vonseiten der wissenschaftlichen Vorgehensweise, um den Prozess der Risikoabschätzung zu objektivieren, zufallsbedingte Aussagen einzuschränken und das Ergebnis

[10] Der Begriff des „gesundheitlichen Risikos“ hat u.a. auch eine lange Tradition in der Beschreibung gesundheitlicher Gefahren, die sich wissenschaftlich nicht hinreichend beschreiben ließen bzw. lassen. Die Umwelthygiene bzw. die Umweltmedizin befassen sich mit gesundheitlichen Risiken für den Menschen aus Umweltbelastungen (bzw. -kontaminationen) und deren Vermeidung bzw. Linderung.

intersubjektiv kommunizierbar zu gestalten. Gleichzeitig muss die Handlungsfähigkeit für den Vollzug der administrativen Aufgaben gewährleistet sein **(Balzereit 1999)**.

Gerade im Altlastenbereich ist deutlich geworden, dass es keine praktische Lösung gibt, die jegliches Restrisiko ausschließt. Ähnlich wie auch z.B. für (natürliche) Strahlenbelastungen, ist für bestimmte Umweltchemikalien eine gesundheitlich sichere Grenzkonzentrationen z.Z. nicht ableitbar (z.B. gentoxische Karzinogene). Ein „risikofreies Leben" wird es insbesondere unter Zugrundelegung der wirtschaftlichen Angemessenheit von Maßnahmen auch in ferner Zukunft nicht geben können. Daher sind bei Expositionen ohne gesundheitlich ableitbare Schwellenwerte die Regulatoren gefordert, die resultierenden Risiken für die Gesellschaft darzustellen. Ihre Höhe orientiert sich, unter den Prämissen des technisch Möglichen, wirtschaftlich Vertretbaren und gesellschaftlich „Akzeptablen", am Minimierungsgebot.[11]

Grundlagen der Risikobewertung liegen traditionell in der Prüfung von Effekten, die die menschliche Gesundheit schädigen können. Weiterhin besteht die Möglichkeit, potentielle Umwelteffekte in die Risikobewertung einzubeziehen. Dabei ist man bemüht, mögliche Folgen einer Umweltkontamination durch Bewertungselemente der Umweltchemie und (Öko-)Toxikologie zu erfassen.

Schwierigkeiten entstehen bereits bei der Auswahl der einzubeziehenden absoluten Kriterien

1. der Humantoxikologie,
2. der Ökotoxikologie

sowie der (in Blick auf 1 und 2) relativen Kriterien von

3. Expositions- und Transportmodellen sowie
4. chemischen und biochemischen Abbaumechanismen

der Stoffe in der Umwelt bzw. im menschlichen Körper.

Weiterhin sind die verfügbaren Basisdaten dieser Kriterien oft mit Unsicherheiten behaftet oder lückenhaft. Gerade im Umgang mit unsicheren Daten und Datenlücken gibt es bisher keinen gemeinsamen Konsens. So gelten z.B. für einige Institutionen Substanzen für nicht bewertbar, bis die Datenlage für eine sichere wissenschaftliche Aussage ausreichend ist (z.B. IRIS[12] der EPA). Für andere Institutionen gelten erste Anzeichen für eine schädliche Wirkung als ausreichend für die Bewertung bis das Gegenteil bewiesen ist. Die unterschiedliche Herangehensweise ist dann kein Widerspruch, wenn die resultierenden Aussagen entsprechend qualifiziert werden. Datenlücken sind daher soweit wie möglich in die Risikobewertung einzubeziehen. Hierdurch wird sowohl resultierender Handlungsbedarf aufgezeigt und eingegrenzt, als auch dem Vorsorgeprinzip [13] in der Bewertung entsprochen. [14] Die Risikobewertung steht also prinzipiell nicht im Widerspruch zum Vorsorgeprinzip; beide Vorgehensweisen führen auch nicht zwingend zu unterschiedlichen Ergebnissen.

Obwohl die Risikobewertung wissenschaftlich abgesicherte Aussagen als Grundlage für die Gesetzgebung und Regulation im Umweltbereich liefert, werden die Ergebnisse nicht unbedingt akzeptiert, sondern auch kontrovers diskutiert. Anlass für Streit sind i.d.R. die Verfügbarkeit und

---

[11] vgl. zum Beispiel **(TrinkwV 2001)**

[12] IRIS = *Integrated Risk Information System* der EPA (U.S. Environmental Protection Agency)

[13] dem Vorsorgeprinzip folgend wird alles getan, was in einem gegebenen Szenario zu tun erwartet werden kann, um unnötige Risiken zu verhindern **(Gee 1997)**

[14] bisher wird das Vorsorgeprinzip oft nur als Handlungsbereich außerhalb (bzw. unterhalb) des Gefahrenbereichs (bzw. dem Risikobereich unterhalb der Gefahrenschwelle) beschrieben (vgl. z.B. **Balzereit 1999; Konietzka und Dieter 1998)**

die Qualität und die Auswahl der Daten, die anzusetzenden Bewertungsschritte und die Ergebnisse der Bewertung sowie der richtige Umgang mit Unsicherheiten bzw. Datenlücken.

3.2 Betrachtung bisheriger Lösungsvorschläge zur Bewertung gesundheitlicher Risiken durch Umweltchemikalien

Bei der Risikoabschätzung im Zusammenhang mit Kontaminationen der Umweltmedien durch anthropogene Chemikalien und deren Auswirkungen auf den Menschen wird keine einheitliche Methode angewendet, sondern es gibt in Abhängigkeit von der Problemstellung bzw. dem Schutzziel unterschiedliche Lösungsvorschläge. Sie zielen alle auf eine Risikominimierung.

In den vergangenen Jahren wurden umfangreiche Arbeiten und Richtlinien zur Bewertung gesundheitlicher Risiken durch Umweltchemikalien vorgelegt **(**vgl. z.B. **IPCS 1994; EEC 1993a; EEC 1967; WHO 1999).** Diese lassen sich in einer vereinfachten Übersicht inhaltlich in mehrere Kategorien aufteilen:

1 Humantoxikologie, Gesundheit (vgl. z.B. **Crawford-Brown 1997; Schneply 1997; Bertollini 1996; Chang 1995; Dieter, Kaiser et al. 1990; Dieter 1994** u.a.),

2 Ökotoxikologie, Biologie, Umwelt (vgl. z.B. **Calow 1997; Van Straalen 1997; Linthurst 1995** u.a.),

3 Altlastenbewertung und Abfallmanagement (vgl. z.B. **American Society for Testing & Materials 1997; Jones 1997; Kerndorff, Schleyer et al. 1993; Kalberlah 1997; Anonymus 1995; Ministerium für Ernährung 1997** u.a.),

4 Industrielle Anwendung, Ernährung und Biotechnologie (vgl. z.B. **Kjellsson 1997; OECD - Environmental Directorate 1996** u.a.),

5 Integrierte Risikobewertung und Risikomanagement (vgl. z.B. **Gillett 1996; Center for Chemical Process Safety Staff 1997** u.a.).

Der internationale Vergleich zeigt starke Unterschiede bei der Erfassung, Erkundung, Bewertung und Sanierung militärischer Altlasten. Altlasten sind nach deutschem Recht *Altstandorte oder Altablagerungen, sofern von Ihnen Gefährdungen für die Umwelt, insbesondere für die menschliche Gesundheit, ausgehen oder zu erwarten sind*; in Österreich gilt eine vergleichbare Definition. In der englischen Sprache findet der Begriff „Altlast" jedoch keine Entsprechung. Die im Englischen verwendeten Begriffe *contaminated area*, *contaminated site* oder *contaminated land* auf Deutsch: kontaminiertes Gelände - sind keine Synonyme, da damit nicht wie mit dem Begriff „Altlast" automatisch auch der Gefahrenbegriff verknüpft ist. Lediglich im Vereinigten Königreich und in Australien ist das der Fall. Holland, Belgien, Norwegen, Kanada, Schweden und die USA dagegen verbinden den Kontaminationsbegriff mit der Überschreitung von Listenwerten oder von natürlichen Hintergrundwerten. Bei der Entscheidung jedoch, ob eine kontaminierte Fläche (bzw. eine Kontaminationsverdachtsfläche) in einem entsprechenden Kataster geführt wird oder nach der Durchführung einer Erkundung in dem Kataster verbleibt, kann die Frage nach der Gefährdung wiederum durchaus relevant sein (z.B. in den USA und Kanada). Umfang und Art der während der „Erst"-Erfassung zu erhebenden „weichen Daten" variieren ebenfalls stark: In Deutschland gehören z.B. liegenschaftsbezogene Luftbildauswertungen zur Ersterfassung; in Holland und Litauen ist die Erstbeprobung bereits Teil der Ersterfassung; in Estland beschränkt sich die Ersterfassung auf eine Ortsbegehung und in Österreich reicht zunächst einmal ein Fragebogen. Die in der Erfassungsphase identifizierten Altlastverdachtsflächen müssen auf ihren tatsächlichen Schadstoffgehalt und ihr Gefahrenpotential untersucht werden. In Deutschland unterscheidet man dabei die orientierende Untersuchung, die detaillierte Untersuchung und die Sanierungsuntersuchung (vgl. auch Kapitel 11.2 Anhang). Während der orientierenden Untersuchung kommen bevorzugt

analytische *screening*-Methoden zur Anwendung. Während der detaillierten Untersuchung wird das Analytikprogramm in einem - nach den Ergebnissen der orientierenden Untersuchung - Untersuchungsraster spezifiziert und verdichtet. Als Ergebnis der detaillierten Untersuchung wird eine Gefährdungsabschätzung erstellt. Falls hieraus eine Sanierung abgeleitet wird, dient die anschließende Sanierungsuntersuchung der Ermittlung der noch für die Sanierungsplanung erforderlichen Parameter **(Schäfer 1997)**.

Das phasenweise Vorgehen ist in keinem Land außer Deutschland formalisiert. In der Regel obliegt es jedoch auch in Deutschland dem die Untersuchungen durchführenden Unternehmen, jeweils Vorschläge für das weitere Vorgehen zu erarbeiten. Umfang und Art der Arbeiten in den einzelnen Phasen können daher von den im Anhang dargestellt Leistungsbild abweichen (vgl. Kapitel 11.2 Anhang).

Insgesamt kann festgestellt werden, dass der Stellenwert, den die Bearbeitung militärischer Altlasten der eigenen Streitkräfte in den einzelnen Ländern einnimmt, von den dort allgemeinen gültigen Standards des Boden- und Grundwasserschutzes abhängt. Wenn gesetzliche Anforderungen zu Sicherungs- und Sanierungsmaßnahmen fehlen oder noch nicht ausreichend entwickelt sind, erfolgt auch keine bzw. nur eine unsystematische weitere Bearbeitung.

Unter Zugrundelegung der für Risikoabschätzungen grundsätzlich erforderlichen prinzipiellen Elemente **(ECETOC 1995)** bzw. vier Komponenten **(Pirages 1999)**

- Identifikation der Gefahr,
- Bestimmung der Toxizität,
- Bewertung der Exposition,
- Charakterisierung des Risikos

lassen sich bezüglich militärischer Altlasten und ihrer potentiellen Auswirkung auf das Trinkwasser nachfolgende zusammenfassende Aussagen und Anforderungen treffen.

3.2.1 Identifikation der Gefahr

Die Identifikation der Gefahr ist der erste Schritt zur Auslösung von Erkundungen zur Gefahrenfeststellung (Gefahrerforschungsmaßnahmen). Die qualitative Feststellung, dass eine einzelne „Noxe“ (z.B. biologisch, physikalisch oder chemisch) zu einer Gefährdung der öffentlichen Gesundheit oder der Umwelt führen kann, wird über einen weitere Maßnahmen auslösenden „Erstverdacht“ konkretisiert. Da einheitliche Bewertungskriterien für die Feststellung des Erstverdachtes i.d.R. fehlen, liegt es im weitestgehenden „Ermessen“ der Ordnungsbehörden, welche Art von Maßnahmen zur Gefahrenfeststellung ausgelöst werden und wie ihr Ergebnis zu bewerten ist.

Schon die Altlasten-Bewertung gemäß dem Altlasten-Handbuch von Baden-Württemberg (BWBV) sah trotz „... Beurteilung eines Standortes bereits auf der Basis eines niedrigen Informationsstandes ...“ kein Kriterium im Sinne eines Erstverdachtes vor **(Arbeitsgruppe Altlasten-Handbuch 1987).**

Soweit Erstbewertungsgrundlagen bzw. -verfahren wie im Rahmen des Altlastprogramm der Bundeswehr (vgl. z.B. **BMBau 1995**) und der ehemaligen Sowjetischen Militärflächen (vgl. z.B. **Reppe 1995**) existieren, zeigen diese keine risikobasierten Wege zur Beschreibung des „Erstverdachtes“ einer Gefahr. Diese Bewertungsverfahren beziehen die Feststellung des auch durch das Bundesbodenschutzgesetz (BBodSchG)[15] geforderten Erstverdachtes nicht in die Bewertung mit ein, sondern betrachten diesen nur als auslösendes Moment für die danach

[15] vgl. § 9 **(BBodSchG 1998)**

durchzuführende Risiko- bzw. Gefährdungsabschätzung (vgl. Kapitel 2.2). Aufgrund dieser Vorgehensweise sind viele militärische Liegenschaften gar nicht in den entsprechenden Altlastprogrammen erfasst worden und entziehen sich damit dem Altlastenkataster und der Prioritätensetzung im weiteren Bewertungsverfahren.

Das Erstbewertungsmodell MEMURA zur Gefährdungsabschätzung von militärischen Liegenschaften **(Reppe 1995)** baut - ähnlich wie auch Bewertungsverfahren für Rüstungsaltlastverdachtsflächen (vgl. **Schulz-Terfloth 1994**) - als formalisiertes Verfahren zur vergleichenden Bewertung und Prioritätensetzung auf dem vom Land Baden-Württemberg für die Altlastenbearbeitung entwickelten Bewertungsansatz (BWBV) auf. Das stoffspezifische Risiko r_0 wird über Stoffeigenschaften wie u.a. Dichte, Viskosität, Löslichkeit sowie biologische und chemische Abbaubarkeit ermittelt. Die Abbildung der tatsächlichen Gefahr für die verschiedenen Schutzgüter erfolgt über Umgebungsfaktoren (m_1 - m_4), die den Austrag von Stoffen aus der Verdachtsfläche, den Eintrag ins Schutzgut, den Transport und die Wirkung im Schutzgut sowie die Bedeutung des Schutzgutes ermitteln. Dabei werden - ausgehend von einer im Modell definierten Vergleichssituation - die Risikofaktoren für jede Verdachtsfläche mit Hilfe der erfassten Daten gemindert oder erhöht. Für das Schutzgut Mensch gilt ein besonderer Bewertungsalgorithmus, der die unterschiedlichen direkten Gefährdungsmöglichkeiten (z.B. durch Brand, durch Ersticken, durch Explosion, durch Verätzung u.a.) berücksichtigt, die von einer Struktur oder einem Schadstoff auf einer Liegenschaft ausgehen. Aus den verschiedenen Risikowerten für die einzelnen Schutzgüter ergibt sich eine schutzgutbezogene Gesamtbeurteilung der Altlast. Das Gesamtrisiko r_4 steht als Maß für den Handlungsbedarf in Bezug auf das bewertete Schutzgut.

MEMURA ist im Sinne des BWBV als Verfahren für die Beweisniveaus der historischen und der orientierenden Erkundung konzipiert und somit auch prinzipiell nicht für eine Identifikation einer „Anscheinsgefahr“ im Sinne eines Erstverdachtes geeignet. Ebenfalls ist auch hier der Trinkwasserpfad nicht explizit in die Erstbewertung aufgenommen.

Das Modell MAGMA dient der Prioritätensetzung bei der Bewertung von militärischen Altlasten nach der detaillierten Gefährdungsabschätzung (Phase IIb, vgl. Kapitel 11.2 Anhang). Es gibt Entscheidungshilfen für nachfolgende Maßnahmen bzw. die Beurteilung der Notwendigkeit von Sicherungs- oder Dekontaminationsmaßnahmen **(Reppe 1995)**. Für jedes Transfermedium (Luft, Oberflächenwasser, Boden und Grundwasser) werden pro Altlastverdachtsfläche jeweils schadstoff- und umgebungsspezifische Parameter (SP und UP) ermittelt, die zu einem als MAGMA-Wert M bezeichneten Ergebnis verknüpft werden. Die Höhe des M-Wertes soll den Handlungsbedarf anzeigen. Auch im Modell MAGMA wird der Trinkwasserpfad vernachlässigt. Die integrierte Toxizitätsprüfung (vgl. Kapitel 3.2.2) bezieht sich i.d.R. auf akute Daten im Tierversuch ohne Unterscheidung des Versuchsansatzes und des toxikologischen Endpunktes. Das Modell erscheint daher als Ansatz zur Bewertung der Trinkwasserrelevanz von Umweltkontaminanten unzureichend.

Ein weiteres Modell zur Gefährdungsabschätzung sowohl auf zivilen wie militärischen Altlasten ist als Modul in dem von der OFD Hannover verwendeten Programm KOSAL zur Schätzung von Sanierungskosten integriert **(Schäfer 1995).** Kriterien für die KOSAL-Gefährdungsabschätzung sind

- die Einzelwahrscheinlichkeiten für Kontaminationen durch die Schadstoffe, bedingt durch die Verwendungsart, die Verwendungsdauer und den Verwendungszeitraum,
- die Wahrscheinlichkeit der Freisetzung aufgrund der Menge der Einsatz-, Betriebs- und Reststoffe in vier Klassen.

Eine Matrix aus den Kriterien Verwendungsart, Verwendungsdauer und -zeitraum sowie Stoffmenge führt zur Berechnung eines Emissionsfaktors EF pro Schadstoff. Unter

Berücksichtigung von chemischen und physikalischen Schadstoffeigenschaften sowie Bewertungskriterien für den Arbeitsschutz wird eine Gefährdungszahl GZ pro Schadstoff ermittelt. Das Produkt aus EF und GZ ergibt einen schadstoffspezifischen Gefährdungswert GW. Das standortspezifische Gefährdungspotential GP, aus der sich Maßnahmeprioritäten ableiten lassen, wird über eine degressive Addition der Einzelwerte GW ermittelt. In der Praxis dient die Gefährdungsabschätzung von KOSAL nur als Zwischenergebnis zur weiteren Berechnung von Sanierungskosten.

Ein Instrument zur Beurteilung des absoluten Gefahrenpotentials für die menschliche Gesundheit ist das ebenfalls in den 90iger Jahren entwickelte UMS-Modell (vgl. z.B. **Kalberlah 1997)**. UMS steht für „umweltmedizinische Beurteilung der menschlichen Schadstoffexposition durch Altlasten". Die Gefahrenbeurteilung erfolgt auf der Basis des Vergleichs der quantitativen Expositionsabschätzung mit toxikologisch duldbaren Körperdosen. Die Anwendung von UMS auf militärische Altlasten ist bisher nicht erfolgt.

3.2.2 Bestimmung der Toxizität

Für die Bestimmung der Toxizität als *wirkungsgestützte* Bewertung von Umweltchemikalien werden in Risikobewertungen auch unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Expositionspfade z.T. sehr unterschiedliche toxikologische Daten zu Grunde gelegt und diese unterschiedlich gewichtet bzw. bewertet. Das hat seinen Grund u.a. darin, dass für die Mehrzahl von Umweltchemikalien keine bzw. wenig Informationen aus Humanstudien vorliegen[16]. Deswegen ist die Frage, wie die Ergebnisse von Tierstudien auf den Menschen wissenschaftlich nachvollziehbar zu übertragen sind, auch ein sehr wichtiger Aspekt der Risikocharakterisierung im Ergebnis der gesamten Risikobetrachtung (vgl. Kapitel 3.2.4).

Das allgemeine Prinzip der Extrapolation ist, vom dosisabhängigen Wirkungsverhalten bei exponierten Labortieren, auf eine mögliche Dosis-Antwort beim Menschen zu schließen. Dabei werden typischerweise hohe Dosen von Umweltchemikalien ab einem bestimmten Punkt (bereits) schädliche Wirkungen (adverse Effekte) hervorrufen bzw. niedrige Dosen (noch) keinen beobachtbaren schädlichen Effekt. Die niedrigste Dosis, ab der eine schädliche Wirkung im Tierversuch einsetzt, wird als $LOAEL_{TV}$ (***L**owest **O**bserved **A**dverse **E**ffect **L**evel* im **T**ier**V**ersuch) und die höchste Dosis, bei der gerade noch keine schädliche Wirkung einsetzt, wird als $NOAEL_{TV}$ (***N**o **O**bserved **A**dverse **E**ffect **L**evel*) bezeichnet. Die Resultate von Tierstudien sollen durch den Extrapolationsschritt die Bewertung von zu erwartenden schädlichen Effekten von Umweltchemikalien beim Menschen ermöglichen. Da die Wirkungen toxischer Stoffe beim Menschen und beim Tier nicht identisch sind, werden zur Näherung entsprechende Extrapolationsfaktoren[17] (EF) verwendet **(Konietzka und Dieter 1998; BMU 1999)**. Die wichtigsten Variablen sind Dosisabhängigkeit, inner- und zwischenartliche Varianz, Reaktionsmechanismus und Metabolismus.

Die der Altlastenbearbeitung des Bundes zugrunde liegenden Bewertungsraster arbeiten bei der toxikologischen Bewertung in der Praxis nur sehr beschränkt nach dem o.b. allgemeinen Prinzip über Sicherheits- bzw. Extrapolationsfaktoren. Oft werden Daten der akuten Toxizität zitiert und die für die Exposition über den Trinkwasserpfad wesentlichen chronischen Effekte nicht hinreichend beschreiben bzw. gar nicht berücksichtigt.

---

[16] Das Problem sind vor allem Stoffe, die am Arbeitsplatz nicht vorkommen. MAK-Werte (maximale Arbeitsplatzkonzentrationen) beruhen sehr häufig auf Humandaten.

[17] Historisch gesehen wurden diese auch als Sicherheitsfaktoren (SF) bezeichnetet in den 50iger Jahren in den USA für Lebensmittelzusatzstoffe eingeführt **(Lehmann und Fitzhugh 1954)**. Dieser Grundansatz wurde für viele Richtlinien und Empfehlungen verschiedener internationaler- und Regierungsorganisationen übernommen und im Laufe der Zeit auch auf Umweltexpositionen übertragen (vgl. z.B. **(Lu 1979; Dourson und Stara 1983)**.

3.2.3 Bewertung der Exposition

Mit Exposition [18] bezeichnet man die Gesamtheit der äußeren Bedingungen, denen ein Organismus ausgesetzt ist. Eine Schadstoff-Exposition beinhaltet also die Freisetzung (Emission) in die und die daraus resultierende Anwesenheit einer Substanz in der Umwelt, die bei exponierten Personen (als Rezeptoren) zur Aufnahme des Stoffes in den Körper damit möglicherweise verbundenen gesundheitlichen Schäden führt. Grundsätzlich besteht die Risikobewertung aus einem Vergleich von vorhergesagten Umweltkonzentrationen (expositionsgestützte Bewertung) und Konzentrationen, die schädliche Wirkungen verursachen können (wirkungsgestützte Bewertung, vgl. auch Kapitel 3.2.2). Es ist sinnvoll die *expositionsgestützte* Bewertung von Umweltsubstanzen von der *wirkungsgestützten* Bewertung zu trennen. Das Reichweitenkonzept von **(Scheringer, Mathes et al. 1998)** sieht als ersten Schritt eine expositionsgestützte Bewertung vor und berücksichtigt dabei die Tatsache, dass ein in die Umwelt eingebrachter Stoff als „chemischer Impuls" (in Form der Ausgangssubstanz oder in Form ihrer Metabolite) mit umso größerer Wahrscheinlichkeit auf einen empfindlichen Rezeptor oder ein System von interagierenden Rezeptoren trifft, je weiter es sich räumlich verteilt und je länger er zeitlich präsent ist. Somit wird einer Exposition (als Anwesenheit einer Substanz in der Umwelt) eine umso größere Möglichkeit für - im Vorhinein unbekannte - Folgewirkungen zugeordnet, je größer ihre räumliche Ausdehnung und ihre zeitliche Dauer ist. Die zeitliche Reichweite entspricht der in der Chemikalienbewertung häufig verwendeten *Persistenz* eines Stoffes; die räumliche Reichweite steht für die *Mobilität* einer Substanz.[19]

Neben der Stoffverteilung in Raum und Zeit bestimmt auch das (Bio-)Akkumulationspotential der belebten und unbelebten Umwelt die Exposition. Stärkere Bioakkumulation ermöglicht das weitere Vordringen einer Substanz in der Nahrungskette und damit eine erhöhte Exposition gegenüber Organismen während eine geogene Akkumulation der Substanz einen Entzug aus der biologischen Kette bedeutet.

Für die expositionsgestützte Bewertung gibt es verschiedene rechnergestützte Expositionsmodelle (z.B. in Form von Regressionsgleichungen, einfachen generischen Modellen bis zu multimedialen Software-Lösungen), deren Ergebnisse jedoch aufgrund der Komplexität der sich gegenseitig beeinflussenden Einflussfaktoren für den Anwender nicht immer nachvollziehbar sind. So ist (auch durch versteckte Algorithmen) oft nicht nachvollziehbar, für welche Substanzen und Umweltsegmente die Modelle realistische Werte liefern. Als Beispiel wird das Sickerwassersimulationsprogramm SISIM genannt, das als modulare Software-Lösung des UMS-Systems[20] ein Instrument für die Risikobeurteilung bei Altlasten bereitstellt, wobei als Grundlage der Risikobewertung die Exposition der Schutzgüter **U**mwelt und **M**ensch mit **S**chadstoffen im Vordergrund steht (vgl. **ARGE Fresenius-focon 1997**). Andere Beispiele für „offiziell etablierte Verfahren" zeigen die Übersichten von **Leeuwen 1995** und **Trapp 1998**.

Mit dem in dieser Arbeit speziell betrachteten Schutzziel Trinkwasser sind expositionsseitig die für die Wassergewinnung im Einzugsgebiet von Altlasten pfadspezifischen Schutzgüter verknüpft:

1. Altlast =>Sickerwasser => Schutzgüter *Grundwasser* und *Oberflächenwasser*

   Die Betrachtung einer Verunreinigung von *Grundwasser* im Einzugsgebiet einer Altlast führt über das Sickerwasser im Boden und die darin gelösten bzw. ungelösten Altlastenstoffe

[18] *lat.* exponere, expositum aussetzen

[19] Die Konzentration steht (mit zunehmender Verdünnung des Stoffes) in Relation zur räumlichen und (nur bedingt z.B. über die Inhibitorwirkung des Stoffes) zur zeitlichen Reichweite.

[20] Das UMS ist ein System zur quantitativen Expositionsabschätzung über die Modellierung des Stoffverhaltens in verschiedenen Umweltmedien.

bzw. deren Metabolite. Je nach Stoffeigenschaft wird die Schadstofffracht bis in *Oberflächengewässer* weiter getragen.

2. Grundwasser und Oberflächenwasser => Schutzgut *Trinkwasser*

Die Gewinnung von Trinkwasser erfolgt in Deutschland besonders häufig aus Grundwasser und/oder Uferfiltrat. Wenn Oberflächenwässer für die Trinkwassergewinnung genutzt werden, dann i.d.R. Talsperrenwässer; nur selten wird eine Direktentnahme aus Fließgewässern betrieben. Der Übergang von Schadstoffen aus Grund- bzw. Oberflächenwässern in das Trinkwasser bis hin zum Wasserhahn (Expositionsort) ist abhängig vom Stofftransport und relevanten Abbaumechanismen vom Kontaminationsort zum Nutzungsort sowie von der Aufbereitung im Wasserwerk. Bei Einzel- und Eigenwasserversorgungsanlagen fehlt i.d.R. eine entsprechende Aufbereitungsanlage, so dass Rohwasserqualität = Trinkwasserqualität bedeutet. Bei der stofflichen Gefahrenbeurteilung ist zu berücksichtigen, dass Umweltchemikalien eine Trinkwasseraufbereitung passieren bzw. durch die Aufbereitungsschritte im Wasserwerk sogar zu gefährlichen Stoffen umgewandelt werden können.

3. Trinkwasser => Schutzgut *menschliche Gesundheit*

Die Höhe der Exposition des Menschen gegenüber Schadstoffen aus dem Trinkwasser ist individuell abhängig vom Trinkwasserkonsum sowie der sonstigen Nutzung des Wassers im Haushalt (Kochen, Waschen, Körperpflege usw.).

3.2.4 Charakterisierung des Risikos

Die Charakterisierung des Risikos ist stoff-, expositions- bzw. schutzgutbezogen. Bei der Betrachtung einer Stoffexposition gegenüber dem Menschen über das Trinkwasser ist die Quantifizierung eines Gesundheitsrisikos neben der Stoffkonzentration im wesentlichen abhängig von der spezifischen Nutzung des Wassers (Expositionsdauer, der Trinkwassermenge und dem Lebensalter). Dabei wird durch den Vergleich tatsächlich aufgenommener Dosen zu toxikologisch duldbaren bzw. gesellschaftlich akzeptierten Dosen/Risiken eine Quantifizierung des Risikos möglich. Der Schritt der Charakterisierung des Risikos ist dementsprechend ein Umsetzungsschritt aus den gewonnenen Daten und der Beschreibung des Risikos hin zur Handhabung des bzw. zum Umgang mit dem Risiko, z.B. in Form einer Nutzen-Schaden-Analyse. Die Charakterisierung des Risikos ist offensichtlich auch ein gesellschaftlicher Prozess und bildet einen *sozialethischen* Bezugspunkt für die Bewertung anthropogener Belastungen durch Umweltchemikalien. Nutzen und Schäden bzw. Gefährdungen oder Belastungen verteilen sich i.d.R. auf verschiedene gesellschaftliche Akteure. Der Nutzen ist i.a. bei der Produktion und im Gebrauch zu sehen, während die Belastungen in Form von potentiell schädlichen Expositionen aus diesem Prozess über zeitliche und räumliche Distanzen ausgelagert werden (vgl. z.B. **Scheringer, Mathes et al. 1998**). Hohe Reichweiten sind ein Indiz für Verletzungen der Verteilungsgerechtigkeit zwischen Nutznießern des schädlichen Chemikalieneinsatzes einerseits und entfernt bzw. später lebenden nicht nutznießenden Personen oder Generationen andererseits (Beispiele FCKW und DDT). Demnach weisen toxische bzw. umweltschädliche Substanzen mit großer räumlicher und zeitlicher Reichweite besonders hohe Risiken für die Umwelt und die menschliche Gesundheit auf.

ZWEITER TEIL: Bewertungsmethodik für Trinkwasser

4 METHODIK ZUR FESTSTELLUNG VON GEFAHREN FÜR TRINKWASSER

Die Vielfalt der Einflussfaktoren auf Umweltsysteme bzw. ihre „Überkomplexität[21]" macht eine 1:1-Beschreibung ihrer gegenwärtigen Zustände anhand bestimmbarer Größen und vorangegangener Umwelteingriffe in Form eindeutiger (gewisser) Ursache-Wirkungs-Beziehungen - auch bezüglich der menschlichen Gesundheit - vorerst unmöglich.[22] Um diesbezüglich einen positiven Ansatz zu gewinnen, sind mindestens drei Forderungen zu erfüllen (vgl. auch **Scheringer, Mathes et al. 1998)**:

1 Die *Reduktion der Komplexität* durch einen *spezifischen* Modellansatz, der eine überschaubare Strukturierung der Befunde ermöglicht und den Aufwand (Zeit, Kosten) für die Bewertung notwendiger Untersuchungen vermindert,

2 Die Integration der Feststellung der „Anscheinsgefahr"[23] in den Gesamtbewertungsprozess, um von der gefahrenbasierten zur risikobasierten Herangehensweise zu kommen (vgl. Kapitel 3.1).

3 eine starke *Berücksichtigung des Vorsorgeprinzips* durch bereits *prospektiv* aussagekräftige Bewertungskriterien, um der nicht zu vernachlässigenden „Ungewissheit" zu begegnen.

Die Reduktion der Komplexität von Einflussfaktoren bei der Risikobewertung von Umweltsubstanzen wird über die Aufstellung eines Bewertungskomplexes erreicht, der zunächst den spezifischen Modellansatz „gesundheitliche Gefahren durch Kontamination von Trinkwasser" bzw. die Beschränkung/Spezifizierung der Risikobetrachtung auf die drei Basiseigenschaften des „chemischen Impulses", des „Pfades" und der „Expositionsgruppe" eingrenzt (vgl. Tabelle 4.1).

Tabelle 4.1 Beschränkung der Risikobetrachtung auf Basiseigenschaften

Basiseigenschaften der Risikobetrachtung	Gesamtkomplex	Spezifizierung
Chemischer Impuls	Umweltsubstanzen	militärische Altlastenstoffe
Pfad	alle Umweltmedien	Trinkwasser
Expositionsgruppe bzw. -ziel	Gesamte Umwelt (physisko-chemische Bedingungen und Ökosysteme) sowie die menschliche Gesundheit	menschliche Gesundheit

Dabei steht der chemische Impuls für das auslösende Moment in Form einer Stoff-Kontamination (hier: Stoffe aus militärischen Altlasten), der Pfad wird ausgedrückt als

[21] Die hohe Variabilität und Selbstveränderlichkeit von Lebewesen zeigt sich auf den überindividuellen Organisationsebenen (Population, Lebensgemeinschaft, allgemein: ökologische Systeme) in einer Vielzahl von Zustandsmöglichkeiten von Strukturen, Funktionen, Siedlungsdichten, Verhaltensweisen und anderen Kenngrößen. In der Ökosystemforschung hat sich deutlich gezeigt, dass Ökosysteme u.a. aufgrund der Charakteristika der sie konstituierenden Einheiten, ihrer sehr hohen Komplexität und ihrer jeweils individuellen Geschichte Unikate sind (vgl. z.B. **Scheringer, Mathes et al. 1998**). Daher beschreiben Erfahrungswerte, die an einem bestimmten System gewonnen wurden, erstens schon dieses eine System nur unvollständig und zweitens können sie auch nur begrenzt (wenn überhaupt) auf andere Systeme übertragen werden.

[22] So scheint die vertiefte Betrachtung von möglichen Faktoren zu immer neuen vertiefenden Ansätzen zu führen, die durch weitere Befunde ergänzt werden müssen und dennoch unvollständig bleiben müssen.

[23] Anscheinsgefahr = auslösender Faktor für weitere Maßnahmen im ordnungsrechtlichen Sinn.

Transportweg zum kontaminierten Medium (hier: Trinkwasser) und das Expositionsziel ist das exponierte Kompartiment (hier: der menschliche Körper).

Die Struktur der *Gesamtbewertung* ist schematisch in Bild 4.1 dargestellt. Parallel zu den Elementen der o.b. Risikobewertung Gefahrenfeststellung, Bestimmung der Toxizität, Bestimmung der Exposition und Risikoquantifizierung gliedert sie sich in einen Bewertungskomplex mit fünf Komplexteilen, in denen die jeweils zugrunde liegenden Bewertungskriterien verzeichnet sind, und ein Bewertungsraster mit standardisierten Werten. Die Abarbeitung der einzelnen Kriterien erfolgt über definierte Arbeitsschritte, die zum Bewertungsraster führen.

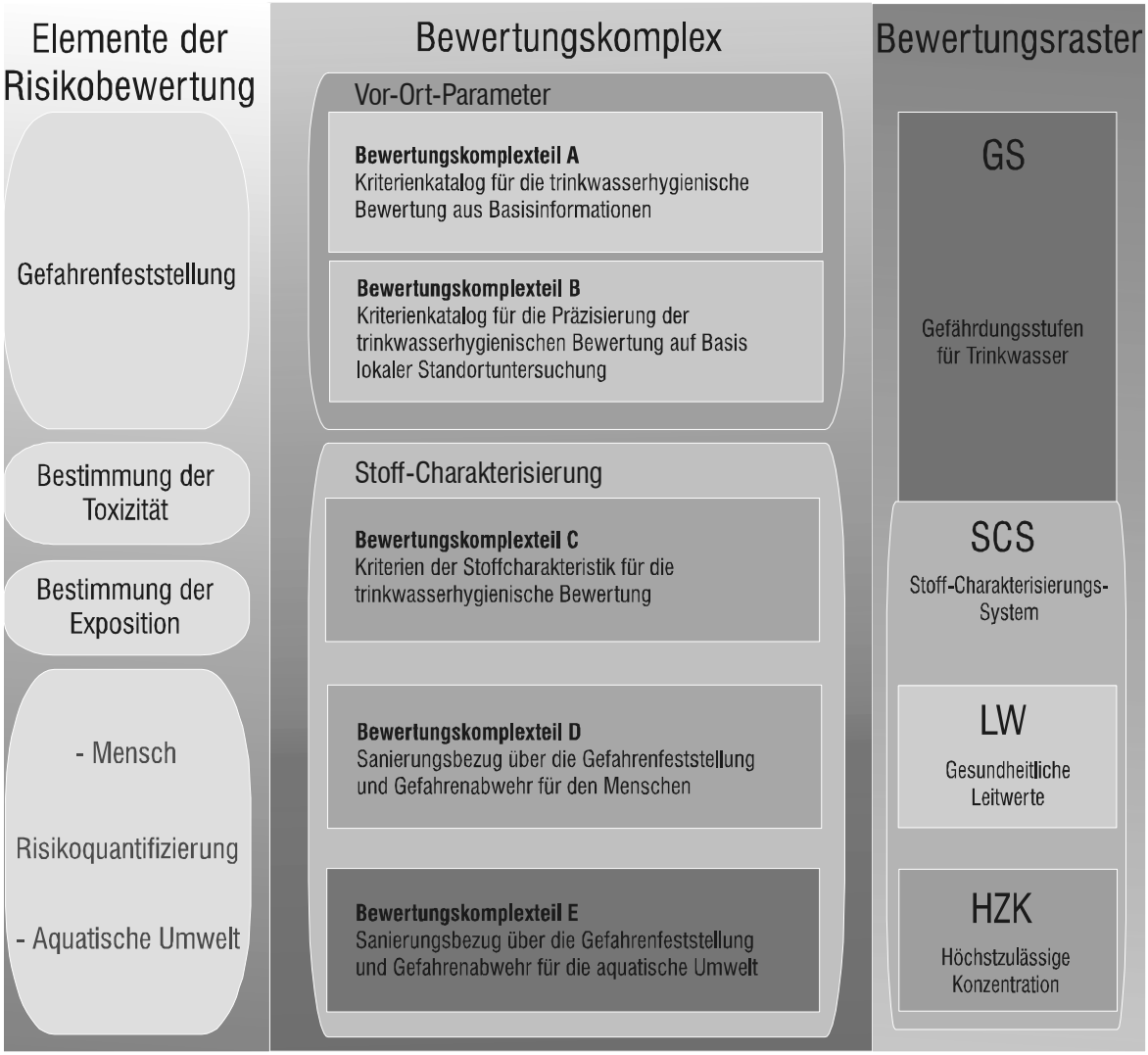


Bild 4.1 Schematischer Aufbau der Gesamtbewertung des Risikos von Umweltkontaminanten für Trinkwasser

Die Gesamtbewertung hat, neben der Bewertung von Vor-Ort-Parametern, ihren Schwerpunkt in der Stoff-Charakterisierung von Umweltchemikalien und besitzt hierdurch einen deutlich prospektiven Charakter. Sie erkennt Risiken für die menschliche Gesundheit ohne besonderen analytischen und Erkundungs-Aufwand frühzeitig und wirkt hierdurch vorsorgend **(Mulisch 2000b)**.

Stufenweise werden für Roh- bzw. Trinkwasser im Einzugsgebiet von militärischen Liegenschaften bzw. Teilflächen über die Abfrage der Kriterien aus den Bewertungskomplexteilen und deren Zuordnung in das Bewertungsraster die Prioritäten zur weiteren

Bearbeitung gesetzt. Zugleich erhöhen sich die Anforderungen zur Belegung eines Gefahrenverdachts von Stufe zu Stufe, so dass die Sicherheit der Aussage für gefahrenverdächtige Objekte zunimmt.

4.1 Der Bewertungskomplex

Der Bewertungskomplex besteht aus den Bewertungskomplexteilen A, B, C, D und E, die von A nach E Ebenen mit zunehmendem Informationsgehalt darstellen (vgl. Tabelle 4.2).

Tabelle 4.2 Modularer Aufbau des Bewertungskomplexes

Komplexteil	Informationsebene	Auswahl der Kriterien und Qualität der Aussage	Aussage zu Kontaminanten	Bewertungsergebnis
A	niedrig	Beprobungslose Kriterien zur Feststellung eines begründbaren Altlastenverdachtes in Trinkwassereinzugsgebieten	Verdachtskontaminanten - Stoffe bzw. Stoffgruppen, die sich aus der ehemaligen Nutzung aufzeigen lassen	Einstufungsraster GS_A
B	mittel	Untersuchungsergebnisse zur Feststellung eines begründeten Kontaminationsverdachtes von Rohwasser für die Trinkwasserversorgung	Hauptkontaminanten – werden bei Untersuchungen häufig und in erhöhten Konzentrationen nachgewiesen	Einstufungsraster GS_B
C	hoch	Gesundheitsrelevante Kriterien zur Feststellung von stoffimmanenten Vorgängen und Prioritätskontaminanten	Prioritätskontaminanten mit umwelttoxikologischer Relevanz für den Menschen; häufig und in hohen Konzentrationen im Abstrom von bestimmten Nutzungsbereichen nachgewiesene Kontaminanten mit schädlicher Wirkung	Einstufungsraster GS_C SCS mit umwelttoxikologischer Relevanz und Aussagen zur Mobilität BZ_{BIO}; BZ_{TOX}
D	sehr hoch	Stoffspezifische humantoxikologische Bewertung	Risikoquantifizierung Mensch mit Sanierungsbezug	LW und expositionsabhängige kurzfristige $LW_{1,5}$, LW_{10}, LW_{70} als Stoffkonzentration im Wasser
E	sehr hoch	Stoffspezifische aquatoxikologische Bewertung	Risikoquantifizierung aquatische Umwelt mit Sanierungsbezug	Höchstzulässige Konzentration im Wasser

Die Bewertungskomplexteile A und B umschließen im Rahmen der Gefahrenfeststellung die Kriterien zur Beurteilung des Erstverdachtes, der Erstbewertung sowie zur Präzisierung der trinkwasserhygienischen Bewertung auf der Basis von *Standortuntersuchungen*. Im

Bewertungsraster erfolgt die Einstufung in Gefährdungsstufen für Trinkwasser (GS I bis GS VI)[24].

Die Bewertungskomplexteile C bis E umschließen das in dieser Arbeit hauptsächlich dargestellte Stoff-Charakterisierungs-System SCS, in dem die *stoffspezifische* modulare Gesamtbewertung von Umweltkontaminanten in Boden, Gewässern und Trinkwasser einschließlich der Risikoquantifizierung erfolgt. Die im Bewertungsraster abgeleiteten gesundheitlichen Leitwerte (LW) bzw. die höchstzulässigen Konzentrationen (HZK) stellen den Sanierungsbezug aus der Gefahrenfeststellung und -abwehr für den Menschen bzw. für die aquatische Umwelt her.

Die Abstufung niedrig, mittel, hoch und sehr hoch in Tabelle 4.2 drückt den quantitativen Umfang der jeweils berücksichtigten im Verhältnis zu den insgesamt aufgeführten und relevanten Kriterien aus. Aus der Auswahl der Kriterien ergibt sich die für jeden Komplexteil qualitative Aussage des Gefahrenverdachtes bzw. der Gefahrenfeststellung (Beweisniveau). Die Aussage zu Kontaminanten wird qualitativ differenziert in

- Verdachtskontaminanten (Targetstoffe), die sich aus der Nutzungshistorie der militärischen Liegenschaft ableiten lassen und ein spezifisches Kontaminationspotential für Boden und Grundwasser bilden (vgl. Anhang Kapitel 11.1),
- Hauptkontaminanten, welche aufgrund von Vor-Ort-Untersuchungen in definierten Nutzungsbereichen besonders häufig und in erhöhten Konzentrationen nachgewiesen werden, sowie
- Prioritätskontaminanten, die im Grundwasser im Abstrom der Altlast analytisch erfasst werden oder aufgrund stoffspezifischer Eigenschaften dort erwartet werden und aufgrund von bestimmten stoffimmanenten Eigenschaften als Schadstoffe in Betracht kommen bzw. für weitere Untersuchungen relevant sind.

4.2 Die Datensätze der Bewertungskomplexteile A, B und C

Die sukzessive Bewertung in der Reihenfolge der Komplexteile A, B und C erfolgt in 28 Arbeitsschritten mit der Einstufung in das Bewertungsraster der Gefährdungsstufen für Trinkwasser GS I bis GS VI mit eventuellen Untergruppen a, b und c (vgl. Kapitel 4.3), dargestellt mit dem Index des jeweiligen Komplexteils (z.B. GS_A Ia).

Jeder Komplexteil umfasst mehrere Datensätze von Kriterien, die in sich thematisch abgeschlossen sind. Die Aufschlüsselung der Bewertungskomplexteile in Datensätze mit zugehöriger Aussage sowie die Differenzierung in obligatorische und fakultative Kriterien sind aus Tabelle 4.3 ersichtlich.

Die Bezeichnung der Datensätze setzt sich aus dem Buchstaben des jeweiligen Komplexteils und einer fortlaufenden Nummerierung von 1 - 9 zusammen. Die Bezeichnung der Kriterien folgt der Nummerierung in Unterpunkten.

[24] Unter Einbeziehung der prioritären Gefahrenbeurteilung als Erstverdacht (Anscheinsgefahr) in das Gesamtraster der Risikobewertung wurde der Kriterienkatalog mit dem Ziel entwickelt, weitestgehend zuverlässige Entscheidungshilfen auch bei lückenhafter und inhomogener Datenbasis zur Altlastensituation zu geben, die besonderen Belange des Trinkwasserschutzes und der Trinkwasserhygiene zu berücksichtigen und diese in die Altlastenbeurteilung verstärkt einzubeziehen. Der Kriterienkatalog stellt somit eine Ergänzung von bereits bestehenden Konzeptionen der Altlastenbewertung speziell im Hinblick auf Wassergefährdungen und resultierende Risiken für die menschliche Gesundheit dar.

Tabelle 4.3 Aufschlüsselung der Bewertungskomplexteile A, B und C in thematische Datensätze von Kriterien

Komplexteil	Datensatz	Aussagen	Obligatorische Kriterien	Fakultative Kriterien	Erläuterungen
A	A0	Verwaltungsdaten	0.1-0.3	0.4-0.7	Tabelle 4.4
	A1	Einschätzung der Altlastenrelevanz aus Liegenschaftsdaten	1.1-1.6	1.7-1.13	
	A2	Einzugsgebiet von Wasserversorgungsanlagen	2.1-2.3	2.4-2.8	
	A3	Relevanz von Verdachtskontaminanten für Wasser	3.1-3.2	3.3-3.5	
B	B4	Lokale Standortcharakteristik	4.1-4.3	4.4	Tabelle 4.5
	B5	Untersuchungsergebnisse aus Bodenproben	5.1-5.2	5.3-5.4	
	B6	Untersuchungsergebnisse Grund-/Sickerwasser-/Rohwasserproben	6.1-6.2	6.3-6.4	
C	C7	Toxizitätspotential von Kontaminanten und Metaboliten	7.1	7.2-7.6	Tabelle 4.6
	C8	Biochemische Abbaubarkeit	8.1	8.2-8.3	
	C9	Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit	9.1-9.2	9.3-9.4	

Die Darstellung der Einzelkriterien findet sich jeweils in den Tabellen 4.4 bis 4.6. Fakultative Kriterien werden im Unterschied zu den obligatorischen Kriterien kursiv dargestellt. Diese Unterscheidung hat sich in den durchgeführten Untersuchungen **(Mulisch 1999)** als zweckmäßig erwiesen, da zur Gefahrenbeurteilung eine jeweils begrenzte Menge an obligatorischen Mindestinformationen (Basisinformationen) notwendig ist. Zusatzinformationen aus den fakultativen Kriterien können einen Sachverhalt präzisieren, führen aber für sich allein, d.h. ohne Basisinformationen, nicht zu gesicherten Bewertungen. Durch dieses Vorgehen werden die Recherchen in den Komplexteilen A bis C erleichtert, so dass z.B. bereits Informationsinhalte wie die Feststellung von kontaminationsverdächtigen Nutzungsbereichen (KVN, vgl. Kapitel 11.3 Anhang) in die Gefahrenermittlung einbezogen werden können, ohne diese von vornherein durch aufwendige Untersuchungen stützen zu müssen. Hierdurch wurde der Aufwand der Erstbewertung tausender von militärischen und paramilitärischen Liegenschaften wesentlich erleichtert und ist in überschaubarer Zeit zu bewältigen (vgl. Kapitel 7).

Das Informationsniveau des Komplexteils A orientiert sich vorwiegend an beprobungslosen Kriterien. Bisweilen sind sowohl Ergänzungen durch einfache Vor-Ort-Untersuchungen angezeigt als auch z.T. vertiefende Altlasterkundungen für die Erstbewertung erforderlich[25]. Auf der Basis von Bewertungskomplexteil A können über die Arbeitschritte 1 bis 10 (vgl. Kapitel 4.4) mit hoher Wahrscheinlichkeit unbelastete Objekte, für die kein Handlungsbedarf für die

[25] Das betrifft z.B. eine große Anzahl von WGT-Objekten, für die - entsprechend der Zielsetzung des WGT-Projektes - zum überwiegenden Teil nur Projektberichte auf der Basis von Erstbegehungen vorliegen **(UBA 1995)**.

Trinkwassergewinnung erkennbar ist, früh aus dem System entlassen werden. Dies gilt vorwiegend für Objekte bzw. für in sich abgeschlossene Teile von Objekten mit rein oder vorwiegend ziviler oder zumindest analog ziviler Nutzungshistorie, auf denen nicht mit wassergefährdenden Stoffen umgegangen wurde[26]. Andererseits können aus den Begehungsberichten auch ohne Analytik eindeutige Kontaminationsherde mit möglichen Auswirkungen auf Trinkwasserressourcen abgeleitet werden. Die Recherchen auf der Ebene des Komplexteils A führen zu den Gefährdungsstufen GS_A I (keine Gefährdung für Trinkwasser) bis GS_A VI (sofortiger Handlungsbedarf, vgl. Tabelle 4.8). Die Qualität der Aussage der Gefährdungsstufen GS_A liegt für kontaminationsverdächtige Standorte in der Feststellung eines „begründbaren Altlastverdachts in Trinkwassereinzugsgebieten", der entweder durch Sofortmaßnahmen beseitigt oder durch weitergehende Nachforschungen bzw. Untersuchungen über Zusatzinformationen der fakultativen Kriterien oder die Kriterien des Bewertungskomplexteils B aufzuklären ist.

Der Bewertungskomplexteil B beinhaltet Kriterien über ergänzende historische sowie technische Erkundungsmaßnahmen - in Form geologischer / hydrogeologischer und stoffanalytischer Erkundungen des Bodens und des Sicker- bzw. Grundwassers - unter besonderer Berücksichtigung der Belange des Trinkwasserschutzes. Die Qualität der Aussage der Gefährdungsstufen GS_B liegt für kontaminierte Standorte in Trinkwassereinzugsgebieten in der Feststellung eines „begründeten Kontaminationsverdachtes für Roh- bzw. Trinkwasser".

Bei festgestellter Kontamination von Boden oder Grundwasser im hydraulischen Einzugsgebiet einer Trinkwasserfassung werden im Komplexteil C über das Stoff-Charakterisierungs-System (SCS) aus stoffspezifischen Aussagen der biochemischen Abbaubarkeit und der toxikologischen Wirksamkeit beim Menschen bzw. der Aquatoxizität die für den Trinkwasserpfad relevanten Schlussfolgerungen einer *umwelttoxikologischen Relevanz* gezogen und in Form von Koeffizienten als Stoffcharakteristiken (SC) dargestellt, die physiko-chemische Parameter einschließen (vgl. Kapitel 5).

4.2.1 Bewertungskomplexteil A

Die zu berücksichtigenden Kriterien des Komplexteils A sind in Tabelle 4.4 aufgeführt, wobei Zusatzinformationen kursiv und eingerückt dargestellt sind.

Grundlage bilden zunächst Verwaltungsdaten des Datensatzes A0, wie sie durch die bisherigen Nutzer bzw. Verwalter der Liegenschaften übermittelt werden. Hierzu zählen die Objektbezeichnung, die Objektnummer und Daten zur Lokalisierung der Liegenschaft, wobei auch Kartenmaterial und Satelliten- bzw. Luftaufnahmen nützlich sind. Zusätzliche

[26] Unter 'analog zivilen Nutzungen' werden nicht-militärtypische Nutzungsbereiche zusammengefasst, auf denen, aufgrund der (anzunehmenden) Nutzungshistorie, mit hoher Wahrscheinlichkeit nicht mit wassergefährdenden Stoffen umgegangen wurde. Hierzu zählen i.d.R. Wohnheime, Erholungsheime, Ledigenheime, Gaststätten, Ferienheime, Naherholung, Wohnunterkünfte, Gästehäuser, Museen, Bungalows, Wohnungen, Wohngrundstücke, Schulen, Wohnhäuser, Sportplätze, Sporthallen, Forsthäuser, Erholungsobjekte, Kulturhäuser. Vereinzelt sind Wehrkreiskommandos und sonstige Verwaltungsliegenschaften aufgenommen. Für diese Liegenschaften wird angenommen, dass keine ALVF bzw. KVN bestehen, welche relevant für Wasserressourcen sein könnten. Liegen jedoch Hinweise auf ALVF bzw. KVN vor, muss aufgezeigt werden, dass in der potentiellen Altlast keine Wasserschadstoffe, sondern ausschließlich für Wasser ungefährliche Altlasten vorliegen (z.B. Bauschutt, Sperrmüll). Dies erfolgt z.B. durch Aussagen der zuständigen Behörden oder aufgrund erster in Augenscheinnahme vor Ort bzw. entsprechender Erstuntersuchungen. Liegen diese entlastenden Aussagen nicht vor, wird im Kriterienkatalog ein Vorbehalt zur allgemeinen Vorgehensweise ausgesprochen. Die Liegenschaft wird dann im Bewertungsverfahren bis auf weiteres wie eine Liegenschaft mit militärischen Nutzungsbereichen behandelt.

Informationen wie Eigentumsverhältnisse, Verwertungsstand und weitere Planung und Größe der Liegenschaft sind hilfreich.

Tabelle 4.4 Bewertungskomplexteil A

Feststellung eines Altlastenpotentials in Trinkwassereinzugsgebieten nach einfachen Kriterien (nicht eingerückt = obligatorische Kriterien, kursiv und eingerückt = fakultative Kriterien)

Datensatz A0: Verwaltungsdaten	
0.1	Objektbezeichnung
0.2	Daten zur Lokalisierung der Liegenschaft (postalische Anschrift, Gemarkung/Flur, Koordinaten, Kartenblätter etc.)
0.3	Dokumentation der Informationsquelle und Quellennummer
0.4	*Objektnummer*
0.5	*Eigentumsverhältnisse*
0.6	*Verwertungsstand / Planung*
0.7	*Fläche in Hektar [ha]*
Datensatz A1: Einschätzung der Altlastenrelevanz aus Liegenschaftsdaten	
1.1	zivile oder analog zivile Nutzungsart der Liegenschaft (z.B. Wohngebäude, Sportanlagen)
1.2	militärische Nutzungsart der Liegenschaft (z.B. Munitionslager, Truppenübungsplatz)
1.3	einzelne Nutzungsbereiche auf der Liegenschaft (z.B. Verwaltungsgebäude, Tanklager)
1.4	Altlastverdachtsflächen (ALVF) bzw. kontaminationsverdächtige Nutzungsbereiche (KVN) (z.B. Tanklager)
1.5	Verdachtskontaminant der ALVF bzw. des KVN aus 1.4 (z.B. MKW)
1.6	Ausgebrachte Schadstoffmenge (in Tonnen, geschätzt)
1.7	*Einwirkdauer der Schadstoffe (in Jahren, geschätzt)*
1.8	*Begehung der Liegenschaft im Rahmen einer Ersterkundung (ja/nein)*
1.9	*Erkundung durch Umwelt-, Bauamt, Ing.-Büro (ja/nein)*
1.10	*Zustand der Liegenschaft (gesichert, beräumt, Bebauung, etc.)*
1.11	*Anzahl von Altlastverdachtsflächen bzw. kontaminationsverdächtigen Nutzungsbereichen (gesamt)*
1.12	*Durchgeführte Sofortmaßnahmen zur ordnungsrechtlich notwendigen Gefahrenabwehr*
1.13	*Anzahl von Altlastverdachtsflächen mit Sofortmaßnahmen*
Datensatz A2: Einzugsgebiete von Wasserversorgungsanlagen (WVA)	
2.1	Art der Wasserversorgungsanlage (ZWVA, EGVA, EZVA) im Umfeld der Liegenschaft
2.2	Betroffenes Wasserwerk (Betreiber)
2.3	Liegenschaftsbezug zu Trinkwasserschutzzonen bzw. zu Vorbehaltsgebieten
2.4	*Entfernung nächste Brunnengalerie*
2.5	*Betroffene Wasserfassung*
2.6	*ALVF bzw. KVN in Trinkwasserschutzzonen (TWSZ) I, II, III bzw. Vorbehaltsgebiet*
2.7	*Verdachtskontaminanten aus ALVF in TWSZ*
2.8	*Aktuelle zusätzliche Informationen von Gesundheitsamt, Umweltamt, Sofortmaßnahmen*
Datensatz A3: Relevanz von Verdachtskontaminanten für Wasser	
3.1	Wasserrelevante ALVF bzw KVN
3.2	Verdachtskontaminante bzw. -stoffgruppe
3.3	*Hauptkontaminante(n) (bei Gemisch oder Stoffgruppe)*
3.4	*Schadstoffe außerhalb des Nutzungsbereichs (wie Lösungsvermittler, z.B. Tenside)*
3.5	*Auswertung von Spezialkarten zur geologischen Situation*
3.6	*Auswertung von Spezialkarten zur hydrogeologischen Situation*

Wichtige Basisinformationen für die Ersteinschätzung der Altlastenrelevanz aus Liegenschaftsdaten (Datensatz A1) sind die Art der Nutzung (Kriterien A1.1 und A1.2) bzw. bei großen Objekten die relevanten Nutzungsbereiche (Kriterien A1.3 allgemein und A1.4 kontaminationsverdächtige Nutzungsbereiche). In einer Vorauswahl kann über das Kriterium A1.1 in Verbindung mit dem Datensatz A0 für alle Objekte ohne wasserrelevanten

Altlastverdacht mit ziviler oder analog ziviler Nutzungshistorie eine Freigabe erfolgen.[27] Wenn, wie vor allem bei den ehemaligen NVA-Liegenschaften, in erster Instanz nur spärliche Informationen zur Altlastenrelevanz und im wesentlichen nur Informationen der Kriterien A1.2 bis A1.4 existieren, ist eine Orientierung über die ehemalige Nutzung bzw. über kontaminationsverdächtige Nutzungsbereiche (KVN) möglich (vgl. Kapitel 11.3 Anhang).[28]

Soweit bereits Erkundungsmaßnahmen oder Maßnahmen vor Ort stattgefunden haben, sollen diese Erkenntnisse z.B. über eine Sickerwassersimulation in die Beurteilung eingebunden werden (Angaben zu den Kriterien A1.7 bis A1.13 in Verbindung mit Bewertungskomplexteil B).[29]

Der Datensatz A2 gibt Auskunft zur relativen Lage (Entfernung) des militärischen Objektes zu einer eventuell betroffenen Wasserversorgungsanlage (WVA). Nach der Art der WVA wird unterschieden in:

- Zentrale Wasserversorgungsanlage (ZWVA) => Unternehmen der öffentlichen Wasserversorgung,
- Eigenwasserversorgungsanlage (EGVA) => dient der Versorgung kleiner (meist betrieblicher) Einheiten von weniger als 20 Einwohnern,
- Einzelwasserversorgungsanlage (EZVA) => Versorgung über Hausbrunnen.

Nur für ZWVA sind i.d.R. Trinkwasserschutzzonen mit Nutzungsbeschränkungen ausgewiesen. Für den Fall, dass kein Trinkwasserschutzgebiet ausgewiesen und über ein hydrogeologisches Gutachten begründet ist, kann zunächst - ohne auf die einzelnen Grundwasserverhältnisse und Entnahmemengen einzugehen - eine Abschätzung des näheren Einzugsgebietes einer Wasserversorgungsanlage überschlägig als Umfeld von 2 km um die Wasserentnahmestelle erfolgen. Dann sind z.T. bereits spezifische Einzelinformationen für die Gefahrenbeurteilung der betroffenen Wasserfassung(en) abzufragen wie die Entfernung zur nächsten Brunnengalerie, die Benennung von Altlastverdachtsflächen bzw. kontaminationsverdächtigen Nutzungsbereichen (KVN) innerhalb von Trinkwasserschutzzonen bzw. Vorhaltegebieten, die Erkundung von Verdachtskontaminanten (Targetstoffe), die das Roh- und Trinkwasser gefährden können, und aktuelle zusätzliche Informationen der zuständigen Behörden.

In Datensatz A3 wird in einer ersten groben Einschätzung die generelle Relevanz von festgestellten Altlastverdachtsflächen bzw. KVN für das Schutzgut Wasser hinterfragt. Dieser Arbeitsschritt hat sich bei der Bearbeitung der WGT-Altlastenerkundungsberichte **(UBA 1995)** bewährt, in denen zunächst z.T. ungefährliche Ablagerungen, wie Sperrmüll, „irrtümlich“ zu Altlastverdachtsflächen deklariert wurden.

Die fakultativen Kriterien informieren über die Benennung von Hauptkontaminanten aus Gemischen oder Stoffgruppen und untypische Schadstoffe in den verschiedenen Nutzungsbereichen.

4.2.2 Bewertungskomplexteil B

Die berücksichtigten Kriterien des Komplexteils B sind in Tabelle 4.5 aufgeführt.

---

[27] Die Vorgehensweise ist in den Arbeitsschritten 1 und 2 beschrieben (vgl. Kapitel 4.4).

[28] Kontaminationsverdächtige Nutzungsbereiche (KVN) lassen sich aus Kapitel 11.3 Anhang ableiten. Hier sind als Ergebnis der bisherigen Auswertungen Verdachtskontaminanten und Aussagen über das Schadstoffpotential fixiert.

[29] Sie sind jedoch zunächst für die Bearbeitung des Bewertungskomplexteils A nicht notwendig und stellen bei nicht ausreichender Kenntnis Zusatzinformationen (fakultative Kriterien) dar.

Tabelle 4.5 Bewertungskomplexteil B:
Kriterien zur Feststellung von Gefahren für Trinkwasser durch militärische Altlasten auf der Basis von Untersuchungsergebnissen (nicht eingerückt = obligatorische, kursiv und eingerückt = fakultative Kriterien)

Datensatz B4: Lokale Standortcharakteristik	
4.1	Erkundungsergebnisse zur geologischen Situation vor Ort (Gesteinszusammensetzung und Schichtfolge des Untergrundes, Klüftigkeit, Porosität, Durchlässigkeitsbeiwert k_f, Flurabstand, Mächtigkeit der Deckschichten)
4.2	Erkundungsergebnisse zur hydrogeologischen Situation vor Ort (Grundwassertyp (Poren-, Kluft-, Karstgrundwasserleiter, Grundwassernichtleiter), Grundwassermächtigkeit, Strömungsverhältnisse (Fließgeschwindigkeit, Fließrichtung)
4.3	Trinkwassereinzugsgebiet (Art der genutzten Wasserressource (Uferfiltrat, Tiefe der Grundwasserentnahme), Bauart des Brunnens (Horizontal-/Vertikalbrunnen), Entnahmevolumen pro Tag)
4.4	*Zusätzliche Angaben (z.B. Speichereigenschaften, Strömungsverhältnisse im Einzugsgebiet der Wasserentnahmestelle und in Relation zur ALVF, Depositionsrate, klimatische Wasserbilanz)*
Datensatz B5: Untersuchungsergebnisse aus Bodenproben	
5.1	gezielte chemische, physikalische oder sensorische Befunde (Einzelparameter und Summenparameter)
5.2	Anzahl von Altlastverdachtsflächen aus der orientierenden Erkundung
5.3	*Aussagen zur Verteilung von Schadstoffen im Boden*
5.4	*Sonstige Bodenbefunde*
Datensatz B6: Untersuchungsergebnisse aus Grund-/Rohwasserproben	
6.1	gezielte chemische, physikalische oder sensorische Befunde (Einzelparameter und Summenparameter)
6.2	Anzahl von Altlastverdachtsflächen aus der orientierenden Erkundung mit Grund/Rohwasserbezug
6.3	*Aussagen zur Verteilung von Schadstoffen im Sicker-/Grund-/Rohwasser*
6.4	*sonstige Sicker-/Grund-/Rohwasser- Befunde*

Der Datensatz B4 gibt Auskunft über Boden- und Grundwasserverhältnisse im lokalen Bereich und im Umfeld der Liegenschaft. Soweit eine Auswertung auf der Basis von Spezialkartenmaterialien laut Kriterien A3.5 bis A3.6 in der ersten Bearbeitungsphase bereits erfolgt ist, werden in den Kriterien B4.1 bis B4.4 erste Erkundungsergebnisse aus Vor-Ort-Untersuchungen berücksichtigt.

Insbesondere soll in den Datensätzen B5 und B6 durch orientierende Vor-Ort-Untersuchungen festgestellt werden, ob und inwieweit die Kontamination der Wasserressource die Bemessungen der lokalen Trinkwassergewinnung stören kann. Dies sind Untersuchungen zur Hydraulik im Untergrund und chemisch-analytische Untersuchungen des Grundwassers im Bereich sowie im Abstrom der Altlast bzw. der KVN und im Zustrom der Trinkwasserbrunnen. Gängig ist eine abgestufte Vorgehensweise im chemisch-analytischen Untersuchungsprogramm auf Verdachtskontaminanten (Targetstoffe). Relevante Stoffe und Stoffgruppen sind dabei solche, die bereits in niedrigen Konzentrationen eine Gefährdung darstellen (vgl. Kapitel 5) sowie solche, mit denen häufig und in großen Mengen umgegangen wurde (z.B. Mineralöle). Am Anfang eines Untersuchungsprogramms werden i.d.R. Summen- oder Gruppenparameter (z.B. DOC als gelöster organischer Kohlenstoffgehalt, oder AOX als Konzentration adsorbierbarer organischer Halogenverbindungen) und Stoffgruppen (z.B. PAK als polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe, oder Phenole) analytisch erfasst. Es wird sich daher zunächst als Mindestprogramm auf die Untersuchung der Verdachtsparameter der Kriterien A1.5 (vgl. Tabelle 4.4 und Kapitel 11.3 Anhang) beschränken.

Zur Beurteilung der Ergebnisse aus Vor-Ort-Untersuchungen im Bereich der Altlast wurden in der Vergangenheit länderspezifische Bezugswerte für Boden und Grundwasser zugrunde gelegt. Bestimmte Parameter sind nunmehr als Prüf- oder Maßnahmewerte in der Bundesbodenschutzverordnung für Böden oder als Geringfügigkeitsschwelle für Sickerwässer (GFS) bundesweit einheitlich festgeschrieben **(BBodSchV 1999)**.

Für die stoffspezifische Risikobewertung von Stoffen aus Altlasten im Hinblick auf Roh- bzw. Trinkwässer sind entsprechende Werte heranzuziehen. Dies wird in Kapitel 6 bei der Beschreibung der Bewertungskomplexteile D und E dargestellt (vgl. auch **BMU 1999**). Die Leitwerte bei kurzfristigen Expositionen (LW_{KE}) für Trinkwasser sind Auslösewerte für Sicherungs- und Dekontaminationsmaßnahmen bei Wasserressourcen in Einzugsgebieten von Trinkwassergewinnungsanlagen, also Maßnahmewerte (MW) im Sinne der Gefahrenerkennung und -abwehr für Trinkwasser. Ort der rechtlichen Gefahrenbeurteilung ist der Übergang von der ungesättigten zur gesättigten Bodenzone innerhalb des hydraulischen Einzugsgebietes der Trinkwasserfassung. Ein LW_{KE} wird entweder direkt gemessen oder über Sickerwassersimulationsmodelle (z.B. **Litz und Blume 1989**; **SISIM**[30] o.a.) bzw. Abschätzungen (in erster Näherung 1/10 der Wasserlöslichkeit) ermittelt.

4.2.3 Bewertungskomplexteil C

Bei der Untersuchung von Rohwasserproben (Kriterium A2.7), die abstromseitig in einer definierten Distanz zur Altlastverdachtsfläche genommen werden, sind diejenigen als relevante Parameter auszuwählen, die bestimmte stoffspezifische Eigenschaften bezüglich ihrer Mobilität, Persistenz, Akkumulierbarkeit und Abbaubarkeit besitzen (vgl. Bewertungskomplexteil C in Kapitel 5).

Im Bewertungskomplexteil C erfolgt die Bestimmung der Stoffcharakteristik. Das Ergebnis ist eine Gesamtaussage der Stoffgefährlichkeit für Trinkwasser (näheres vgl. Kapitel 5). Die Datensätze C7 Toxizitätspotential, C8 biochemische Abbaubarkeit sowie C9 Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit werden zur Bestimmung von Prioritätskontaminanten über die Bildung von Stoffcharakteristiken (SC) zunächst einzeln präzisiert und dann miteinander verknüpft. Die drei Datensätze mit ihren obligatorischen und fakultativen Kriterien sind in der Tabelle 4.6 dargestellt. In die Betrachtung einbezogen werden alle Verdachtskontaminanten (vgl. z.B. Kapitel 11.3 Anhang) sowie gefährliche Metabolite, soweit dazu Daten vorliegen oder berechnet werden können.

[30] SISIM = EDV – Modul Sickerwassersimulation. ARGE Fresenius – Focon / Chemlog GbR; hrsg. Umweltbundesamt Berlin, 1999

Tabelle 4.6 Bewertungskomplexteil C:
Kriterien zur Bestimmung der Stoffcharakteristik für die trinkwasserhygienische Bewertung (nicht eingerückt = obligatorische Kriterien; *kursiv und eingerückt* = fakultative Kriterien)

Datensatz C7: Toxizitätspotential von Kontaminanten und Metaboliten*
7.1 Toxikologische Bewertungszahl (BZ)
7.2 Einzelangaben zur chronischen Toxizität, wie NOAEL, ADI u.a. *7.3 Einzelangaben zur akuten Toxizität, vor allem LD_{50} (oral) und LC_{50} (inhalativ).* *7.4 Stoffgefährlichkeitswerte verschiedener Autoren (vgl. z.B. Kapitel 3.2.1)* *7.5 Wassergefährdungsklasse (WGK 0-3)* *7.6 Ökotoxikologische Daten wie Fischtoxizität, Daphnientest u.a.*
Datensatz C8: Biochemische Abbaubarkeit
8.1 Angaben zur biochemischen Abbaubarkeit (Abbauraten auf der Basis eines standardisierten Verfahrens)
8.2 Abbauergebnisse, die nicht auf standardisierten Verfahren beruhen *8.3 Abschätzung der biochemischen Abbaubarkeit aus der chemischen Konstitution*
Datensatz C9: Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit
9.1 Löslichkeit in Wasser (20°C) 9.2 Angaben zur Adsorbierbarkeit auf der Basis eines standardisierten Verfahrens
9.3 Adsorbierbarkeit aus nicht standardisierten Verfahren *9.4 Weitere Parameter wie Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizient, Viskosität, Dampfdruck u.a.*

* vgl. auch Abkürzungsverzeichnis

4.3 Das Bewertungsraster der Gefährdungsstufen für Trinkwasser (GS)

Durch die Zuordnung der militärischen Liegenschaften aus den jeweiligen Bewertungskomplexteilen A, B und C in das Einstufungsraster lässt sich der erforderliche Handlungsbedarf zur Sicherung der Trinkwasserversorgung ableiten (vgl. Tabelle 4.7 und Tabelle 4.8).

Tabelle 4.7 Grundlage des GS-Bewertungsrasters

Gruppe	Aussage / Folge	Gefährdungsstufe
1	Aussage: Keine Gefährdung bzw. kein unmittelbarer Handlungsbedarf für die Trinkwasserversorgung Folge: keine	GS I - GS III
2	Aussage: Potentielle oder vermutete Kontamination von Rohwasser im Einzugsgebiet von Wasserversorgungsanlagen Folge: Unverzügliche Erkundungs- und Untersuchungsmaßnahmen	GS IV
3	Aussage: Fehlende Datensätze; in Einzelfällen widersprüchliche Aussagen in Lage- und Erkundungsberichten Folge: Durchführung entsprechender Recherchen	GS V
4	Aussage: Nachgewiesene Gefahr für das Trinkwasser (akute Exposition) bzw. akuter Gefahrenverdacht durch mit hoher Wahrscheinlichkeit zu erwartende Kontamination des Trinkwassers (latente Exposition) Folge: Unmittelbarer Handlungsbedarf	GS VI

In der weiteren Differenzierung enthält das GS-Bewertungsraster insgesamt 13 unterschiedliche Gefährdungsstufen GS, **(Mulisch, Winter et al. 1996)** wobei die Unterscheidung in GS_A, GS_B, und GS_C wie o.b. das jeweilige Beweisniveau der Bewertungskomplexteile A, B und C kennzeichnet (vgl. Tabelle 4.8).

Tabelle 4.8 Differenzierung des GS-Bewertungsrasters

Gruppe	Ermittlungs- und Untersuchungs-ergebnisse	Beweis-niveau	Aussage zur Gefährdung des Trinkwassers	Gefähr-dungs-stufe (GS)	Handlungs-bedarf zur Qualitäts-sicherung des Trinkwassers
1	keine Altlastverdachtsflächen (ALVF) mit wassergefährdenden Stoffen	GS_A, GS_B	keine Gefährdung	GS Ia	kein erkennbarer Handlungsbedarf
	kein Verdacht auf Kontamination nach Einschätzung von Ingenieurbüros oder zuständigen Behörden		Einschätzung: keine Gefährdung	GS Ib	
	analog zivile Nutzungshistorie der Liegenschaft ohne umwelt- oder gesundheitsgefährdende Nutzungsbereiche	GS_A	keine Gefährdung	GS Ic	
	potentieller Altlastenverdacht, jedoch langfristig keine Auswirkungen auf Wasserressourcen nachgewiesen	GS_B, GS_C	Nachweis: keine Gefährdung	GS II	
	z.Z. keine Nutzung von Wasserressourcen für Trinkwasserzwecke, jedoch potentielle Kontamination	GS_A, GS_B,	z.Z. keine Gefährdung	GS IIIa	
	z.Z. keine Nutzung von Wasserressourcen für Trinkwasserzwecke, jedoch Kontamination nachgewiesen bzw. sehr wahrscheinlich		z.Z. keine Gefährdung	GS IIIb	
2	Die Liegenschaft liegt innerhalb eines Einzugsgebietes der öffentlichen Wasserversorgung	GS_A	potentielle Gefährdung wegen möglicher Kontamination	GS IVa	Untersuchungs-bedarf
	Einzel- bzw. Eigenwasserversorgungs-anlagen befinden sich innerhalb bzw. in unmittelbarer Nähe zu der Liegenschaft			GS IVb	
	Verdacht auf bzw. Nachweis von wassergefährdende(n) Altlasten innerhalb eines Einzugsgebietes der öffentlichen Wasserversorgung		potentielle Gefährdung wegen Verdacht auf Kontamination	GS IVc	

Gruppe	Ermittlungs- und Untersuchungs-ergebnisse	Beweis-niveau	Aussage zur Gefährdung des Trinkwassers	Gefähr-dungs-stufe (GS)	Handlungs-bedarf zur Qualitäts-sicherung des Trinkwassers
3	Verdacht auf wassergefährdende Altlasten, jedoch Un-kenntnis über ausgewiesene Trinkwasserschutzzonen oder betroffene Trinkwasserfassungen	GS_A	Gefährdung kann nicht ausgeschlos-sen werden	GS Va	unmittelbarer Klärungsbedarf
	widersprüchliche Aussagen			GS Vb	
	keine Kenntnisse			GS Vc	
4	vermutete bzw. nachgewiesene unmittelbare Kontamination von Rohwasser für Trinkwasserzwecke	GS_A, GS_B, GS_C	Gefahr bzw. akuter Gefahren-verdacht	GS VI	unmittelbarer Handlungsbedarf

Die Aussagen der Gruppe 1 sind breit gefächert und reichen von „keine Altlastverdachtsflächen mit wassergefährdenden Stoffen“ (GS Ia) bis „nachgewiesene bzw. sehr wahrscheinliche Verunreinigung von Grundwasser“ (GS IIIb), das jedoch nicht für Trinkwasserzwecke genutzt wird und in absehbarer Zeit auch nicht dafür vorgesehen ist. Aus Sicht eines nachhaltigen Umweltschutzes bzw. des flächendeckenden Grundwasserschutzes sind jedoch bereits bei Einstufungen in GS IIIa und GS IIIb Beanstandungen angebracht. Für Liegenschaften der Gruppe 1 besteht aus Sicht der Trinkwasserversorgung kein Handlungsbedarf.

Die Gruppe 2 bezeichnet Liegenschaften bzw. Teilliegenschaften, bei denen eine Gefährdung für Rohwasserressourcen durch Altlasten nicht auszuschließen bzw. wahrscheinlich oder bereits nachgewiesen ist oder zumindest latente Gefahren für Trinkwasser bestehen. Die im Umfeld betroffenen Wasserversorgungsanlagen (WVA) werden unterschieden in zentrale öffentliche Wasserversorgungsanlagen (ZWVA) sowie, soweit hierüber Kenntnisse bestehen, in Einzelwasserversorgungsanlagen (EZVA) und Eigenwasserversorgungsanlagen (EGVA).

Der festgestellte Untersuchungsbedarf für Liegenschaften der Gruppe 2 umfasst sowohl liegenschaftsbezogene Maßnahmen in Form von Altlasterkundungen als auch wasserwerksseitige Untersuchungen zur Feststellung der Roh- und Trinkwasserqualität an und im Umfeld der Entnahmestelle. Der Untersuchungsbedarf für Gruppe 2 ist angezeigt bei Liegenschaften des Beweisniveaus A oder B und mit der Gefährdungsstufe GS IV.

Der Gruppe 3 werden alle Liegenschaften zugeordnet, über die, außer den Verwaltungsdaten nach A0 (vgl. Bewertungskomplexteil A), keine Kenntnisse vorliegen. Dies betrifft auch alle Liegenschaften mit bereits festgestelltem Verdacht auf wassergefährdende Altlasten, für die jedoch noch keine Kenntnisse über ausgewiesene Trinkwasserschutzzonen oder betroffene Wasserfassungen bestehen oder bei denen widersprüchliche Aussagen vorliegen. Der festgestellte Klärungsbedarf für Liegenschaften der Gruppe 3 umfasst das Mindestinformationsniveau des Datensatzes A0 - A1.1 betreffs ziviler oder analog ziviler Objekte bzw. die Nutzungshistorie des Komplexteils A für militärische Liegenschaften. Entscheidende Bedeutung hat dabei die Tatsache, ob sich Trinkwasserbrunnen im Umfeld einer ALVF oder KVN befinden. Ebenso sind widersprüchliche Aussagen in Begehungsberichten und Liegenschaftsangaben durch entsprechende Recherchen aufzuklären. Der Erläuterungsbedarf

bezieht sich daher ausschließlich auf Liegenschaften des Beweisniveaus A und der Gefährdungsstufe GS V.

Die Gruppe 4 betrifft alle Liegenschaften mit vermuteten bzw. nachgewiesenen unmittelbaren Kontaminationen von Rohwasser für Trinkwasserzwecke, bei denen schnell reagiert werden soll, um den akuten Gefahrenverdacht auszuräumen oder einem solchen zuvorzukommen.

Der festgestellte unmittelbare Handlungsbedarf der Gruppe 4 beinhaltet sämtliche Sicherungs- und Sanierungsmaßnahmen für Liegenschaften der Bewertungskomplexteile A, B und C der Gefährdungsstufe GS VI.

4.4 Arbeitsschritte des Bewertungsrasters für die Komplexteile A, B und C

In bis zu 28 Arbeitsschritten wird aus dem Bewertungskomplex die jeweilige Gefährdungsstufe (GS I – GS VI) und der daraus abzuleitende Handlungsbedarf über das Einstufungsraster ermittelt. Ausgangspunkt bildet der Datensatz A0, der im wesentlichen die Objektbezeichnung, Angaben zur Lokalisierung der Liegenschaft sowie die Dokumentation der Informationsquellen enthält. Alle Arbeitsschritte sind in den Tabellen 4.9 bis 4.12 dargestellt, wobei jeweils zwischen dem Kenntnisstand und der Aussage der einzelnen Datensätze eines Komplexteils unterschieden wird. Der Kenntnisstand gibt Auskunft, inwieweit die obligatorischen bzw. fakultativen Kriterien des jeweiligen Datensatzes geprüft wurden. Die Aussage eines Datensatzes kann entweder entlastend (Symbol -) oder belastend (Symbol +) sein. Das in Klammern gesetzte Symbol (+) im Arbeitsschritt 12 weist auf eine Gefährdung von Grundwasser hin, das aber derzeit nicht für eine Trinkwassergewinnung herangezogen wird (vgl. Tabelle 4.11). Die Aussage (+ –) im Arbeitsschritt 5 verweist auf widersprüchliche Angaben. Widersprüchliche Aussagen erfordern die Einstufung in GS Vb mit dem Ergebnis einer hohen Priorität zur unverzüglichen Klärung des Sachverhalts. Die Arbeitsschritte 2, 8, 10, 13, 19 und 21 führen entweder bei eindeutiger Situation zur Festlegung einer Gefährdungsstufe oder im Zweifelsfall über Zwischenschritte, gekennzeichnet mit dem Symbol X (mit lfd. Nr. als Index), zu einem weiterführenden Arbeitsschritt, in dem die fehlende Zusatzinformation abgerufen wird. Die Aussagen der Arbeitsschritte 15, 17, 24 und 25 erlauben keine Gefährdungseinschätzung, sondern führen zwangsläufig zu einem weiterführenden Arbeitsschritt. Fundierte Kenntnisse über fakultative Kriterien (gekennzeichnet mit dem Symbol *Z* mit Angabe des jeweiligen Komplexteils bzw. Datensatzes; also *ZA, ZB* oder *ZC*) können in den Arbeitsschritten 11, 12, 13 (für den Komplexteil A), 20 und 21 (für den Komplexteil B), 25 und 26 (für den Komplexteil C) zur Fixierung einer Gefährdungsstufe führen.

Die Schrittfolge beginnt mit dem Bewertungskomplexteil A, in dem versucht wird, bereits auf der Grundlage von einfachen Kriterien und entsprechend niedrigem Informationsniveau eine Entscheidung zu treffen, ob eine akute oder latente Gefahr für die Trinkwasserversorgung gegeben oder möglich ist. Ansonsten erfolgt die sukzessive Abarbeitung der Komplexteile B und C in der vorgegebenen Schrittfolge. Die gesamte Vorgehensweise ist aus Bild 4.2 zu ersehen.

Bereits in der Primärauswahl werden über das Kriterium A1.1 des Datensatzes A1 (vgl. Tabelle 4.4) alle Liegenschaften mit eindeutig ziviler Nutzung (z.B. Sportplätze, Kultureinrichtungen) und analog ziviler Nutzung (z.B. Befehlsstände) - soweit keine gegenteiligen Informationen vorliegen - aus der weiteren Bewertung herausgenommen, da die Nutzungshistorie dieser Flächen den Umgang mit wassergefährdenden Stoffen in der Vergangenheit mit praktischer Gewissheit ausschließt.

Die Aussagen über Liegenschaften mit ziviler und analog ziviler Nutzung werden gemäß Tabelle 4.9 in zwei Arbeitsschritten getroffen.

Tabelle 4.9 Arbeitsschritte zur Einstufung von Liegenschaften mit ziviler und analog ziviler Nutzung (Kriterien vgl. Tabelle 4.4)

Arbeits-schritt	Kriterium A1.1	Datensatz A2		Datensatz A3		Gefährdungsstufe (GS_A)
	Angabe	Angabe	Aussage	Angabe	Aussage	
1	Ja	Ja	-	Ja	-	Ia, Ic
	Ja	Ja	+	Ja	-	
2	Ja	Ja	+	Ja	+	Ib X_1

Legende:

- = negative entlastende Aussage, + = positive belastende Aussage

X_1 = Zwischenaussage, die durch Zusatzinformationen zu präzisieren ist

Der Informationsgehalt zu Liegenschaften mit ziviler bzw. analog ziviler Nutzungshistorie ist erfahrungsgemäß wegen geringerer Geheimhaltung gut, so dass i.d.R. die notwendigen Kenntnisse vorliegen. Unabhängig davon, ob Einzugsgebiete von Wasserversorgungseinrichtungen berührt werden oder nicht, führt das Fehlen wasserrelevanter Altlastverdachtsflächen im Arbeitsschritt 1 zur Gefährdungsstufe GS_A-Ia des Einstufungsrasters. Liegenschaften mit analog ziviler Nutzungshistorie werden der GS_A-Ic zugeordnet. In Ausnahmefällen sind jedoch auf Liegenschaften mit analog ziviler Nutzung - wie beispielsweise Wehrkreiskommandos (WKK) und Volkskreiskommandos (VKK) - unbefestigte Tanklager und Waschplätze angelegt worden. Befindet sich ein solches Objekt zudem in unmittelbarer Nähe einer Trinkwassergewinnungsanlage (Arbeitsschritt 2), kann die resultierende belastende Aussage nur durch die zuständige Behörde bzw. durch weitergehende Erkundungsmaßnahmen enthärtet werden, was zur Einstufung in GS_A-Ib bzw. unter Nachweis, dass auf Dauer keine Gefährdung vorliegt, zur Einstufung in GS_C-II führt. Bleibt der Erstverdacht bestehen, ist auch für Liegenschaften mit analog ziviler Nutzungshistorie ab Arbeitsschritt 11 (vgl. Tabelle 4.11) weiter zu verfahren (Zwischenschritt X_1).

Der Arbeitsablauf beginnt mit den Datensätzen A0 bis A3 des Bewertungskomplexteils A und führt entsprechend den Gegebenheiten über obligatorische / fakultative Kriterien ggf. über den Komplexteil B in den Komplexteil C. Die Stoffbewertung im Komplexteil C kann aber – z.B. resultierend aus einer ökonomischen Abwägung bei bereits vorliegenden Stoffdaten – auch losgelöst von liegenschaftsbezogenen Erkundungen zunächst nur für die Targetstoffe des Bewertungskomplexteils A erfolgen. Verwiesen wird zudem auf die Erläuterungen zu Bild 4.2.

Erläuterungen zum Bild 4.2

Bewertungskomplex

Bewertungskomplexteile A, B und C mit den Datensätzen A0 bis C9, die obligatorische und fakultative Kriterien ZA, ZB und ZC beinhalten.

Methodik: 28 Arbeitsschritte (AS 1 bis AS 28). X_1 bis X_8 sind Zwischenschritte ohne Bewertung.

Einstufungsraster:

Ergebnis der Bewertung: Gefährdungsstufen GS I – GS VI in Abhängigkeit von zunehmendem Erkenntnisstand auf Basis der Bewertungskomplexteile von GS_A über GS_B bis GS_C.

3. Sanierungsbezug:

Die Gefährdungsstufe GS VI erfordert unabhängig vom Informationsniveau GS_A bis GS_C unmittelbaren Handlungsbedarf.

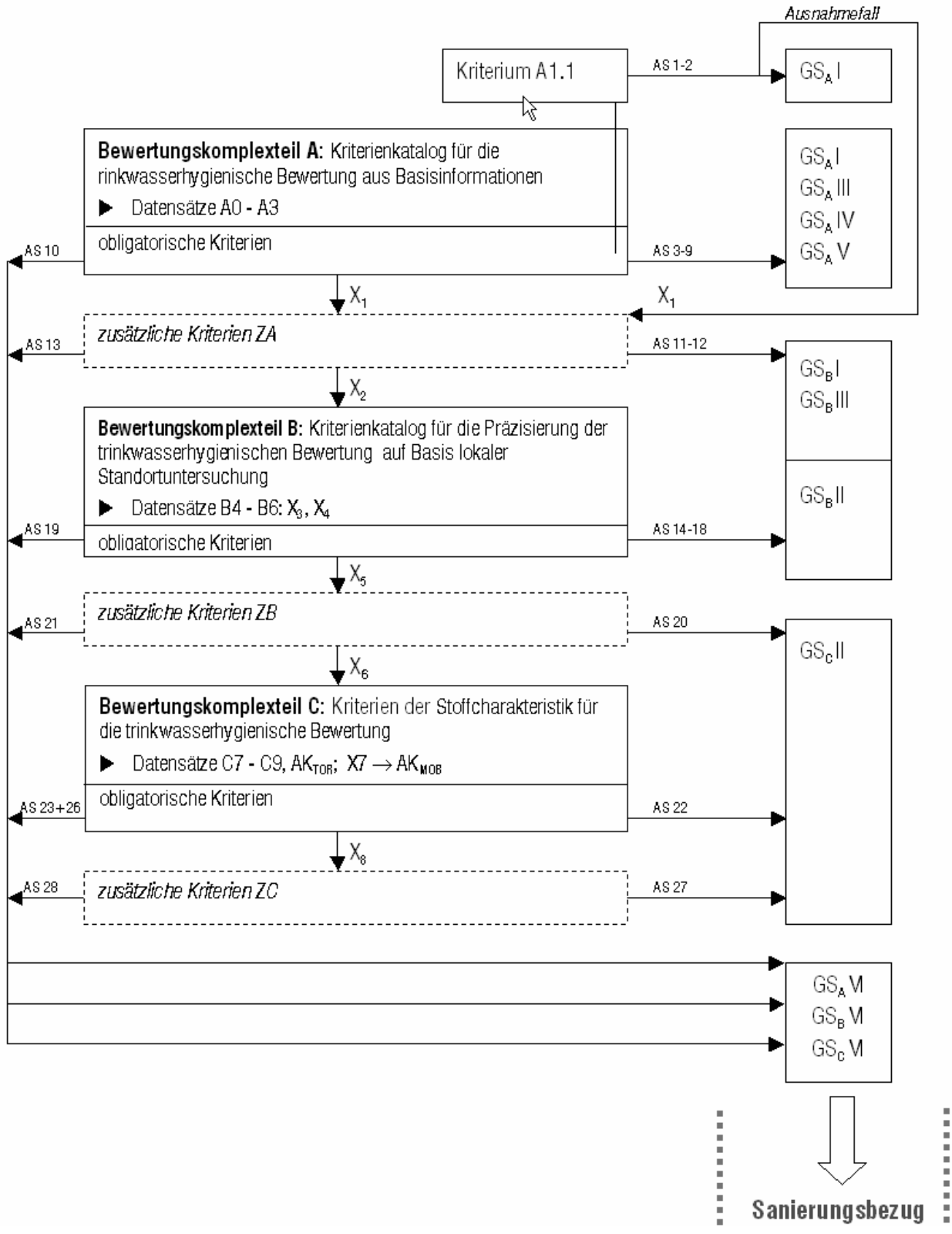


Bild 4.2 Arbeitsschritte bei der Bewertung aus den Komplexteilen A, B und C in die Gefährdungsstufen für Trinkwasser (GS)

4.4.1 Arbeitsschritte von Bewertungskomplexteil A

Ausgehend von Verwaltungsdaten (Datensatz A0) sind in Tabelle 4.10 für alle Liegenschaften mit militärischer Nutzungshistorie die Arbeitsschritte aufgeführt, die je nach Qualität und Vollständigkeit der Datensätze A1 bis A3 zu einer Erstbewertung führen.

Tabelle 4.10 Arbeitsschritte zur GS_A-Einstufung im Bewertungskomplexteil A

Arbeits-schritt	Datensatz A1		Datensatz A2		Datensatz A3		Gefährdungsstufe (GS_A)
	Angabe	Aussage	Angabe	Aussage	Angabe	Aussage	
3	Nein		Nein		Nein		Vc
4	Ja	+	Nein		Nein		Va
	Ja	+	Nein		Ja	+	
5	Ja	+-	Ja	+-	Ja	+-	Vb
6	Nein		Ja	-	Nein		IIIa
7	Ja	+	Ja	-	Ja	+	IIIb
	Ja	+	Ja	-	Nein		
8	Nein		Ja	+	Nein		IVa
	Nein		Ja	+	Nein		IVb
							X_1
9	Ja	-	Nein		Ja	-	Ia
	Ja	-	Ja	-	Ja	-	
	Ja	-	Ja	+	Ja	-	
10	Ja	+	Ja	+	Ja	+	IVc
							VI
							X_1

Legende:

- = negative entlastende Aussage, + = positive belastende Aussage, +- = widersprüchliche Aussage

X_1 = Zwischenaussage, die durch jeweils nachstehende Datenbasis zu präzisieren ist

Fehlen außer den Verwaltungsdaten jegliche weiteren Angaben, gilt die Gefährdungsstufe GS_AVc. Gibt es Hinweise auf wassergefährdende Altlasten, jedoch Unkenntnis, ob die Liegenschaft Trinkwasserfassungen berührt, erfolgt die Einstufung in GS_AVa. In die GS_AVb (Arbeitsschritt 5) werden Objekte aufgenommen, bei denen widersprüchliche Aussagen, z.B. in Begehungsberichten, zur Altlastensituation oder Lage der militärischen Objekte vorliegen. Für alle GS_AV -Liegenschaften ist unmittelbarer Klärungsbedarf angezeigt, um eine Ersteinschätzung zumindest über den Liegenschaftsbezug zu Trinkwassereinzugsgebieten (Datensatz A2) zu ermöglichen (Arbeitsschritt 6 bis 10).

Liegenschaften, die sich außerhalb von Trinkwassereinzugsgebieten der öffentlichen Wasserversorgung befinden und auch keine Eigen- oder Einzelwasserversorgungsanlage gefährden können, werden unabhängig von der Tatsache, ob Kenntnis über eine Altlastensituation vorliegt, entsprechend den Arbeitsschritten 6 bzw. 7 den Gefährdungsstufen GS_AIIIa bzw. GS_AIIIb zugeordnet. Zu beachten ist hierbei jedoch, dass mit der Einstufung in GS_AIII eine Grundwasserkontamination prinzipiell als wahrscheinlich angesehen wird bzw. bereits vorliegt.

Ehemalige militärische Objekte, die sich nachweislich innerhalb von Trinkwasserschutzzonen bzw. in unmittelbarer Nähe von Einzel- oder Eigenwasserversorgungsanlagen befinden und bei denen jegliche Angaben zu den Datensätzen A1 und A3 fehlen, sind gemäß Arbeitsschritt 9 den Gefährdungsstufen GS_AIVa bzw. GS_AIVb zuzuordnen. Im Zweifelsfall sind weitere

Informationen notwendig, um über den Zwischenschritt X_1 die Aussagen nach den Arbeitsschritten 11 bis 13 (vgl. Tabelle 4.11) präzisieren zu können.

Voraussetzung für die Entlassung aus der weiteren Bewertung in Arbeitsschritt 9 über die Einstufung in GS_AI sind entlastende Aussagen der Bewertungskomplexteile A1 und A3.

Die ungünstigste Variante für Liegenschaften resultiert aus dem Arbeitsschritt 10. Hier existiert ein unmittelbarer Bezug zu Wasserversorgungsanlagen bei nachweislich wasserrelevanten Schadstoffen und damit als Mindesteinstufung die GS_AIVc. Wird der Verdacht auf wassergefährdende Altlasten innerhalb des Einzugsgebiets der öffentlichen Wasserversorgung oder Beeinflussung von Einzel- oder Eigenwasserversorgung erhärtet, muss eine Einstufung in die höchste Gefährdungsstufe GS_AVI erfolgen: Um das Risiko einer Gesundheitsgefährdung zu vermeiden, ergibt sich hieraus unmittelbarer Handlungsbedarf. Wird die Aussage X_1 als Zwischenlösung gewählt, muss als nächster Schritt eine Aufklärung des Sachverhaltes an Hand der fakultativen Kriterien des Komplexteils A erfolgen. Das betrifft vor allem Ersterkundungsmaßnahmen im Rahmen von liegenschaftsbezogenen historischen und technischen Erkundungen mittels der Arbeitsschritte 11, 12 und 13, wobei letzterer über die Zwischenaussage X_2 (positive belastende Aussage) zum Bewertungskomplex B überleitet (vgl. Tabelle 4.11). Bei Vorliegen von entlastenden Aussagen der fakultativen Kriterien *ZA* kann eine Rückstufung in die GS_AI erfolgen, ansonsten ist die Aussage GS_AIV oder GS_AVI zutreffend. Die fakultativen Kriterien im Rahmen von liegenschaftsbezogenen historischen und technischen Erkundungen als Zusatzinformationen *ZA* verlangen insbesondere die Klärung der Eigentumsverhältnisse, Nutzung und Bebauung, die Art von umweltrelevanten Vorkommnissen, die Beschreibung der geologischen und hydrogeologischen Situation des Standortes und der näheren Umgebung sowie die Bewertung des Schadstoffpotentials. Ist bei einer möglichen oder nachgewiesenen Kontamination mit Sicherheit eine Beeinflussung von Rohwasser für die Trinkwasserversorgung auszuschließen, ergibt sich die Einstufung in GS_AIII. Dagegen führen belastende Aussagen des Arbeitsschrittes 13 zur Gefährdungsstufe GS_AVI oder im Zweifelsfall über den Zwischenschritt X_2 zur Datenbasis B4 (lokale Standortcharakteristik). Liegen nach Erreichen des Arbeitsschrittes 13 keine Zusatzinformationen (fakultative Kriterien) zum Bewertungskomplex A vor, müssen ebenfalls Details zur lokalen Standortcharakteristik oder weiterführende B5- bzw. B6-Untersuchungen angefordert werden.

Das Ergebnis des Bewertungskomplexteils A ist die Zuordnung in Gefährdungsstufen GS_A des Einstufungsrasters (vgl. Tabelle 4.8). Bei Liegenschaften der Gefährdungsstufen GS_AI bis GS_AIII besteht für die Trinkwasserversorgung kein Handlungsbedarf. Aus Sicht der allgemeinen Umwelthygiene können aber insbesondere bei der Einstufung in GS_AIII erhebliche Sanierungsmaßnahmen notwendig sein, die allerdings nicht das Lebensmittel Trinkwasser betreffen. Nur die Liegenschaften in den Einstufungen GS_AIV bis GS_AVI sind für weitere Betrachtungen bzw. Untersuchungen aus Sicht der Trinkwasserhygiene relevant.

Für Liegenschaften mit den Gefährdungsstufen GS_AVI oder GS_AIV (Trinkwassergefährdung oder Verdacht auf Trinkwassergefährdung) sollten gemeinsame Besichtigungen vor Ort unter Leitung der zuständigen Wasserbehörde und unter Einbeziehung des Gesundheitsamtes, des Wasserversorgers, des Grundstückseigentümers (und ggf. der Bundeswehrverwaltung) durchgeführt werden. Über den begründeten Verdacht einer Rohwassergefährdung auf der Basis der Ergebnisse des Bewertungskomplexteils A lässt sich an dieser Stelle das weitere Vorgehen - insbesondere zu Anforderungen an Ausführung und Finanzierung von Maßnahmen - wesentlich vereinfachen und im Sinne wirtschaftlichen Handelns beschleunigen.

4.4.2 Arbeitsschritte von Bewertungskomplexteil B

Im Komplexteil B sind Kenntnisse über die geologische und hydrogeologische Situation im Umfeld einer Liegenschaft sowie gegebenenfalls Untersuchungsergebnisse über Boden-, Roh-

und Trinkwasserproben gefragt, mit dem Ziel, GS-Rückstufungen vornehmen oder aber den erforderlichen Handlungsbedarf präzisieren zu können (vgl. Tabelle 4.11).

Tabelle 4.11 Arbeitsschritte zur GS_B-Einstufung im Bewertungskomplexteil B

Arbeits-schritt	Zwischen-aussage	Zusatzinformation			Gefährdungsstufe (GS_B) bzw. Zwischenaussage X
		Datenbasis	Angabe	Aussage	
11	X_1	ZA	Ja	-	I
12	X_1	ZA	Ja	(+)	III
13	X_1	ZA	Ja Nein	+	VI X_2 X_2
14	X_2	B4	Ja	-	II
15	X_2	B4	Ja	+	X_3
16	X_3	B5	Ja	-	II
17	X_3	B5	Ja	+	X_4
18	X_4	B6	Ja	-	II
19	X_4	B6	Ja	+	VI X_5

Legende:

- = negative entlastende Aussage, + = positive belastende Aussage; (+) = positiv belastende Aussage, ohne direkten Trinkwasserbezug

X_1 – X_4 sind Zwischenaussagen, die durch jeweils nachstehende Datenbasis (obligatorische bzw. fakultative Kriterien) zu widerlegen oder zu belegen sind

Kartenmaterialien z.B. der Geologischen Landesämter stellen Aussagen zu deckenden Bodenschichten, zu Strömungsverhältnissen des Aquifers im Untergrund und zur Verschmutzungsempfindlichkeit des Grundwassers, zum Grundwasserflurabstand und zur Grundwasserneubildung zur Verfügung. Diese Daten dienen der technischen Erkundung und werden bei der Festlegung notwendiger Entnahmestellen von Boden- bzw. Grundwasserproben in den Schritten B4 bis B6 berücksichtigt. Aus den Aussagen zu Deckschichten und dem Rückhaltevermögen des Untergrundes für Schadstoffe sowie der Nutzungsdauer können sich zudem erste quantitative Abschätzungen zu militärischen Altlasten ergeben. Auch können anhand dieser Kriterien z.B. aus den Strömungsverhältnissen bzw. der Fließgeschwindigkeit und -richtung des Grundwassers bereits potentielle Schadstoffbereiche im Abstrom der KVN abgeschätzt bzw. eingegrenzt werden (vgl. auch Kapitel 5).

Im Rahmen der geologischen/hydrogeologischen Untersuchungen bzw. im Anschluss daran werden die stoffanalytischen Boden- und Grundwasseruntersuchungen durchgeführt. Dabei sind vorrangig die Ergebnisse der Grundwasseranalysen aus dem lokalen Einflussbereich der Altlast heranzuziehen. Werden hier Kontaminationen gemessen, sollen zur weiteren Beurteilung an- und abstromseitig der Altlast, sowie im Anstrom der Trinkwasserentnahmestelle Messungen analog den Schutzzonendefinitionen stattfinden. Nur wenn die Ergebnisse in den Arbeitsschritten 14, 15 und 17 sichere Aussagen, z.B. im Rahmen von geologischen / hydrogeologischen Gutachten über die Geschütztheit des Rohwassers aufgrund der gegebenen Verhältnisse zulassen, ist eine Rückstufung in GS_B II und damit eine Entlassung der militärischen Liegenschaft aus dem weiteren Untersuchungsprogramm möglich. Ergeben sich jedoch belastende Aussagen zugunsten der Kontamination von Trinkwasserressourcen insbesondere aufgrund der Stoffkonzentrationen im Rohwasser, so erfolgt zur weiteren Präzisierung des Gefahrenverdachtes die Zuordnung zum Zwischenschritt X_5 oder zur direkten Auslösung von Maßnahmen direkt in GS_B VI (Arbeitsschritt 19).

Das Ergebnis des Bewertungskomplexteils B ist die Zuordnung der militärischen Liegenschaften in die Gefährdungsstufen GS_B des Einstufungsrasters (vgl. Tabelle 4.8). Rückstufungen aus dem Bewertungskomplex A gelangen über entlastende Aussagen in die Gefährdungsstufen GS_B I, GS_B II oder GS_B III. Für diese Liegenschaften besteht aus Sicht der Trinkwasserhygiene dann kein Handlungsbedarf mehr.

Bei Einstufungen in die Gefährdungsstufen GS_B VI sind Gefahren für Trinkwasser im Umfeld der Liegenschaften eindeutig festgestellt. Hieraus ergibt sich unmittelbar die Notwendigkeit von Gefahrenabwehrmaßnahmen in Form von Sicherungs- bzw. Sanierungsmaßnahmen am Kontaminationsort sowie im Einzugsgebiet der betroffenen Wasserversorgungsanlage. Liegen keine ausreichenden stoffspezifischen Daten zur Toxikologie, zur Mobilität und zur Abbaubarkeit vor, erfolgt über den Zwischenschritt X_5 der Eintritt in den Bewertungskomplexteil C.

4.4.3 Arbeitsschritte von Bewertungskomplexteil C

Im Bewertungskomplexteil C werden Kriterien zur Beurteilung der Trinkwasserrelevanz von Schadstoffen in Form einer stoffspezifischen Bewertung herangezogen. Dieser Bewertungskomplexteil besteht im wesentlichen aus dem SCS-Modell. Es wird ausführlich in Kapitel 5 dargestellt.

Zunächst werden die fakultativen Kriterien als Zusatzinformationen *ZB* aus dem Bewertungskomplexteil B in den Arbeitsschritten 20 und 21 abgerufen. Bei ausreichend entlastenden Aussagen kann eine Rückstufung in GS_C II erfolgen. Nur eindeutig belastende Zusatzinformationen sollten zur Einstufung GS_C VI führen, ansonsten muss über die Zwischenstufe X_6 weiter verfahren werden. Das gilt auch, wenn keine fakultativen Aussagen vorliegen (Tabelle 4.12).

Tabelle 4.12 Arbeitsschritte zur GS_C-Einstufung im Bewertungskomplexteil C

Arbeits-schritte	Zwischen-aussage	Datensatz / SC	Kenntnis / Angabe	Aussage	Gefährdungsstufe (GS_C)
20	X_5	ZB	Ja	-	II
21	X_5	ZB	Ja Nein	+	VI X_6 X_6
22	X_6	SC_{TOR}	Ja	$SC_{TOR} \leq 3$	II
23	X_6	SC_{TOR}	Ja	$SC_{TOR} \geq 5$	VI
24	X_6	SC_{TOR}	Ja	$3 < SC_{TOR} < 5$	X_7
25	X_7	SC_{TOR}	Nein		X_8
26	X_7	SC_{MOB}	Ja Ja Nein	$SC_{MOB} \rightarrow 2$ $SC_{MOB} \rightarrow 4$	VI X_8 X_8
27	X_8	ZC	Ja	-	II
28	X_8	ZC	Ja	+	VI

Legende:

- = negative entlastende Aussage, + = positive belastende Aussage

X_5 – X_8 sind Zwischenaussagen, die durch die jeweils nachstehende Datenbasis (obligatorische bzw. fakultative Kriterien) zu präzisieren sind

SC_{TOR} = SC-Wert der umwelttoxikologischen Relevanz; SC_{MOB} = SC-Wert der Mobilität

$SC_{MOB} \rightarrow$ [Zahlenwert] = SC-Wert der Mobilität geht gegen [Zahlenwert]

In den Arbeitsschritten 22 und 23 ist auf der Basis des SC_{TOR}-Wertes eine Entscheidung über

- die Rückstufung in GS_C II bei $SC_{TOR} \leq 3$

oder

- eine Hochstufung in GS_C VI bei $SC_{TOR} \geq 5$

zu treffen[31]. Für die übrigen Verbindungen mit $3 < SC_{TOR} < 5$ wird über die Zwischenaussage X_7 die Stoffcharakteristik SC_{MOB} abgefragt. Für Trinkwasserressourcen im Umfeld von Kontaminationsquellen sind Substanzen mit hoher Mobilität (und hoher räumliche Ausdehung, allerdings auch verbunden mit abnehmenden Konzentrationen bei zunehmendem Abstand von der Kontaminationsquelle) im Allgemeinen kritischer einzuschätzen als immobile Stoffe. Umgekehrt sind die mit $SC_{MOB} = 4$ ausgewiesenen Stoffe, die zudem toxikologisch relevant und biochemisch schwer abbaubar sind, noch nach Jahrzehnten am Ort der Altlast als gefährlich einzustufen (die Auswirkungen auf die Trinkwasserversorgung im sehr nahen Umfeld der Altlast sind dann weitestgehend von den Vor-Ort-Parametern abhängig und könnten ggf. ebenfalls kritisch einzuschätzen sein).

Lassen sich wegen schlechter Datenlage keine SC_{TOR}-Werte ermitteln bzw. fehlen die im Arbeitsschritt 26 geforderten Angaben zum SC_{MOB}, muss über die Arbeitsschritte 27 und 28 auf die fakultativen Kriterien der Datensätze C7 bis C9 zurückgegriffen werden. Diese beinhalten auch die aquatoxikologischen Daten und deren Bewertung (vgl. SC_{AQU} in Kapitel 5). Bei ausreichender Kenntnis ergibt sich alternativ die Wahl zwischen GS_C II und GS_C VI.

Der Bezug zu den Gefährdungsstufen des Einstufungsrasters aus dem Bewertungskomplexteil C ist rein stoffspezifisch und erfordert, außer der Kenntnis der nachgewiesenen Prioritäts- oder Hauptkontaminanten bzw. der aus der ehemaligen militärischen Nutzung abgeleiteten Verdachtskontaminanten, keine weiteren standortspezifischen Untersuchungen. Das nachfolgende Kapitel 5 beschreibt das System zur modularen Gesamtbewertung von Umweltkontaminanten im Trinkwasser (SCS - Stoff-Charakterisierungs-System), welches als Bewertungssystem für die Bewertungskomplexteile C, D und E entwickelt wurde **(Mulisch 2003).**

[31] SC-Werte vgl. Kapitel 5

5 FEINSTRUKTUR VON BEWERTUNGSKOMPLEXTEIL C: STOFFCHARAKTERISIERUNGSSYSTEM ZUR BEWERTUNG VON UMWELTKONTAMINANTEN (SCS)

Das System zur modularen Gesamtbewertung des Gefährdungspotentials (SCS - Stoff-Charakterisierungs-System) klassifiziert und bewertet die boden- und gewässerhygienisch bedeutsamen Eigenschaften von Umweltkontaminanten in Form standardisierter Koeffizienten (SC-Werte). Auf der Grundlage der SC-Werte können boden- und gewässervermittelte stoffliche Expositions- und Gefährdungspotentiale für den Menschen oder für aquatische Organismen rechtzeitig erkannt, quantifiziert und nötigenfalls abgewehrt werden **(Mulisch 2003).**

In den Fällen, bei denen die SC-Werte

- ein bestimmtes Expositions- und Gefährdungspotential vorhersagen oder
- ein bereits gegebenes, also nicht rechtzeitig vorhergesagtes Expositions- und Gefährdungspotential abgewehrt werden muss,

sind kurz- bis mittelfristig Sanierungsentscheidungen (z.B. zur Sicherung der gesundheitlichen Unbedenklichkeit des Lebensmittels Trinkwasser) fällig. Das Ergebnis des SCS-Verfahrens muss dann durch

- aquatoxikologische Stoffbewertungen in Form aquatoxikologisch duldbarer höchstzulässiger Konzentrationen (HZK) (vgl. Bewertungskomplexteil E in Kapitel 6.1) oder
- humantoxikologische Stoffbewertungen in Form gesundheitlich duldbarer Leitwerte für Trinkwasser (LW) (vgl. Bewertungskomplexteil D in Kapitel 6.2)

ergänzt werden.

Das System eignet sich damit nicht nur für die Bewertung von militärischen Altlasten oder sonstigen altlastenrelevanten Stoffen, sondern grundsätzlich für alle Stoffe, die gezielt oder ungezielt in die Umwelt gelangt sind (Umweltkontaminanten).

5.1 Herkunftsbereiche und Gruppencharakteristik

Das SCS systematisiert die Herkunfts-/Einsatzbereiche - über die Thematik der militärischen Altlasten hinaus - nach Expositionscharakteristiken oder charakterisiert Substanzen je nach Herkunft in die Gruppen A bis H (vgl. Tabelle 5.1). Die Kenntnisse hierüber helfen bei der Bewertung des Einsatzes und des Verbleibs der Substanz in der Umwelt und schließen die Lücke zwischen Stoffspezifik und Standortbeurteilung.

Tabelle 5.1 Gruppen von Herkunftsbereichen und Eigenschaften von Umweltkontaminanten

Gruppe	Herkunftsbereich	Gruppencharakteristik	Beispiele
A	Bestimmungsgemäße Anwendung von Chemikalien beim Verbraucher / Nutzer	Flächenhafte Exposition möglich. Migration in Abhängigkeit von der Mobilität	Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmittel (PBSM) Textilhilfsmittel Waschmittel Lebensmittelzusatzstoffe Arzneimittel

Gruppe	Herkunftsbereich	Gruppencharakteristik	Beispiele
B	Zwischen- und Rohprodukte zur Modifikation bzw. Weiterverarbeitung	Bei Einhaltung der Umweltbestimmungen keine oder sehr geringe Umweltrelevanz	Zwischen-, Neben- und Handelsprodukte der chemischen Industrie, Groß- und Laborchemikalien
C	Emissionen entsprechend dem Stand der Technik	Punktuelle Exposition möglich. Migration in Abhängigkeit von der Mobilität	Unerwünschte Nebenprodukte der chemischen Industrie Emissionen der Müllverbrennung, beispielsweise Dioxine Verbrennungsgase aus Kraftwerken Verbrennungsgase aus Kraftfahrzeugen, beispielsweise Polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK)
D	Altlasten durch kontaminierte Industrie, Gewerbe-, Militär- und Rüstungsstandorte sowie unkontrolliert abgelagerte Sonderabfälle und Unfallorte sowie unsachgemäß ausgebrachte Stoffe	Die Exposition ist durch die Vernachlässigung bzw. Negierung des Vorsorgeprinzips bedingt. Dies betrifft z.T. Substanzen, die sich nicht mehr im Produktionsprozess befinden (z.B. DDT)	Polychlorierte Biphenyle (PCB) Mineralölkohlenwasserstoffe (MKW) Lösemittel Kampfmittel wie u.a. Trinitrotoluol (TNT) und Hexogen
E	Metabolite, die sich durch biochemische, hydrochemische oder geochemische Umsetzung aus Substanzen der Herkunftsbereiche A, B, C und D gebildet haben	Speziell relevant für Metabolite, die kritischer als deren Ausgangssubstanzen einzuschätzen sind	Methylquecksilber aus anderen organischen oder anorganischen Quecksilberverbindungen Vinylchlorid aus Trichlorethen Reduktionsverbindungen aus nitrierten Kampfmitteln
F	Ultragifte	Chemische Verbindungen mit hoher akuter Toxizität (LD_{50} < 1 mg/kg KG)	chemische Kampfstoffe, beispielsweise VX (vgl. Kapitel 11.1 Anhang) Terror- und Sabotagegifte, beispielsweise Cyanide (CN^-) Mykotoxine, beispielsweise Aflatoxine
G	Essentielle Verbindungen	Genese und Einsatz fast ausschließlich im Lebensmittelbereich	natürliche Wasserinhaltsstoffe Vitamine sekundäre Pflanzenstoffe wie Polyphenole
H	Unter Normalbedingungen gasförmige und leicht flüchtige Umweltkontaminanten	Vorwiegend inhalative Aufnahme	Fluorchlorkohlenwasserstoffe (FCKW) Smog-Bestandteile Innenraumbelastungen (Formaldehyd, Lösemittel u.a.)

Die *A-Gruppe* umfasst Umweltkontaminanten in Boden und Trinkwasser, die durch eine bestimmungsgemäße Anwendung von Umweltchemikalien durch den Endverbraucher bzw. Anwender hervorgerufen werden. Beispiele massiver bzw. flächenhafter Expositionen sind Pflanzen- und Schädlingsbekämpfungsmittel (PBSM), Textilhilfsmittel sowie Wasch- und

Reinigungsmittel. Bereits flächenhaft in der Umwelt nachweisbar sind z.B. auch Arzneimittel bzw. Mittel aus der medizinischen Anwendung sowie Lebensmittelzusatzstoffe.

Die *B-Gruppe* bilden die Handelsprodukte der chemischen Industrie sowie deren Zwischen- und Nebenprodukte zur Modifikation bzw. Weiterverarbeitung. Diese große Gruppe von Umweltchemikalien sollte unter Einhaltung der Umweltbestimmungen keine oder nur noch geringe Umweltrelevanzen bilden (tatsächlich kommt es selten aber regelmäßig durch Havarien zu punktuellen Expositionen von Stoffen der B-Gruppe, wobei die Freisetzung von reaktionsfreudigen Zwischenprodukten besonders gefährlich ist).

Zusammengefasst in der *C-Gruppe* sind alle Emissionen von Stoffen in die Umwelt aufgrund des Standes der Technik z.B. von Maschinen, Anlagen sowie technischen Verfahren und Abfällen. Aufgrund der fortlaufenden Optimierung dieser Anlagen bzw. Vorgänge und unter Berücksichtigung des Vorsorgeprinzips sollten sich zumindest die spezifischen Emissionen dieser Gruppe stetig vermindern. Die Gruppencharakteristik der Expositionen sind zeitlich relativ konstante punktförmige Emissionsquellen, die über die Luft mitunter auch flächenhaften bis globalen Verunreinigungscharakter, bezüglich Trinkwasser jedoch vor allem regionale Bedeutung haben.

Die *D-Gruppe* wird durch die Altlasten bzw. Altstandorte gebildet, die sich nach den ehemaligen Nutzungen aus gewerblichen bzw. industriellen und militärischen Bereichen zusammensetzen. Hierzu zählen auch Umweltkontaminationen aus unsachgemäßer (bestimmungswidriger) Ausbringung von Stoffen. Die Gruppencharakteristik der Expositionen sind zeitlich relativ konstante punktförmige bzw. regional flächenhafte Emissionsquellen mit speziellen Kontaminanten, die bezüglich Trinkwasser regionale Bedeutung haben.

Die *F-Gruppe* umschließt die Ultragifte mit hoher akuter Toxizität. Die Gruppencharakteristik beschreibt sie als zeitlich sehr seltene und punktförmige Emissionsquellen, die hauptsächlich als Terror- oder Sabotagegifte in Konfliktsituationen über die Luft oder direkt in das Trinkwasser eingetragen werden.

Die *F-Gruppe* umfasst die für die Biosphäre essentiellen Verbindungen bzw. natürlichen Wasserinhaltsstoffe.

Die *H-Gruppe* beschreibt die gasförmigen bzw. leicht flüchtigen Verbindungen, deren Relevanz nicht vorwiegend im Trinkwasserbereich liegt.

Dabei sind einzelne Umweltkontaminanten u.U. nicht nur einer einzigen Herkunft bzw. einer Gruppencharakteristik zuzuordnen. Beispielsweise muss ein Herbizid - nach bestimmungsgemäßer Anwendung wäre es nur der *A-Gruppe* zugehörig - nach unsachgemäßer Entsorgung oder nach bestimmungswidriger Anwendung in Gruppe D eingestuft werden. Zudem können Altlastenstoffe Metabolite bilden und dann der *E-Gruppe* angehören. Ebenso können Stoffe der *F-Gruppe* (Ultragifte) sowohl militärische Einsatzstoffe als auch Teil von Umweltkontaminanten aus militärischen Altlasten sein.

5.2 Expositions- und Gefährdungspotential für den Menschen

Das Expositions- und damit auch Gefährdungspotential einer Umweltchemikalie ergibt sich nach SCS aus ihrer *umwelttoxikologischen Relevanz*. **(Mulisch 2001)**. Umwelttoxikologisch deshalb, weil die Aussage „Relevanz" sowohl toxikologische Aussagen als auch Aussagen zur Abbaubarkeit in Boden und Gewässern bewertet.

5.2.1 Stoffcharakteristik der Toxizität - SC_{TOX}

Die Dokumentation der Toxizität für das Bewertungsverfahren und ausgedrückt als SC_{TOX} umfasst im wesentlichen die Daten zu den Aussagebereichen der Tabelle 5.2.

Tabelle 5.2 Dokumentierte Daten für das Verfahren zur Bewertung der Humantoxizität

lfd. Nr.	Daten
1	Vorkommen, Verwendung des Stoffes und Exposition
2	Übersicht zur Datenlage und allgemeiner Wirkungscharakter
3	Toxikokinetik und Metabolismus
4	Akute Toxizität
5	Reizwirkung und Sensibilisierung
6	Toxizität bei längerfristiger Aufnahme – subchronische und chronische Effekte
7	Übersicht der toxischen Endpunkte
8	Karzinogenität
9	Immuntoxizität
10	Humantoxikologische Daten
11	Expertenmeinungen
12	Recherchen ohne Ergebnisse (Datenlücken)
13	Theoretische Berechnungen zur Auffüllung von Datenlücken

Die Bewertung der Toxizität über den Trinkwasserpfad erfolgt grundsätzlich Anhand der Berechnung der toxikologischen Bewertungszahl BZ_{TOX} nach **Dieter, Kaiser et al. 1990; Dieter 1994)** (vgl. Anhang 11.4). Das Ergebnis dieses Verfahrens ist bei ausreichender Datenlage eine toxikologische Bewertungszahl BZ_{TOX} zwischen 1 und 100. Die verfügbaren Stoffdaten (außer Karzinogenität) werden zwecks Beurteilung ihrer Bewertbarkeit eingangs in den acht toxikologisch relevanten Teilbereichen

- subchronische Toxizität,
- chronische Toxizität,
- Reproduktionstoxizität,
- subchronische Immuntoxizität,
- chronische Immuntoxizität,
- Toxikokinetik,
- Biochemie,
- Mutagenität

dokumentiert und ihrer Bedeutung entsprechend durch unterschiedliche Punktzahlen gewichtet (vgl. Tabelle 11.4.1 im Anhang). Eine noch ausreichende Bewertbarkeit der Toxizität eines Stoffes ist bei Erreichen von 4 bis 8 Punkten gegeben, gesicherte Aussagen sind bei 9 bis 12 erreichten Wichtungspunkten möglich. Stoffe mit spärlichen Informationen (1 bis 3 Punkte) sollten nur im Ausnahmefall toxikologisch bewertet werden (vgl. auch Kapitel 5.2.2). Vorhandensein oder Abwesenheit von Daten zur Karzinogenität werden über Risikozuschläge (RZ) gesondert bewertet (vgl. Tabelle 11.4.3 in Kapitel 11.4 Anhang).

Die Skala zur Bewertbarkeit der Karzinogenität umfasst die Gruppen canc A, canc B_1 bis B_3, C und D:

canc A	=	eindeutig humankarzinogen	RZ = 100
canc B_1	=	eindeutig karzinogen im Tierversuch als Initiator oder Anfangsverdacht aus Humandaten bei wahrscheinlicher Initiatorwirkung	RZ = 100
canc B_2	=	Initiatorwirkung im Tierversuch zweifelhaft, aber begründeter Anfangsverdacht aus Tier- oder Strukturdaten	RZ = 33
canc B_3	=	oral wie Gruppe C; andere Pfade aber wie $B_2/B_1/A$	RZ = 22
canc C	=	nicht karzinogen bei adäquater Testung	RZ = 0
canc D	=	nicht adäquat getestet, aber kein Verdacht aus Strukturdaten	RZ = 11

Der Vorteil dieses Verfahrens besteht darin, unter Wahrung aller heute akzeptierten Maßstäbe und Regeln der toxikologischen Stoffbewertung, auch die in dem für eine Verbindung verfügbaren Datensatz vorhandenen Lücken standardisiert zu wichten und diese Wichtung in nachvollziehbarer Form zum Bestandteil der Gesamtbewertung eines Stoffes zu machen und sie gegebenenfalls aufzufüllen.

Durch gezieltes Zusammenführen der Daten zur Dosis-/Wirkungsbeziehung und sonstigen tierexperimentellen toxikologischen Prüfungen mit denen zur Karzinogenität sowie von direkt am Menschen beobachteten Effekten wird zunächst, wie in Tabelle 5.3 dargestellt, die integrierte Bewertungszahl BZ_{TOX} für Toxizität und Karzinogenität gebildet, die wiederum Werte von 1 bis 100 annimmt. Dabei besteht die Kombination der Toxizität mit der Karzinogenität in der Addition der karzinogenitätsbezogenen Risikozuschläge (RZ) zur Dosis/Tox-Zahl, die ihrerseits die multiplikative Verknüpfung

1. der Dosis/Wirkungsbeziehung als negativen dekadischen Logarithmus des NOAEL bzw. LOAEL-Wertes des Stoffes (vgl. Kapitel 6.2)

und

2. der aus einer dreistelligen Toxizitätszahl, die sich aus den Aussagen negativ (0), zweifelhaft (1/2) und positiv (1) der sonstigen toxikologischen Prüfungen zusammensetzt (da es 9 Prüfungen sind, ist die Quersumme der Toxizitätszahl ist immer 9), modifizierten einstelligen Toxizitätszahl (MToxZ)

bewertet (vgl. auch **Dieter, Kaiser et al. 1990)**.

Die Additionsprodukte BZ_{TOX} werden linear auf eine Skala von 1 bis 4 übertragen und bilden die toxikologischen Stoffcharakteristiken SC_{TOX}. Dabei bedeutet 1,0 „gesundheitlich unbedenklich“ bis 4,0 für „hochtoxisch“ bzw. „eindeutig humankarzinogen“. SC_{TOX} wird aus BZ_{TOX} über die Gleichung 1

$$1 \leq SC_{TOX} = 1 + 3 \cdot BZ_{TOX} / 100 \leq 4 \qquad (Gl.\ 1)$$

erhalten.

Die Tabelle 5.3 zeigt die Gruppencharakteristiken der Toxizität (Tox-Gruppen I bis VI) und Karzinogenität (CANC-Gruppen A bis D) von Stoffen und die Ableitung der jeweiligen SC_{TOX}.

Stoffe mit spärlichen Informationen (≤8 Punkte der Eingangsprüfung vgl. Kapitel 11.4 Anhang) können nur vorläufig toxikologisch bewertet werden und erhalten zur Kennzeichnung den Index X (SC_{TOX-X}).

Für Umweltkontaminanten mit extrem hoher akuter Toxizität (z.B. Ultragifte entsprechend der *F-Gruppe* gem. Tabelle 5.1) gilt SC_{TOX-Z} (gekennzeichnet mit Index Z) da der akute Effekt überwiegt und für die Bewertung keine chronischen Daten zugrunde gelegt werden.

Tabelle 5.3 Integrierte Bewertung von Toxizität und Karzinogenität über die Stoffcharakteristik SC_{TOX} auf der Basis der toxikologischen Bewertungszahl nach Addition der Risikozuschläge RZ zu BZ_{TOX}

TOX-Gruppe	CANC-Gruppe	BZ_{TOX}*	Toxizität, Karzinogenität und Risikozuschläge (RZ)	SC_{TOX}
I	canc A	100	eindeutig humankarzinogen (RZ = 100)	4,0
I	canc B1	100	eindeutig karzinogen im Tierversuch als Initiator oder Anfangsverdacht aus Humandaten bei wahrscheinlicher Initiatorwirkung (RZ = 100)	4,0
I	canc C	91 - 100	hoch toxisch und nicht karzinogen bei adäquater Testung	>3,7 - 4,0
II	canc B2	68 - 90	stark toxisch und Initiatorwirkung im Tierversuch zweifelhaft, aber begründeter Anfangsverdacht aus Tier- und Strukturdaten (RZ=33)	>3,0 - 3,7
IIIa	canc B3	51 - 67	stark toxisch oder mäßig toxisch und karzinogen bei nicht oraler Testung (RZ=22)	>2,5 - 3,0
IIIb	canc B2	34 - 50	stark toxisch oder schwach toxisch und Initiatorwirkung im Tierversuch zweifelhaft, aber begründeter Anfangsverdacht aus Tier- und Strukturdaten (RZ=33)	>2,0 - 2,5
IV	canc D	11 - 33	mäßig toxisch oder schwach toxisch und auf Karzinogenität nicht adäquat getestet, kein Verdacht aus Strukturdaten (RZ=11)	>1,3 - 2,0
V	canc C	2 - 10	schwach toxisch und nicht karzinogen bei adäquater Testung	>1,0 - 1,3
VI	canc C	≤1	gesundheitlich nicht relevant	1,0

* Kappung ab BZ-Rechenwerten > 100

Fehlen jegliche experimentelle Daten, lässt sich nur dann eine SC_{TOX} für bestimmte Umweltkontaminanten ableiten, wenn Voraussetzungen wie eindeutige Definition der chemischen Konstitution, Analogieschluss (aus verwandten Verbindungen), Struktur-Wirkungs-Beziehungen sowie langjährige interdisziplinäre Erfahrungen gegeben sind. Die Bewertungsergebnisse solcher Recherchen erhalten den Index Y (SC_{TOX-Y}, vgl. Tabelle 5.4).

Tabelle 5.4 SC_{TOX} von Umweltkontaminanten - Klassifizierung nach Datenlage

SC_{TOX}	Klassifizierung von Stoffen nach standardisierter BZ_{TOX} - Methode
SC_{TOX-X}	Klassifizierung von Stoffen mit spärlicher Datenlage (≤ 8 Wichtungspunkte = vorläufige Bewertung)
SC_{TOX-Y}	Klassifizierung von Stoffen aufgrund von Analogieschlüssen über die chemische Konstitution, Struktur-Aktivitätsbeziehungen (SAB/QSAB) sowie langjährige Erfahrungen (Expertenwissen bzw. -systeme)
SC_{TOX-Z}	Klassifizierung von Stoffen mit hoher akuter Toxizität

5.2.2 Voraussage der Toxizität aus Struktur-Wirkungsbeziehungen - SC_{TOX-Y}

Die Basisaussage für eine Vorhersage der Toxizität aus der chemischen Struktur ist, dass sich neben den physikalischen und chemischen auch die chemisch-toxischen Eigenschaften einer Substanz in ihrer Molekularstruktur abbilden. Die Analyse von Struktur-Aktivitäts-Beziehungen SAB (engl.: *structure activity relationsships*, *SAR*) und quantitativen Struktur-Aktivitäts-Beziehungen

QSAB (engl. *quantitative structure activity relationsships*, Q*SAR)* dienen der Aufdeckung der molekular-strukturellen Grundlagen biologischer Aktivitäten von Umweltchemikalien einschließlich ihrer erwartbaren metabolischen Umwandlung. Bestimmte Erkenntnisse (oder Modelle), die bei der Untersuchung der toxischen Eigenschaften eines Stoffes in Labortestsystemen gewonnen wurden, werden dabei (mit Einschränkungen) in einem Umkehrschluss auf Stoffe mit bisher unbekannten toxischen Eigenschaften, jedoch ähnlichen bzw. analogen chemischen Strukturanteilen, übertragen. Die Voraussage der Toxizität von neuen oder bisher nicht getesteten Umweltchemikalien wird mit unterschiedlichem Aufwand versucht, angefangen mit einfachen Vergleichen zwischen Stoffstrukturen mit gleicher chemisch-/toxikologischer Funktionalität, bis hin zu komplexen rechnergestützten Großdatenbanken mit Daten zu Tausenden von Stoffen in entsprechenden Strukturkatalogen.[32]

So konnte z.B. durch Betrachtung der biologischen Wirkungen im Endpunkt Gentoxizität der polycyclischen Kohlenwasserstoffe (PAK) erkannt werden, dass eine Voraussetzung für deren Mutagenität und Kanzerogenität die so genannte *bay*-Region (von engl. *bay* = Bucht) ist. Folglich besitzen chemische Verbindungen, die der Gruppe der PAK angehören und über eine bay-Region verfügen, mit hoher Wahrscheinlichkeit mutagenes bzw. kanzerogenes Potential. Der toxische Effekt kann damit vorausgesagt werden (Prädiktionsanalyse), ohne dass in erster Instanz experimentelle Untersuchungen notwendig wären. Die SAB/QSAB - Analytik ist somit eine Methode der Mechanismenanalyse und prädiktiven Toxikologie **(Rosenkranz 1999)**.

Moderne Expertensysteme[33] erweitern die klassischen hypothesistischen Methoden (Einsatz vermuteter spezieller Reaktionsmechanismen und kongenerischer Datensätze eng miteinander verwandter Stoffe für die Aktivitätsanalyse) und wollen die tatsächlich wesentlich höhere Komplexität toxikologischer Effekte stärker berücksichtigen. Die neuen rechnergestützten SAB/QSAB - Modelle sind in der Lage, auf der Basis der angebotenen Informationen, selbständig eigene Hypothesen oder Deskriptoren (als molekulare Determinanten für biologische Aktivität) als Lerndatensätze abzuleiten (vgl. z.B. **Mitchell 1986; Rosenkranz 1989**). Die Prädiktivität und Sinnhaftigkeit eines SAB-Modells ist eine Funktion von Umfang und Qualität der Datenbasis, die zur Erstellung des Lerndatensatzes eingesetzt wurde, der Natur der chemischen Stoffe, die im Lerndatensatz repräsentiert werden (d.h. dem strukturellen Informationsgehalt) sowie der Natur der darzustellenden toxikologischen Reaktions-mechanismen. Alle computergestützten Modelle sollen jedoch nicht überbewertet werden und gelten hinsichtlich ihrer Ergebnisse und deren Interpretation nur als Ergänzung vorhandenen empirischen und experimentellen Wissens.

---

[32] Gemeinsames Merkmal der Herangehensweise ist eine *mechanistische Hypothese* zur Analogie der chemischen Struktur und/oder Funktionalität mit dem interessierenden toxikologischen Endpunkt.

[33] Expertensystem (XPS), ein Computer-Anwendungsprogramm, das Entscheidungen trifft oder Probleme löst, die ein ganz spezielles Gebiet betreffen, beispielsweise aus der Finanzwelt oder Medizin. Bei Expertensystemen handelt es sich um Entwicklungen aus dem Bereich künstliche Intelligenz. Üblicherweise überprüft man Aussagen mit Hilfe einer Kombination aus Faktenwissen und Schlussfolgerungen. Ein Expertensystem analysiert Wissensaussagen auf der Basis von Wenn-dann-Folgerungen. Die Grundfunktionen (wenn und dann) sind bei diesen Systemen in zwei verschiedenen, aber miteinander verbundenen Komponenten enthalten, die man als Wissensbasis und Schlussfolgerungseinheit bezeichnet. Die Wissensbasis stellt spezielle Fakten und Regeln zu einem Gegenstand zur Verfügung, während die Schlussfolgerungsmaschine die Fähigkeit des Expertensystems liefert, mittels logischer Argumentation Schlüsse zu ziehen. Die Erklärungskomponente versetzt das System in die Lage, seine Schlussfolgerungen zu erklären und zu begründen. Mit dieser Zusatzfunktion können Entwickler die korrekte Arbeitsweise ihres Systems überprüfen. Die ersten Expertensysteme entstanden in den sechziger Jahren des 20. Jahrhunderts in den Vereinigten Staaten. Die ersten Einsatzgebiete waren Teilbereiche aus der Chemie, der Geologie und Medizin. Nur kurze Zeit später kamen auch Gebiete aus dem Bereich Banken und Investmentangelegenheiten (siehe Investmentfonds) sowie Versicherungen hinzu (Quelle: Microsoft Encarta 2002).

Ein fortschrittliches System stellt z.B. die CASE/MULTICASE - Methode dar (CASE engl. *computer automated structure evaluation*; vgl. **Klopman 1992a und Klopman 1992b**). Mit dieser Methode konnten diejenigen chemisch-strukturellen Komponenten identifiziert werden, die signifikant mit dem Potential der Chemikalien zur Induktion einer spezifischen biologischen Aktivität (z.B. sensorische Irritation der Maus) assoziiert waren (= Biophoren). Darüber hinaus identifiziert das Programm für jede Biophore die chemischen, physikalisch-chemischen und quantumchemischen Parameter, die die Aktivitätswahrscheinlichkeit beeinflussen (d.h. modulieren) und daher verschiedene Gradationen der biologischen Aktivität verursachen können **(Rosenkranz 1999)**. Dabei ist zu berücksichtigen, dass es sich bei den Untersuchungen nicht um Kausalanalysen, sondern um Wahrscheinlichkeitsanalysen auf mathematisch-statistischer Grundlage handelt. In diesem Sinn ist das Strukturaktivitätsprogramm in der Lage, die mit Aktivität bzw. Inaktivität organischer Verbindungen assoziierten molekularen Substrukturen zu identifizieren. Wird ein möglichst umfassender Datensatz im Hinblick auf einen spezifischen, biologischen Endpunkt als Lerndatensatz eingesetzt oder werden aussagekräftige kongenerische Datensätze verwendet, so können auch *unbekannte* biologische Aktivitäten von Stoffen auf der Basis der Lerndatensatzanalyse vorausgesagt werden. Dies gilt im Prinzip für alle biologischen Endpunkte oder Effekte **(Mersch-Sundermann 1993)**. Bereits validierte CASE/MULTICASE-Datenbanken können eingesetzt werden, um toxikologische Profile von Umweltchemikalien vorauszusagen, z.B. nach **(Rosenkranz 1999)**

- Ames-Test,
- Nagetierkarzinogenität,
- Strukturkomponenten (mit Warnhinweis engl. *structural alerts*) für DNA-Reaktivität,
- Teratogenität,
- systemische Toxizität (Ratte, Maus),
- Cytotoxizität,
- Kurzzeit-Gentoxizitätstests (inkl. SOS-Chromo-Test),
- Kontaktsensibilisierung,
- sensorische Irritation (der Maus gegenüber inhalativer Exposition),
- Reizwirkung am Auge (DRAIZE-Test),
- biologische Abbaubarkeit,
- Fischtoxizität (Elritze).

In den vergangenen 30 Jahren wurden Struktur-Aktivitäts-Beziehungen für zahlreiche Chemikalien veröffentlicht. Viele der verfügbaren früheren Datensätze sind allerdings nach heutigem Maßstab von geringer Aussagekraft. Erst jüngere Untersuchungen liefern zufriedenstellende Resultate zu speziellen Fragestellungen durch die Kombination von verschiedenen SAB-Auswertungen z.B. bei der Betrachtung von Mechanismen bei der Krebsentstehung (vgl. u.a. **Combes 2000** zur Erfassung nicht-gentoxischer Karzinogene über SAB und Cytotoxizität, **Malacarne 1993** zum Zusammenhang zwischen Molekularverbindungen (-konnexität) und karzinogener Aktivität über SAB, **Sabbioni 1994** zur (Un-)Tauglichkeit der Hämoglobin-Bindung als Index des gentoxischen Potentials von Arylaminen und Nitroarenen und **Hansch 1995** zur Anwendung von QSAR bei teratogenen Effekten von Umweltchemikalien).

Das U.S. *National Toxicology Program* (NTP) testete 301 Chemikalien auf die Korrelation von chemischer Struktur, Mutagenität für Salmonella (Ames-Test) und Karzinogenität für Ratten und Mäuse **(Ashby 1990)**. Die Autoren schließen aus den Ergebnissen zusammenfassend, dass Nagetiertoxizität nicht mehr als einzelne gegebene Größe (Entität) betrachtet werden kann. Strukturkomponenten (*structural alerts*) und Mutagenität für Salmonella sind nützliche, jedoch nicht definitive Indikatoren. Dabei zeigte sich eine hohe Korrelation zwischen Strukturkomponenten für DNA-Reaktivität und Mutagenität, jedoch eine geringe zur Karzinogenität.

In Auswertung von Untergruppen ließen sich zusammenfassend folgende signifikante Aussagen treffen:

(a) die meisten der Nagetier-Karzinogene waren Strukturkomponenten-Chemikalien,

(b) Die meisten der Strukturkomponenten-Chemikalien waren Mutagene (84% der Karzinogene und 66% der nicht-Karzinogene). Es ließ sich eine Gruppe von 33 aromatischen Amino/Nitro-Typ-Spezies mit 100%iger Übereinstimmung als Mutagene identifizieren.

(c) Unter den 147 Chemikalien ohne Strukturkomponenten für DNA-Reaktivität waren weniger als 5% mutagen, ob karzinogen oder nicht karzinogen.

Mersch-Sundermann 1993 zeigte mit der SAB/QSAB-Methode beispielhaft im Vergleich der Ergebnisse einer CASE-Prädiktion und der korrespondierenden, experimentellen Ergebnisse zur SOS-Induktion von 436 Substanzen im SOS-Chromotest eine hohe Korrelation. Das Großrechnerprogramm ist nach den Autoren prinzipiell für alle biologischen Endpunkte oder Effekte einsetzbar. In diesem Sinn kann CASE dazu dienen, die großen Datenmengen, die mittlerweile zu einigen Biotestsystemen vorliegen, systematisch in ihren Beziehungen zwischen chemischen Strukturen und biologischen Aktivitäten zu erfassen und zu bewerten.

In der Literatur wird über weitere rechnergestützte Expertensysteme berichtet (vgl. Tabelle 5.5) .

Tabelle 5.5 Beispiele rechnergestützter Expertensysteme der prädiktiven Toxikologie

Experten-system	**Prinzip**	**Ergebnis**
TOXALERT	PC-Version von CASE/MULTICASE	
META	Simulation des Säugetiermetabolismus in Hinblick auf Biotransformation über eine Datenbank von Hunderten enzymatischer und spontaner Reaktionen	Ableitung von potentiellen Metaboliten im Säugerstoffwechsel
COMPACT	Voraussage der Interaktion mit Cytochrom-P-450-Enzymen auf der Grundlage von aus der 3-dimensionalen Struktur abgeleiteten Parametern	Ableitung der Toxizität für Stoffe mit metabolischer Aktivierung
DEREK **(Sanderson D.M. und Earnshaw 1991; Ridings J.E. 1996)**	Nutzung von Expertenwissen zu Strukturmerkmalen, die mit bestimmten toxikologischen Entpunkten korrelieren.	Verbreitete Verwendung in der chemischen Industrie; qualitative Voraussage toxischer Endpunkte (z.B. Mutagenität, Karzinogenität, Hautsensibilisierung) aus der biologischen Aktivität von Strukturmerkmalen
TOPKAT	Nutzung von Datenbanken mit molekularen Strukturfragmenten und zusätzlicher aus der *chemical graph theory* abgeleiteter Deskriptoren	Qualitative und quantitative Voraussage toxischer Potentiale aus der biologischen Aktivität von Strukturmerkmalen
OncoLogic **(Woo Y.-T. 1995)**	regelbasiertes System	Voraussage der Karzinogenität
Hazard-Expert **(Smithing 1991)**	-	Schätzung der Bioverfügbarkeit und Bioakkumulation kombiniert mit verschiedenen toxikologischen Endpunkten

Wenn auch die rechnergestützten Expertensysteme noch nicht formell validiert sind, so stellen sie doch eine wertvolle Ergänzung toxikologischer Daten auch in der Hinsicht dar, dass Tierversuche minimiert werden. Möglicherweise besteht der größte Vorteil der Modellierung

von Struktur-Aktivitätsbeziehungen gegenüber anderen Alternativen der prädiktiven Toxikologie darin, dass sie angewendet werden kann, bevor die entsprechenden Chemikalien überhaupt synthetisiert werden **(Barratt 2000)**.

Manchmal ist es möglich, durch den direkten Experten-Vergleich zwischen Umweltchemikalien mit gleichen chemisch/toxikologisch funktionellen Gruppen deren Bioverfügbarkeit und Toxizität vorauszusagen. Zu dieser Herangehensweise der prädiktiven Toxikologie (engl. *„reading-across"*) gibt es in der Literatur bereits einige validierte Untersuchungsergebnisse, die auch durch die regulierenden Verwaltungen (Regulatoren) von Fall zu Fall anerkannt werden.

Ein Beispiel ist die systematische Analyse molekularer Mechanismen von chlororganischen Verbindungen und ihrer daraus resultierenden Toxizität **(Henschler 1994)**. Die Systematik besteht hier in der Beschreibung von Gruppen chlorierter Aliphaten (Methan, Ethan, Ethen, Ethin, Propan, Butan, Buten) und chlorierter Aromaten (Benzol, Phenol) und deren toxikologischer Wirkung (akute, subchronische und chronische Toxizität, Reproduktionstoxizität, Mutagenität und Karzinogenität) in Abhängigkeit von der Anzahl an Kohlenstoff-Atomen und Chlorsubstituenten. Bei der Bewertung dieser Zusammenstellungen sollte man zuvor im Auge behalten, dass nur ein kleiner Teil aller chlororganischen Verbindungen pro Gruppe überprüft ist. Es ist jedoch ist klar erkennbar, dass die Einführung von Chlor

- i.d.R. zu einer Verstärkung des toxischen Wirkpotentials für alle Wirkungen (s.o.) führt,
- i.d.R. die Toxizität mit der Zahl der Chlorsubstituenten steigt,
- häufig neue Wirkqualitäten zur Folge hat (vor allem Leber, Niere im akuten und subchronischen Bereich),
- bei den meisten betrachteten Verbindungen gentoxische und/oder karzinogene Effekte auslösen.

Nur relativ wenige Verbindungstypen entfalten ohne metabolische Aktivierung direkte gentoxische Wirkungen (vor allem Alkylantien). Überwiegend bedarf es der körpereigenen Aktivierung zu elektrophilen Zwischenprodukten, die dann zur kovalenten Bindung an der DNA fähig sind. Ein beträchtlicher Anteil aller untersuchten Chlororganika wirkt krebserzeugend (ca. 1/3 aller in der MAK-Werte-Liste erfassten krebserzeugenden oder krebsverdächtigen Stoffe). Dabei können grundsätzlich zwei Gruppen unterschieden werden:

- aliphatische Chlorkohlenwasserstoffe mit geringer Kettenlänge wirken aufgrund ihrer Gentoxizität krebserregend,
- polychlorierte cyclische Verbindungen können über andere cytotoxische (nicht-gentoxische) Mechanismen Tumore auslösen (immer hohe Dosen).

Bei den chlororganischen Verbindungen mit mutagenen und karzinogenen Eigenschaften lassen sich eine Reihe von Molekülfragmenten erkennen, auf die die gentoxischen Effekte zurückgehen. Innerhalb chemisch eng verwandter chlororganischer Verbindungen (homologe und analoge Reihen), bei denen die Toxizität durchgängig von einem einheitlichen, chemisch identifizierbaren Molekülfragment getragen wird, sind Voraussagen über das Auftreten oder Ausbleiben toxischer (einschließlich gentoxischer) Wirkungen möglich. Handelt es sich dagegen um heterogene Reihen (d.h. mit chemisch unterschiedlichen toxophoren Gruppen) oder sind innerhalb einer Gruppe mehrere Mechanismen der Toxizität möglich, ist die Voraussagbarkeit stark eingeschränkt. Der wesentliche Grund dafür besteht in der biologischen Variabilität enzymatischer Aktivierungs- und Deaktivierungsreaktionen, die an einem Molekül ablaufen können (vgl. **Henschler 1994**).

SAB/QSAB zeigt Erfolge hinsichtlich der akuten Toxizität, die Systeme haben jedoch zur Zeit noch nicht die Fähigkeiten, (sub)chronische oder andere Gesundheitseffekte validiert zu

modellieren. Im Hinblick auf die hohe Anzahl bereits bekannter Umweltchemikalien und zukünftig zu erwartender neuer Stoffe wird die prädiktive Toxikologie zunehmend an Bedeutung gewinnen, da die rechnergestützte Modellierung von Struktur-Aktivitäts-Beziehungen wesentlich komplexere Aufgaben bewältigen kann, als dies mit teuren Tierversuchen möglich scheint.

Um zukünftig validierte Aussagen aus SAB/QSAB im chronischen Bereich zu erhalten, sind diese rechnergestützten Ergebnisse mit einem Expertensystem (s.o.) zu verknüpfen. Hierzu ist allerdings das Verständnis der Verhältnisse zwischen Strukturen, Eigenschaften und Toxizität bzw. Gesundheitseffekten wesentlich zu vertiefen[34].

Ergebnisse aus SAB/QSAB-Untersuchungen werden im Rahmen des SC-Systems zur Identifikation von Metaboliten und Strukturanalogien folgendermaßen genutzt (vgl. Kapitel 11.4 Anhang):

1. *Vervollständigung der Datenbasis in Feld 1 des BZ_{TOX} - Bewertungsrasters*

   Durch die Einbeziehung von SAB-Untersuchungen in das BZ_{TOX}-Raster können bei der Beurteilung der Vollständigkeit der Datenbasis in Feld 1 zuzügliche Wichtungspunkte vergeben werden, die die Gruppeneinstufung aus rein tierexperimentellen Daten beeinflussen.

2. *Bestätigung von (sub)chronischen Daten in Feld 2 des BZ_{TOX} - Bewertungsrasters*

   Ergebnisse aus SAB-Untersuchungen können als zusätzliche toxikologische Informationen zur Bestätigung chronischer oder subchronischer Daten bzw. Überbrückung von Datenlücken herangezogen werden (z.B. bei systemischen bzw. teratogenen Wirkungen). Durch das Auffüllen von Datenlücken und die dadurch erhöhte Sicherheit der Aussage können sonst erforderliche Sicherheitsfaktoren wegfallen. Für sich alleine sind SAB i.d.R. nicht ausreichend, um eine Bewertung der Dosis-Wirkungs-Beziehung in Feld 2 vorzunehmen.

3. *Vervollständigung der Datenbasis in Feld 3 des BZ_{TOX} - Bewertungsrasters*

   Vervollständigung der Datenbasis oder alleinige Zugrundelegung der SAB/QSAB-Untersuchungen bei der Bewertung der Karzinogenität (Bildung des Risikozuschlages in den Gruppen B2 und D).

4. *Vervollständigung der Datenbasis in Feld 4 des BZ_{TOX} - Bewertungsrasters*

   Vervollständigung der Datenbasis oder alleinige Zugrundelegung der SAB/QSAB-Untersuchungen bei der Bewertung sonstiger toxikologischer Prüfungen der Toxikokinetik, Biochemie und Mutagenität (Bildung der Toxizitätszahl aus den Gruppen 1 bis 3)

Werden überwiegend Daten aus SAB-Untersuchungen der toxikologischen Bewertung zugrunde gelegt (Gruppeneinstufung I und II in Feld 1 bzw. RZ in Feld 3) wird der berechnete SC_{TOX}-Wert mit dem Index Y (= $SC_{TOX\text{-}Y}$) gekennzeichnet (vgl. Tabelle 5.4).

5.2.3 Stoffcharakteristik der biochemischen Abbaubarkeit - SC_{BIO}

Die Dokumentation der biochemischen Abbaubarkeit von Substanzen - ausgedrückt als SC_{BIO} - für das Bewertungsverfahren umfasst im wesentlichen die Aussagebereiche der Tabelle 5.6.

[34] Dieser Prozess wird durch die Weiterentwicklung von gegenüber *in vivo*-Tests alternativen Testmethoden (*biotools*) in den nächsten Jahren stark beschleunigt werden **(Schultz 2000)**.

Tabelle 5.6 Dokumentierte Daten für das Bewertungsverfahren der biochemischen Abbaubarkeit

lfd. Nr.	Daten
1	Ergebnisse standardisierter Laboruntersuchungen zum aeroben Abbau von chemischen Stoffen
2	Ergebnisse von Feldversuchen zum aeroben Abbau von chemischen Stoffen
3	Ergebnisse von Feldversuchen zum anaeroben Abbau von chemischen Stoffen (Metabolite)
4	Ergebnisse aus standardisierten Laboruntersuchungen zur chemischen Oxidierbarkeit der Stoffe
5	Ergebnisse aus Abschätzungen der biochemischen Abbaubarkeit
6	Expertenmeinungen
7	Recherchen ohne Ergebnisse (Datenlücken)
8	Theoretische Berechnungen zur Auffüllung von Datenlücken (biochemische Abbaubarkeit auf Basis der chemischen Konstitution)

Ein wesentlicher bestimmender Parameter für den Transfer von Stoffen im Untergrund ist die milieuspezifische Abbaurate im Boden bzw. im Grundwasser. Ein Stoff, der z.B. durch Mikroorganismen schnell abgebaut werden kann und nur eine geringe Mobilität besitzt, wird den Nutzungsort (Ort der Trinkwasserentnahme) nicht oder nur in unbedeutenden Konzentrationen erreichen und hat daher i.d.R. eine geringe bzw. keine Relevanz hinsichtlich einer Trinkwassergefährdung. Beim biochemischen Abbau unterscheidet man grundsätzlich zwischen aerobem und anaerobem Abbau. Nur unter aeroben Bedingungen im Untergrund durch Luftsauerstoff oder Sauerstoffdonatoren führt der mikrobielle Abbau organischer Materie, in Abhängigkeit von der chemischen Konstitution in sehr unterschiedlichen Zeiträumen, im wesentlichen zu den Endprodukten Wasser, Kohlendioxid und anderen anorganischen Verbindungen, die nicht weiter dissimilierbar sind. Der biochemische Abbau setzt grundsätzlich Wassergelöstheit, Adaption und ausreichende Sauerstoffmenge in Form von in Wasser gelöstem Sauerstoff (≥ 1 mg/l) oder Anwesenheit von O_2-Donatoren, wie z.B. Nitrat, voraus. Fehlt eine der Bedingungen, findet kein aerober Abbau statt.

Sauerstoffdonatoren, wie z.B. Nitrat aus Düngemitteln oder als Abbauprodukt sprengstofftypischer Verbindungen (STV), können dort „aerobe Verhältnisse" schaffen, wo der Luftsauerstoff nicht hingelangt. Im reduktiven bzw. anaeroben Milieu werden beim Abbau jedoch oft nur Teilprodukte (Metabolite) erzeugt, die bisweilen sogar toxikologisch kritischer als das Ausgangsprodukt einzuschätzen sind.

Ebenso kann eine chemische Reaktion ohne biochemischen Umsatz z.B. durch Hydrolyse oder die Bildung freier Radikale durch UV-Strahlen in photochemischen Reaktionen vorherrschen. Soweit diese Mechanismen für den Abbau der Substanz dominant sind bzw. Bedingungen für einen anaeroben Abbau vorherrschen, sind die resultierenden Metabolite nach Möglichkeit in die Gefährdungsabschätzung einzubeziehen **(Wotzka 1984; Rippen 1997; Mulisch 2000a)**.

Die Bewertung der biochemischen Abbaubarkeit in Boden und Gewässern erfolgt dabei, analog der Bewertung der Toxizität über die Berechnung einer biochemischen Bewertungszahl BZ_{BIO} zwischen 1 und 100. Aus ihr wird die Substanzcharakteristik SC_{BIO} in Höhe von 1,0 für „biochemisch leicht abbaubar" bis 2,0 für „nicht abbaubar" bzw. „hoch persistent" errechnet.

Die Bewertung umfasst die Prüfung in 4 Kategorien (4 Felder) hinsichtlich

- der Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{BIO}),

- der Angaben zum Abbauverhalten in Form des Eingangswertes (EW_{BIO}) und der Abbauzahl (AZ),
- abiotischem Abbau durch Hydrolyse bzw. Photolyse in Form einer physiko-chemischen Modifikation (mod),
- sonstigen Ergebnissen zum biochemischen Abbau in Form einer Bio-Zahl (BioZ) und einer modifizierten Bio-Zahl (MBioZ).

Die vorhandenen Stoffdaten werden in Feld 1 in mehreren den biochemischen Abbau beschreibenden Teilbereichen in 6 Gruppen dokumentiert und ihrer Bedeutung entsprechend durch unterschiedliche Punktzahlen pro Gruppe gewichtet. Bei der Wichtung wird zudem unterschieden, ob nur ein Wert bzw. nur eine Versuchsserie vorliegt oder ob mehrere Werte bzw. Serien für die Bewertung vorliegen. Die Summe der Wichtungspunkte zeigt den Grad der Bewertbarkeit des Stoffes an: 0 - 20 Punkte = nicht bewertbar, 21 - 40 Punkte = vorläufig bewertbar und >40 = bewertbar (vgl. Tabelle 5.7).

Tabelle 5.7 SC_{BIO} - Bewertung der Datenbasis zur biochemischen Abbaubarkeit

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{BIO})

Bio-Bereiche	Wichtungspunkte (WP) Serie / Wert	mehrere Serien / Werte
1 Aerober Abbau		
1.1 Standardisierte Prüfmethode:		
1.1.1 Testung nach Adaption (z.B. Warburg)	30 ( )	40 ( )
1.1.2 Testung inkl. Adaption (z.B. *screening*)	25 ( )	35 ( )
1.2 Andere Laborprüfungen		
1.2.1 Labor BB	25 ( )	35 ( )
1.2.2 Batch-Test	8 ( )	12 ( )
1.2.3 Standardverdünnungsverfahren (z.B. BSB_5)	6 ( )	8 ( )
1.3 Industrielle bzw. kommunale biologische Reinigungsanlage		
1.3.1 dominanter Inhaltsstoff	20 ( )	25 ( )
1.3.2 nicht dominanter Inhaltsstoff	12 ( )	15 ( )
1.4 Feldversuche		
1.4.1 Oberflächenwasser	10 ( )	15 ( )
1.4.2 Grundwasser	8 ( )	12 ( )
1.4.3 Brackwasser	6 ( )	10 ( )
1.4.4 Boden	6 ( )	10 ( )
1.5 Strukturanalyse (SAB)		
1.5.1 Basis homologe Reihe	20 ( )	25 ( )
1.5.2 Basis Strukturformel	15 ( )	20 ( )
2 Anaerober Abbau		
2.1 Labor-/Feldversuche	4 ( )	
3 Chemischer Abbau		
3.1 Fotolyse	3 ( )	
3.2 Hydrolyse	2 ( )	
3.3 TOC, DOC, CSB-Cr	1 ( )	
3.4 CSB-Mn	0 ( )	
4 Wasserlöslichkeit		
4.1 standard. Methode	4 ( )	
4.2 berechnet	2 ( )	
5 Inhibitorwirkung		
5.1 experimentell	4 ( )	
5.2 Strukturanalyse	2 ( )	
6 Bioakkumulation		
6.1 experimentell	4 ( )	
6.2 berechnet	2 ( )	

Summe: .....

Gruppeneinstufung

I	0 - 20 Punkte	(nicht bewertbar)
II	21 - 40 Punkte	(vorläufig bewertbar)
III	41 - 60 Punkte	(bewertbar)

Gruppe: .....

$$f(x) = (\frac{-x}{10} + 11) \cdot 1{,}5 \qquad \textit{Gl. 2}$$

in einen Eingangswert umgerechnet und vorhandene Datenlücken über Sicherheitsfaktoren (SF) berücksichtigt. Dabei wird für die Unsicherheit der Ergebnisse aus SAB-Berechnungen sowie für sehr langsame biochemische Umsätze jeweils ein SF von 10 angesetzt. Dieser Eingangswert

wird nochmals korrigiert, wenn die verfügbare Datenbasis aus Standard- oder praktischer Prüfmethode bzw. aus Struktur-Aktivitäts-Beziehungen unvollständig ist. Das Ergebnis der Bewertung des biochemischen Abbaus in Feld 2 ist die Abbauzahl (AZ) des Stoffes (vgl. Tabelle 5.8).

Tabelle 5.8 SC_{BIO} - Bewertung der biochemischen Abbaubarkeit

Feld 2a: Eingangswert zum Abbauverhalten (EW_{BIO})

	(%)	(Quelle)
Standardisierte Prüfmethode:		( )
Praktische Prüfmethode:		( )
Strukturanalyse (SAB):		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller Abbau : ..... % (neg./10+11)·1,5 = ... (a)

b) niedrigster abgeschätzter Abbau : ..... % (neg./10+11)·1,5 = ... (b)

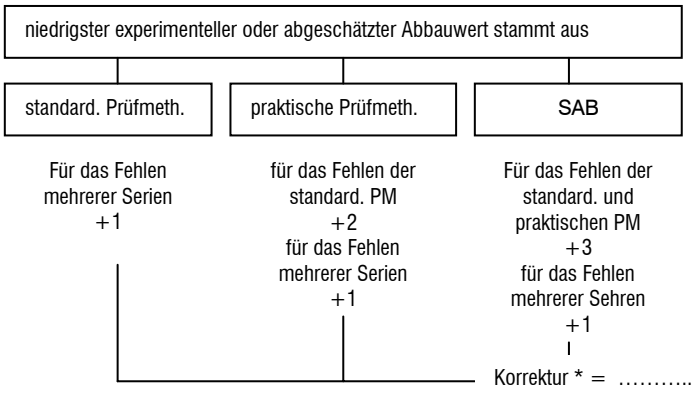
c) SF = 10; bei Anwendnung von SAB log = ... (c)

d) SF = 10; bei sehr langsamem biochemischem Umsatz log = ... (d)

Feld 2b: Berechnung der Abbauzahl (AZ)

2.2 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis

(korrigierte Abbauzahl wird mit * gekennzeichnet)



2.3 Beurtelung der Substanz im Feld 2 EW_{BIO}:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Bio-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) = Abbauzahl = ……..

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) = Abbauzahl = ……..

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) + 2.2 Korrektur *= Abbauzahl = ……..

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) + 2.2 Korrektur *= Abbauzahl = ……..

Hydrolytische oder photolytische Abbauvorgänge werden in Feld 3 gesondert über so genannte Abbauabschläge (AA) von AA = 0 für Stoffe, die stabil sind, bis AA = -20 für Stoffe mit rascher Hydrolyse bzw. Photolyse, berücksichtigt (vgl. Tabelle 5.9).

In Feld 4 werden die sonstigen Ergebnisse zum aeroben und zum anaeroben Abbau bewertet. Hierzu zählen die Bildung von toxikologisch relevanten Metaboliten sowie Bioakkumlation, Wasserlöslichkeit und Inhibitorwirkungen. Unterschieden werden die Aussagen

- positiv oder nicht ausreichend getestet,
- ausreichend getestet, aber Bewertung strittig,
- ausreichend getestet und Ergebnis negativ.

Tabelle 5.9 SC_{BIO} - Bewertung der Hydrolyse und Photolyse über Abbauabschläge

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation (mod)

mod C = keine Hydrolyse und keine Photolyse nach adäquater Testung (AA = 0)
mod D = nicht adäquat getestet, aber keine Hydrolyse oder Photolyse erwartbar aufgrund von Strukturdaten (AA=0)
mod B_2 = strukturelle Voraussetzungen für Hydrolyse oder Photolyse sind gegeben (AA =-5)
mod B_1 = langsame Hydrolyse oder Photolyse erwartbar (AA = -10)
mod A = rasche Hydrolyse oder Photolyse experimentell adäquat gesichert (AA = -20)

Einstufung phys./chem. Modifikation: Gruppe ..... => AA = ...

Das Ergebnis ist eine dreistellige stoffspezifische Biozahl, die - analog der Toxizitätszahl - in die einstellige modifizierte Biozahl umgewandelt wird (vgl. Tabelle 5.10).

Tabelle 5.10 SC_{BIO} - Bewertung von sonstigen Ergebnissen zum biochemischen Abbau

Feld 4: Sonstige Ergebnisse (BioZ)

		positiv oder nicht ausreichend getestet Quelle	Ausreichend getestet, aber Bewertung strittig Quelle	ausreichend getestet, Ergebnis negativ Quelle
4.1 aerober Abbau:				
- Inihibitorwirkung	<10 mg/l	( )	( )	( )
	< 1 mg/l	( )	( )	( )
- $t_{1/2}$ (Feldversuch)	> 1 Jahr	( )	( )	( )
	> 10 Jahre	( )	( )	( )
- Adaptionszeit	> 25 Jahre	( )	( )	( )
4.2 anaerober Abbau:				
- toxikol. relevante Metabolite		( )	( )	( )
4.3 sonstige Parameter:				
- Wasserlöslichkeit	< 10 mg/l	( )	( )	( )
	< 1 mg/l	( )	( )	( )
- Bioakkumulation		( )	( )	( )
Summe = Biozahl (BioZ) =				

modifizierte Biozahl (MBioZ) =
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Die Biozahl (BioZ) ist maximal 900 und minimal 009; die modifizierte Biozahl (MBioZ) ist entsprechend maximal 9 und minimal 0.

BZ_{BIO} ist das Produkt aus AZ (Feld 2) und MBioZ (Feld 4) zuzüglich dem Abbauabschlag (AA) (Feld 3).

SC_{BIO} wird aus BZ_{BIO} durch die Gleichung 3

$$1 \leq SC_{BIO} = 1 + BZ_{BIO} / 100 \leq 2 \qquad (Gl.\ 3)$$

erhalten. Sowohl für Laborwerte (vgl. Tabelle 5.11) als auch für praktische Zwecke (vgl. Tabelle 5.12) lassen sich chemische Verbindungen hinsichtlich ihrer biochemischen Abbaubarkeit in Gruppen einteilen. Auf der Basis einer standardisierten Laborprüfmethode erfolgt dies im SCS für organische Stoffe in fünf BIO-Gruppen A, B1, B2, C und D und für anorganische Stoffe in zwei BIO-Gruppen E1 und E2.

Tabelle 5.11 Charakterisierung von chemischen Verbindungen hinsichtlich ihrer biochemischen Abbaubarkeit - Gruppenzuordnung

BIO-Gruppe	BZ_{BIO}	Labor – Untersuchungsergebnisse	Wasserlöslichkeit [mg/l]	SC_{BIO}	Aussage
A	0 - 25	Abbaurate weitestgehend konzentrationsunabhängig Dissimilation vollständig oder nahezu vollständig Abbaugrad ≥60%; $t_{1/2}$ = Stunden oder Tage	≥ 10	1,0 - 1,25	leicht abbaubar
B1	26 – 50	Abbaurate konzentrationsabhängig Dissimilation ist nicht vollständig oder der vollständige Abbau wird in der fixierten Reaktionszeit nicht erzielt Abbaugrad 40 – 59%; $t_{1/2}$ < 1 Jahr	≥ 10	1,26 - 1,5	mit Einschränkungen abbaubar
B2	51 – 75	Gegenüber B1 weiter eingeschränkte Abbaurate prolongierte Dissimilationsdauer Abbaugrad 20 – 39%; $t_{1/2} \approx$ 1 Jahr	≥ 10	1,51 - 1,75	teilweise abbaubar
C	76 – 95	Sehr geringe Abbaurate geringer biochemischer Umsatz auch bei wesentlich verlängerten Reaktionszeiten Abbaugrad 5 – 19%; $t_{1/2}$ > 1 Jahr	< 10	1,76 - 1,95	schwer abbaubar
D	96 – 100	Kein biochemischer Abbau auch bei stark verlängerten Reaktionszeiten kein oder sehr geringer biochemischer Umsatz Abbaugrad 0 – 4%[35]; $t_{1/2}$ >> 1 Jahr bis Jahrzehnte	< 1	1,96 - 2,0	nicht abbaubar
E1	100	Alle anorganischen Verbindungen mit Ausnahme der E2-Substanzen Untergruppe a: reaktionsneutral (Elemente, Oxide, Mehrzahl der Kationen) Untergruppe b: Reaktionen möglich, aber ohne Stoffminderung (z.B. lösliche Eisenverbindung als Fe(II) ⇔ schwerlösliche Eisenverbindung als Fe(III), Arsenit AsO_3^{3-} als As(III) ⇔ Arsenat AsO_4^{3-} As(V), Chromsulfat $Cr(SO_4)_3$ als Cr(III) ⇔ CrO_4^{2-} als Cr(VI))	<1 - ∞	2,0	nicht abbaubar
E2	50	Anorganische Verbindungen wie NH_4^+, NO_2^-, NO_3^-, CN^- u.a., die oxidativ und/oder reduktiv biochemisch eliminierbar sind. Stark prolongierte Reaktionszeiten	≥ 10	1,5	teilweise abbaubar

Alle Stoffe der BIO-Gruppe A werden im wässrigen Medium unter adaptierten und ausreichenden O_2-Bedingungen biochemisch leicht vor allem zu Kohlenstoffdioxid und Wasser abgebaut. Bei organischen Stickstoffverbindungen erfolgt anschließend die Nitrifikation. Da ein Teil des organischen Materials dem Baustoffwechsel unterliegt, werden, gemessen am Gesamtumsatz, bei respiratorischen Methoden keine 100% erreicht, auch wenn die Substanz

[35] der Wert bis maximal 4% resultiert aus Messfehlern oder/und Verunreinigungen

vollständig umgesetzt wird. Organische Verbindungen der BIO-Gruppe B (B1 und B2) sind durch einen unvollständigen Abbau (20% bis 59% zum BSBT bzw. CSB) oder verminderte Abbaugeschwindigkeiten charakterisiert. Deutlich reduzierte Reaktionsumsätze weisen Vertreter der BIO-Gruppe C auf. Zur BIO-Gruppe D gehören z.B. viele halogenierte Verbindungen, die unter standardisierten Bedingungen biochemisch nicht abbaubar sind. Das betrifft auch eine Anzahl von Prioritätskontaminanten aus militärischen Altlasten. "Biochemisch nicht abbaubar" weist, wenn überhaupt, auf sehr langsamen und vor allem unvollständigen Umsatz hin.

Die Einstufung anorganischer Substanzen in das Bewertungssystem SC_{BIO} ist ebenfalls in Tabelle 5.11 (Gruppen E1 und E2) beschrieben. Die meisten anorganischen Stoffe gehören der Gruppe E1 an und sind als „biochemisch stabil“ anzusehen bzw. im Sinne der Fragestellung findet nur ein unbedeutender Stoffumsatz statt. Dies gilt auch für chemische Reaktionen, die im Boden oder Grundwasser ablaufen können. Daraus werden zwei Untergruppen gebildet:

- Die Untergruppe a enthält Anorganika, die unverändert im Untergrund erhalten bleiben.
- Der Untergruppe b gehören alle anorganischen Verbindungen an, die zwar Reaktionen eingehen können, aber die Gesamtstoffbilanz nicht beeinflussen. In Tabelle 5.11 sind dazu drei charakteristische Beispiele aufgeführt.

In beiden Untergruppen ist eine Stoffminderung durch biochemische Umsetzung ausgeschlossen. Damit entspricht die Aussage der BIO-Gruppe E1 der anorganischen Substanzen weitestgehend der BIO-Gruppe D der Organika. Interessant für den Stoffumsatz ist die Gruppe E2, da hier bei entsprechenden Voraussetzungen eine vollständige Eliminierung anorganischer Substanzen mittels biochemischer Reaktionen (im Ausnahmefall auch durch rein chemische Vorgänge im Untergrund) möglich ist. Voraussetzungen dafür sind vor allem:

- Anwesenheit spezieller Mikroorganismen im wässrigen Medium,
- Sauerstoff oder O_2-Donatoren für aeroben Abbau,
- Redox-Potential bei Anwesenheit von Anaerobiern bzw. reduktiven Prozessen,
- Zum Teil Kombination von aeroben und anaeroben Vorgängen und Möglichkeiten zu pH-Wert-Änderungen.

Sind entsprechende Bedingungen erfüllt, kann eine zeitlich verzögerte Eliminierung erfolgen.

In Bild 5.1 ist die biochemische Abbaubarkeit zusammenfassend als Bewertungszahl BZ_{BIO}, in der BIO-Gruppeneinteilung und als Stoffcharakteristik SC_{BIO} auf der Basis von Laborbedingungen dargestellt. Laborwerte, die nicht aus einer standardisierten Methode resultieren und damit eine geringere Aussagekraft aufweisen, erhalten den Index x als SC_{BIO-X}.

Eine Besonderheit stellt der umweltvermittelte anaerobe Abbau von Umweltkontaminanten dar. Da oft nur reduzierte Zwischenprodukte entstehen (z.B. Umsatz von Nitro- in Aminoverbindungen gem. E-Gruppe der Tabelle 5.1), ist eine Klassifizierung nach vorgegebenem Schema schwierig. Ihre Bewertung beschränkt sich deshalb auf die Wichtung über toxikologisch relevante Metabolite in Feld 4.

Eine praxisbezogene Klassifizierung der Umweltkontaminanten und ihren biochemischen Abbaubarkeiten ist in Tabelle 5.12 dargestellt. Das betrifft sowohl die biologische Abwasserreinigung als auch das Verhalten im Untergrund bzw. Grundwasser. Die Kennzeichnung besteht im Unterschied zur standardisierten Labormethode im Index z als SC_{BIO-Z} (vgl. Tabelle 5.13).

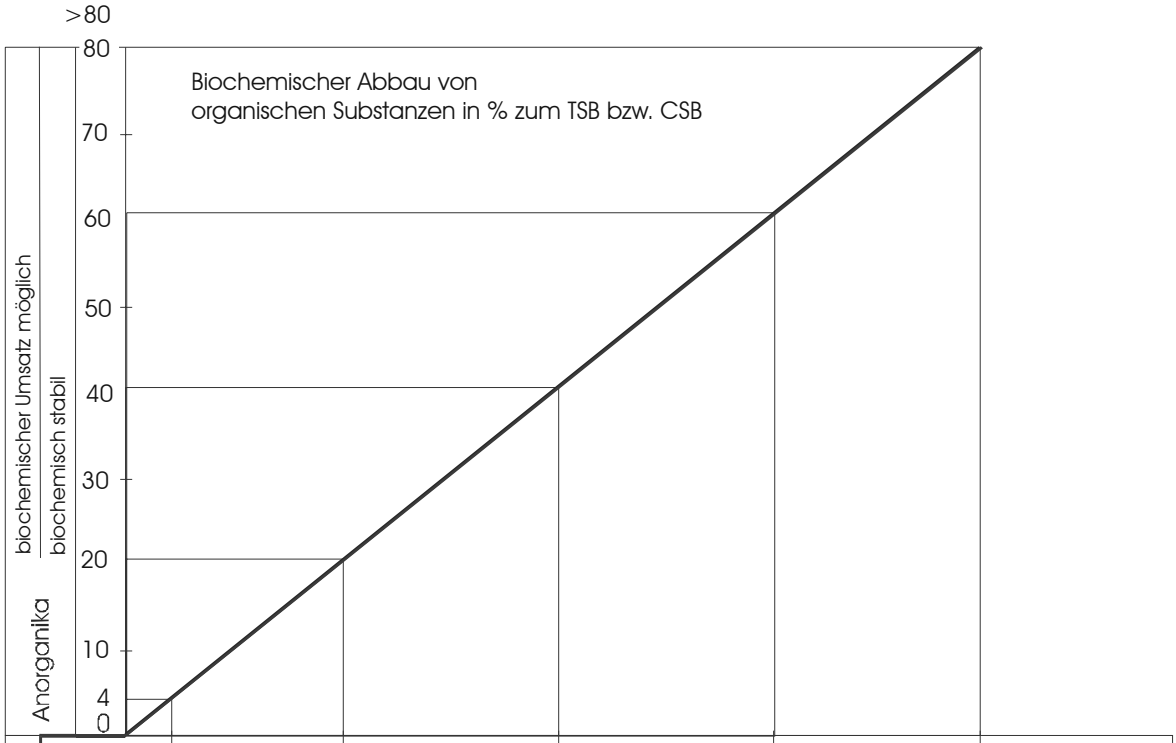


Bild 5.1 Biochemischer Abbau von organischen und anorganischen Substanzen dargestellt als Bewertungszahl BZ_{BIO}, als Gruppeneinteilung (BIO-Gruppe) und als Stoffcharakteristik SC_{BIO}

Tabelle 5.12 Charakterisierung von Umweltkontaminanten hinsichtlich ihrer biochemischen Abbaubarkeit – Aussagen für praktische Belange

BIO-Gruppe	Verhalten in einer biologischen Reinigungsanlage	Verhalten im Untergrund bzw. Grundwasser	SC_{BIO} / SC_{BIO-Z}
A	Substratcharakter Abbau konzentrationsunabhängig Aufenthaltsdauer T: ca. 1 Stunde Abbaugrad 96 bis 100%	Adaptionszeit: Tage Effizienter Stoffumsatz, hohe Abbauggeschwindigkeit Keine bis sehr geringe Inhibitorwirkung Halbwertszeit $t_{1/2}$: Tage bis Wochen	1,0
B1	Für biologische Reinigungsanlage geeignet Abbau z.T. konzentrationsunabhängig Aufenthaltsdauer T: eine bis mehrere Stunden Abbaugrad ≥ 90%	Adaptionszeit: Wochen Mittlere Abbaugeschwindigkeit Inhibitorwirkung bei c > 1 g/l Halbwertszeit $t_{1/2}$: Monate	1,3

BIO-Gruppe	Verhalten in einer biologischen Reinigungsanlage	Verhalten im Untergrund bzw. Grundwasser	SC_{BIO} / SC_{BIO-Z}
B2	Zusätzliche Kohlenstoffquellen in Form von A- und/oder B-Substanzen erforderlich Alternativen: Mehrstufige Anlage, Kreislaufführung Aufenthaltszeit T > 24 Stunden Abiotische Nachbehandlung Leistungsminderung durch erhöhte B2-Konzentrationen Abbaugrad < 90%	Adaptionszeit: Wochen bis Monate Bildung von Metaboliten, die ev. kritisch einzuschätzen sind Geringe Abbaugeschwindigkeit Inhibitorwirkung bei c > 100 mg/l Halbwertszeit $t_{1/2}$: ca. 1 Jahr	1,5
C	für biologische Reinigung ungeeignet Stört bzw. behindert den biologischen Reinigungsprozess Ev. Alternativen durch gentechnische Manipulation Nur geringer biochemischer Abbau	Adaptionszeit: Jahr(e) Sehr kleine Dissimilationsrate Inhibitorwirkung bei c > 10 mg/l, andere biochemische Umsatze werden behindert Halbwertszeit $t_{1/2}$: mehrere Jahre	1,8
D	Stört bzw. behindert den biologischen Reinigungsprozess erheblich Ev. starke Inhibitorwirkung Kein biochemischer Abbau	Adaption nicht bzw. kaum möglich Inhibitorwirkung bei c > 1 mg/l Halbwertszeit $t_{1/2}$: Jahrzehnte	2,0

Tabelle 5.13 SC_{BIO} - Bewertung der biochemischen Abbaubarkeit von Umweltsubstanzen - Klassifizierung nach Datenlage

SC_{BIO}	Bewertung von Stoffen nach standardisierter Laborprüfmethode
SC_{BIO-X}	Bewertung von Stoffen über Laborwerte aus einer nicht standardisierten Methode (eingeschränkte Aussagekraft)
SC_{BIO-Y}	Bewertung von Stoffen durch Analogieschlüsse über die chemische Konstitution, Struktur-Aktivitäts-Beziehungen (SAB/QSAB) unter Berücksichtigung von reaktiven Gruppen (z.B. Hydroxyl-, Carbonyl-, Sulfonat- Gruppen) und prohibitiven Faktoren (z.B. Häufung von Halogensubstituenten) bzw. Expertensysteme (s.o.) bzw. -meinungen
SC_{BIO-Z}	Bewertung von Stoffen aus praktischen bzw. Felduntersuchungen

5.2.4 Voraussage der biochemischen Abbaubarkeit aus Struktur-Aktivitäts-Beziehungen - SC_{BIO-Y}

Fehlen jegliche Untersuchungswerte, lässt sich trotzdem eine Klassifizierung für bestimmte Umweltkontaminanten ableiten, wenn die Voraussetzungen wie eindeutige Definition der chemischen Konstitution, Analogieschluss aus Derivaten, Berücksichtigung der reaktiven Faktoren (beispielsweise funktionelle Gruppen wie in Hydroxyl-, Carbonyl-, Sufonat-Verbindungen u.ä.) und prohibitive Faktoren (beispielsweise Blockierung der ortho-Stellung im Benzolgrundgerüst oder Häufung von Halogensubstituenten) sowie langjährige interdisziplinäre Erfahrungen vorliegen. Einige Beispiele von Faktoren, die den biochemischen Abbau beeinflussenden sind in Tabelle 5.14 zusammengestellt (zu den Grundlagen vgl. z.B. **Winter 1964**).

Tabelle 5.14 Beispiele der Abhängigkeit des biochemischen Abbaus von der chemischen Konstitution

positive Faktoren (schneller Abbau)	Anwesenheit funktioneller Gruppen, vor allem Hydroxyl-, Carboxyl-, Sulfon-, Sulfonat-, Carbonyl- und Aminogruppen Metabolite mit zunehmender Wasserlöslichkeit im Vergleich zur Primärsubstanz
negative Faktoren (langsamer Abbau)	Steigende Kettenlänge von n-Aliphaten Steigende Ringzahl von Aromaten Verzweigung der aliphatischen Kette, sekundäre und tertiäre Verbindungen aliphatische Doppelbindungen Halogensubstitution Häufung von funktionellen Gruppen, außer Halogen, Blockierung der ortho-Stellung im Benzolgrundgerüst, außer phenolische Gruppe Beschränkte Wasserlöslichkeit
Blockierung (kein Abbau)	Schwer oder nicht lösliche Verbindung Verbindungen mit bakterizider Wirkung Häufung von Halogensubstitution

Analog zu toxikologischen Expertensystemen (s.o.) bzw. Struktur-Aktivitäts-Beziehungen (SAB) werden heute auch entsprechende (rechnergestützte) Systeme zur Voraussage der biochemischen Abbaubarkeit von Substanzen eingesetzt.

Ergebnisse aus SAB/QSAB-Untersuchungen gehen in die Bewertung wie folgt ein:

1. *Vervollständigung der Datenbasis in Feld 1 des BZ_{BIO} - Bewertungsrasters*
   Durch die Einbeziehung von SAB-Untersuchungen in das BZ_{BIO} - Bewertungsraster können bei der Beurteilung der Vollständigkeit der Datenbasis in Feld 1 zusätzliche Wichtungspunkte vergeben werden, die die Gruppeneinstufung beeinflussen.
2. *Bestätigung von Daten des biochemischen Abbaus in Feld 2 des BZ_{BIO}* - Bewertungsrasters
   Ergebnisse aus SAB-Untersuchungen können als zusätzliche Information zur Bestätigung von Daten des biochemischen Abbaus bzw. zur Überbrückung von Datenlücken herangezogen werden.
3. *Vervollständigung der Datenbasis in Feld 3 des BZ_{BIO} - Bewertungsrasters*
   Vervollständigung der Datenbasis oder alleinige Zugrundelegung der SAB-Ergebnisse bei der Bewertung der Hydrolyse.
4. *Vervollständigung der Datenbasis in Feld 4 des BZ_{BIO} - Bewertungsrasters*
   Vervollständigung der Datenbasis oder alleinige Zugrundelegung der SAB-Ergebnisse bei der Bewertung sonstiger Ergebnisse hinsichtlich toxikologisch relevanter Metabolite (aerob / anaerob) und Inhibitorwirkung.

Werden der Bewertung der biochemischen Abbaubarkeit überwiegend Daten aus SAB-Untersuchungen zugrunde gelegt (Gruppeneinstufung I oder II in Feld 1 bzw. AA in Feld 3), wird der berechnete SC_{BIO} - Wert mit dem Index Y (= SC_{BIO-Y}) gekennzeichnet (vgl. Tabelle 5.13).

5.2.5 Stoffcharakteristik des abiotischen Abbaus von Umweltsubstanzen - SC_{HYD}, SC_{FOT}

Bei einigen Substanzen verläuft, wie erwähnt, der chemische Umsatz z.B. infolge von Hydrolyse, wesentlich schneller als der biochemische Abbau und ist somit unter Beachtung der toxikologischen Eigenschaften der Zersetzungsprodukte zu berücksichtigen. Die Hydrolyse ist an gewisse Substanzklassen und Strukturelemente gebunden, z.B. Ester, Säureamide, aktivierte Halogensubstitution, Epoxide und Carbamate. Die bestimmenden Umweltrahmenbedingungen sind Temperatur und pH-Wert. Vergleiche von Ergebnissen aus Labor- und Feldversuchen zeigen gute Übereinstimmung, wenn diese beiden Parameter übereinstimmen. Eine Ausnahme bilden Organika, die ausschließlich oder bevorzugt nicht-biochemischen Reaktionen in Form von photochemischen Reaktionen durch das Sonnenlicht unterworfen sind (z.B. in Oberflächengewässern).

Die Substanzcharakteristiken SC_{HYD} für den hydrolytischen Abbau und SC_{FOT} für den photochemischen Abbau sind in der SC_{BIO}-Bewertung in Feld 3 durch die Abbauabschläge (AA) berücksichtigt (vgl. Tabelle 5.9). SC_{HYD} und SC_{FOT} lassen sich über die jeweiligen Halbwertszeiten bzw. den prozentualen Abbau aber auch gesondert darstellen (vgl. **Mulisch 2001**). Dabei ist zu beachten, dass speziell die Hydrolyse zwar Spaltprodukte erzeugen kann, jedoch selten zur vollständigen Mineralisierung führt.

5.2.6 Stoffcharakteristik der umwelttoxikologischen Relevanz - SC_{TOR}

Die Summe der Koeffizienten SC_{TOX} und SC_{BIO} führt zur „umwelttoxikologischen Relevanz" des Stoffes in Form eines SC_{TOR}-Wertes (vgl. Gleichung 4).

$$6 \geq SC_{TOR} = SC_{TOX} + SC_{BIO} \geq 2 \qquad (Gl.\ 4)$$

Den höchsten SC_{TOR} - Wert besitzt ein Stoff mit hohem Toxizitätspotential, der biochemisch nicht abbaubar ist. Ein SC_{TOR} 6,0 signalisiert also eine „hohe (intrinsische) Gefährlichkeit" während der niedrigste SC_{TOR} 2,0 anzeigt, dass von einem solchen Stoff aufgrund seiner intrinsischen Eigenschaften weder ein Expositions- noch ein Gefährdungspotenzial für den Menschen ausgeht **(Mulisch 2003)**.

Eine Orientierungshilfe zur Aussage der SC_{TOR} gibt Bild 5.2 wieder.

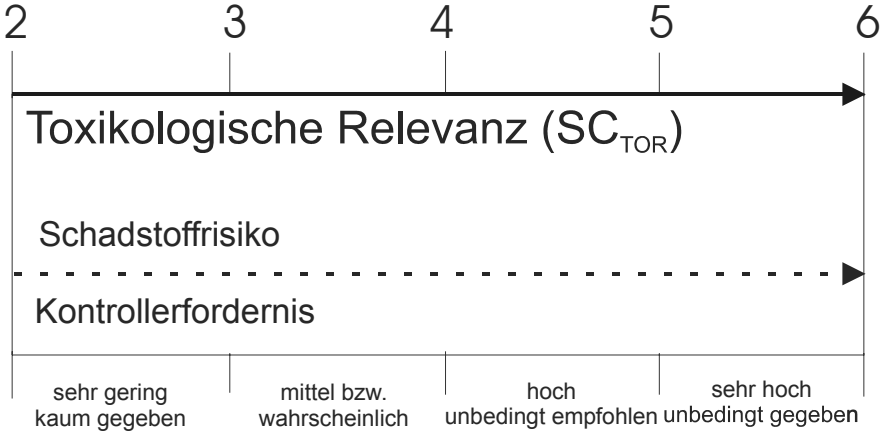


Bild 5.2 Schematische Aussagen zur Stoffcharakteristik der umwelttoxikologischen Relevanz SC_{TOR}

Alle Verbindungen mit SC_{TOR} -Werten ≥ 5 sind gefährlich und sollten noch nach Jahren bis Jahrzehnten Anlass zu Abwehrmaßnahmen geben. Im Gegensatz dazu kann das Gefährdungs-

potenzial von Stoffen mit SC_{TOR} Werten ≤ 3 erfahrungsgemäß vernachlässigt werden. Sie sind biochemisch gut abbaubar und wenig toxisch. Für Substanzen, deren SC_{TOR}-Werte zwischen 3 und 5 liegen, sind weitere Parameter für die Bewertung von Gefahren zu berücksichtigen, insbesondere die stoffspezifische Mobilität SC_{MOB} bzw. die vor-Ort-Parameter im Rahmen einer Einzelfallprüfung (vgl. Kapitel 11.2 Anhang und **Mulisch 2000b**).

5.3 Stoffliche Mobilität - SC_{MOB}

Zur Bewertung der stofflichen Mobilität von Substanzen, ausgedrückt als SC_{MOB}, werden für das Bewertungsverfahren im wesentlichen die Daten der Aussagebereiche von Tabelle 5.15 dokumentiert.

Tabelle 5.15 Dokumentierte Daten für das Bewertungsverfahren der Mobilität von Stoffen als SC_{MOB}

lfd. Nr.	Daten
1	Ergebnisse aus standardisierten Laboruntersuchungen zur Löslichkeit von Stoffen in Wasser
2	Ergebnisse aus standardisierten Laboruntersuchungen zur Adsorbierbarkeit an Adsorberharzen und Aktivkohle
3	Weitere physikochemische Daten als Hilfsgrößen: Molekulargewicht, Schmelzpunkt, Dichte, Dampfdruck, Verteilungskoeffizient log P_{OW}, Sorptionskoeffizient K_{OC}, Henry-Konstante, u.a.
4	Expertenmeinungen
5	Recherchen ohne Ergebnisse (Datenlücken)
6	Theoretische Berechnungen zur Auffüllung von Datenlücken

Die Bewertung der Mobilität von Substanzen in Boden und Grundwässern ist für die Beurteilung ihres Migrationverhaltens im Untergrund entscheidend (z.B. für das Ausmaß ihrer Wanderung aus Altlastverdachtsflächen in das Rohwasser von Trinkwasserbrunnen). Für das Migrationsverhalten sind eine Reihe von Parametern verantwortlich, die sich z.T. gegenseitig beeinflussen. In Bezug auf die Vor-Ort-Paramter hängt z.B. die Fähigkeit eines Bodens zur Adsorption von Kationen aus der Bodenlösung ebenso von der mineralischen Zusammensetzung der Tonfraktion wie vom prozentualen Tongehalt des Bodens ab. Außerdem wird sie von der Menge und Art des organischen Materials bestimmt, das der Boden enthält. Die Wasserdurchlässigkeit von Böden hängt z.B. stärker vom Ausmaß des Zusammenschlusses der mineralischen Partikel und der organischen Masse zu Struktureinheiten mit dazwischen liegenden Hohlräumen ab, als von der Körnung.

Zur Quantifizierung der stofflichen Mobilität berücksichtigt das SCS als wesentliche stoffliche Kriterien die Wasserlöslichkeit und die Adsorbierbarkeit der Substanz nach standardisierten Methoden, z.B. an Aktivkohle oder an Adsorberharzen bei Gleichgewichtsbeladung.

Die Bewertung der Mobilität erfolgt dabei schematisch analog der Bewertung von Toxizität und biochemischer Abbaubarkeit über die Berechnung einer Mobilitätszahl BZ_{MOB}, die mit abnehmender Mobilität von 1 auf 100 zunimmt. Hieraus wird ein Wert der Substanzcharakteristik SC_{MOB} von 2,0 für „sehr hohe Mobilität“ bis 4,0 für „sehr geringe Mobilität“ berechnet.

Die Bewertung umfasst die Prüfung in 4 Kategorien (4 Felder) hinsichtlich

- der Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{MOB}),

- der Angaben zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit und der Berechnung eines Eingangswertes (EW_{MOB}),
- Stoffbeschreibungen und Berechnungsgrundlagen bzw. Vereinfachungen und
- sonstigen Ergebnissen in Form einer Mobilitätszahl (MobZ) und einer modifizierten Mobilitätszahl (MmobZ).

Die vorhandenen Stoffdaten werden in Feld 1 in mehreren, die Mobilität beschreibenden Teilbereichen, dokumentiert und ihrer Bedeutung entsprechend durch unterschiedliche Punktzahlen gewichtet. Die Summe der Wichtungspunkte zeigt die Bewertbarkeit des Stoffes an: 1 - 4 Punkte = nicht bewertbar, 5 - 13 Punkte = vorläufig bewertbar und >13 = bewertbar. (vgl. Tabelle 5.16).

Tabelle 5.16 SC_{MOB} - Bewertung der Datenbasis zur Mobilität

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{MOB})

	Wichtungs-punkte	
standardisierte Laborprüfmethode	3	( )
Feldversuch	1	( )
Adsorbierbarkeit an AK	3	( )
Adsorbierbarkeit an Ads.-Harzen	2	( )
Adsorbierbarkeit Boden	1	( )
Löslichkeit in Wasser	3	( )
Verteilungskoeffizient log P_{ow}	1	( )
Henry-Konstante	1	( )
Dampfdruck	1	( )
pk_a (für ionisierbare Substanzen)	1	( )
Sorptionskoeffizient K_{oc}	1	( )
Dichte	1	( )

Summe: .....

Gruppeneinstufung

I	1 - 4 Punkte
II	5 - 13 Punkte
III	14 - 19 Punkte

Gruppe: .....

Die Angaben zur Wasserlöslichkeit und zur Adsorbierbarkeit werden in Feld 2 in einen Eingangswert umgerechnet. Hierzu werden die Löslichkeit x (in mg/l) entsprechend der Gleichung 5

$$f(x)_{LÖS} = 9\ x\ /\ 1000 + 1, \text{max. } 10 \qquad (Gl.\ 5)$$

und die Adsorbierbarkeit x in mg/g entsprechend der Gleichung 6

$$f(x)_{ADS} = (100 - x)\ \cdot 9\ /\ 100 + 1, \text{max. } 10 \qquad (Gl.\ 6)$$

jeweils berechnet und dann aufaddiert.

Es ergibt sich eine Werteskala von 1 (für schwer löslich und hohe Adsorbierbarkeit) bis 20 (für leicht löslich und geringe Adsorbierbarkeit). Eventuell vorhandene Datenlücken werden durch die zusätzliche Addition von Korrekturwerten systematisiert. Liegen keine Daten zur Adsorbierbarkeit des Stoffes vor, kann ein Wert aus dem Sorptionskoeffizienten K_{OC} bzw. aus dem Oktanol-/Wasserverteilungskoeffizienten K_{OW} (*engl.* P_{OW}) gebildet werden. Ein Sicherheitsfaktor (SF) 10 soll die Unsicherheit bei der Abschätzung eines durch Berechung bzw. Vereinfachung ermittelten Adsorptionswertes berücksichtigen. Weitere Sicherheitsfaktoren dienen der Überbrückung der Varianz zwischen den zugrunde liegenden Adsorbermaterialien im Labormaßstab (innere Varianz mit SF 1 - 10) sowie zwischen Labor- und Freifeldmaßstab

(äußere Varianz mit SF 1 - 10). Das Ergebnis der Bewertung in Feld 2 ist der Eingangswert der Mobilität (vgl. Tabelle 5.17).

Tabelle 5.17 SC_{MOB} - Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit (EW_{MOB})

	(Quelle)
a) Wasserlöslichkeit S (Lit_{max}-Wert mg/l]	
- .... °C	( )
- Umrechungsfaktor	
- 20 °C	( )
b) Adsorbierbarkeit:C_{ads} (Lit_{min}-Wert mg/g]	
- AK	( )
- Harz	( )
- Boden	( )
- Schätzung aus K_{OC} bzw. P_{OW}	( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) höchster experiment. Lös.-Wert: ..... (mg/l) · 9/1000+1, max. 10) = ... (a)
b) experiment.Ads.-Wert (-x+100): ..... (mg/g) · 9/100+1, max. 10) = ... (b)
c) geschätzter Ads.-Wert (-x+100): ..... (mg/g) · 9/100+1, max. 10) = ... (c)
d) SF = 10 bei berechnetem Ads.-Wert: ^{10}log = ... (d)
e) SF = 1-10 zur Überbrückung der Varianz Ads.-Materialien
^{10}log = ... (e)
f) SF = 10 zur Überbrückung der Varianz Labor / Feld ^{10}log = ... (f)

Eingangswert: 2.1.1 (a+b+d+e+f) oder 2.1.2 (a+c+d+e+f) = ...

Feld 3 zeigt die für die Bewertung der Mobilität charakteristischen u.a. physiko-chemischen Stoffbeschreibungen sowie Berechnungsgrundlagen und Vereinfachungen zur Abschätzung von Daten aus anderen Größen, z.B. die Abschätzung der Wasserlöslichkeit und der Biokonzentration in Fischen aus dem Oktanol-/Wasserverteilungskoeffizienten log P_{OW}, die Abschätzung der Halbwertszeit der Substanz aufgrund ihrer Volatilität, das Verhalten der Substanz im Grundwasser als sog. *floater* bzw. *sinker* aufgrund ihrer Dichte (vgl. Tabelle 5.18).

In Feld 4 werden sonstige Ergebnisse in die Bewertung mit einbezogen, die im weiteren Zusammenhang mit Mobilitätseigenschaften der Stoffe stehen. Hierzu zählen der Biokonzentrationsfaktor (BKF), der eine Anreicherung in der Biosphäre abbildet, die Tendenz der Stoffe zur Komplexbildung, Dissoziation und Volatilität sowie deren potentielles Verhalten im Untergrund aufgrund stoffspezifischer *floater-/sinker*-Eigenschaften im Grundwasser, vereinfachte QSAR-Aussagen zur Konzentration am Punkt der Beurteilung zwischen gesättigter und ungesättigter Bodenzone sowie zum Verhältnis des geschätzten minimal/maximal kontaminierten Grundwasservolumens.

Unterschieden werden die Aussagen positiv oder nicht ausreichend getestet, ausreichend getestet/Bewertung strittig, ausreichend getestet/Ergebnis negativ. Das Ergebnis ist eine dreistellige stoffspezifische Mobilitätszahl, die - analog der Toxizitätszahl - in die einstellige modifizierte Mobilitätszahl MMobZ umgewandelt wird (vgl. Tabelle 5.19).

Tabelle 5.18 SC_{MOB} - Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Charakterisierung:
Aggregatzustand unter Normalbedinungen:
Siedepunkt [°C]:
Schmelzpunkt [°C]:
Dichte [g/cm³ bei 20 °C]:
Viskosität [mPa · s]:
Oberflächenspannung:
Dampfdruck [Pa]:
Löslichkeit [g/l 20 °C H_2O]:
Dampfsättigungskonzentration [g/m³] bei 20 °C:
Verteilungskoeffizient log P_{OW}:
Sorptionskoeffizient K_{OC}:
pk_s (Dissoziationsgradkurve unter Annahme pH = 5)
Henry-Konstante [Pa m²/mol]:
Remobilisierung von Metallionen durch Komplexbildung [log K_k]:
Sättigungskonzentration [g/m³]:
Biokonzentrationsfaktor:

Berechnungsgrundlagen:
Henry-Koeffizient: $H = C_g/C_w$ = (p [Pa] · M [g/mol]) / (S [mg/l] · 8314 · T [K]
Verteilungskoeffizient: log P_{ow} = -0,662 log $C_{s,w}$ [mol/l] + 0,710
Adsorptionskoeffizient: $K_{OC} = 100 \cdot C_{ads}/C_W$ (T) / (0,58 · % org. Materie)(o.m.) mit o.m. = o.c. / 0,58; K_{OC} = 0,4 P_{OW} => K= K_{OC} · % o.c. /100 und $C_{ads} = K \cdot C_W$

Vereinfachungen:
Abschätzung der Wasserlöslichkeit S aus P_{OW}: log S = 3,05 - 1,29 Log P_{OW}
BKF (Fische) = $C_{BIO} / C_w = k_1$ (Aufnahme) / k_2 (Abgabe) = 0,048 P_{OW}
Konz. am Punkt der Beurteilung: C_A =! 0,1 S_A
min. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\ (min)}$ = S / C · V_S mit C = $C_{Sickerwasser}$
max. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\ (max)}$ = S / C · V_S mit C = LW
Volatilität: $t_{1/2}$ = ln 2 · 215,7$^{1/2}$ [2710 * 28,3 / H]
Verzög.-F. (VF) und Lipophil.: Beispiel P_{OW} 200 => VF 2,2; P_{OW} 4000 => VF 7,9
floater / *sinker*: Dichte Substanz < / > Dichte Wasser

Tabelle 5.19 SC_{MOB} - Bewertung von sonstigen Ergebnissen zur Mobilität

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	negativ oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis positiv
	Quelle	Quelle	Quelle
Biokonzentration(BKF):	( )	( )	( )
Dissoziation:	( )	( )	( )
Komplexbildung:	( )	( )	( )
Volatilität:	( )	( )	( )
floater / sinker:	( )	( )	( )
Konz. am Punkt der Beurteilung	( )	( )	( )
min/max. kontaminiertes GW-Volumen	( )	( )	( )

Summe = Mobilitätszahl (MobZ) = | | | |

modifizierte Mobilitätszahl (**MMobZ**) =
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

MobZ = max. 700 und min. 007. MMobZ = max. 7 und min. 0

Die BZ_{MOB} ist das Produkt aus dem Eingangswert EW_{MOB} aus Feld 2 und der modifizierten Mobilitätszahl (MMobZ) entsprechend Gleichung 7

$$0 \leq BZ_{MOB} = - (EW_{MOB} \cdot MMobZ) + 100 \leq 100 \qquad (Gl.\ 7)$$

SC_{MOB} wird aus BZ_{MOB} über die Gleichung 8

$$2 \leq SC_{MOB} = 2 + 2 \cdot BZ_{MOB} / 100 \leq 4 \qquad (Gl.\ 8)$$

erhalten. Mit abnehmendem SC_{MOB}-Wert erhöht sich die physiko-chemisch bedingte Mobilität. Umgekehrt sind Schadstoffe mit hohem SC_{MOB} durch lange Verweilzeiten im Untergrund gekennzeichnet. Ein $SC_{MOB} = 4$ bezeichnet nahezu vollständige Immobilität des Stoffes (vgl. Tabelle 5.20).

Für die Praxis lässt sich der SC_{MOB} auch als additive Verknüpfung der Stoffcharakteristiken „Wasserlöslichkeit $SC_{LÖS}$" und „Adsorbierbarkeit SC_{ADS}" vereinfachend darstellen. Dabei erstreckt sich die Stoffcharakteristik der Wasserlöslichkeit $SC_{LÖS}$ von 1,0 für „sehr leicht lösliche" bis $SC_{LÖS}$ 2,0 für „sehr schwer lösliche" Substanzen. Die Adsorbierbarkeit im Bereich $1 \leq SC_{ADS} \leq 2$ bewegt sich von „sehr geringe" bis „sehr hohe" Adsorbierbarkeit. Die Addition der beiden Koeffizienten $SC_{LÖS}$ und SC_{ADS} führt auf die Bewertung der Mobilität des Stoffes als SC_{MOB} (vgl. Gleichung 9 und Tabelle 5.20).

$$2 \leq SC_{MOB} = SC_{LÖS} + SC_{ADS} \leq 4 \qquad (Gl.\ 9)$$

Tabelle 5.20 Mobilität als SC_{MOB} von Substanzen über die Stoffcharakteristiken $SC_{LÖS}$ und SC_{ADS} (vereinfachtes Verfahren)

MOBILI-TÄTS-Gruppe	**BZ_{MOB}**	**Charak-teristik der Mobilität**	**SC_{MOB}**		**SC_{ADS}**	**Charak-teristik der Adsorbier-barkeit**	**Gleichge-wichts-beladung Q_∞ [mg/g]**		**$SC_{LÖS}$**	**Charakteristik der Wasser-löslichkeit**	**Löslichkeit in Wasser [mg/l] bei 20 °C**
I	90 - 100	sehr gering	3,8 - 4,0		2,0	sehr hoch	≥ 100		2,0	sehr schwer löslich	<1
II	65 - 89	gering	3,3 - 3,79		1,9	hoch	>49 - 99		1,9	schwer löslich	1 - <10
III	40 - 64	mäßig	2,8 - 3,29	←	1,7	mittel	>19 - 49	+	1,5	mittelmäßig löslich	10 – <100
IV	25 - 39	hoch	2,5 - 2,79		1,3	gering	>2 - 19		1,2	leicht löslich	100 - <1000
V	0 - 24	sehr hoch	2,0 - 2,49		1,0	sehr gering	≤ 2		1,0	sehr leicht löslich	>1000

5.4 Stoffliche Aquatoxizität - SC_{AQU}

Für die Bewertung der Aquatoxizität von Substanzen - ausgedrückt als SC_{AQU} - werden im Bewertungsverfahren im wesentlichen Daten der Aussagebereiche von Tabelle 5.21 dokumentiert.

Tabelle 5.21 Dokumentierte Daten zur Bewertung der Aquatoxizität von Stoffen (SC_{AQU})

lfd. Nr.	Daten
1	Ergebnisse aus standardisierten Laboruntersuchungen der akuten Aquatoxizität 50%ige letale Konzentration LC_{50} Effektive Wirkkonzentration EC_{50} 50%ige Vermehrungshemmung bei Algen IC_{50}
2	Ergebnisse aus standardisierten Laboruntersuchungen der (semi-) chronischen Aquatoxizität NOEC (*no observed effect concentration*; bei Kurzzeitversuchen auch im akuten Bereich) LOEC (*lowest observed effect concentration*)
3	Expertenmeinungen
4	Rechercheergebnisse zu Datenlücken
5	theoretische Berechnungen und Voraussagen zur Auffüllung von Datenlücken

Die aquatoxikologische Bewertung ist im SCS unter dem Aspekt der ökologisch erwünschten Kreislaufführung des Wassers ein fakultativer Bewertungsschritt. Das entsprechende Bewertungsmodul ermöglicht prinzipiell die Berücksichtigung einer breiten Palette von Testsystemen und -organismen, z.B. von Nutzfischen (Karpfen, Forellen und Aale), Teich- und Aquarienfischen (z.B. Guppy, Zebrabarben und Goldfische), Algen (z.B. *Ankistrodesmus falcatus*), Kleinkrebsen (z.B. *Daphnia magna*), Bakterien (z.B. *Escherichia coli*) und Protozoen (u.a. Ciliaten) **(Liebmann 1960; Meinck 1968; Mattheis 1979)**.

Statistisch am deutlichsten lässt sich die mittlere letale Konzentration LC_{50} logarithmisch darstellen. Es handelt sich dabei um diejenige Konzentration einer Umweltchemikalie, bei der 50% der Tiere im Versuchsansatz innerhalb von ≥ 96 Stunden sterben. Bei Untersuchungen mit Daphnien wird die mittlere effektive Wirkkonzentration (Schwimmunfähigkeit der Versuchstiere) EC_{50} in mg/l nach einer Expositionsdauer von mindestens 24 Stunden erfasst. Daneben hat sich zur Erfassung von Photosynthesegiften die 50%ige Vermehrungshemmung bei Algen als IC_{50} in mg/l bewährt (dabei steht das I für Inhibitorwirkung). Bei *Ankistrodemus falcatus* als meist verwendeter einzelliger planktischer Grünalge beträgt die Expositionszeit 10 Tage (vgl. auch **Rippen 1997, Tscheu-Schlüter 1985**).

Als Bewertungskriterium für die chronische oder semichronische Aquatoxizität gilt die *no observed effect concentration* (NOEC), d.h. die höchste noch nicht toxisch wirkende Dosis bei täglicher Verfütterung unter Angabe der Prüfdauer und der Versuchstierart. In der älteren Literatur findet man hierfür auch den Begriff Grenzkonzentration [GC in mg/l] (vgl. z.B. **Mattheis 1979**).

Die SC_{AQU} charakterisiert die stoffliche Aquatoxizität in erster Präferenz auf Grundlage von Ergebnissen aus Testsystemen mit Fischen. Um Auswirkungen von Umweltkontaminanten auf Gewässersysteme nachträglich einschätzen bzw. vorsorgend handeln zu können, sollte der Bewertung der Aquatoxizität nach Möglichkeit die NOEC[36] (*not observed effect concentration)* bzw.

[36] NOEC = Nicht beobachtete Effekt-Konzentration im Versuchsansatz (*not observed effect concentration*)

die LOEC[37] (*lowest observed effect concentration)* zu Grunde gelegt werden. Ausschlaggebend ist derjenige toxische Endpunkt, der bei der niedrigsten Konzentration (noch) auf den Stoff reagiert (angegeben in mg/l bei beobachteter Wirkung; bei Fischen z.B. erkennbar an den ersten deutlichen Endpunkten „Notatmung" und „Gleichgewichtsstörungen").

Die Bewertung der Aquatoxizität erfolgt analog der Bewertung der Toxizität, der biochemischen Abbaubarkeit oder der Mobilität durch Berechnung einer aquatoxikologischen Bewertungszahl BZ_{AQU} zwischen 1 und 100. Hieraus wird dann wiederum ein Wert der Substanzcharakteristik SC_{AQU} zwischen 1,0 für „schwach aquatoxisch" bis 2,0 für „hoch aquatoxisch" abgeleitet. Die Bewertung umfasst die Prüfung in 4 Kategorien (4 Felder) hinsichtlich

- der Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{AQU}),
- der Angaben zur Dosis-/Wirkungsbeziehung unter Ableitung eines Eingangswertes EW_{AQU} und einer Dosiszahl DZ_{AQU} sowie
- sonstigen aquatoxikologischen Prüfungen in Form einer Aquatox-Zahl (AquZ) bzw. einer modifizierten Aquatox-Zahl (MAquZ).

Die vorhandenen Stoffdaten werden in Feld 1 in 4 Gruppenbereichen dokumentiert und ihrer Bedeutung entsprechend durch unterschiedliche Punktzahlen gewichtet. Die Summe der Wichtungspunkte zeigt die Bewertbarkeit des Stoffes an: ≤ 5 = nicht bewertbar, 6 - 20 Punkte = vorläufig bewertbar und ≥ 21 Punkte = bewertbar (vgl. Tabelle 5.22). Stoffe mit spärlichen Informationen zur Fischtoxizität werden mit X im Index des SC-Werte bzw. mit einem Stern * bei den BZ_{AQU}-Werten gekennzeichnet.

Tabelle 5.22 SC_{AQU} - Bewertung der Datenbasis zur Aquatoxizität

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{AQU})

	Wichtungs-punkte			
1 Akute Fischtoxizität:				
- LC_{50}	5 ( )			
- LC_{5}	1 ( )			
- LC_{100}	1 ( )			
- LC_{100}	1 ( )			
2 (semi-)chronische Fischtoxizität:				
- LOEC	8 ( )			
- NOEC	10 ( )			
3 Strukturanalyse (SAB):	4 ( )			
4 Sonstige Ergebnisse:				
- Kleinkrebse	4 ( )			
- Bakterien	5 ( )	Gruppeneinstufung		
- Protozoen	1 ( )	I	≤ 5 Punkte	(nicht bewertbar)
- Algen	2 ( )	II	6 - 20 Punkte	(vorläufig bewertbar)
- Bioakkumulationsfaktor	3 ( )	III	21 - 45 Punkte	(bewertbar)
Summe:	.....	**Gruppe:**		

Die Angaben zur Dosis-Wirkungsbeziehung werden in Feld 2 in einen Eingangswert umgerechnet. Die Bewertung orientiert sich an einem NOEC zwischen 0,001 mg/l und 1.000 mg/l. Dieser wird in Gleichung 10 über die natürliche logarithmische Regression

$$f(x) = - 1{,}9 \cdot \ln(x) + 14 \qquad (Gl.\ 10)$$

und zusätzliche Sicherheitsfaktoren

- SF 10 Zur Abschätzung einer NOEC aus einer LOEC

[37] Die LOEC-Werte werden auch als Schwellenkonzentration (SwC) bezeichnet; LOEC = Niedrigste beobachtete Effekt-Konzentration im Versuchsansatz (*lowest observed effect concentration*)

- SF 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Laborspezies
- SF 10 zur Abschätzung einer LOEC aus einer LC_{50}
- SF 10 für das Fehlen standardisierter Bedingungen
- SF 3 für die Umrechnung eines Wertes, der aus SAB-Untersuchungen gewonnen wurde, in eine NOEC

für eventuell vorhandene Datenlücken in den Eingangswert EW_{AQU} transformiert (vgl. Tabelle 5.23).

Tabelle 5.23 SC_{AQU} - Berechnung des Eingangswertes EW_{AQU} zur Dosis-/Wirkungs-beziehung in der Aquatoxizität

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{AQU})

	L_0-Werte	Spezies	(Quelle)
akute Toxizität:			
- LC_{50}			( )
- LC_5			( )
- LC_{10}			( )
- LC_{100}			( )
(semi-)chronische Toxizität:			
- LOEC			( )
- NOEC			( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller NOEC : …… - 1,9 · ln(x) + 14 = …….. (a)
b) niedrigster abgeschätzter Wert : …… - 1,9 · ln(x) + 14 = …….. (b)
c) SF = 10 zur Abschätzung NOEC aus LOEC log = …….. (c)
d) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Speziel in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt log = …….. (d)
e) SF = 10 zur Abschätzung LOEC aus LC_{50} log = …….. (e)
f) SF = 10 für das Fehlen standard. Bedingungen log = …….. (f)
g) SF = 3 Umrechnung NOEC aus SAB log = ……. .(g)

Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = …….

Der Eingangswert wird in Feld 3 weiter korrigiert, wenn die vorliegende experimentelle Datenbasis für den (semi-)chronischen bzw. akuten Bereich unvollständig ist. Das Ergebnis der Bewertung der Aquatoxizität in Feld 3 ist die Dosiszahl DZ_{AQU} des Stoffes (vgl. Tabelle 5.24).

Tabelle 5.24 Berechnung der Dosiszahl in der Aquatoxizität

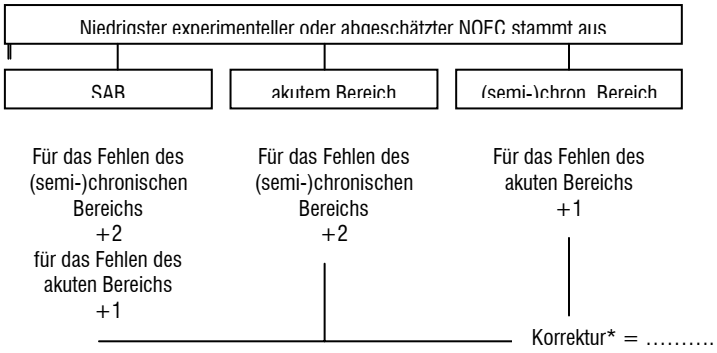
Feld 3: Berechnung der Dosiszahl (DZ_{AQU})

Übertrag Eingangswert:

2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = …….

3.1 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis

(korrigierte Dosiszahl wird mit * gekennzeichnet)



3.2 Beurtelung der Substanz im Feld 2 EW_{AQU}

3.2.1 Adäquate Daten sind für alle Aquatox-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = ……..

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = ……..

3.2.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g) + 3.1 Korrektur *= Abbauzahl = ……..

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) + 3.1 Korrektur *= Abbauzahl = ……..

In Feld 4 werden die Ergebnisse aus sonstigen aquatoxikologischen Tests bewertet. Hierzu zählen Tests an Kleinkrebsen, Bakterien, Protozoen, Algen sowie Aussagen zur Bioakkumulation bei Fischen. Unterschieden werden die Aussagen positiv/nicht ausreichend getestet, ausreichend getestet/Bewertung strittig, ausreichend getestet/Ergebnis negativ. Das Ergebnis ist eine dreistellige stoffspezifische Aquatoxizitätszahl (AquZ) zwischen 900 und 009, aus deren erster und zweiter Ziffer die modifizierte Aquatoxizitätszahl (MAquZ) berechnet wird (vgl. Tabelle 5.25).

Tabelle 5.25 SC_{AQU} - Bewertung von sonstigen Ergebnissen der Aquatoxizität

Feld 4: Sonstige Ergebnisse (AquZ)

	positiv oder nicht ausreichend getestet Quelle	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig Quelle	ausreichend getestet, Ergebnis negativ Quelle
4.1 Kleinkrebse (EC_{50}):			
- Dapnie mulex	( )	( )	( )
4.2 Bakterien (Test:)			
- Spezies:	( )	( )	( )
4.3 Protozoen (Test:)			
- Ciliaten, Amöben, Glockentierchen	( )	( )	( )
4.4 Algen (Hemmungstelst IC_{50})			
- planktische Grünalge	( )	( )	( )
- Blaualgen	( )	( )	( )
4.5 Bioakkumulationsfaktor (C_{Fisch} / C_{H2O})	( )	( )	( )
Summe = Aquatoxzahl (AquZ)			
modifizierte Aquatoxzahl (MAquZ) (Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)			

Die BZ_{AQU} ist das Produkt aus der ermittelten Dosiszahl (DZ_{AQU}) aus Feld 2 multipliziert mit der modifizierten Aquatox-Zahl (MAquZ) aus Feld 4. SC_{AQU} wird aus der BZ_{AQU} über die Gleichung 11

$$1 \leq SC_{AQU} = 1 + BZ_{AQU} / 100 \leq 2 \qquad (Gl.\ 11)$$

erhalten.

Vereinfachend lässt sich die Stoffcharakteristik der Aquatoxizität auch aus dem SC_{LOEC} ableiten, wie Tabelle 5.26 zeigt. Der Nachteil des vereinfachten Verfahrens ist die beschränkte Aussagekraft in 5 Gruppenbereichen. Die Skalierung reicht von 1,0 für „nicht relevant" bis 2,0 für „extrem toxisch".

Tabelle 5.26 Charakterisierung von Umweltchemikalien hinsichtlich ihrer Aquatoxizität als SC_{AQU} – Gruppenzuordnung und vereinfachte Klassifizierung als SC_{LOEC} (mit $SC_{AQU} \sim SC_{LOEC}$)

AQUATOX-Gruppe	BZ_{AQU}	SC_{AQU}	Grad der Aquatoxizität	SC_{LOEC}	LOEC [mg/l]
I	91 - 100	>1,9 – 2,0	extrem toxisch	2,0	< 1
II	68 - 90	>1,67 – 1,9	hoch toxisch	1,8	1 – 9
IIIa	51 - 67	>1,5 – 1,67	stark toxisch		
IIIb	34 - 50	>1,3 - 1,5	mäßig toxisch	1,5	10 – 99
IV	11 - 33	>1,1 - 1,33	schwach toxisch		
V	2 - 10	>1,0 - 1,1	kaum toxisch	1,3	100 - 500
VI	≤1	⩽1,0	nicht relevant	1,0	> 500

Im Anhang 11.5 sind für einige ausgewählte Umweltkontaminanten beispielhaft die LOEC-Werte, die mittlere letale Konzentration LC_{50} sowie der SC_{LOEC} aufgeführt (vgl. auch **Mulisch 2003**).

5.5 Übersicht über das Substanz-Charakterisierungs-Systems (SCS)

Bild 5.3 zeigt eine Übersicht des SCS mit den o.b. Stoffcharakteristiken SC_{TOX}, SC_{BIO}, SC_{TOR}, $SC_{LÖS}$, SC_{ADS}, SC_{MOB} sowie SC_{AQU}, SC_{LOEC} und ihren Wertebereichen.

Das Ergebnis der SCS-Stoffbewertung informiert im Gesamtüberblick über die relative Gefährlichkeit einer Umweltchemikalie als prospektive Bewertungsschritte der stoffimmanenten Größen „Toxizität", „biochemische Abbaubarkeit" und „Mobilität" sowie der „Aquatoxizität". Das SCS zeigt auf diesem Weg systematisch die Umweltrelevanz von Chemikalien auf und klärt insbesondere, inwieweit Trinkwasser von Verunreinigungen betroffen sein kann.

Obligatorische Parameter des SCS		**Gefahrenfeststellung**	
Stoffbewertung		Exposition	*Legislative* bzw. gesundheitliche Leitwerte
Stoffcharakteristiken	Wertebereiche	⇨	TrinkwV
SC_{TOX}	1,0 - 4,0		
SC_{BIO}	1,0 - 2,0	⇨	LW
$SC_{TOX} + SC_{BIO} = SC_{TOR}$	2,0 - 6,0		LW_{KE}
$SC_{LÖS}$	1,0 - 2,0		LW_{SK}
SC_{ADS}	1,0 - 2,0	⇨	HSO
SC_{MOB}	2,0 - 4,0		
SC_{AQU} SC_{LOEC}	1,0 - 2,0	⇨	WHG HZK

Legende:

Stoffcharakteristiken SC

TOX = Humantoxizität
TOR = Umwelttoxikologische Relevanz
ADS = Adsorbierbarkeit
MOB = Mobilität
BIO = biochemischer Abbau
LÖS = Wasserlöslichkeit
LOEC = aquatoxikologischer Schwellenwert
AQU = Aquatoxizität

Gefahrenfeststellung

LW = gesundheitlicher Leitwert
LW_{KE} = Expositionszeitabhängiger Leitwert
LW_{SK} = Leitwert für Säuglinge und Kleinkinder bei kurzfristiger Exposition
HSO = hygienisch-sensorische Obergrenze
HZK = höchstzulässige Konzentration (Aquatoxizität)

Gefahrenfeststellung - Beispiele gesetzlicher Vorgaben

TrinkwV = Trinkwasserverordnung
LMBG = Lebensmittel und Bedarfsgegenstände Gesetz
WHG = Wasserhaushaltsgesetz
AbwAbG = Abwasserabgabengesetz

Bild 5.3 Darstellung des Stoff-Charakterisierungs-Systems (SCS)

Die *retrospektive* (nachträgliche) Bewertung oder Feststellung der von einer Umweltchemikalie tatsächlich ausgehenden Gefahren geschieht durch Vergleich

- der Messwerte im Trinkwasser mit humantoxikologisch abgeleiteten, lebenslang gesundheitlich duldbaren Leitwerten (LW) und
- der Messwerte in natürlichen Gewässern mit aquatoxikologisch begründeten, höchstzulässigen Konzentrationen (HZK).

Sobald der Messwert größer ist als eine HZK oder ein LW, wird eine Gefahr im ordnungsrechtlichen Sinn festgestellt und eine Sanierungsentscheidung notwendig (vgl. auch Kapitel 6.3).

6 BEWERTUNGSKOMPLEXTEILE D UND E: GEFAHRENFESTSTELLUNG FÜR SANIERUNGSENTSCHEIDUNGEN

6.1 Feststellung von Risiken bzw. Gefahren für aquatische Organismen

Für den Gewässerschutz hat der Gesetzgeber speziell durch das Wasserhaushaltsgesetz (WHG) und das Abwasserabgabengesetz (AbwAbG) die wesentlichen Voraussetzungen zur Gefahrenfeststellung für aquatische Organismen vorgegeben. Bei weitgehender oder sogar vollständiger Beachtung des Vorsorgeprinzips und Minimierungsgebots sind aquatoxikologisch nur zugelassene Chemikalien der Herkunftsbereiche der Gruppen A, C und G (vgl. Tabelle 5.1) zu tolerieren. Tatsächlich sind allerdings auch Chemikalien aller anderen Herkunftsbereiche zu erwarten.

Für den Fall, dass die Höhe des SC_{AQU} bzw. SC_{LOEC} gemäß Kapitel 5.4 eine aquatoxikologische Relevanz signalisiert, bietet das SCS in diesem Kapitel eine Gefahrenquantifizierung vor und während Sanierungsmaßnahmen an. Dies geschieht in Form einer aquatoxikologisch abgeleiteten **h**öchst**z**ulässigen **K**onzentration (HZK). Bei Einhaltung oder Unterschreitung der HZK sind Schädigungen von Wasserorganismen auszuschließen. Falls zudem die HZK unterhalb des gesundheitlichen Leitwertes LW liegt, enthält dieser umfassende Gewässerschutz auch alle Voraussetzungen zur Sicherung der Trinkwasserversorgung aus gesundheitlicher Sicht (vgl. Kapitel 6.2).

Die HZK wird nach Gleichung 12 berechnet:

$$HZK = \frac{NOEC\ bzw.\ LOEC \cdot \cos\alpha}{EF_1 \cdot EF_2 \cdot EF_3 \cdot EF_4}\ [mg/l] \qquad (Gl.\ 12)$$

Dabei sind:

NOEC höchste Konzentration noch ohne sichtbaren Effekt unter Angabe der Prüfdauer

LOEC niedrigste Konzentration, die eine deutliche Schädigung wie z.B. Notatmung oder Gleichgewichtsstörungen noch erkennen lässt.

α Steilheit der Konzentrations-Wirkungs-Gerade im ^{10}log-System (mit maximal $\cos\alpha = 0{,}3$)

EF_1 Extrapolationsfaktor zur Schätzung des aquatoxikologisch (noch) sicheren NOEC bzw. der Grenzkonzentration aus der tiefsten, bereits unsicheren LOEC. Für diesen Fall gilt $EF_1 = 10$.
Bei Vorliegen einer gemessenen NOEC ist $EF_1 = 1$.

EF_2 Extrapolationsfaktor in Abhängigkeit vom biochemischen Abbau als Maß der aquatoxikologisch bewerteten Gefährlichkeit einer Umweltchemikalie
$EF_2 = SC_{BIO}$

EF_3 Extrapolationsfaktor zur Bewertung der Qualität der dokumentierten Werte
$EF_3 = 1$ bei sicherer und ausreichender Testung
$EF_3 = \sqrt{3}$ bei zwei oder mehr widersprüchlichen bzw. nicht standardgerechten Testungen
$EF_3 = 3$ bei nur einer Datenquelle (Literaturwert) bzw. nur einer Testung

EF_4 $EF_4 = 10$ Extrapolationsfaktor ausschließlich für intensiv genutzte Gewässer, wie z.B. für die Fischzucht, für natürliche Gewässer gilt $EF_4 = 1$

Der Winkel α gibt die Steilheit der Konzentrations-Wirkungs-Gerade im 10log-System an. Ist der Winkel α unbekannt, wird er mit dem „Maximalwert" von ca. 72,5° angegeben, so dass der $\cos \alpha = 0{,}3$.

Bei fehlenden NOEC und LOEC, aber der Kenntnis der LC_{50} kann eine Abschätzung der HZK auf der Basis $LOEC \approx LC_{50} \cdot 0{,}1$ erfolgen. Aufgrund der starken Streuung aller Erfahrungswerte sind gemessene NOEC- und LOEC-Werte einer derart unsicheren Abschätzung in jedem Fall vorzuziehen.

6.2 Feststellung von Risiken bzw. Gefahren für den Menschen

Zur Feststellung und Abwehr von Gefahren aus Belastungen von Umweltkontaminanten für den Menschen hat der Gesetzgeber Grenzwerte bzw. Prüf-, Richt-, Eingreif- und weitere Werte für Stoffe in den Umweltmedien Wasser, Boden und Luft sowie in Lebensmitteln festgesetzt. Diese Werte (z.B. die Grenzwerte der Trinkwasserverordnung, oder die Höchstmengen der Schadstoff-Höchstmengenverordnung) sind regulatorische, aber längst nicht immer nur toxikologisch begründete oder abgeleitete („gesundheitlich duldbare") Höchstkonzentrationen. Sie sollen lediglich - mit Maßnahmen verknüpft - aus den unterschiedlichsten Gründen höhere Expositionen verhindern, die höher sind als dieser definierte regulatorische Wert **(Dieter 1999)**.

Für den Fall, dass die Höhe des SC_{TOR}-Wertes (vgl. Kapitel 5) überhaupt eine Umwelt- bzw. Trinkwasserrelevanz signalisiert, bietet das SCS eine Gefahrenquantifizierung vor und während Sanierungsmaßnahmen in Form

- lebenslang gesundheitlich duldbarer Leitwerte (LW) und von
- Leitwerten für kurzfristige (weniger als lebenslange) Expositionen (LW_{KF}) [38]

an, angegeben in µg/l Trinkwasser.

Unter dem gesundheitlichen Leitwert versteht man die *lebenslang* gesundheitlich duldbare Höchstkonzentration für einen Stoff in Trinkwasser. Er wird für Stoffe mit Wirkungsschwelle aus einem stoffspezifischen, toxikologisch abgeleiteten TDI-Wert (*tolerable daily intake*) errechnet. Der TDI stellt die lebenslang gesundheitlich duldbare, tägliche Körperdosis in mg pro Kilogramm Körpermasse und Tag dar. Bei der Berechnung des gesundheitlichen Leitwertes für lebenslange Exposition (LW) berücksichtigt man (je nach Expositionsschätzung) 10% (bis 50%) des TDI auf 2 Liter Trinkwasser pro Tag und Person von 70 kg Körpermasse (vgl. Gleichung 13 bzw. Tabelle 6.1 Spalte 6):

$$LW = \frac{TDI \cdot 70\,kg}{10 \cdot 2\,l} \qquad \textit{Gl. 13}$$

Die folgenden Extrapolationsfaktoren EF werden zur Ableitung des TDI als Divisior(en) auf den experimentellen oder epidemiologischen NOAEL eines Stoffes mit Wirkungsschwelle angewandt (vgl. Tabelle 6.1 Spalte 5):

EF_a Extrapolationsfaktor zur Abschätzung eines chronischen NOAEL durch Hochrechnung von subchronischer auf chronische Expositionsdauer (auf Basis von Tierversuchen nicht humanrelevant, nur zur Überbrückung von Datenlücken).

EF_b Extrapolationsfaktor zur Abschätzung eines $NOAEL_{TV}$ [39] aus einem experimentellen $LOAEL_{TV}$ [39] (auf Basis von Tierversuchen meist nicht humanrelevant) oder

zur Abschätzung eines $NOAEL_E$[39] aus einem epidemiologisch ermittelten $LOAEL_E$[39] (immer humanrelevant).

EF_c Extrapolationsfaktor zur Überbrückung der zwischenartlichen Varianz zwischen Mensch und Versuchstier (immer humanrelevant).

EF_d Extrapolationsfaktor zur Überbrückung der innerartlichen Varianz beim Menschen, falls der NOAEL nicht schon an besonders empfindlichen Teilpopulationen (auch in Tierversuchen) gemessen wurde (immer humanrelevant).

Die gegenseitig unabhängige Verknüpfung (Multiplikation) der Einzelfaktoren ergibt das Gesamtprodukt gem. Gleichung 14

$$EF_g = EF_a \cdot EF_b \cdot EF_c \cdot EF_d \qquad \textit{(Gl. 14)}$$

Die Substanz gilt als bewertbar, wenn $EF_g \leq 3000$ ist **(Dieter 1995; Konietzka und Dieter 1998)**. Mit Hilfe der vier Extrapolationsfaktoren (EF) wird die Datenbasis sowohl behelfsmäßig ergänzt als auch zwecks Ableitung eines TDI auf den Menschen übertragen ("extrapoliert").

Leitwerte für kurzfristige Exposition sind nicht lebenslang gesundheitlich duldbar. Es handelt sich vielmehr um Grenzkonzentrationen mit "hinreichend wahrscheinlichem Gefahrenbezug", falls die Exposition gegenüber einem LW_{KE} über die ihnen zugeordnete Zeitdauer hinaus anhielte. Falls die ihnen zugeordneten, weniger als lebenslangen Expositionszeiten überschritten würden, wäre eine Gefährdung der menschlichen Gesundheit hinreichend wahrscheinlich bzw. nicht mehr mit hinreichender Sicherheit auszuschließen.

Die Interpolation der kurzfristigen Leitwerte in den Gefahrenbereich hinein erfolgt durch den Interpolationsfaktor IF unter teilweiser Inanspruchnahme derselben Extrapolationsfaktoren (EF, in der Literatur auch Sicherheitsfaktoren SF genannt), die bei der Ableitung des TDI aus der experimentellen oder epidemiologischen Datenbasis zur Anwendung kommen, und zwar in Anlehnung an die im Bodenschutz bereits eingeführte Interpolationsmethode von **Konietzka und Dieter 1998** (vgl. hierzu auch **BMU 1999**).

Der gefahrverknüpfte Interpolationsfaktor IF[40] für die Herleitung eines Gefahrenbezuges aus dem TDI ist bei Stoffen mit Wirkungsschwelle eine Funktion der Vollständigkeit der dem TDI zugrunde gelegten Datenbasis und damit eine Funktion der EF (vgl. Tabelle 6.1).

---

[38] Der gesundheitliche Leitwert (LW) ist identisch mit dem früher so genannten toxikologischen Basiswert (BW)**;** der Leitwert für kurzfristige Exposition (LW_{KE}) ist identisch mit dem früher so genannten Gefahrenwert (GefW, vgl. **Dieter 1996)**

[39] $LOAEL_{TV}$ = lowest observed adverse effect level; niedrigste Dosis bei beobachteter schädlicher Wirkung im Tierversuch.

$LOAEL_E$ = niedrigste Dosis bei beobachteter schädlicher Wirkung für die Allgemeinbevölkerung E (durchschnittlich gesunde Erwachsene).

$LOAEL_e$ = niedrigste Dosis bei beobachteter schädlicher Wirkung für die besonders empfindliche Schutzzielgruppe e.

$NOAEL_{TV}$ = no observed adverse effect level; höchste Dosis ohne schädliche Wirkung im Tierversuch.

$NOAEL_{tv}$ = höchste Dosis ohne schädliche Wirkung im Tierversuch (empfindliche Spezies).

$NOAEL_E$ = höchste Dosis ohne schädliche Wirkung für die Allgemeinbevölkerung (durchschnittlich gesunde Erwachsene).

NOAELe = höchste Dosis ohne schädliche Wirkung für die besonders empfindliche Bevölkerungsgruppe e.

[40] Der Interpolationsfaktor IF entspricht dem gefahrenverknüpfenden Faktor $F_{(Gef)}$ aus **BMU 1999**

Tabelle 6.1 Ableitung der duldbaren Körperdosis und des Gefahrenbezuges für den Menschen über Extrapolationsfaktoren aus der jeweiligen Datenbasis, Herstellung des Gefahrenbezugs mit Hilfe des IF und Beispielrechnung mit $EF_a = 10$, $EF_b = 3$, $EF_c = 10$, $EF_d = 10$ für Expositionen über Trinkwasser

		Extrapolationsfaktor (EF)		duldbare Körperdosis TDI = [NOAEL/LOAEL] : EF_g (=virtueller $NOAEL_e$)	gesundheitlicher Leitwert für lebenslange Exposition	Interpolationsfaktor (IF) für nicht kumulierende Stoffe		IF / EF_g [%]	gefahrverknüpfende Dosis (= virtueller $LOAEL_e$)	Leitwert für kurzfristige Exposition
Expositionsdauer	NOAEL / LOAEL [mg/kg/d]	EF_g	Beispiel EF_g	TDI [mg/kg/d]	LW [mg/l]	$IF = \sqrt{EFgh}$	Beispiel	Beispiel	GD [mg/kg/d]	$LW_{KE} = LW_{10}$ [mg/l]
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
subchronisch	$LOAEL_{TV}$ [a]	$EF_a \cdot EF_b \cdot EF_c \cdot EF_d$	3000	$LOAEL_{TV}$ [a] : $(EF_a \cdot EF_b \cdot EF_c \cdot EF_d)$	0,1 TDI · 70 kg / 2 l	$\sqrt{EF_c} \cdot \sqrt{EF_d}$	$\sqrt{100} = 10$	0,3 %	TDI · IF	0,1 GD · 70 kg / 2 l
subchronisch	$LOAEL_{TV}$ [b]	$EF_a \cdot EF_b \cdot EF_c \cdot EF_d$	3000	$LOAEL_{TV}$ [b] : $(EF_a \cdot EF_b \cdot EF_c \cdot EF_d)$		$\sqrt{EF_b} \cdot \sqrt{EF_c} \cdot \sqrt{EF_d}$	$\sqrt{300} = 17$	0,57 %		
subchronisch	$NOAEL_{TV}$	$EF_a \cdot EF_c \cdot EF_d$	1000	$NOAEL_{TV}$: $(EF_a \cdot EF_c \cdot EF_d)$		$\sqrt{EF_c} \cdot \sqrt{EF_d}$	$\sqrt{100} = 10$	1 %		
subchronisch	$NOAEL_{tv}$	$EF_a \cdot EF_c$	100	$NOAEL_{tv}$: $(EF_a \cdot EF_c)$		$\sqrt{EF_c}$	$\sqrt{10} = 3{,}2$	3,2 %		
chronisch	$LOAEL_{TV}$ [a]	$EF_b \cdot EF_c \cdot EF_d$	300	$LOAEL_{TV}$ [a] : $(EF_b \cdot EF_c \cdot EF_d)$		$\sqrt{EF_c} \cdot \sqrt{EF_d}$	$\sqrt{100} = 10$	3,3 %		
chronisch	$LOAEL_{TV}$ [b]	$EF_b \cdot EF_c \cdot EF_d$	300	$LOAEL_{TV}$ [b] : $(EF_b \cdot EF_c \cdot EF_d)$		$\sqrt{EF_b} \cdot \sqrt{EF_c} \cdot \sqrt{EF_d}$	$\sqrt{300} = 17$	5,7 %		
chronisch	$NOAEL_{TV}$	$EF_c \cdot EF_d$	100	$NOAEL_{TV}$: $(EF_c \cdot EF_d)$		$\sqrt{EF_c} \cdot \sqrt{EF_d}$	$\sqrt{100} = 10$	10 %		
chronisch	$NOAEL_{tv}$	EF_c	10	$NOAEL_{tv}$: EF_c		$\sqrt{EF_c}$	$\sqrt{10} = 3{,}2$	32 %		
subchronisch	$LOAEL_E$	$EF_a \cdot EF_b \cdot EF_d$	300	$LOAEL_E$: $(EF_a \cdot EF_b \cdot EF_d)$		$\sqrt{EF_b} \cdot \sqrt{EF_d}$	$\sqrt{30} = 5{,}5$	1,8 %		
subchronisch	$NOAEL_E$	$EF_a \cdot EF_d$	100	$NOAEL_E$: $(EF_a \cdot EF_d)$		$\sqrt{EF_d}$	$\sqrt{10} = 3{,}2$	3,2 %		
subchronisch	$LOAEL_e$	$EF_a \cdot EF_b$	30	$LOAEL_e$: $(EF_a \cdot EF_b)$		EF_b	3	10 %		
subchronisch	$NOAEL_e$	EF_a	10	$NOAEL_e$: EF_a		EF_b	3	30 %		
chronisch	$LOAEL_E$	$EF_b \cdot EF_d$	30	$LOAEL_E$: $(EF_b \cdot EF_d)$		$\sqrt{EF_b} \cdot \sqrt{EF_d}$	$\sqrt{30} = 5{,}5$	18 %		
chronisch	$NOAEL_E$	EF_d	10	$NOAEL_E$: EF_d		$\sqrt{EF_d}$	$\sqrt{10} = 3{,}2$	32 %		
chronisch	$LOAEL_e$	EF_b	3	$LOAEL_e$: EF_b		EF_b	3	100 %		
chronisch	$NOAEL_e$	-	1	$NOAEL_e$		EF_b	3	300 %		

[a] Datenbasis $LOAEL_{TV}$ ohne Kenntnisse über die Steilheit der Dosis-Wirkungskurven in Versuchstier und Mensch
[b] Datenbasis $LOAEL_{TV}$ bei nachweislich gleicher Steilheit der Dosis-Wirkungskurven in Versuchstier und Mensch

$LOAEL_{TV}$ = lowest observed adverse effect level; niedrigste Dosis mit beobachteter schädlicher Wirkung im Tierversuch
$LOAEL_E$ = niedrigste Dosis mit beobachteter schädlicher Wirkung für die Allgemeinbevölkerung (gesunde Erwachsene)
$LOAEL_e$ = niedrigste Dosis mit beobachteter schädlicher Wirkung für die Allgemeinbevölkerung einschließlich der empfindlichsten Bevölkerungsgruppe
$NOAEL_{TV}$ = no observed adverse effect level; höchste Dosis ohne beobachtete schädliche Wirkung im Tierversuch.
$NOAEL_{tv}$ = höchste Dosis ohne beobachtete schädliche Wirkung im Tierversuch (empfindliche Spezies)
$NOAEL_E$ = höchste Dosis ohne beobachtete schädliche Wirkung für die Allgemeinbevölkerung (gesunde Erwachsene)
$NOAEL_e$ = höchste Dosis ohne beobachtete schädliche Wirkung für die Allgemeinbevölkerung einschließlich der empfindlichsten Bevölkerungsgruppe
$F_{(Gef)}$ = gefahrverknüpfender Faktor
GD = gefahrenbezogene Dosis aus dem gesundheitlich sicheren TDI-Wert und dem gefahrverknüpfenden Faktor $F_{(Gef)}$ ($GefD = TDI \cdot F_{(Gef)}$)
TDI = lebenslang gesundheitlich tolerierbare Dosis [mg/kg KG/Tag]
LW = Leitwert, lebenslang gesundheitlich unschädliche Konzentration, berechnet als 10% des TDI in 2 l TW pro Tag und Person
LW_{10} = Wert mit hinreichender Wahrscheinlichkeit einer Gefährdung für die menschliche Gesundheit über den Expositionspfad Trinkwasser
EFgh = humanrelevanter Gesamtextrapolationsfaktor (vgl. Text)

Als Bemessungsgrundlage zur Herstellung des Gefahrenbezugs über die „gefahrverknüpfte Dosis[41]“ gemäß Gleichung 15

$$GD = TDI \cdot IF \qquad (Gl.\ 15)$$

mit Hilfe des IF kommen allerdings nur diejenigen EF in Frage, die das „System Mensch“ entweder direkt quantifizieren oder es auf definierte Weise zu einem $NOAEL_{TV}$ in Beziehung setzen. Das Produkt dieser humanrelevanten EF heißt deshalb nicht EF_g, sondern EF_{gh}. Es besteht i.d.R. aus den Teilfaktoren EF_c und EF_d. EF_a und EF_b sind auf der Basis von Tierversuchen dagegen nicht bzw. meist nicht humanrelevant.

Auf der Datenbasis von Tierversuchen (mit den Versuchsergebnissen eines $LOAEL_{TV}$ und/oder eines $NOAEL_{TV}$) gilt Gleichung 16

$$IF = \sqrt{EF_{gh}} \qquad (Gl.\ 16)$$

bzw. in der Regel $IF = \sqrt{EF_c \cdot EF_d}$ [42]. Die Benutzung der quadratischen Wurzel aus EF_{gh} zur Quantifizierung der Interpolation stellt sicher, dass die interpolierte gefahrverknüpfte Dosis GD nach Höhe und Art ihrer Ableitung höchstens dem $LOAEL_e$ entspricht. Sie liegt somit zwischen dem NOAEL (experimenteller oder epidemiologischer *no observed adverse effect level*) und dem NAEL[43] (*no adverse effect level* im Menschen). In humantoxikologischer Hinsicht ist - wie auch bereits von **Koniezka und Dieter 1998** für den Pfad Boden => Mensch dargelegt - bei Überschreitung der GD die juristisch geforderte Bedingung der „hinreichenden Wahrscheinlichkeit einer Gefährdung des Menschen“ definiert.

Die der GD entsprechende, anteilige Konzentration des Stoffes im Trinkwasser ist der stoff- und belastungsdauerspezifische LW_{KE}.

Die LW_{KE} werden gem. Gleichung 17 mit Hilfe des IF aus dem LW errechnet,

$$LW_{KE} = IF \cdot LW \qquad (Gl.\ 17)$$

der seinerseits mit dem TDI korrespondiert. Zu diesem Zweck wird zunächst die duldbare Körperdosis TDI, wie sie sich aus dem NOAEL mit Hilfe des toxikologisch begründeten Gesamt-Extrapolationsfaktors EF_g[44] ergibt, mit dem IF multipliziert.

Im Zusammenhang mit Trinkwasser wird - in ansonsten im Prinzip analoger Vorgehensweise wie bei der Bewertung von Altlasten im Bodenschutz – hier weiterführend zwischen

- nicht oder schwach kumulierenden Stoffen mit Eliminations-Halbwertszeiten von $t_{1/2} \leq 3$ Jahren (Stoffgruppe A) und
- stark kumulierenden Stoffen mit $t_{1/2} > 3$ Jahren (Stoffgruppe B)

unterschieden. Außerdem kann zwischen unterschiedlich langen Sanierungszeiträumen differenziert werden, innerhalb derer die Trinkwasserqualität den regulatorisch geforderten

[41] GD heißt deshalb gefahrverknüpft, weil eine Schutzzielgruppe, die in Höhe der GD ... exponiert ist, mit hinreichender Wahrscheinlichkeit einer Gesundheitsgefährdung ausgesetzt wäre **(Konietzka 1998)**

[42] Nur wenn auf der Basis von Tierversuchsdaten für Mensch und Versuchtier bezüglich des schädlichen Effektes eine gleich oder ähnlich steile Dosis-Wirkungsbeziehung vorausgesetzt werden kann oder aufgrund von epidemiologischen Daten, ist auch EF_b humanrelevant und kommt als Beitrag zur Bemessungsgrundlage von IF zusätzlich in Frage.

[43] Der NAEL ist die nicht beobachtete, aber als gegeben unterstellte, tatsächliche Wirkungsschwelle des Stoffes im Menschen. Der NAEL ist in regulatorisch-toxikologischer, nicht unbedingt jedoch in wissenschaftlicher Hinsicht mit dem TDI identisch.

[44] Der Gesamt-Extrapolationsfaktor EF_g hieß früher Gesamt-Extrapolationsfaktor SF_g, vgl. **BMU 1999**

Werten wieder entsprechen soll. Der Index des kurzfristigen Leitwertes LW_{KE} zeigt dabei die maximale Dauer bis zum Abschluss der Sanierung:

> 1,5 Jahre: Der $LW_{1,5}$ ist die gesundheitlich duldbare Höchstkonzentration während Sanierungszeiträumen von wenigen Monaten von bis zu 1,5 Jahren (Der $LW_{1,5}$ entspricht der 3 Jahresfrist gem. § 9 der TrinkwV und wird daher auch als LW_3 bezeichnet). Er beträgt je nach toxikologischer Charakteristik des Stoffes ca. das 10-fache des LW (vgl. Tabelle 6.2).
>
> 10 Jahre: Der LW_{10} ist die gesundheitlich duldbare Höchstkonzentration während Sanierungszeiträumen von bis zu 10 Jahren (entsprechend der maximalen 9 Jahresfrist (3 mal 3) gem. § 9 der TrinkwV). Er beträgt das 3- bis 20-fache des LW (vgl. Tabelle 6.2).
>
> 70 Jahre: Der LW_{70} ist die gesundheitlich duldbare Höchstkonzentration während Sanierungszeiträumen von bis zu 70 Jahren. Er ist für stark kumulierende Stoffe identisch mit dem LW oder bei schwach bis nicht kumulierenden Stoffen in der Regel 3-mal bzw. in Einzelfällen (nicht kumulierende Stoffe) 10-mal höher als der LW (vgl. Tabelle 6.2).

Tabelle 6.2 Berechnung von Interpolationsfaktoren in Abhängigkeit der Expositionsdauer und der Kumulationstendenz von Umweltchemikalien (vgl. auch **Dieter und Henseling 2003**)

Expositionsdauer / Kumulationsgruppe	**kurz (1,5 Jahre)**	**mittel (10 Jahre)**	**lang (70 Jahre)**
AI nicht kumulierend ($t_{1/2}$ < 1 Jahr)	$IF_{AI3} = EF_{gh}$ max. 10	$IF_{AI10} = EF_{gh}$ max. 10	$IF_{AI70} = \sqrt{EF_{gh}}$ max. 10
AII schwach kumulierend ($t_{1/2} \leq 3$ Jahre)	$IF_{AII3} = EF_{gh}$ max. 10	$IF_{AII10} = \sqrt{EF_{gh}}$ max. 3	$IF_{AII70} = \sqrt{EF_{gh}}$ max. 3
B stark kumulierend ($t_{1/2}$ > 3 Jahre)	$IF_{B3} = 2\sqrt{EF_{gh}}$ max. 20	$IF_{B10} = 2\sqrt{EF_{gh}}$ max. 20	$IF_{B70} = 1$
C gentoxische Stoffe[45]	$IF_{C3} = 17$	$IF_{C10} = 6$	$IF_{C70} = 1$

Für Sanierungszeiträume von 10 Jahren und bei schwach kumulierenden Stoffen (Kumulationsgruppe A bei einer Eliminations-Halbwertszeit $t_{1/2} \leq 3$ Jahre) entspricht der IF_A gem. Gleichung 18 i.d.R. dem IF der Gleichung 16 mit

$$IF_A = \sqrt{EF_{gh}} \qquad (Gl.\ 18)$$

Bei stark kumulierenden Stoffen (Eliminations-Halbwertszeit $t_{1/2}$ > 3 Jahre) gem. Gleichung 19

$$IF_B = 2 \cdot \sqrt{EF_{gh}}\ . \qquad (Gl.\ 19)$$

wird der zusätzliche Multiplikator 2 eingeführt. Er trägt den toxikokinetischen Gegebenheiten bei akkumulierenden Stoffen während deutlich kürzerer als lebenslanger Expositionszeiten Rechnung **(Dieter 2002)**.[46] Für stark kumulierende Stoffe kommen also während mehr als 10 Jahren Dauer Überschreitungen des gesundheitlichen Leitwertes nicht in Betracht, denn der Eintritt einer Gesundheitsgefährdung erschiene dann wegen der starken Kumulationsneigung

[45] ohne Wirkungsschwelle bezogen auf ein Hintergrundrisiko $HR_{E70} = 10^{-6}$ bzw. $HR_{e70} = 5{,}86 \cdot 10^{-6}$

[46] Bei (stark) kumulierenden Stoffen stellt sich das Gleichgewicht zwischen Aufnahme und Ausscheidung und damit auch die gesundheitlich relevante innere Schadstoffkonzentration um mindestens den Faktor 2 langsamer ein, als bei den nicht oder nur schwach kumulierenden (Dieter (in Vorbereitung)).

schon "wahrscheinlich". Für nicht und schwach kumulierende Stoffe dagegen wären Überschreitungen des LW bis zur Höhe des LW_{10} von mehr als 10 Jahren Dauer denkbar, allerdings nur unter Duldung des "hinreichend wahrscheinlichen" Eintritts einer gesundheitlichen Gefahr während der Überschreitungsdauer.

Exponierte gegenüber gentoxischen Stoffen ohne Wirkungsschwelle (Stoffgruppe C) sind einem stoffspezifischen Hintergrundrisiko (HR) ausgesetzt. Die gesellschaftliche Akzeptanz dieser Hintergrundrisiken liegt i.d.R. rechnerisch bei 1 : 1.000.000 (= 10^{-6}), d.h. eine (karzinogene, immuntoxische, o.a.) irreversible Erkrankung zu einem nicht vorhersagbaren Zeitpunkt innerhalb einer Lebenserwartung von 70 Jahren bezogen auf 1.000.000 betroffene Einwohner. Wie das Hintergrundrisiko HR einem gesundheitlichen Leitwert über eine Expositionszeit von 70 Jahren projiziert wird (LW_{70})[47], wird der Leitwert für kurzfristige Risiken (LW_{KR}) auf das entsprechende gefahrbezogene Risiko (GR) bezogen. Es gilt deshalb Gleichung 20

$$LW_{KR} = IF \cdot LW_{70} \qquad (Gl.\ 20)$$

Die den Expositionszeiträumen von 3 und 10 Jahren entsprechenden Interpolationsfaktoren IF_3 und IF_{10} für Stoffe ohne Wirkungsschwelle sind der Höhe nach so eingestellt, dass das rechnerische Zusatzrisiko ZR während einer Überschreitungsdauer zwar unterschiedlich hoch ist, das gem. Gleichung 21

$$GR = ZR + HR \qquad (Gl.\ 21)$$

aber unter Berücksichtigung der besonderen Empfindlichkeit der ersten 10 Lebensjahre[48] und in Erwartung eines durchschnittlich 70 Jahre dauernden Lebens immer auf $GR \leq 5 \cdot HR$ beschränkt bleibt. Mit den stoffinvarianten Interpolationsfaktoren [49] von $IF_{C3} = 17$ bzw. $IF_{C10} = 6$, wie sie hier in Anlehnung an die Empfehlungen der Trinkwasserkommission zur Verfahrensweise bei gentoxischen Stoffen ohne Wirkungsschwelle für bis zu 3 bzw. 10 Jahre Überschreitungsdauer eines LW_{70} übernommen werden, wird dieser Tatsache Rechnung getragen. Der IF_C variiert also, anders als IF_A und IF_B, nicht in Abhängigkeit von Stoff und Expositionsdauer, sondern allein in Abhängigkeit von der Expositionsdauer **(Dieter und Henseling 2003)**.

Das jeweils während insgesamt 70 Jahren Lebenszeit kumulierende gefahrbezogene Risiko GR, wegen 3- bis 10-jähriger Überschreitung eines LW_{70} an Krebs zu erkranken, beträgt $GR = 29{,}3 \cdot 10^{-6}$ bei Anwendung dieser IF_C in Abhängigkeit von der erwarteten Überschreitungsdauer. Dies ist das 5-fache des HR_{e70} (vgl. Fußnote 51). Das der Gefahrensituation zugeordnete "Zusatzrisiko" steht damit im gleichen Verhältnis zum maßgeblichen HR wie gem. **Konietzka und Dieter 1998** bzw. **BMU 1999** im Bodenschutzrecht.

---

[47] lebenslang gesundheitlich "akzeptable" Leitwerte, die einem Hintergrundrisiko HR_{E70} dieser Höhe für durchschnittlich empfindliche Erwachsene (E) entsprechen, heißen in dieser Arbeit ebenfalls LW_{70}

[48] Bei der Ableitung "akzeptabler" Leitwerte für diese Stoffe soll auch berücksichtigt werden, dass während der ersten 10 Lebensjahre die Empfindlichkeit (e) gegenüber gentoxischen Karzinogenen etwa 10mal höher ist, als während der 60 restlichen **(Schneider 2001)**. Das HR beim LW_{70} erhöht sich deshalb unter Berücksichtigung der Standards zur Expositionsabschätzung des Bund-/Länderausschusses für Umwelthygiene **(BAGS 1995)** rechnerisch von $HR_{E70} = 1 \cdot 10^{-6}$ auf maximal $HR_{e70} = 5{,}86 \cdot 10^{-6}$. Das Rechenergebnis HR_{e70} ist die Summe aus dem 10-fachen Hintergrundrisiko HR_{e10} während der ersten 10 Jahre von insgesamt 70 Jahren ($HR_{e10} = 5{,}0 \cdot 10^{-6}$ bei 1 l/d und 10 kgKM) und dem einfachen Hintergrundrisiko HR_{E70} während der verbleibenden 60 Jahre ($HR_{E60} = 0{,}86 \cdot 10^{-6}$ bei 2 l/d und 70 kgKM)

[49] IF_k = Interpolationsfaktor für kanzerogene Stoffe

6.3 Gesundheitlich motiviertes Risiko- bzw. Gefahrenmanagement

Managementaufgaben haben im Prinzip immer einen vorsorgenden bzw. *prospektiven* Charakter. Der Aufbau eines Managementsystems beinhaltet die Schaffung von Strukturen in der Festlegung von Verantwortlichkeiten und Verfahrensabläufen, z.B. in Form von Verhaltensmustern zur Steigerung der Effektivität bzw. auch um auf Notfallsituationen rasch, fachgerecht und gezielt reagieren zu können (vgl. z.B. HACCP-Konzept, Umwelt- und Qualitätsmanagement gem. DIN EN ISO 14001 bzw. DIN EN ISO 9001 bzw. das ökologische Management- und Audit Schema der EU für das Umweltmanagement (*ecologic management and audit scheme* EMAS)). In diesem Zusammenhang hat das prospektive SCS-Bewertungsverfahren seinen Platz in entsprechenden Managementstrukturen z.B. in Anweisungen zur Qualitätssicherung des Trinkwassers oder bei der Festlegung von sog. kritischen Lenkungs-, bzw. Eingriffspunkten (*critical control points*) im HACCP-Konzept.

Die nachsorgende bzw. *retrospektive* Bewertung oder Feststellung der von einer Umweltkontaminanten möglicherweise ausgehenden Gefährdung geschieht durch Vergleich von Messwert zur regulatorisch festgelegten Höchstkonzentration in Gewässern bzw. zum duldbaren Leitwert (LW).

Die Art des gesundheitlich motivierten Risikomanagements ergibt sich daraus, ob der Messwert für einen Stoff unter oder über seinem Leitwert LW (bzw. LW_{70}) oder gar über seinem LW_{KE} (bzw. LW_{KR}) liegt. Ein Messwert < $LW_{A,B}$ (LW_{70}) liegt im Vorsorgebereich; ein Messwert im Bereich zwischen $LW_{A,B}$ und LW_{KE} (bzw. LW_{70} und LW_{KR}) liegt im Besorgnisbereich. Falls der Messwert gleich dem $LW_{KE} = LW_{A,B} \cdot IF_{A,B}$ bzw. dem $LW_{KR} = LW_{70} \cdot IF_{3C,10C}$ ist, so bildet er darüber hinaus mit hinreichender Wahrscheinlichkeit den per Expositionsschätzung vereinbarten Anteil am LOAEL bzw. das vereinbarte, "gefahrbezogene" Vielfache des Hintergrundrisikos der Schutzzielgruppe ab **(Konietzka und Dieter 1998)**. Für Zwecke des nachsorgenden Risikomanagements stellt also ein Messwert = $LW_{KE} = LW_{A,B} \cdot IF_{A,B}$ bzw. $MW = LW_{KR} = LW_{70} \cdot IF_{3C,10C}$ die stoffspezifische Untergrenze des Gefahren- und die Obergrenze des Besorgnisbereichs dar **(Dieter 1999; Konietzka und Dieter 1998; BMU 1999)**.

Die auch nur zeitweise Überschreitung eines LW_{KE} bzw. LW_{KR} ist vom Gesetzgeber nicht vorgesehen - es sei denn, die fallbezogene Prüfung hätte intolerable (inakzeptable) gesundheitliche Risiken mit praktischer Gewissheit ausgeschlossen oder sie gegen andere, noch größere Risiken abgewogen und erstere für geringer befunden. In jedem Fall muss die Überschreitung eines LW_{KE} bzw. LW_{KR} während der ihm zugeordneten Expositionsdauer angemessene Maßnahmen zur Gefahrenabwehr und Expositionsminderung auslösen. Im übrigen wird auf die Definition des Interpolationsfaktors (gefahrenverknüpfenden Faktors) im Bodenschutzrecht verwiesen **(BMU 1999)**.

DRITTER TEIL: Ergebnisse der Bewertung und Diskussion

7 UNTERSUCHUNGSERGEBNISSE ZUR GEFAHRENFESTSTELLUNG VON MILITÄRISCHEN ALTLASTEN AUF DIE TRINKWASSERVERSORGUNG IN DEN NEUEN BUNDESLÄNDERN

In der Absicht, eine umfassende Aussage zu Auswirkungen militärischer Altlasten auf die Trinkwasserversorgung in den neuen Ländern zu erhalten, standen die Recherchen im Umfeld von ehemaligen WGT-Liegenschaften im Mittelpunkt der Bewertungen für gesundheitliche Risiken durch Trinkwasserkontamination **(Mulisch 1997; Mulisch 1999)**. Ergänzend wurden die ehemaligen NVA-Flächen im Freistaat Sachsen in diese Untersuchungen einbezogen **(Mulisch 1998)**.

7.1 Die Westgruppe der Truppen (WGT) der Sowjetunion bzw. der Gemeinschaft Unabhängiger Staaten (GUS)

7.1.1 Bestandsaufnahme

Basis der Bestandaufnahme sind die WGT-Projektberichte der IABG mbH Ottobrunn, die als Projektkoordinator für BMU/UBA die Altlast-Verdachtsflächen auf den Liegenschaften der Westgruppe der Truppen (WGT) ermittelte. Darüber hinaus wurden ergänzende Angaben aus den Ländern und eigene Recherchen in die Datenerfassung aufgenommen. Das WGT-Projektes **(BMU 1995)** stellte insgesamt 33.750 Altlastverdachtsflächen (ALVF)fest, von denen 32% (11.079 ALVF) als grundwassergefährdend eingestuft wurden. Von diesen lagen 53,8% (5.960 ALVF) innerhalb von Trinkwasserschutzgebieten.

7.1.2 Bewertung

Die Altlastverdachtsflächen (ALVF) sind auf 140 Truppenübungsplätzen (TÜP), 406 Garnisonen, 80 Flugplätzen, 147 Lagern und Bunkern sowie 42 Großtanklagern erfasst und dokumentiert worden. Diese umweltrelevanten ALVF bilden eine kontaminierte Gesamtfläche von ca. 5.700 ha. Schwerpunkte der Umweltverschmutzung sind die Nutzungsbereiche

- Tanklager, Tankstellen, Flugplätze, Wasch- und Wartungsrampen,
- Munitions- und Waffenlager, Schießanlagen, Spreng- und Brandplätze,
- Vergrabungen und geschobene Flächen,
- defekte Kanalisationen und Kläranlagen sowie
- ungeordnete Müllablagerungen und Schrottplätze.

Die genannten Liegenschaften waren jahrzehntelang von der Öffentlichkeit abgeschirmt. Aktivitäten, Stoffe und viele Begleitfaktoren, wie z.B. Schadstoffpotential und Einwirkdauer, waren unbekannt. Die Bewertung des jeweiligen Gefährdungspotentials für Trinkwasserressourcen war dadurch erheblich erschwert, dass präzise Stoffaussagen meist fehlen und in den Erkundungsberichten z.T. nur Oberbegriffe für Abfälle bzw. Altlasten - die genaue stoffliche Zusammensetzung jedoch nicht - benannt werden. Hinzu kommt, dass bei den Begehungen und der Festlegung von ALVF durch beauftragte Ingenieurbüros mancherorts altlastenrelevante Kontaminanten, wie z.B. chlorierte Kohlenwasserstoffe (CKW) und Kampfmittel, unentdeckt blieben. Dieses Manko konnte nur durch extensive eigene Recherchen sowie Ergebnisse von Untersuchungen der Bundeswehr bzw. der Oberfinanzdirektionen ausgefüllt werden. Sie

enthielten Analysen aus Altlastverdachtsflächen, von Bodenproben, von Beprobungen des Grundwassers und von Roh- und Trinkwasser aus Wasserwerken. So ließ sich aus den einzelnen militärischen Nutzungsbereichen unter Beachtung von Zusatzinformationen (z.B. Anzahl der Altlastverdachtsflächen und Beginn der Einwirkzeit) auf Verdachts- und Prioritätskontaminanten schließen (vgl. hierzu Anhang 11.3).

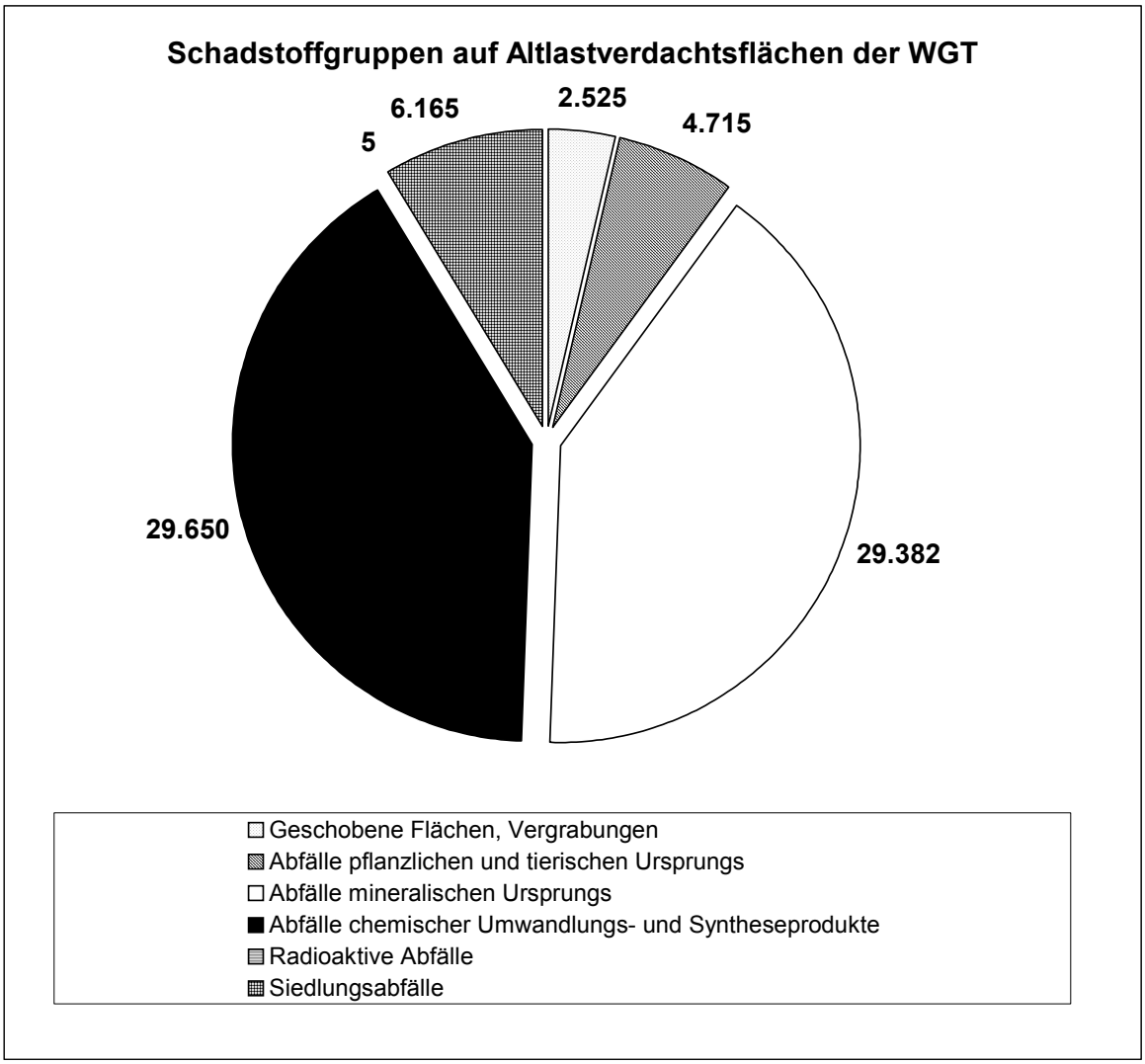


Bild 7.1 Schadstoffgruppen auf Altlastverdachtsflächen der WGT-Liegenschaften

Die Übersicht in Bild 7.1 zeigt die festgestellten Stoffe auf den Altlastverdachtsflächen entsprechend den im WGT-Altlastprogramm definierten Oberbegriffen: Geschobene Flächen, Vergrabungen, Abfälle mineralischen Ursprungs, Radioaktive Abfälle, Abfälle pflanzlichen und tierischen Ursprungs, Abfälle chemischer Umwandlungs- und Syntheseprodukte sowie Siedlungsabfälle.

Ohne Bedeutung im Sinne der Zielstellung sind die registrierten 29.382 ALVF mit Abfällen mineralischen Ursprungs. Nur bedingt grund- und trinkwasserrelevant sind die 4.715 ALVF mit Abfällen pflanzlichen und tierischen Ursprungs sowie die 6.165 mit Siedlungsabfällen. Als ebenso unbedeutend haben sich aufgrund von Analysen die wenigen festgestellten Flächen „radioaktiver Abfälle“ für die Trinkwasserversorgung herausgestellt.

Dagegen werden die „wilden Ablagerungen“ als kritisch bewertet. Insgesamt etwa 465.000 Tonnen Stoffe aller Art inklusive Munitionsreste auf „geschobenen Flächen und Vergrabungen“ wurden auf ihnen illegal entsorgt. Große Unsicherheiten ergaben sich vor allem aus Vergrabungen in Trinkwasserschutzgebieten, da spezifische Hinweise auf deren Zusammensetzung meist fehlten und nach dem Abzug der WGT nicht mehr zu erfragen waren.

Die Schadstoffe, welche unter dem Oberbegriff „Abfälle chemischer Umwandlungs- und Syntheseprodukte zusammengefasst sind, stellen neben den Munitionsresten die Hauptgruppe der die Trinkwasserversorgung gefährdenden Stoffe dar. Die hier bezeichneten Stoffe oder Stoffgruppen sind in Tabelle 7.1 sowie in Bild 7.2 und in Bild 7.3 über die umweltrelevanten Mengen in Tonnen (t) aufgeschlüsselt.

Tabelle 7.1 Schadstoffgruppen auf ALVF und deren relative Anteile auf WGT-Flächen

Schlüssel Nr.	Bezeichnung	Anteil ALVF [%]	geschätzte relative Masse [%]
5	Abfälle chemischer Umwandlungs- und Syntheseprodukte	<1%	1%
5.1	Oxide, Hydroxyde, Salze	2%	5%
5.2	Säuren, Laugen, Konzentrate	2%	<1%
5.3	Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmittel (PBSM) und pharmazeutische Artikel	1%	1%
5.4	Mineralölprodukte	51%	71%
5.5	organische Lösemittel, Farben, Lacke, Klebstoffe, Kitte, Harze	11%	1%
5.7	Kunststoff- und Gummiabfälle	19%	11%
5.8	Textilabfälle	4%	<1%
5.9	Andere Abfälle chemischer Produktion	10%	10%

Die Schadstoffgruppen 5.7 und 5.8 sind als Gefahrstoffe für die Trinkwasserversorgung von geringer Bedeutung. Relevant ist insbesondere die Gruppe 5.4 „Mineralölprodukte“, weiterhin die Gruppe 5.9 „Andere Abfälle chemischer Produktion“ sowie die Gruppe 5.5 „Organische Lösemittel, Farben, Lacke, Klebstoffe, Kitte, Harze“, in welcher für 148 ALVF auch Kontaminationen mit halogenierten Lösemitteln aufgeführt sind. Trotz der insgesamt sehr gering geschätzten Schadstoffmengen von <1% der Gesamtbelastungen, ist für chlorierte Kohlenwasserstoffe (CKW) ein hohes Kontaminationspotential für Rohwässer anzusetzen[50]. Dies gilt auch für Vergrabungen aller Art, da hier u.U. Stoffe aus Sondermüll und Munition in den Untergrund freigesetzt werden.

Unter dem Begriff „Andere Abfälle chemischer Produktion“ werden Spezialchemikalien, vor allem militärische Kampfmittel, zusammengefasst. Dies betrifft sowohl Explosivstoffe, als auch

[50] Die Gruppe der halogenierten Lösemittel wurde - mit entsprechenden Spezifizierungen auf die Einzelsubstanzen - in den WGT-Projektberichten nur bei 21 ALVF aufgeführt (1,2-Dichlorbenzol – 7 ALVF, Chlorbenzole – 1 ALVF, Dichlormethan – 2 ALVF, Tetrachlorethen – 1 ALVF, Tetrachlormethan – 2 ALVF, Trichlorethen 8 ALVF). Diese für die Trinkwasserversorgung mitunter sehr problematische Gruppe der chlorierten Kohlenwasserstoffe (CKW) erscheint jedoch, gemessen an den Problemen, wie sie sich heute verschiedentlich in der Wasserwerkspraxis zeigen, insgesamt in den WGT-Projektberichten unterrepräsentiert.

chemische Kampfstoffe (vgl. Kapitel 11.1 Anhang). Chemische Kampfstoffe kommen jedoch nur in wenigen Fällen als Verdachtskontaminanten in Frage.

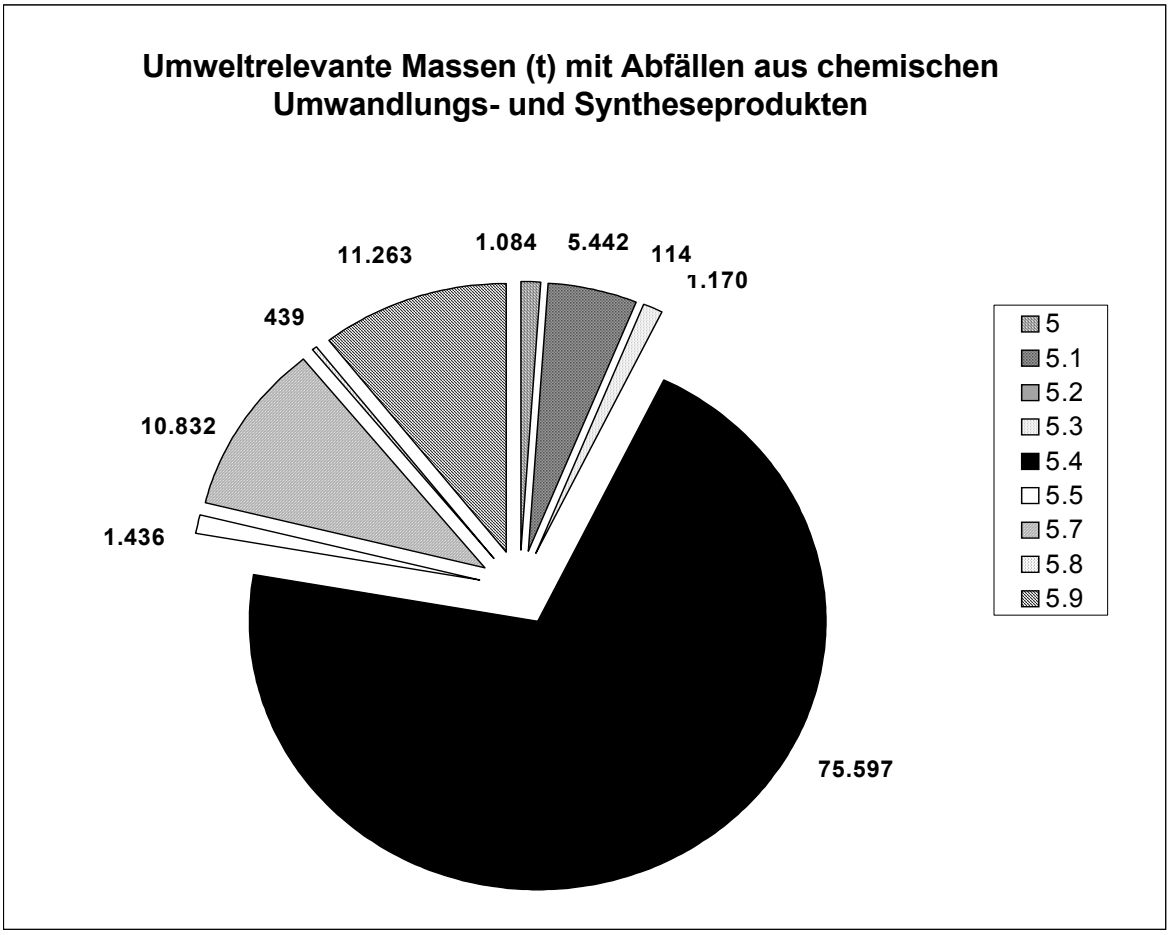


Bild 7.2 Geschätzte umweltrelevante Massen von Altlaststoffen aus Abfällen chemischer Umwandlungs- und Syntheseprodukte (Schlüssel-Nr. 5) auf ALVF der WGT in Tonnen (t)

Die sehr starke Gruppe 5.4 der Mineralölkohlenwasserstoffe (MKW) umfasst quantitativ diejenigen dominierenden Altlaststoffe, welche erhebliche trinkwasserhygienische Probleme bereiten. Hierzu gehören die Mineralölprodukte Diesel, Benzin, Kerosin und andere Treibstoffe, aber auch Altöle und PCB-Erzeugnisse sowie Emulsionen und Schlämme aus Mineralölprodukten.

Die Ergebnisse zeigen, dass von ca. jeder dritten Liegenschaft bzw. Teilliegenschaft ein Gefährdungspotential für die Trinkwasserversorgung im Umfeld dieser Liegenschaften ausgeht (vgl. GS IV bis VI in Tabelle 7.2).

Insgesamt konnte für 11.079 ALVF auf WGT-Liegenschaften eine Gefährdung für Grundwasser festgestellt werden, von denen über 50% innerhalb von TWSZ der öffentlichen Wasserversorgung liegen.

Dabei wurden vorrangig

- Treibstoffe für Panzer, Last- und Personenkraftwagen,
- Flugzeug- und Raketentreibstoffe,
- Hydraulik-, Getriebe-, Schmier- und Konservierungsstoffe sowie Altöle aller Art,

- Trichlorethen und Tetrachlormethan als Lösemittel für Panzer-, Motoren- und Uniformwäsche,
- Kampfmittel z.B. Explosivstoffe wie 2,4,6-Trinitrotoluol u.a.,
- Mineralsäuren als Beizmittel,
- Lacke und Farben,
- Lösemittel für Lacke und Farben,
- Glykol als Gefrierschutzmittel,
- Polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe und Dioxine aus Verbrennungsprozessen (auch im Zuge der Räumung der Liegenschaften)

als trinkwasserrelevante Verdachtskontaminanten gefunden. Angaben über in den Untergrund eingebrachte Schadstoffmengen und deren Einwirkdauern beruhen im wesentlichen auf Schätzungen oder wurden (unter Nutzung von SISIM[51]) durch Simulationen ermittelt.

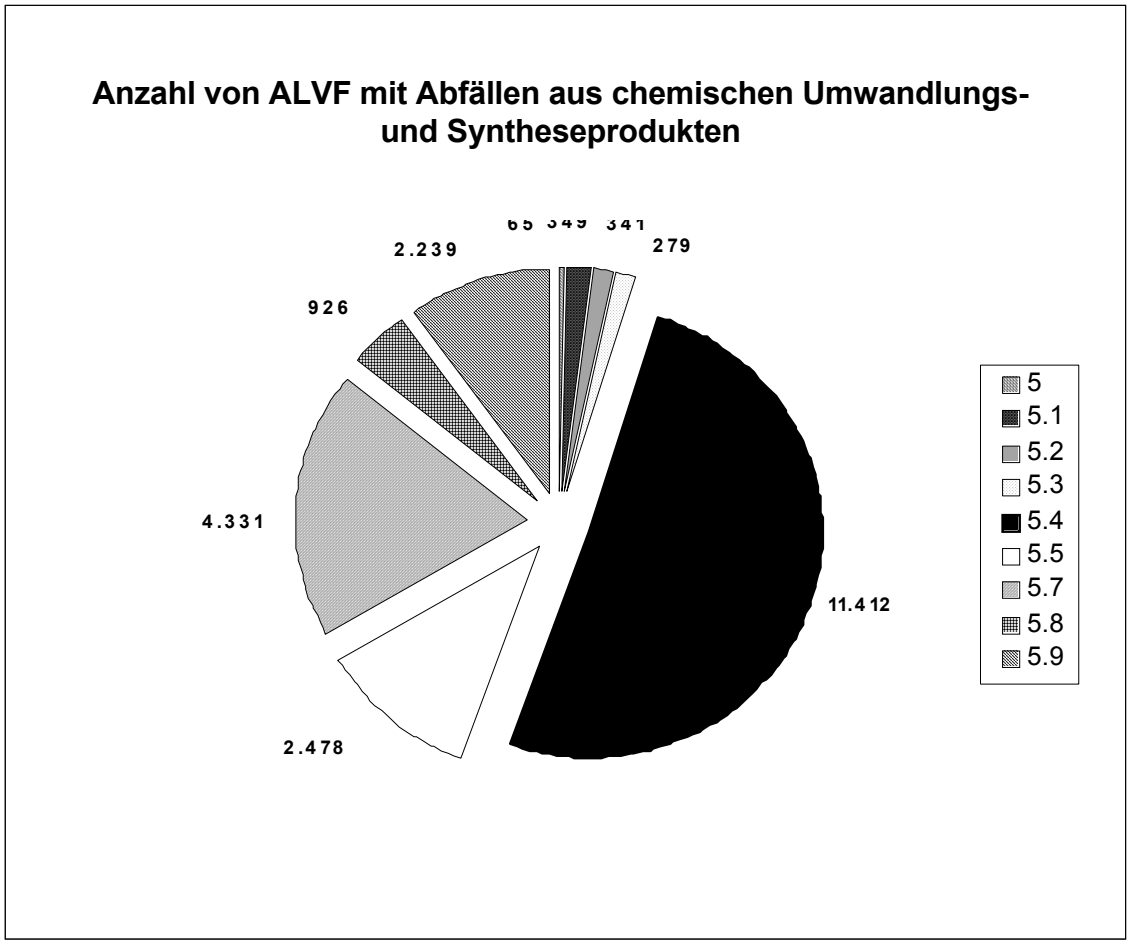


Bild 7.3 Anzahl der Altlastverdachtsflächen (ALVF) mit Abfällen aus chemischen Umwandlungs- und Syntheseprodukten (Schlüssel-Nr. 5) auf Liegenschaften der WGT

Ein Kontaminationspotential durch chemische Kampfstoffe, wie es von Rüstungsaltlasten ausgeht, konnte im Rahmen der Untersuchungen nicht nachgewiesen worden.

[51] SISIM Sickerwassersimulation, Umwelt-Mensch-Schadstoff - System. EDV-Modul. Herausgeber Umweltbundesamt, FG Altlasten, BMU / UBA 1999

Tabelle 7.2 Ergebnisse der Bewertung WGT-Liegenschaften in Gefährdungsstufen (GS_{A-B} I – VI) für die Trinkwasserversorgung aufgeschlüsselt nach den Ländern Berlin (BE), Brandenburg (BB), Mecklenburg-Vorpommern (MV), Sachsen (SN), Sachsen-Anhalt (SN) und Thüringen (TH), (vgl. UFOPLAN 202 02 664 /UBA-FB 99-089,) **(Mulisch 1999)**

GS	**BE**		**BB**		**Gruppen-Summe**	**MV**		**Gruppen-summe**	**SN**		**Gruppen-summe**	**ST**		**Gruppen-summe**	**TH**		**Gruppen-summe**	**Summe**		**Gruppen-summe**
	n	%		%	BB	N	%	MV	n	%	SN	n	%	ST	n	%	TH	n	%	aller Länder
Ia	2	13	86	18		21	30		17	15		23	13		21	24		170	18	
Ib	1	6	48	10		13	18		19	16		52	30		11	13		144	16	
Ic	7	44	37	8		3	4		10	9		4	2		7	8		68	7	
II	0	0	0	0		0	0		0	0		0	0		0	0		0	0	
IIIa	0	0	97	21	311	16	23	60	33	28	94	35	20	123	6	7	50	187	20	648
IIIb	0	0	43	9	67%	7	10	85%	15	13	80%	9	5	72%	5	6	58%	79	9	70%
IVa	3	19	38	8		0	0		2	2		6	3		7	8		56	6	
IVb	0	0	15	3		5	7		1	1		2	1		0	0		23	2	
IVc	3	19	67	14		4	6		16	14		36	21		5	6		131	14	
Va	0	0	11	2		1	1		0	0		0	1		16	19		28	3	
Vb	0	0	8	2		0	0		3	3		1	0		1	1		13	1	
Vc	0	0	3	1	156	0	0	11	0	0	23	0	0	49	4	5	36	7	1	281
VI	0	0	14	3	33%	1	1	15%	1	1	20%	4	2	28%	3	3	42%	23	3	30%
Summe	16	100	467	100		71	100		117	100		172	100		86	100		929	100	
% von allen Liegenschaften in GS IV-VI (Ländervergleich)					56%			4%			8%			17%			13%			
% von allen Liegenschaften in GS I-III (Ländervergleich)					48%			9%			15%			19%			8%			

7.2 Die deutschen Truppen der Nationalen Volksarmee (NVA)

7.2.1 Bestandsaufnahme

Die Bestandsaufnahme von Standorten der ehemaligen NVA erfolgte auf der Grundlage von Meldungen der von der Bundeswehr dem Allgemeinen Grundvermögen (AGV) zugegangenen Liegenschaften der Oberfinanzdirektion Chemnitz über einen Erfassungsbogen. Dieser enthält Grunddaten zur Lage, Nutzungshistorie und zum Rückgabezeitpunkt sowie Angaben zum Verwertungsstand bzw. geplanten zukünftigen Nutzung und zu liegenschaftsbezogenen Erkundungen, Untersuchungen oder Beräumungen. Tabelle 7.3 zeigt den Verwertungsstand und Tabelle 7.4 die Nutzungen bzw. Nutzungshistorien der gemeldeten ehemaligen NVA-Objekte einschließlich einiger Liegenschaften in vorübergehender oder dauernder Nutzung durch die Bundeswehr.

Tabelle 7.3 Verwertungsstand ehemaliger NVA-Objekte im Freistaat Sachsen **(Mulisch 1998)**

Objekte gemeldet durch	zivile Nutzung	vorübergehende Nutzung durch die Bundeswehr	Dauernutzung durch die Bundeswehr	Summe
Bundesvermögensamt Chemnitz	101	-	-	101
Bundesvermögensamt Dresden	74	-	-	77
Bundesvermögensamt Leipzig	37	-	-	37
Oberfinanzdirektion Chemnitz	141	-	-	141
Bundeswehrverwaltung	24	14	31	69
Summe	377	14	31	425

Die Daten der OFD Chemnitz wurden mit Daten der Wehrbereichsverwaltung VII in Strausberg und dem Altlastenkataster abgeglichen und mit den entsprechenden Kartenblättern (topographischen Karten, historischen Karten, Lageplänen, Nutzungsplänen) und ergänzenden Materialien (z.B. zur Lage von Trinkwasserschutzzonen und betroffenen Wasserwerken im Umfeld der Liegenschaften, potentiellen Kontaminanten usw.) in ein objektbezogenes rechnergestütztes Datenblatt übertragen. Die Struktur des Datenblattes entspricht dabei inhaltlich der der Bewertungskomplexteile A und B (vgl. Kapitel 4).

Tabelle 7.4 Verwertungsstand ehemaliger NVA-Objekte im Freistaat Sachsen **(Mulisch 1998)**

Nutzung	Anzahl
Technik / Lager / Abfalldeponie	66
Analog zivile Nutzungen	85
Ausbildung / Schießplätze / Übungsgelände	77
Garagen	45
Wehrkreiskommandos (WKK, VKK)	42
Munitionslager	12
Kasernengelände / Mehrzweckobjekte	20

Nutzung	Anzahl
Flugplätze / Luftstreitkräfte	7
Raketenstellungen	6
Krankenhäuser	3
Grenzobjekt	10
Rüstungsstandorte	2
Schutzbauwerke / Bunker	11
Land-/forstwirtschaftliche Flächen	4
Unbekannte oder sonstige Nutzungen (z.B. Parkplätze)	35
Summe	425

7.2.2 Bewertung

Alle Objekte erfüllen die Kriterien des Komplexteils A; eine Einstufung in GS V (Klärungsbedarf) war daher nicht notwendig. Die vorliegenden Daten lassen jedoch nur Teilaussagen der Komplexteile B oder C zu, so dass keine Liegenschaft vollständig nach GS_B oder GS_C bewertet werden konnte.

Tabelle 7.5 NVA-Liegenschaften in den Bewertungskategorien A, B und C

Bewertungskomplexteil			Keine Aussage (GS_A V)	Summe
A	B	C		
425	27	1	0	425
425 GS_A	-	-		

Das Ergebnis der Bewertungen ist in Tabelle 7.6 wiedergegeben. Für über 80% der Liegenschaften sind aufgrund der Bewertungskriterien auch langfristig keine Auswirkungen von Altlasten auf Trinkwasserressourcen zu erwarten. Der Anteil von Objekten mit kontaminationsverdächtigen Nutzungsbereichen bzw. festgestellten Altlasten, die ein Gefährdungspotential für Grundwasser, jedoch kein Gefahrenpotential für Trinkwasser darstellen, liegt bei über 40% der bewerteten Objekte. Bei 17% (=73 Liegenschaften) der NVA-Objekte besteht aufgrund der Bewertung Altlastenverdacht oder es wurden Altlasten mit wassergefährdenden bzw. toxischen Stoffen festgestellt, die eine potentielle Gefährdung von Trinkwasserressourcen darstellen. Bild 7.4 zeigt die Auswirkungen der militärischen NVA-Objekte auf die Trinkwasserversorgung.

Tabelle 7.6 NVA-Liegenschaften in Gefährdungsstufen für Trinkwasser nach Kategorie A

Objekte gemeldet durch	Gefährdungsstufe (GSA)				Gesamt-zahl Objekte
	I	III	IV	VI	
Bundesvermögensamt Chemnitz	50	31	23	0	104
Bundesvermögensamt Dresden	22	38	13	0	73
Bundesvermögensamt Leipzig	12	12	13	1 +(1)	39
Oberfinanzdirektion Chemnitz	72	62	8	0	141
Bundeswehrverwaltung	19	32	16	(1)	68
Summe	175	175	73	2	425

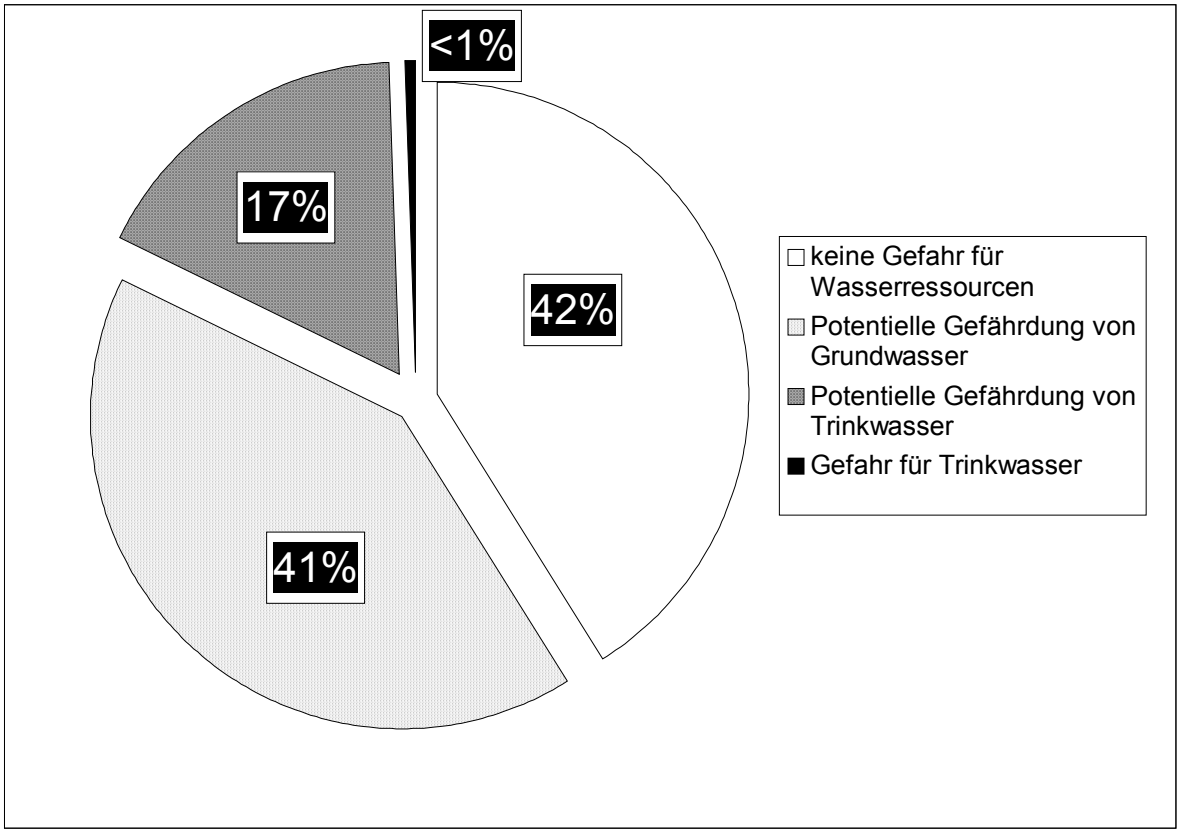


Bild 7.4 Auswirkungen von 425 Liegenschaften der ehemaligen Nationalen Volksarmee (NVA) auf die Trinkwasserversorgung im ihrem Umfeld

Tabelle 7.7 zeigt den Anteil der Objekte mit Gefahrenverdacht für Trinkwasserressourcen aufgeschlüsselt nach den Nutzungskategorien.

Tabelle 7.7 Aufschlüsselung der NVA-Liegenschaften mit Gefahrenverdacht für Trinkwasserressourcen nach ehemaligen Nutzungskategorien

Nutzungskategorie	Gesamt	Anteil mit Gefahrenverdacht für Trink-wasserressourcen - GSA IV	
	a) Anzahl	b) Anzahl	c) % von b)
Technik / Lager / Abfalldeponie	66	22	30
Analog zivile Nutzungen	85	3	4
Ausbildung / Schießplätze / Übungsgelände	77	29	40
Garagen	45	0	0
Wehrkreiskommandos (WKK, VKK)	42	1	1
Munitionslager	12	5	7
Kasernengelände / Mehrzweckobjekte	20	5	7
Flugplätze / Luftstreitkräfte	7	2	3
Raketenstellungen	6	2	3
Krankenhäuser	3	0	0
Grenzobjekt	10	1	1
Rüstungsstandorte	2	0	0
Schutzbauwerke / Bunker	11	3	4
Land-/forstwirtschaftliche Flächen	4	0	0
Unbekannte oder sonstige Nutzungen	35	0	0
Summe	425	73	100

Wesentliche Schadstoffquellen sind insbesondere Technik- und Lagerbereiche sowie Ausbildungs-, Schieß- und Übungsgelände. Haupt-, Verdachts- bzw. Prioritätskontaminanten sind Mineralöle, Lösemittel und sprengstofftypische Verbindungen (vgl. Anhang Kapitel 11.3).

Die Gefahrenfeststellung aus den Ergebnissen der Bewertungskomplexteile A und B bewirkt i.d.R. die Auslösung von Einzelfalluntersuchungen vor Ort zur Bestimmung von Toxizität und Exposition sowie zur Risikoquantifizierung für den Menschen und die Umwelt. Dabei ist die Stoffcharakterisierung gemäß den Bewertungskomplexteilen C, D und E eine nützliches Element für ein fachlich abgesichertes, zielgenaues und wirtschaftliches Vorgehen in der Ausführungsplanung weitergehender Erkundungs-, Sicherungs- und Sanierungsmaßnahmen oder der Feststellung notwendiger Sofortmaßnahmen.

8 STOFFCHARAKTERISIERUNG UND RISIKOQUANTIFIZIERUNG AM BEISPIEL VON HEXOGEN

Ein typischer militärischer Einsatzstoff und aus militärischen Altlasten bekannter Umweltkontaminant ist der Sprengstoff Hexogen [CAS 121-82-4], der beispielhaft für

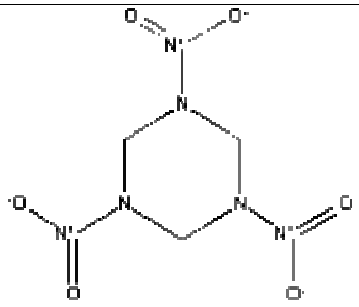
- für eine Stoffcharakterisierung nach dem SCS-System und
- für eine Risikoquantifizierung für die aquatische Umwelt und für den Menschen über den Trinkwasserpfad

bewertet wird.

Die stoffspezifische Bewertung stützt sich auf aktuelle Studien aus Literaturdatenbanken und Literaturzusammenstellungen internationaler Organisationen. Die Suche in Literaturdatenbanken ist über verschiedene Portale im Internet möglich und wurde insbesondere über die Web-basierten Datenbanken TOXLINE Spezial, MEDLINE, CANCERLIT, CCRIS, TSCATS u.a. sowie über die Portale der Organisationen Umweltbundesamt (GEIN), *Agency for Toxic Substances and Disease Registry* (ATSDR), *Health Canada Assessment*, *International Agency for Research on Cancer* (IARC) *Monographs*, WHO/IPCS *Environmental Health Criteria*, *National Toxicological Program* (NTP) *cancer bioassay*, NTP *Report on Carcinogens*, *Hazardous Substances Database* (HSDB) und *Integrated Risk Information System* (IRIS) realisiert. Das Literaturmanagement wurde über das Programm EndNote durchgeführt, das ebenfalls die Möglichkeit von online-Recherchen ermöglicht und mit den meisten Literaturdatenbankformaten bzw. Import-Funktionen kompatibel ist. Bei Ergebnissen von mehr als 1.000 Literaturstellen pro Umweltchemikalie wurde die Suchfunktion verfeinert. Die wesentlichen Ergebnisse der Literaturrecherchen zur Stoffcharakterisierung wurden in den Originalaufsätzen eingesehen.

8.1 Stoffcharakterisierung

Tabelle 8.1 Identität und Stoffkonstanten von Hexogen

Strukturformel:	
Andere Bezeichnungen:	Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazin; RDX (Royal Demolition Explosive), Cyclonite, Hexolit, PBX (AF) 108, T4 In Gemischen: Composition B, Trixogen, Composition C-4
Stoffgruppe:	Heterocyclische Nitramine
CAS-Nr.	121-82-4
Summenformel	$C_3H_6N_6O_6$
Stoffbeschreibung	Kristalle, Pulver, weiss
Molekulargewicht [g/Mol]	222,12

8.1.1 Herkunftsbereich und Gruppencharakteristik

Hexogen ist eine synthetischer organischer Stoff, der vorwiegend für militärische Zwecke als Explosivstoff (hochbrisanter Sprengstoff) in Munition hergestellt und genutzt wird. Die sehr hohe Sprengwirkung wird dadurch erreicht, dass im Molekül Sauerstoff locker gebunden ist und so die Nitrogruppe (NO_2) bei der Zündung zerfällt. Die daraus frei werdenden Sauerstoffatome reagieren unmittelbar mit den benachbarten Kohlenstoffatomen zu Kohlendioxid, so dass schlagartig eine große Gasmenge frei wird, welche die Druckwelle verursacht. Es dient weiterhin zusammen mit Aluminiumpulver als Füllung für panzerbrechende Waffen, die sich aufgrund der hohen Hitzeentwicklung durch dicke Panzerplatten oder Betonschichten hindurchschweißen. Hexogen ist damit neben TNT eine Grundkomponente fast aller Sprengstoffe. Die Verbindung findet weiterhin auch als Rodentizid **(Martinetz 1990)** und als Desinfektionsmittel Verwendung **(WHO 1994)**.

Hexogen ist ein weißes kristallines Pulver (fest bei 21 °C / 101,3 kPa) mit einem Molekulargewicht von 222,12 g/mol. Die explosionsartige Zersetzung ist bei Stoss, Reibung oder Erschütterung möglich. Bei Erhitzen bildet sich ein giftiges Gas. Hexogen ist ein starkes Oxidationsmittel und reagiert daher mit brennbaren und reduzierenden Stoffen. Die Zersetzungstemperatur, der Flammpunkt und die Explosionsgrenzen sind in der vorliegenden Literatur nicht beschrieben **(WHO 1994)**.

Als Umweltchemikalie stellt Hexogen einen militärischen Altlastenstoff dar und gehört damit zur Gruppe D der Herkunftsbereiche. Er gelangt in die Umwelt über verschiedene Abfallströme aus der Produktion bzw. während der Anwendung. Hexogen wird im Umfeld verschiedener militärischer und Rüstungs-Standorte in Deutschland im Grund- und Trinkwasser gefunden, was im Falle von militärischen Liegenschaften auf Vergrabungen beim Abzug der Alliierten schließen lässt. Aktuell werden z.B. Konzentration von bis zu 135 Mikrogramm pro Liter in den Zogenreuther Kesselquellen gefunden, was zu deren Abkoppelung vom Trinkwasserversorgungsnetz der Stadt Auerbach führte (vgl. z.B. „Als Trinkwasser nicht mehr geeignet, ..." www.oberpfalznetz.de 2003).

In Oberflächengewässern im Umfeld von Munitionsfabriken wurden Konzentrationen von 0,24 bis 37 mg/l Hexogen gemessen **(Bauer, Hämpfling et al. 1991)**.

In kontaminierten Grundwässern wurden Konzentrationen von 0,5-1,5 µg/l (Stadtallendorf 1988) bis zu 20 mg/l (Munitionsfabrik Milan, TN, USA vor 1989) gefunden **(Bauer, Hämpfling et al. 1991)**.

In Sedimenten von Fließgewässern wurden Konzentrationen von 5 - 220 mg/kg (Abwassergraben der Granatenabfüllung, Shreveport, LA, USA ca. 1987) nachgewiesen **(Bauer, Hämpfling et al. 1991)**.

In Böden wurden Konzentrationen von ≤ 22 mg/kg (Stadtallendorf), 40-3.200 mg/kg (Geretsried) bis zu 12.300 mg/kg (USA, Savanna, IL,) gemessen **(Bauer, Hämpfling et al. 1991).**

Die weltweite Produktion von Hexogen wird auf 200.000 t pro Jahr geschätzt (USA 1969-71 ca. 80.000 t, Europa 1992 in keinem Mitgliedsland > 1.000 t/a Produktion **(Rippen 1997)**.

8.1.2 Stoffliche Mobilität - SC_{MOB}

Physiko-chemische Daten

Der Geruch von Hexogen wird als leicht stechend beschrieben. Der Schmelzpunkt liegt bei 205 °C, der Dampfdruck wird in der Literatur mit 5,45 $\cdot 10^{-7}$ Pa angegeben **(HSDB 2003a)**. Hexogen ist mit ca. 50 mg/l nur gering in Wasser löslich. Aufgrund des niedrigen Dampfdrucks

erfolgt ein Verdampfen aus Böden bzw. Gewässern nur sehr langsam und ist als unbedeutend anzusehen. Sowohl aus (feuchten und trockenen) Böden als auch aus Wasser (vgl. Henry-Konstante) wird Hexogen als nicht flüchtig beschrieben. Hexogen kommt demnach in der Atmosphäre nur partikulär vor (vgl. Tabellen 8.1 und 8.2).

Tabelle 8.2 Relevante physiko-chemische Daten von Hexogen

Schmelzpunkt [°C]	205 (CIVS / DIMDI)
Siedepunkt [°C]	(nicht verfügbar)
Dichte [g/ml bei 20 °C]	1,82
Dampfdruck [Pa]	$0{,}8 \cdot 10^{-6}$ (äußerst gering)
Löslichkeit [g/l 20 °C H_2O]	0,0597 (25 °C, exp.), **0,05** (20 °C) (SRC 2003); gering (HSDB 2003), 0,038 (Spranggord, Mabey et al. 1983)
Verteilungskoeffizient log K_{OW}	0,87 (exp.) (Rippen 1997)
Sorptionskoeffizient K_{OC}	42-167 (gemessen in Sedimenten, (HSDB 2003a)); Log K_{OC} 0,88 - 2,4 (Albert 1999)
Henry-Konstante [$Pa \cdot m^3/mol$]	$1{,}4 \cdot 10^{-9}$ (Rippen 1997)
Hydrolyse / Dissoziation	unbedeutend

Die K_{OC}-Werte zwischen 42 bis 167 (gemessen in Sedimenten) zeigen, dass Hexogen keine hohen adsorptiven Eigenschaften in Bodenmaterialen oder suspendierten Feststoffen besitzt. Trotz dieser Feststellungen und der geringen Adsorption an Tonmineralen in Bodensäulenversuchen nach 26 Wochen sind >99 % Hexogen in den oberen 10 cm der Bodenschicht geblieben. Wegen der geringen Adsorption wanderte Hexogen trotz der geringen bis mittleren Wasserlöslichkeit stetig in das Grundwasser **(Bauer, Hämpfling et al. 1991)**.

Für Grünalgen wurde ein BKF von 123, für verschiedene Fischarten wurden mittlere BKF zwischen 4 bis 5 ermittelt; es zeigt sich also eine geringe bis mittlere Anreicherung in aquatischen Organismen. Hydrolyse ist bei natürlichen pH-Werten unbedeutend und deshalb unter normalen Umweltbedingungen kein dominanter Abbauschritt; in Meerwasser erfolgt eine langsame Hydrolyse (in stark basischem Medium waren nach 3 Wochen ca. 27 % hydrolysiert; **Bauer, Hämpfling et al. 1991)**.

Bewertung (vgl. Tabelle 8.3):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{MOB})

Informationen sind zu 8 von 12 relevanten Teilbereichen erhältlich (vgl. Bewertungsraster SC_{MOB}). Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien wurden 9 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage vorläufig bewertbar (Gruppe II).

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit (EW_{MOB})

In die Bewertung geht ein Adsorptionswert von 0,03 mg/g ein. Die Wasserlöslichkeit wird mit 50 mg/l (20°C) angegeben. Über zwei SF errechnet sich ein Eingangswert von 12,44*.

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Der K_{OC} 110,5 wurde für die Berechnung des Eingangswertes herangezogen.

Tabelle 8.3 Bewertungsraster SC_{MOB} von Hexogen

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{MOB})

	Wichtungspunkte	
standardisierte Laborprüfmethode	3 ( )	
Feldversuch	1 (x)	
Adsorbierbarkeit an AK	3 ( )	
Adsorbierbarkeit an Ads.-Harzen	2 ( )	
Adsorbierbarkeit Boden	1 ( )	
Löslichkeit in Wasser	3 (x)	
Verteilungskoeffizient log P_{OW}	1 (x)	Gruppeneinstufung
Henry-Konstante	1 (x)	
Dampfdruck	1 (x)	I 1 - 4 Punkte
pk_a (für ionisierbare Substanzen)	1 ( )	II 5 - 13 Punkte
Sorptionskoeffizient K_{oc}	1 (x)	III 14 - 19 Punkte
Dichte	1 (x)	
Summe:	9	**Gruppe:** II

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit (EW_{MOB})

		(Quelle)
a) Wasserlöslichkeit S (Lit_{max}-Wert mg/l]		
- .... °C		( )
- Umrechungsfaktor		
- 20 °C	50	( )
b) Adosrbierbarkeit:C_{ads} (Lit_{min}-Wert mg/g]		
- AK		( )
- Harz		( )
- Boden		( )
- Schätzung aus K_{OC} bzw. P_{OW}	0,03	( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) höchster experiment. Lös.-Wert: 50 (mg/l)x 9/1000+1, max. 10) = 1,45 (a)
b) experiment.Ads.-Wert (-x+100): 99,2 (mg/g)x9/100+1, max. 10) = 9,99 (b)
c) geschätzter Ads.-Wert (-x+100): ..... (mg/g)x9/100+1, max. 10) = ... (c)

d) SF = 10 bei berechnetem Ads.-Wert: neg.^{10}log = 1 ....(d)
e) SF = 1-10 zur Überbrückung der Varianz Ads.-Materialien neg.^{10}log = ... (e)
f) SF = 10 zur Überbrückung der Varianz Labor / Feld neg.^{10}log = ... (f)

Eingangswert: 2.1.1 (a+b+d+e+f) oder 2.1.2 (a+c+d+e+f) = 12,44

Ergebnis (Freitext):

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Charakterisierung:

Aggregatzustand unter Normalbedinungen: fest, farblose Kristalle
Molare Masse: 222,12 g/mol
Siedepunkt [°C]:
Schmelzpunkt [°C]: 205
Dichte [g/cm³]: 1,82
Viskosität [mPa · s]:
Oberflächenspannung:
Dampfdruck [Pa]: $8 \cdot 10^{-5}$
Dampfsättigungskonzentration [g/m³] bei 20 °C:
Log P_{OW}: 0,87
K_{OC}: 110,5
pk_s (Dissoziationsgradkurve unter Annahme pH = 5)
Henry-Konstante [Pa m²/mol]: $1,4 \cdot 10^{-9}$
Remobilisierung von Metallionen durch Komplexbildung [log K_k]:
Sättigungskonzentration [g/m³]: 50
Biokonzentrationsfaktor (Fsiche): 5,0 Mittelwert

Berechnungsgrundlagen:

Henry-Koeffizient: $H = C_g/C_w$ = (p [Pa] · M [g/mol]) / (S [mg/l] · 8314 · T [K]
Verteilungskoeffizient: log P_{ow} = -0,662 log $C_{s,w}$ [mol/l] + 0,710
Adsorptionskoeffizient: $K_{OC} = 100 \cdot C_{ads}/C_W$ (T) / (0,58 · % org. Materie)(o.m.) mit o.m. = o.c. / 0,58; K_{OC} = 0,4 P_{OW} => K= K_{OC} · % o.c. /100 und C_{ads}= K · C_W

Vereinfachungen:

Abschätzung der Wasserlöslichkeit S aus P_{OW}: log S = 3,05 - 1,29 Log P_{OW}
BKF (Fische) = C_{BIO} / C_w = k_1 (Aufnahme) / k_2 (Abgabe) = 0,048 P_{OW}
Konz. am Punkt der Beurteilung: C_A =! 0,1 S_A
min. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\ (min)}$ = S / C · V_S mit C = $C_{Sickerwasser}$
max. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\ (max)}$ = S / C · V_S mit C = LW
Volatilität: $t_{1/2}$ = ln 2 · 215,7$^{1/2}$ [2710 * 28,3 / H]
Verzög.-F. (VF) und Lipophil.: Beispiel P_{OW} 200 => VF 2,2; P_{OW} 4000 => VF 7,9
floater / sinker: Dichte Substanz < / > Dichte Wasser

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	negativ oder nicht ausreichend	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis positiv
	Quelle	Quelle	Quelle
Biokonzentration (BKF):	(x)	( )	( )
Dissoziation:	(x)	( )	( )
Komplexbildung:	(x)	( )	( )
Volatilität:	(x)	( )	( )
floater / sinker:	(x)	( )	( )
Konz. am Punkt der Beurteilung	( )	( )	(x)
min/max. kontaminiertes GW-Volumen	(x)	( )	( )

Summe = Mobilitätszahl (MobZ) = 6 | 0 | 1

modifizierte Mobilitätszahl (MMobZ) = 6
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

VK_{MOB}:	EW_{MOB}:	MobZ:	BZ_{MOB}:	SC_{MOB}
II	12,34	511	25,36	2,51

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Die sonstigen Stoffdaten ergeben eine Mobilitätszahl von 700. Für DBS wurde ein geringer Biokonzentrationsfaktor von 130 für Goldorfen ermittelt **(HSDB 2002b)**. Die Verbindung dissoziiert nicht in Wasser und bildet keine komplexen Verbindungen. Aufgrund des geringen Dampfdrucks ist nicht mit einer Ausgasung von Hexogen aus Böden oder Gewässern zu rechnen. Die Maximalkonzentration am Punkt der Beurteilung wird aufgrund der Wasserlöslichkeit auf ≤5 mg/l eingeschätzt.

Bewertungszahl für die Mobilität und Stoffcharakteristik SC_{MOB}:

Aus dem ermittelten Eingangswert EW_{MOB} 12,44 aus Feld 2 und der modifizierten Mobilitätszahl (MMobZ) 6 aus Feld 4 errechnet sich die Bewertungszahl für die Mobilität BZ_{MOB}.

$1 \leq BZ_{MOB} = -$ (Eingangswert · MMobZ) + 100 ≤ 100 = - (12,44 · 6) + 100

BZ_{MOB} = 25,36 und **SC_{MOB} = 2,51**.

Hexogen liegt wegen seines geringen Dampfdrucks vorwiegend im Boden und im Wasser vor. Der Übergang vom Boden in das Grundwasser erfolgt wegen der geringen adsorptiven Eigenschaften und der geringen bis mittleren Wasserlöslichkeit mittel bis schnell, da auch die Biokonzentration gering ist und nicht als „Puffer" wirken kann.

8.1.3 Aquatoxizität - SC_{AQU}

Zur Wirkung auf aquatische Lebewesen liegen Untersuchungsergebnisse mit Mikroorganismen (Prokaryonten, Eukaryonten), Wasserpflanzen, Invertebraten (*Daphnia magna*, *Ceriodaphnia dubia* u.a.) und Fischen vor (vgl. Tabelle 8.4).

Tabelle 8.4 Darstellung von aquatoxikologischen Daten von Hexogen (Auszug)

Spezies	Endpunkt	Effekt	Literatur
Daphnia magna	Beweglichkeit	$LC_{50/48\ Std}$ ≥15 - ≥100 mg/l $EC_{50/48\ Std}$ > 100 mg/l	(Layton, Mallon et al. 1987) (Peters, Vurton et al. 1991)
Blauer Sonnenbarsch	Mortalität der Brut	$LC_{50/96\ Std}$ = 3,6 mg/l	(Bauer, Hämpfling et al. 1991)
Pimephales promelas (amerik. Elritze)	Schlüpferfolg Schlüpferfolg Wachstum	$EC_{0/36\ Tage}$ = 9,8 mg/l $LC_{50/96\ Std}$ = 12,9 mg/l $LOEC_{28\ Tage}$ = 2,4 mg/l $NOEC_{28\ Tage}$ = 1,4 mg/l	(Burton, Turley et al. 1994)

Bewertung (vgl. Tabelle 8.5):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Informationen sind zu 8 von 12 toxikologisch relevanten Teilbereichen erhältlich.

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 38 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe III).

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-Wirkungs-Beziehung

Der Bewertung wird der NOEC von 1,4 mg/l aus der Fisch-Tox-Studie mit *Pimephales promelas* und dem Endpunkt Wachstumshemmung von **Burton 1994** zugrunde gelegt. Aufgrund dieser Versuchsergebnisse wird für Hexogen ein Eingangswert (EW_{AQU}) von 13,36 errechnet.

Tabelle 8.5 Bewertungsraster SC_{AQU} von Hexogen

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{AQU})

	Wichtungspunkte	
1 Akute Fischtoxizität:		
- LC_{50}	5 (x)	
- LC_5	1 ( )	
- LC_{100}	1 ( )	
- LC_{100}	1 ( )	
2 (semi-)chronische Fischoxizität:		
- LOEC	8 (x)	
- NOEC	10 (x)	
3 Strukturanalyse (SAB):	4 ( )	
4 Sonstige Ergebnisse:		
- Kleinkrebse	4 (x)	Gruppeneinstufung
- Bakterien	5 (x)	
- Protozoen	1 (x)	I 0 - 5 Punkt
- Algen	2 (x)	II 6 - 20 Punkte
- Bioakkumulationsfaktor	3 (x)	III 21 - 45 Punkte

Summe: 38 **Gruppe:** III

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{AQU})

	L_0-Werte	Spezies	(Quelle)
akute Toxizität:			
- LC_{50}			( )
- LC_5			( )
- LC_{10}			( )
- LC_{100}			( )
(semi-)chronische Toxizität:			
- LOEC			( )
- NOEC	1,4 mg/l		(Burton 1994)

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller NOEC : 1,4 (mg/l) neg.^{e}ln · 1,9 + 14 = 13,36 (a)

b) niedrigster abgeschätzter Wert : .... (mg/l) neg.^{e}ln · 1,9 + 14 = ... (b)

c) SF = 10 zur Abschätzung NOEC aus LOEC ^{10}log = ... (c)

d) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Spezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt ^{10}log = ... (d)

e) SF = 10 zur Abschätzung LOEC aus LC_{50} ^{10}log = ... (e)

f) SF = 10 für das Fehlen standard. Bedingungen ^{10}log = ... (f)

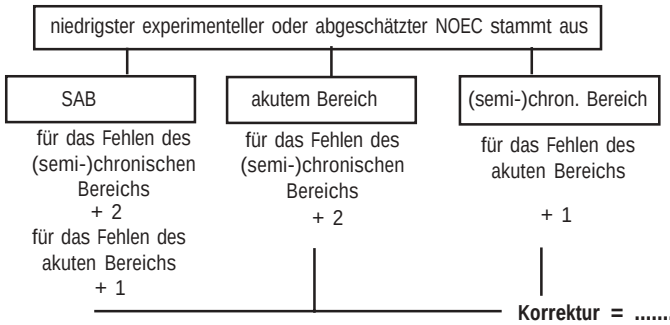
g) SF = 3 Umrechnung aus SAB in NOEC ^{10}log = ... (g)

Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = 13,36

Feld 3: Berechnung der Dosiszahl (DZ_{AQU})

Übertrag Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = 13,36

3.1 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis
(korrigierte Dosiszahl wird mit * gekennzeichnet)



3.2 Beurteilung der Substanz im Feld 2 EW_{AQU}:

3.2.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = 13,36

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = ...

3.2.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g) + Korrektur* = Dosiszahl = ...

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) + Korrektur* = Dosiszahl = ...

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
	Quelle	Quelle	Quelle
4.1 Kleinkrebse (EC_{50})			
- Daphnie pulex	(x)	( )	( )
4.2 Bakterien (Test, Spezies:)			
- Spezies:	(x)	( )	( )
4.3 Protozoen (Test:)			
- Ciliaten, Amöben, Glockentierchen	(x)	( )	( )
4.4 Algen (Hemmungstest IC_{50})			
- planktische Grünalgen	(x)	( )	( )
- Blaualgen	(x)	( )	( )
4.5 Bioakkumulationsfaktor (c_{Fisch} / c_{H2O})	(x)	( )	( )
Summe = Aquatoxizitätszahl (AquZ)	6	0	0

modifizierte Aquatoxizitätszahl (**MAquZ**) = 6
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Beurteilungsprofil:	**VK:**	**EW:**	**DZ:**	**AquZ:**	**BZ_{AQU}:**	**SC_{AQU}:**
Fischtoxizität	38	13,36	13,36	600	80,2	1,80

Feld 3: Berechnung der Dosiszahl

Aufgrund der Datenlage ergeben sich keine Korrekturwerte. Die Dosiszahl (DZ_{AQU}) ist mit dem Eingangswert (EW_{AQU}) identisch.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Hexogen wird von Wasserorganismen aufgenommen. Der Biokonzentrationsfaktor für die amer. Elritze liegt im Mittel bei 5,0 für den Blauen Sonnenbarsch bei 4,1.

Alle sonstigen ökotoxikologischen Prüfungen sind mit positivem Ergebnis ausreichend getestet bzw. als nicht ausreichend getestet bewertet. Es ergibt sich eine Aquatox-Zahl (AquZ) von 600 und eine modifizierte Aquatox-Zahl (MAquZ) von 6.

Aquatoxikologische Bewertungszahl und Stoffcharakteristik SC_{AQU}:

Aus der ermittelten Dosiszahl (DZ_{AQU}) 13,36 aus Feld 3 und der modifizierten Aquatox-Zahl MAquZ 6 aus Feld 4 errechnet sich die Bewertungszahl für die Aquatoxizität BZ_{AQU}

$0 \leq BZ_{AQU}$ = (Dosiszahl · mod. Aquatox-Zahl) = 13,36 · 6 ≤ 100

BZ_{AQU} = 80,2 und **SC_{AQU} = 1,80**.

Hexogen wird in die Aquatox-Gruppe II als „hoch toxisch" für Fische eingestuft. Für andere Wasserorganismen, insbesondere für Daphnien, ist Hexogen vorläufig ebenfalls in die Aquatox-Gruppe II als hoch toxisch einzustufen.

8.1.4 Toxizität - SC_{TOX}

Die Mehrzahl der toxikologischen Studien an Hexogen wurde in den 80iger Jahren durchgeführt. Eine umfassendes toxikologisches Profil wurde im Jahr 1995 vom U.S. Department of Health and Human Services erstellt **(ATSDR 1995)**. In Deutschland wurde Hexogen im Umweltforschungsplan 1999 (298 76 251) bei der Ermittlung von Prüfwerten für ausgewählte rüstungsaltlastenrelevante Schadstoffe betrachtet **(Schneider, Oltmanns et al. 1999)**. Die der Bewertung zugrunde liegenden toxikologischen Basisdaten sind in Tabelle 8.6 zusammengefasst.

Die Substanz wird nach oraler Aufnahme langsam aber extensiv (≈100%) resorbiert. Zur Wirkung beim Menschen liegen Daten zur kurzfristigen Exposition vor sowie Vergleichsdaten einer subchronischen Studie mit Affen. Bei beiden steht die Wirkung auf das Zentralnervensystem (epilepsieartige Krämpfe, Erbrechen, Übererregbarkeit, Verwirrung, Amnesie) im Hochdosisbereich im Vordergrund **(Etnier 1989; ATSDR 1995)**. Die quantitative Übertragbarkeit einer Krebsrisikoabschätzung von Daten zur Hepatokanzerogenität bei Mäusen **(U.S. DOD 1984)** auf den Menschen wird angesichts fehlender Belege für eine gentoxische Wirkung als fraglich angesehen **(Dieter 1994; Schneider, Oltmanns et al. 1999)**. Hautkontakt kann Dermatitis hervorrufen **(ATSDR 1995)**.

Neben den Wirkungen auf das ZNS (niedrigste Effektdosen bei 12,5 mg/kg bei einmaliger Anwendung) wird bei akuter Toxizität im Tierversuch auch über gastrointestinale Effekte und Nierenschäden berichtet. In einigen Fällen zeigten sich nach inhalativer oder oraler Aufnahme hoher Dosen auch hämatologische Effekte (Leukozytose), Hämaturie und Proteinurie sowie Lebereffekte. Orale LD_{50}-Werte bei der Ratte liegen im Bereich 44 - 300 mg/kg, bei der Maus 59 - 500 mg/kg. Effekte auf die Reproduktion und auf die Nachkommen (verringerte Fötusgewichte und -größe) zeigten sich in den vorliegenden Studien an Ratten nach subakuter Exposition gegenüber 20 mg/kg/d, wobei auch maternale Toxizität auftrat (NOAEL 2 - 6 mg/kg/d) **(Etnier 1989; ATSDR 1995)**.

Neben der auch bei längerfristiger Exposition relevanten neurotoxischen Wirkung wurden in chronischen Tierstudien Effekte auf Leber, Niere, Gastrointestinaltrakt und Prostata nachgewiesen **(Martin und Hart 1974; Levine, Furedi et al. 1983; McLellan, Hartley et al. 1988)**.

Die wesentlichen Untersuchungsergebnisse werden in der folgenden Bewertung zitiert.

Bewertung (vgl. Tabelle 8.6):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Informationen sind zu 6 von 8 toxikologisch relevanten Teilbereichen erhältlich, u.a.:

In einer subchronischen Studie an Affen (3/Geschlecht und Dosis, Dosisgruppen 0,1; 1 und 10 mg/kg/Tag, 90 Tage) wurden in der Hochdosisgruppe massive neurotoxische Effekte und histologische Veränderungen in Knochenmark und Leber beobachtet. Außer gelegentlichem Erbrechen traten in den beiden unteren Dosisgruppen keine weiteren Effekte auf **(Martin und Hart 1974)**.

Weiterhin liegen verschiedene chronische Studien an Ratten und Mäusen vor: Bei der Ratte zeigten sich neben weiteren Effekten im Hochdosisbereich, ab der Dosis von 1,5 mg/kg/d bei männlichen Tieren eitrige Entzündungen der Prostata sowie Pigmentablagerungen in der Milz (=> NOAEL 0,3 mg/kg/d) **(Levine, Furedi et al. 1983)**. In einer weiteren Studie an Ratten war nur die Körpergewichtszunahme bei weiblichen Tieren ab 3,1 mg/kg/d signifikant verzögert (NOAEL 1 mg/kg/d). Degenerative Veränderungen der Testes und verringerte Körpergewichtszunahme wurden in einer 2-Jahresstudie mit Mäusen beobachtet (LOAEL 35 mg/kg/d und NOAEL 7 mg/kg/d) **(Lish, Levine et al. 1984)**. Gleiche Wirkung zeigte auch eine 6-monatige Untersuchung mit Ratten bei einem LOAEL von 4 mg/kg/d und einem NOAEL von 8 mg/kg/d **(Levine, Furedi et al. 1983)**. In einer subchronischen Studie mit Ratten zu neurotoxischen Effekten waren Enzymaktivitäten und die Sauerstoffaufnahme im Gehirn bei einen LOAEL von 2,5 mg/kg/d (NOAEL 0,3 mg/kg/d) verändert **(Braun 1975)**.

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 9 Wichtungspunkte erreicht.
Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe III).

Feld 2: Angaben zur Dosis-Wirkungs-Beziehung

Der Bewertung wird der NOAEL von 0,3 mg/kg/d aus der Studie von **Levine 1983** zugrunde gelegt. Es berechnet sich ein Eingangswert von 3,52. Korrekturen sind aufgrund der Datenlage nicht notwendig, so dass sich eine Dosiszahl von 3,52 ergibt.

Feld 3: Karzinogenität

Erfahrungen am Menschen zu kanzerogenen Wirkungen liegen nicht vor. In mehreren chronischen Studien mit Ratten und Mäusen wurde das karzinogene Potenzial von Hexogen untersucht: In Fischer 344-Ratten **(U.S. DOD 1984)**, an Sprague-Dawley Ratten **(Hart 1977)** und B6C3F1-Mäusen **(U.S. DOD 1984)**. In Ratten konnte ein karzinogenes Potential nicht nachgewiesen werden. Jedoch wurde an Mäusen eine dosisabhängige signifikant erhöhte Tumorrate in der Leber (Adenome und Karzinome) festgestellt. Die niedrigste krebserzeugende Dosis lag bei 7 mg/kg/d. Die EPA stuft Hexogen in die Gruppe C als mögliches Humankarzinogen ein (IRIS).

Von einer Initiatorwirkung ist aufgrund der vorliegenden Ergebnisse nicht auszugehen. Im Feld 3 wird Hexogen aber noch in die Gruppe B_2 eingestuft.

Tabelle 8.6 Bewertungsraster SC_{TOX} von Hexogen

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{TOX})

	Wichtungspunkte	
subchronische Toxizität:	1 (X)	
chronische Toxizität:	3 (X)	
Reproduktionstoxizität:	2 (X)	
subchronische Immuntoxizität:	1 ( )	Gruppeneinstufung
chronische Immuntoxizität:	2 ( )	
Toxikokinetik:	1 (X)	I 1 - 3 Punkte
Biochemie:	1 (X)	II 4 - 8 Punkte
Mutagenität:	1 (X)	III 9 - 12 Punkte

Summe: 9 **Gruppe:** III

Feld 3: Karzinogenität (canc)

(Kennzeichnung für nichtorale Studien: i = inhalativ, d = dermal)

canc A = eindeutig humankarzinogen ($RZ = BZ_{TOX} = 100$)
canc B_1 = eindeutig karzinogen im Tierversuch als Initiator oder Anfangsverdacht aus Humandaten bei wahrscheinlicher Initiatorwirkung ($RZ = BZ_{TOX} = 100$)
canc B_2 = Initiatorwirkung im Tierversuch zweifelhaft, aber begründeter Anfangsverdacht aus Tier- oder Strukturdaten (RZ = 33)
canc B_3 = oral wie Gruppe C; andere Pfade aber wie $B_2/B_1/A$ (RZ = 22)
canc C = nicht karzinogen bei adäquater Testung
canc D = nicht adäquat getestet, aber kein Verdacht aus Strukturdaten (RZ = 11)

Einstufung der Karzinogenität der Substanz: Gruppe B_2 **=> RZ =** +33

Feld 2: Angaben zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{TOX})

	NOAEL / LOAEL	(Quelle)
subchronische Toxizität:		( )
chronische Toxizität:	0,3 / 1,5	(Levine et al 1983 bzw. US DOD (1983)
Reproduktionstoxizität:		( )
subchronische Immuntoxizität:		( )
chronische Immuntoxizität:		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (EW)

a) niedrigster experimenteller NOAEL : $0,3 \cdot 10^{-3}$ (g/kg/d) neg.^{10}log = 3,52 (a)
b) niedrigster abgeschätzter NOAEL : ..... (g/kg/d) neg.^{10}log = ... (b)
c) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Laborspezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt ^{10}log = ... (c)
d) SF = 10 für voraussichtlich starke Kumulation der Substanz im Säuger (Halbwertszeit der Elimination >1 a) ^{10}log = ... (d)

Eingangswert: 2.1.1 (a+c+d) oder 2.1.2 (b+c+d) = 3,52

2.2 Dosiszahl DZ_{TOX} (Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis)

niedrigster experimenteller oder abgeschätzter NOAEL stammt aus

subchron. Bereich	chronischer Bereich	Reprotox. Bereich
für das Fehlen des chronischen Bereichs + 2	für das Fehlen des subchron. Bereichs + 1	für das Fehlen des chron. Bereichs + 2
für das Fehlen des Reprotox. Bereichs + 1	für das Fehlen des Reprotox. Bereichs + 1	für das Fehlen des subchron. Bereichs + 1

Korrektur = ...

2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2 DWB:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) = Dosiszahl = 3,52

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) = Dosiszahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = ...

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = ...

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
Toxikokinetik:	Quelle	Quelle	Quelle
Kumulationstendenz in Säugern (> = 24 h)	( )	( )	(X)
Reaktive Metabolite	( )	( )	(X)
Plazentagängigkeit	(X)	( )	( )
Biochemie:			
Blutbild, Serum, Immunzellenstatus: Veränderungen	(X)	( )	( )
Enzym, Hormon, Transmitter: Veränderungen	(X)	( )	( )
Metallhomöostase: Veränderungen	(X)	( )	( )
Mutagenität:			
DNA-Schäden	( )	( )	(X)
Punktmutationen	( )	( )	(X)
Chromosomenmutationen	( )	( )	(X)

Summe = Toxizitätszahl (ToxZ) =	4	0	5

modifizierte Toxizitätszahl (**MToxZ**) = 4
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Feld 5: Humantoxikologie

a) Erfahrungen am Menschen (Freitext):

b) vorhandene Werte:

Beurteilungsprofil:	VK_{TOX}:	EW_{TOX}:	DZ_{TOX}:	canc:	ToxZ:	BZ_{TOX}:		SC_{TOX}:
oral	III	3,52	3,52	B_2	405	47,1		2,41

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Hexogen wird inhalativ und oral gut resorbiert, wobei auf dem oralen Pfad eine 100%ige Resorption anzunehmen ist. Nach subchronischer Applikation wird keine Akkumulation in Geweben gefunden. Es wurden über 90% der verabreichten Substanz innerhalb von 4 Tagen metabolisiert. Angaben zu Metaboliten gibt es nur für C1-Fragmente (CO_2, Bicarbonat und Ameisensäure). Die Ausscheidung erfolgt zu 27 - 50% als CO_2 über die Atmung, zu 22 - 35% über den Urin und zu 4 - 5 % über Faeces **(Etnier 1989; ATSDR 1995)**. Hexogen war in Tests auf gentoxische Wirkung negativ bzw. wurde - speziell hinsichtlich *in vivo*-Tests - als nicht ausreichend getestet eingestuft **(ATSDR 1995)**.

Die sonstigen toxikologischen Prüfungen zur Ermittlung der Toxizitätszahl ergeben 4 positive (bzw. als nicht ausreichend getestet bewertete) Befunde und 5 negative Ergebnisse (vgl. Tabelle 8.20) so dass die Toxizitätszahl 405 erhalten wird.

Toxikologische Bewertungszahl und toxikologische Stoffcharakteristik SC_{TOX}:

$0 \leqslant BZ_{TOX}$ = Dosiszahl · mod. Toxiziätszahl + RZ = 3,52 · 4 + 33 $\leqslant 100$

BZ_{TOX} 47,1 und **SC_{TOX} = 2,41**

Die Substanz erhält die toxikologische Bewertungszahl 47,1. Der Wert der toxikologischen Substanzcharakteristik SC_{TOX-X} ist 2,41.

Hexogen ist für den Menschen mäßig toxisch. Eine Initiatorwirkung im Tierversuch ist zweifelhaft. Es besteht aber begründeter Anfangsverdacht zur karzinogenen Wirkung aus Tierversuchen.

8.1.5 Biochemischer Abbau - SC_{BIO}

Der biochemische Abbau von Hexogen wurde unter aeroben und anaeroben Bedingungen untersucht. Die vorliegenden Daten lassen vermuten, dass, außer unter speziellen Bedingungen, ein aerober Umsatz von Hexogen nicht oder nur in sehr geringem Ausmaß stattfindet.

- Aerober Abbau: Unter aeroben Bedingungen liegt in Wasser kein biochemischer Abbau in 90 Tagen vor. Nur in Wasser/Sediment geringfügiger Verlust in 30 Tagen (durch Sorption) **(Bauer, Hämpfling et al. 1991)**.

- Anaerober Abbau: Unter anaeroben Bedingungen bei Anwesenheit einer weiteren C-Quelle schrittweise Reduktion **(Bauer, Hämpfling et al. 1991)**. In sandigem Boden (RDX 3000 mg/kg, Aufschlämmung) bei pH=6,5 vollständige Transformation in 24 Tagen **(Funk, Roberts et al. 1993)**. Schrittweise Reduktion zu Mono-, Di- und Trinitrosoderivaten sowie zu Formaldehyd und Methanol, Hydrazin, 1,1-Dimethylhydrazin und 1,2-Dimethylhydrazin **(Bauer, Hämpfling et al. 1991)**. In Kompost guter Abbau bis zur Mineralisierung: Halbwertszeit bei 35 - 40 °C 31 Tage, bei 55 - 60 °C 17,3 Tage. In Boden unter anaeroben Bedingungen Ringspaltung und vollständige Mineralisation **(Garg, Grasso et al. 1991)**. In Boden (59 mg/kg) nach 2 Monaten 83% unverändert extrahierbar; 1,1% irreversibel gebunden, 0,3% mineralisiert zu CO_2 **(Harvey, Fellows et al. 1991)**.

Mikrobieller Umsatz durch Weißfäulpilze (*Phanaerochaete chrysosporium*) führt zu einer schnellen Transformation (von 55 auf ca. 7 mg/l in ca. 20 Std.), jedoch zur keiner vollständigen Mineralisation **(Sublette, Ganapathy et al. 1992)**.

Halbwertszeit in der Umwelt 460-2000 Tage **(Martinetz 1990)**.

Bewertung (vgl. Tabelle 8.7):

Tabelle 8.7 Bewertungsraster SC_{BIO} von Hexogen

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{BIO})

Bio-Bereiche	Wichtungspunkte (WP) Serie / Wert	mehrere Serien / Werte
1 Aerober Abbau		
1.1 Standardisierte Prüfmethode:		
1.1.1 Testung nach Adaption (z.B. Warburg)	30 ( )	40 ( )
1.1.2 Testung inkl. Adaption (z.B. *screening*)	25 ( )	35 ( )
1.2 Andere Laborprüfungen		
1.2.1 Labor BB	25 ( )	35 ( )
1.2.2 Batch-Test	8 ( )	12 ( )
1.2.3 Standardverdünnungsverfahren (z.B. BSB_5)	6 ( )	8 ( )
1.3 Industrielle bzw. kommunale biologische Reinigungsanlage		
1.3.1 dominanter Inhaltsstoff	20 ( )	25 (x)
1.3.2 nicht dominanter Inhaltsstoff	12 ( )	15 ( )
1.4 Feldversuche		
1.4.1 Oberflächenwasser	10 ( )	15 ( )
1.4.2 Grundwasser	8 ( )	12 ( )
1.4.3 Brakwasser	6 ( )	10 ( )
1.4.4 Boden	6 ( )	10 ( )
1.5 Strukturanalyse (SAB)		
1.5.1 Basis homologie Reihe	25 ( )	
1.5.2 Basis Strukturformel	20 ( )	
2 Anaeber Abbau		
2.1 Labor-/Feldversuche	4 (x)	
3 Chemischer Abbau		
3.1 Fotolyse	3 (x)	
3.2 Hydrolyse	2 ( )	
3.3 TOC, DOC, CSB-Cr	1 ( )	
3.4 CSB-Mn	0 ( )	
4 Wasserlöslichkeit		
4.1 standard. Methode	4 (x)	
4.2 berechnet	2 ( )	
5 Inhibitärwirkung		
5.1 experimentell	4 ( )	
5.2 Strukturanalyse	2 ( )	
6 Bioakkumulation		
6.1 experimentell	4 (x)	
6.2 berechnet	2 ( )	

Summe: 40

I	0 - 20 Punkte	nicht bewertbar
II	21 - 40 Punkte	vorläufig bewertbar
III	41 - 60 Punkte	bewertbar

Gruppe: II

Feld 2a: Eingangswert zum Abbauverhalten (EW_{BIO})

	(%)	(Quelle)
Standardisierte Prüfmethode:		( )
		( )
Praktische Prüfmethode:	0	(Bauer 1991)
		( )
Strukturanalyse (SAB):		( )
		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller Abbau : 0 % (neg./10 + 11)·1,5 = 16,5 (a)

b) niedrigster abgeschätzter Abbau : ..... % (neg./10 + 11)·1,5 = ... (b)

c) SF = 10; bei Anwendnung von SAB $^{10}\log$ = ... (c)

d) SF = 10; bei sehr langsamem biochemischem Umsatz $^{10}\log$ = 1 ... (d)

Übertrag 2a = 17,5

Feld 2b: Berechnung der Abbauzahl (AZ)

Übertrag aus 2a = 17,5

2.2 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis
(korrigierte Abbauzahl wird mit * gekennzeichnet)

niedrigster experimenteller oder abgeschätzter Abbauwert stammt aus

standard. Prüfmeth.	praktische Prüfmeth.	SAB
für das Fehlen mehrerer Serien + 1	für das Fehlen der standard. PM + 2	für das Fehlen der standard. und praktischen PM + 3
	für das Fehlen mehrerer Serien + 1	für das Fehlen mehrerer Serien + 1

Korrektur* = +2*

2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Bio-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) = Abbauzahl = ...

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) = Abbauzahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) + 2.2 Korrektur * = Abbauzahl = 19,5*

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) + 2.2 Korrektur * = Abbauzahl = ...

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation (mod)

mod C = keine Hydrolyse und keine Photolyse bei adäquater Testung (AA = 0)

mod D = nicht adäquat getestet, aber keine Hydrolyse oder Photolyse aufgrund von Strukturdaten (AA=0)

mod B_2 = strukturelle Voraussetzungen für Hydrolyse oder Photolyse (AA =-5)

mod B_1 = langsame Hydrolyse oder Photolyse (AA = -10)

mod A = rasche Hydrolyse oder Photolyse experimentell gesichert (AA = -20)

Einstufung phys./chem. Modifikation: **Gruppe** B2 **=> AA =** -5

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
4.1 aerober Abbau:	Quelle	Quelle	Quelle
- Inhibitorwirkung < 10 mg/l	(x)	( )	( )
< 1 mg/l	(x)	( )	( )
- $t_{1/2}$ (Feldversuch) > 1 Jahr	( )	( )	(x)
> 10 Jahre	( )	( )	(x)
- Adaptionszeit > 25 Tage	(x)	( )	( )
4.2 anaerober Abbau:			
- toxikol. relevante stabile Metabolite	(x)	( )	( )
4.3 sonstige Parameter:			
- Wasserlöslichkeit < 10 mg/l	( )	( )	(x)
< 1 mg/l	( )	( )	(x)
- Bioakkumulation	( )	(x)	( )

Summe = Biozahl (BioZ) =	4	1	4

modifizierte Biozahl (**MBioZ**) = 4,5
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

VL_{BIO}:	EW_{BIO}:	AZ_{BIO}:	BioZ:	BZ_{BIO}	SC_{BIO-X}
II	17,5	19,5*	404	82,75*	1,83

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 40 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage vorläufig bewertbar (Gruppe II).

Feld 2: Angaben zum Abbauverhalten

Bewertet werden die Ergebnisse von **Bauer 1991** mit 0% Abbau in Wasser in 90 Tagen. Es errechnet sich, über einen SF wegen des sehr langsamen biochemischen Umsatzes, ein Eingangswert von 17,5. Für das Fehlen standardisierter Prüfmethoden wird eine Korrektur um +2* vorgenommen. Die Abbauzahl lautet daher 19,5*.

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation

Ein hydrolytischer Abbau unter Umweltbedingungen ist unwahrscheinlich. Der Hauptabbauschritt in wässriger Lösung ist die Photolyse zwischen 240 und 350 nm und Halbwertszeiten zwischen 10,5 Std. und 14 Tagen (unter Bildung von Cyanwasserstoff, Nitrat, Ammonium und Ameisensäure). Es erfolgt daher die Einstufung in die Gruppe mod B_2 (mit AZ = -5).

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Beim anaeroben Abbau bildeten sich toxikologisch relevante Metabolite. Der Biokonzentrationsfaktor liegt zwischen 123 (Grünalge) und 1,5 (Kleinkrebs).

Biochemische Bewertungszahl und SC_{BIO}:

$0 \leqslant BZ_{BIO}$ = Abbauzahl · mod. Biozahl + mod = 19,5* · 4,5 - 5 $\leqslant 100$

BZ_{BIO} = 82,75* und **SC_{BIO-X} = 1,83**

Hexogen wird aufgrund der vorliegenden Daten in SC_{BIO} = 1,83, BIO-Gruppe C „kein aerober biochemischer Abbau auch bei stark verlängerten Reaktionszeiten, jedoch strukturelle Voraussetzungen für Photolyse“ eingestuft.

8.1.6 Umwelttoxikologische Relevanz - SC_{TOR}

Hexogen erwies sich als (anaerob bzw. photolytisch) biochemisch teilweise abbaubar sowie als mäßig toxisch. Seine Initiatorwirkung im Tierversuch ist zweifelhaft, doch besteht ein begründeter Anfangsverdacht auf Karzinogenität aus Tier- und Strukturdaten (RZ=33). Die umwelttoxikologische Relevanz von Hexogen ist mittel bis hoch und hat einen Wert von

SC_{TOR} = 4,24 mit $6 \geq SC_{TOR} = SC_{TOX} + SC_{BIO} \geq 2$.

Das Schadstoffrisiko ist „hoch“, ein Kontrollerfordernis wird bei Kontaminationsverdacht unbedingt empfohlen.

8.2 Feststellung von Risiken bzw. Gefahren für die aquatische Umwelt

Der Berechnung der HZK für Hexogen wird der NOEC von 1,4 mg/l aus der Fisch-Tox-Studie von **Burton 1994** zugrunde gelegt.

$$HZK = \frac{1,4 \cdot 0,3}{1,83}\ [mg/l] = 0,23\ mg/l$$

Dabei sind:

cos α = 0,3 Maximalwert bei unbekannter Steilheit der Dosis-Wirkungs-Geraden
EF_1 = 1,0 für das Vorliegen einer gemessenen NOEC
EF_2 = 1,83 als Maß für den biochemischen Abbau

$EF_3 = 1{,}0$ zur Bewertung der Qualität als sichere Testung
$EF_4 = 1$ für natürliche Gewässer

Die HZK für Hexogen liegt mit dem Faktor von ca. 210 oberhalb des in Kapitel 8.3 für den Menschen berechneten gesundheitlichen LW bei lebenslanger Exposition und ist damit humantoxikologisch unsicher. Die HZK liegt zudem ca. 21-fach oberhalb der Leitwerte für kurzfristige Expositionen LW_{KE}. Das Sanierungsziel für Hexogen wird sich daher immer am gesundheitlichen Leitwert orientieren.

8.3 Feststellung von Risiken bzw. Gefahren für den Menschen

Zur Berechnung des gesundheitlichen Leitwertes für Hexogen im Trinkwasser wird der NOAEL von 0,3 mg/kg/d aus der Studie von **Levine 1983** mit den Endpunkten Entzündungen der Prostata sowie Pigmentablagerungen in der Milz zugrunde gelegt.

Für die Ableitung eines TDI für den Menschen werden folgende Extrapolationsfaktoren (EF) angesetzt:

EF_c = 10 zur Überbrückung der zwischenartlichen Varianz zwischen Mensch und Versuchstier,

EF_d = 10 zur Überbrückung der innerartlichen Varianz beim Menschen, da der NOAEL nicht an einer besonders empfindlichen Teilpopulation gemessen wurde,

sowie

SF_{mkanz} = 10 als zusätzlichen Sicherheitsfaktor für eine mögliche kanzerogene Wirkung von Hexogen (Gruppe canc B_2)

Aus der Multiplikation dieser Extrapolationsfaktoren mit SF_{mkanz} ergibt sich der Gesamtextrapolationsfaktor EF_g = 1.000.

$$TDI_{Hexogen} = \frac{0{,}3\ mg}{kg \cdot d \cdot 1.000} = 3 \cdot 10^{-4}\ mg/kg/d.$$

Der gesundheitliche Leitwert errechnet sich für einen Erwachsenen mit einem Körpergewicht von 70 kg, der 2 Liter Trinkwasser pro Tag zu sich nimmt, zu

$$\mathbf{LW_{Hexogen}} = \frac{0{,}1 \cdot 0{,}3\ mg \cdot 70\ kg \cdot d}{kg \cdot d \cdot 2\ l \cdot 1.000} \mathbf{= 0{,}0011\ mg/l = 1{,}1\ \mu g/l.}$$

Der Interpolationsfaktor IF für die Herleitung eines Gefahrenbezuges aus dem TDI ist eine Funktion des EF_{gh}. Für die Berechnung der kurzfristigen Leitwerte LW_{KE} für Trinkwasser wird Hexogen der Stoffgruppe AI (nicht kumulierende Stoffe) zugeordnet. Für die Bildung des LW_{KE} bei 3 bzw. 10 Jahre Überschreitung des LW werden die Interpolationsfaktoren wie folgt berechnet:

$$IF_{A3,10}\ (\leqslant 10) = EF_{gh} = 10$$

sowie

$$IF_{A70}\ (\leqslant 10) = \sqrt{EF_{gh}} = 10$$

Die gefahrverknüpfte Dosis von Hexogen für den Menschen ist $GD_{Hexogen}$ = 0,003 mg/kg/d.

Die Leitwerte für kurzfristige Expositionen LW_{KE} liegen für alle Expositionszeiten (3, 10, 70 Jahre) für einen Erwachsenen bei

$$\mathbf{LW_{AI3,10,70} = 1{,}1 \cdot 10^{-2}\ mg/l = 11\ \mu g/l}$$

8.4 Diskussion und Schlussfolgerungen

Der internationale Vergleich zeigt starke Unterschiede bei der Erfassung, Erkundung, Bewertung und Sanierung von militärischen Altlasten und anderen Umweltkontaminationen. Ein „phasenweises" Vorgehen ist in keinem Land außer in Deutschland formalisiert. Die angewendete gefahrenbasierte (retrospektive) Herangehensweise, z.B. im Altlastenbereich, identifiziert einen toxischen Stoff und leitet ab einem bestimmten Parameterwert entsprechende Maßnahmen ein, um die Gefahr zu beseitigen. Vorsorgende (prospektive) Bewertungsansätze wurden zwar immer wieder diskutiert, konnten aber bislang für Trinkwasser noch nicht hinreichend systematisiert werden.

Wegen der zentralen Bedeutung einer risikobasierten Herangehensweise bei der (vorsorgenden) Bewertung von Umweltkontaminanten wurde ein Modell entwickelt, mit dem das Risiko für die menschliche Gesundheit durch Trinkwasserverunreinigungen mit Umweltkontaminanten quantitativ über Kennzahlen erfasst werden kann. Das Ziel dieser Risikoabschätzung ist die systematische und rationale Ermittlung einer möglichst richtigen Aussage über die Wahrscheinlichkeit einer bestehenden oder zukünftigen Gefährdung bzw. über die Risikohöhe einer Kontamination.

Die Bewertungsmethodik basiert auf den Eigenschaften der Risikobetrachtung a) chemischer Impuls, b) Transportweg und c) exponiertes Medium, wobei die Spezifizierung zunächst in der Berücksichtigung a) militärischer Stoffe, b) Trinkwasser und c) der menschlichen Gesundheit liegt. Sie gliedert sich formell in einem Bewertungskomplex mit fünf Komplexteilen von Bewertungskriterien, welche die Vor-Ort Parameter auf der Basis beprobungsloser Kriterien und lokaler Standortuntersuchung sowie die Kriterien der Stoff-Charakterisierung umfassen. Die für die korrekte Beschreibung aller Ergebnisse der Bewertungskriterien erforderlichen „Kennzahlen" werden anhand definierter Arbeitsschritte und in Form von einem - dem Stand der Recherchen entsprechendem – Bewertungsraster von Gefährdungsstufen (GS) für Trinkwasser berechnet. Die Bewertungsergebnisse der Komplexteile werden in fünf Informationsebenen von niedrig bis sehr hoch eingestuft. Die Informationsebene der stoffspezifischen Bewertung (Bewertungskomplexteil C) für die Ermittlung von Prioritätskontaminanten sowie die Risikoquantifizierungen für Mensch und Umwelt (Bewertungskomplexteile D und E) werden als hoch bis sehr hoch bezeichnet. Die Gesamtbewertung hat damit ihren Schwerpunkt in der Stoff-Charakterisierung und besitzt hierdurch einen deutlich prospektiven Charakter.

Die Bewertungen der militärischen Liegenschaften auf dem Gebiet der ehemaligen DDR hinsichtlich potentieller Gefahren für Trinkwasser ergaben, dass die Informationsgehalte der ausgewerteten Erkundungs- bzw. Untersuchungsberichte für die Darlegung (potentiell) trinkwasserrelevanter Kontaminationen i.d.R. niedrig sind. So ließ sich aus den einzelnen militärischen Nutzungsbereichen der Westgruppe der Truppen (WGT) der ehemaligen Sowjetarmee und der Nationalen Volksarmee (NVA) zwar oft aus Verdachtskontaminanten (Bewertungskomplex A) jedoch nur vereinzelt aus Hauptkontaminanten (Bewertungskomplex B) auf Prioritätskontaminanten (Bewertungskomplex C) mit toxikologischer Relevanz für den Menschen schließen. Neben Kampfmitteln, wie Munitions- bzw. Explosivstoffresten, sind dies im wesentlichen Mineralölprodukte, welche erhebliche trinkwasserhygienische Probleme bereiten können. Andere trinkwasserrelevante Verdachtskontaminanten sind die organischen Lösemittel, insbesondere die halogenierten Lösemittel, die trotz der insgesamt sehr gering geschätzten Schadstoffmenge, ein hohes Kontaminationspotential besitzen.

Die Bewertungsergebnisse zeigen, dass von jeder dritten ehemaligen WGT-Liegenschaft bzw. -Teilliegenschaft ein Gefährdungspotential für die Trinkwasserversorgung ausgeht. Sofortmaßnahmen waren in 23 Fällen einzuleiten, um eine direkte Gefährdung der menschlichen

Gesundheit auszuschließen. Für über 80% der untersuchten ehemaligen NVA-Liegenschaften in Sachsen konnte aufgrund der Bewertung festgestellt werden, dass auch langfristig keine Auswirkungen von Umweltkontaminationen auf die umliegenden Trinkwasserressourcen zu erwarten sind. Auf nahezu jeder fünften dieser NVA-Liegenschaften besteht Altlastenverdacht oder es wurden Altlasten mit wassergefährdenden toxischen Stoffen festgestellt, die eine potentielle Gefährdung von Trinkwasserressourcen darstellen. Sofortmaßnahmen konnten in 2 Fällen eingeleitet werden.

Dass ein Bewertungsergebnis nicht zwingend die tatsächlichen Gegebenheiten bescheinigen kann, ist vor allem bei einer unsicheren oder unvollständigen Datenlage der Fall. Bei den durchgeführten stoffspezifischen Bewertungen (Bewertungskomplexteile C, D und E) konnte dies aber i.d.R. dadurch minimiert werden, dass Datenlücken mit in die Bewertung einbezogen wurden. Das Stoff-Charakterisierungs-System (SCS), als eine Weiterentwicklung der humantoxikologischen Bewertungszahl von **Dieter 1994**, bewertet und verknüpft neben der Humantoxizität die stoffspezifischen Eigenschaften des biochemischen Abbaus, der Aquatoxizität und der Mobilität in einzelnen Bewertungsmodulen, die miteinander zu einer Gesamtaussage der Trinkwasserrelevanz verknüpft werden. Für diese Einzelbewertungen sind ein Mindestbestand an Daten sowie deren Qualität und Aktualität zu dokumentieren. Eventuelle experimentelle Datenlücken sollen über zusätzliche (fakultative) Aussagen und Sicherheitsfaktoren (SF) soweit kompensiert werden, so dass die Ergebnisse der Einzelbewertungen und die Gesamtaussage den tatsächlichen Gegebenheiten sehr nahe kommen. Diese Methodik zur Beschreibung und Berücksichtigung der Datenlücken im Bewertungsverfahren ist insofern anwendbar, um Unsicherheiten bei der Bewertung aufgrund einer inhomogenen Datenlage zu begegnen und vorläufig auszuräumen, bis bessere Daten zur Verfügung stehen. Voraussetzung ist die Kennzeichnung als „vorläufiges“ Ergebnis und die regelmäßige Überprüfung der Datenlage auf Aktualität.

Die Ergebnisse der einzelnen prospektiven Bewertungsmodule von Hexogen als potentieller Trinkwasserkontaminant zeigen gute Übereinstimmung mit bisherigen praktischen Erfahrungen bzw. z.T. vorliegenden Bewertungsergebnissen anderer Autoren. Weitere Umweltchemikalien aus nicht militärischer Anwendung wurden in die Untersuchen einbezogen, um das Stoff-Charakterisierungs-System (des Bewertungskomplexteiles C) zu validieren und somit allgemein für die Bewertung von Umweltkontaminanten anwendbar zu machen. Diese waren die Pestizide Nitrofen (Herbizid) und Toxaphen (Insektizid), Dodecylbenzolsulfonat als vielfach eingesetzter wirksamer Bestandteil von Reinigungsmitteln sowie Ethylenglykol, ein ubiquitär eingesetztes Frostschutzmittel. Zu der Diskussion über pharmazeutische Substanzen aus der medizinische Diagnostik und deren Gefährdungspotential als Trinkwasserkontaminanten wurde Iopromid als Vertreter jodhaltiger Röntgenkontrastmittel (RKM) der medizinischen Diagnostik bewertet. Hierbei zeigte sich, dass die getroffenen Annahmen für die Aufstellung der Bewertungskriterien und die zugrunde liegenden Berechnungsverfahren angemessen und gerechtfertigt sind. Die Anwendung des Stoffcharakterisierungssystems (SCS) ist damit nicht auf militärische Altlaststoffe begrenzt, sondern diese Bewertung ist auf alle Umweltchemikalien anwendbar.

Unter der Maßgabe eines umfassenden Gewässerschutzes für die Trinkwassergewinnung hat sich die retrospektive Feststellung von Gefahren aus Umweltkontaminationen im Rahmen der vorliegenden Arbeit auf zwei Ebenen bewährt. Im ersten Schritt erfolgte die Ableitung einer aquatoxikologisch begründeten Höchstkonzentration aus einer NOEC bzw. LOEC (i.d.R. Fischtoxizität) unter Anwendung von maximal vier Extrapolationsfaktoren (EF). Im zweiten Schritt wird aus einem NOAEL bzw. LOAEL aus dem Tierversuch eine tolerierbare tägliche Dosis (TDI) und daraus ein gesundheitlicher Leitwert für den Menschen abgeleitet. Über dieses Vorgehen ist es möglich, den Sanierungsbedarf aqua- bzw. humantoxikologisch zu begründen und von technisch begründeten oder im gesellschaftlichen Konsens festgelegten Grenzwerten zu bereinigen, wo dies notwendig ist.

Für Hexogen hat sich gezeigt, das die aquatoxikologisch berechnete Höchstkonzentration weit oberhalb des gesundheitlichen Leitwertes und auch oberhalb des für den Sanierungsbedarf relevanten kurzfristigen Leitwertes für den Menschen liegt. Dies erklärt sich aus der Berücksichtigung einer möglichen karzinogenen Wirkung beim Menschen. Für andere Umweltkontaminanten ist eine unterhalb des Leitwertes liegende HZK das Sanierungsziel, da oberhalb dieser HZK eine Gewässerbeeinträchtigung stattfindet kann und hierdurch die Anforderungen der DIN 2000 nicht erfüllt sind.

Als eine weitere Schlussfolgerung dieser Arbeit wird vorgeschlagen, die aufgezeigten Bewertungskriterien der Trinkwasserhygiene verstärkt in die praktische Arbeit der Erfassung, Bewertung und Sanierung von Altlasten einzubeziehen. Für die Bewertung von Altlasten in Einzugsgebieten von Trinkwasserfassungen bedeutet dies - z.B. im Rahmen des Leistungsbildes der Altlasterkundungen der Phasen I bis IV die Ergänzung durch folgende Punkte (vgl. Kapitel 11.2 Anhang):

Identifikation der Gefahr

1 Systematisierung der Auslösung von Ersterkundungsmaßnahmen in der Phase 0 (Feststellung einer Anscheinsgefahr) und der Phase I. Die Identifikation der Gefahr für Trinkwasser geht über die allgemeinen Forderungen bisheriger Verfahren hinaus und fordert die Einbeziehung der Feststellung des Erstverdachtes als ersten prospektiven Bewertungsschritt der Gesamtrisikobewertung **(Mulisch 2000b)**. Erst hierdurch wird die Annäherung von der rein gefahrenbasierten zur risikobasierten Herangehensweise möglich (vgl. Kapitel 4 und Anhang).

2 Integration der Belange der Trinkwasserhygiene in die technische Erkundung mit deren Unterpunkten IIa der orientierenden Phase und IIb der Detailerkundung (vgl. Kapitel 4.2.2).

Bestimmung der Toxizität

3 Stärkere Berücksichtigung standardisierter Toxizitätsbewertungen und Verknüpfung der toxikologischen Bewertung mit stoffimmanenten Daten der Persistenz und Mobilität in der Detailerkundung und für Sanierungsentscheidungen der Stufen III „Sanierungs-untersuchung“ und IV „Sanierungsplanung und –überwachung“ gem. Kapitel 4.3 bzw. Kapitel 5 und Kapitel 6 sowie den Ausführungen im Anhang).

Exposition und Risikocharakterisierung

4 Zeitliche Differenzierung von Expositionsdaten bei der Risikocharakterisierung und Ableitung des kurzfristigen Leitwertes aus dem gesundheitlichen Leitwert für den Menschen als Maßnahmewert in Abwägung zur aquatoxikologischen Höchstkonzentration.

Risikomanagement

5 Schaffung von integrierten Umwelt-, Hygiene- und Risiko-Managementstrukturen als Instrumente zur Regelung von Verantwortlichkeiten, Kosten, Stoffströmen unter der Prämisse der Nachhaltigkeit (vgl. DIN EN ISO 9001, DIN EN ISO 14001, EMAS, HACCP-Konzept).

Die Ergänzungen der Punkte 1 bis 4 gewährleisten die Sicherstellung der Versorgung mit Trinkwasser einwandfreier Qualität auch in Einzugsgebieten von Altlasten oder sonstigen Umweltkontaminanten hinreichend. Punkt 5 zeigt neue Wege der Umwelt- und Qualitätssicherung für Wasserbetriebe und Gesundheitsbehörden auf, die über die gesetzlichen Anforderungen hinausgehen, indem durch freiwillige Maßnahmen des Wasserversorgers im betrieblichen Umweltschutz und Ressourcenmanagement, eine nachhaltige Qualitätssicherung des Trinkwassers sichergestellt ist.

9 ZUSAMMENFASSUNG

Eine der Leitlinien moderner Wasserversorgung ist der Ersatz des Durchflussprinzips durch ein modernes Kreislaufprinzip. Um so mehr gilt es, den Selbstreinigungsprozess im Wasserkreislauf zu unterstützen sowie diesen Prozess speziell hinsichtlich die Trinkwassergewinnung bzw. -versorgung verstärkt zu kontrollieren. Dabei fällt der trinkwasserhygienischen Bewertung bei der Vielzahl potentieller Kontaminanten eine wesentliche Bedeutung zu: Gesundheitliche Gefahren aus Verunreinigungen müssen im Vorfeld erkannt werden, um rechtzeitige Abhilfemaßnahmen treffen zu können.

Gegenstand dieser Arbeit war die Darstellung von Kriterien zur Bewertung von Risiken für die menschliche Gesundheit durch Umweltkontaminanten im Trinkwasser. Die Problematik von Umweltkontaminanten wurde zunächst am Beispiel militärischer Altlasten dargestellt und darauf aufbauend in ein umfassend anwendbares Bewertungssystem für Böden und Gewässer verallgemeinert. Dem Vorsorgeanspruch der Trinkwasserhygiene entsprechend wurde ein Verfahrenskonzept entwickelt, das eine prospektive Bewertung potentieller Umweltkontaminationen zulässt. Über Stoffcharakteristiken wurden so genannte Stoffkoeffizienten (SC) definiert und berechnet, die in ihrer Kombination eine mögliche Exposition und Gefahr (Risiko) bei der Trinkwassergewinnung aus Grund- oder Oberflächenwasser aufzeigt.

Um Gefahren zu erkennen bzw. gesundheitliche Risiken abzuwägen, wurden im prospektiven 1. Schritt der Risikobewertung die komplexen biophysikalischen, chemischen und biochemischen Übertragungswege sowie der mikrobielle Metabolismus systematisiert. Das trinkwasserhygienische Bewertungssystem über Stoffkoeffizienten (SC) umfasst im Wesentlichen den Parameter SC_{BIO} für den biochemischen Abbau in der Umwelt sowie die Parameter SC_{TOX} bzw. SC_{AQU} für die Schädlichkeit des Umweltkontaminanten gegenüber dem menschlichen Organismus bzw. der aquatischen Umwelt. Die Verknüpfung der Einzelbewertungen erfolgt zum SC_{TOR} mit der Aussage der umwelttoxikologischen Relevanz des Umweltkontaminanten. Ergänzt wurde das SC-Bewertungssystem durch Parameter der Mobilität der Substanzen in der Umwelt als SC_{MOB}.

Im 2. Schritt wurden (nach Gefahrenfeststellung) eindeutige gesundheitsbezogene Expositionsgrenzen in Form von Maßnahmewerten (kurzfristige gesundheitliche Leitwerte LW_{KE}) im Rahmen von humantoxikologischen Bewertungen sowie zulässige Höchstkonzentrationen (HZK) durch aquatoxikologische Bewertungen erarbeitet und hinsichtlich des Sanierungsbedarfs festgelegt. Die Prioritätensetzung eines Sanierungsbedarfs orientiert sich dabei an - aus der Kumulationstendenz der Stoffe im menschlichen Organismus berechneten - zeitlich strukturierten Maßnahmewerten. Hierdurch wurde es ermöglicht, Prioritätensetzungen bei Sanierungsentscheidungen, z.B. auch im Vorfeld zu „*natural attenuation*"-Entscheidungen[52] bei Altlastenflächen hinreichend wissenschaftlich zu hinterlegen und dadurch auch juristisch abzusichern.

Durch die vorliegende Arbeit konnte somit ein modular aufgebautes System zur Gesamtbewertung von Umweltkontaminanten in Trinkwasser aufgebaut werden, das stoffliche Expositions- und Gefährdungspotentiale für den Menschen oder für aquatische Organismen rechtzeitig erkennt und quantifiziert. Für Fälle, in denen die Bewertung ein bestimmtes

[52] Natürlicherweise im Untergrund ablaufende Abbau- und Rückhalteprozesse werden unter dem von der US-EPA definierten Begriff "*natural attenuation*" zusammengefasst. Der Übergang zwischen *natuaral attenuation* und aktiven Sanierungsmaßnahmen ist fließend. Die Akzeptanz der Schadstofffahne im Grundwasser als Reaktionsraum für *natuaral attenuation* steht im Konflikt mit dem Deutschen Wasserrecht.

Expositions- und Risikopotential vorhersagt oder eine nicht rechtzeitig vorhergesagte Gefährdung abgewehrt werden muss, werden zusätzlich Höchstkonzentrationen zum Zwecke des Risikomanagements benannt. Mit ihrer Hilfe kann bewertet und darüber entschieden werden, ob die chemische Qualität eines kontaminierten Trinkwassers (noch) gesundheitlich sicher ist und ob die chemische Qualität eines kontaminierten Gewässers die aquatische Biozönose nachteilig beeinflussen könnte.

10 VERZEICHNISSE

10.1 Tabellen

10.2 Bilder

10.3 Abkürzungen und Glossar

10.1 Tabellen

Seite

Tabelle 2.1 Rüstungsaltlasten: Beispiele von Explosivstoffen 5

Tabelle 2.2 Beispiele für grundwasserrelevante Schadstoffgruppen aus Rüstungs- und militärischen Altlasten 7

Tabelle 2.3 Differenzierung der Nutzbarkeit von Grundwasservorkommen in Deutschland zur Trinkwassergewinnung 10

Tabelle 4.1 Beschränkung der Risikobetrachtung auf Basiseigenschaften 21

Tabelle 4.2 Modularer Aufbau des Bewertungskomplexes 23

Tabelle 4.4 Bewertungskomplexteil A 27

Tabelle 4.5 Bewertungskomplexteil B: Kriterien zur Feststellung von Gefahren für Trinkwasser durch militärische Altlasten auf der Basis von Untersuchungsergebnissen (nicht eingerückt = obligatorische, kursiv und eingerückt = fakultative Kriterien) 29

Tabelle 4.6 Bewertungskomplexteil C: Kriterien zur Bestimmung der Stoffcharakteristik für die trinkwasserhygienische Bewertung (nicht eingerückt = obligatorische Kriterien; *kursiv und eingerückt* = fakultative Kriterien) 31

Tabelle 4.7 Grundlage des GS-Bewertungsrasters 31

Tabelle 4.8 Differenzierung des GS-Bewertungsrasters 32

Tabelle 4.9 Arbeitsschritte zur Einstufung von Liegenschaften mit ziviler und analog ziviler Nutzung (Kriterien vgl. Tabelle 4.4) 35

Tabelle 4.10 Arbeitsschritte zur GS_A-Einstufung im Bewertungskomplexteil A 37

Tabelle 4.11 Arbeitsschritte zur GS_B-Einstufung im Bewertungskomplexteil B 39

Tabelle 4.12 Arbeitsschritte zur GS_C-Einstufung im Bewertungskomplexteil C 40

Tabelle 5.1 Gruppen von Herkunftsbereichen und Eigenschaften von Umweltkontaminanten 42

Tabelle 5.2 Dokumentierte Daten für das Verfahren zur Bewertung der Humantoxizität 45

Tabelle 5.3 Integrierte Bewertung von Toxizität und Karzinogenität über die Stoffcharakteristik SC_{TOX} auf der Basis der toxikologischen Bewertungszahl nach Addition der Risikozuschläge RZ zu BZ_{TOX} 47

Tabelle 5.4 SC_{TOX} von Umweltkontaminanten - Klassifizierung nach Datenlage 47

Tabelle 5.5 Beispiele rechnergestützter Expertensysteme der prädiktiven Toxikologie 50

Tabelle 5.6 Dokumentierte Daten für das Bewertungsverfahren der biochemischen Abbaubarkeit 53

Tabelle 5.7 SC_{BIO} - Bewertung der Datenbasis zur biochemischen Abbaubarkeit 54

Tabelle 5.8 SC_{BIO} - Bewertung der biochemischen Abbaubarkeit 55

Tabelle 5.9 SC_{BIO} - Bewertung der Hydrolyse und Photolyse über Abbauabschläge 56

Tabelle 5.10 SC_{BIO} - Bewertung von sonstigen Ergebnissen zum biochemischen Abbau 56

Tabelle 5.11 Charakterisierung von chemischen Verbindungen hinsichtlich ihrer biochemischen Abbaubarkeit - Gruppenzuordnung 57

Tabelle 5.12 Charakterisierung von Umweltkontaminanten hinsichtlich ihrer biochemischen Abbaubarkeit – Aussagen für praktische Belange 59

Tabelle 5.13 SC_{BIO} - Bewertung der biochemischen Abbaubarkeit von Umweltsubstanzen - Klassifizierung nach Datenlage 60

Tabelle 5.14 Beispiele der Abhängigkeit des biochemischen Abbaus von der chemischen Konstitution 61

Tabelle 5.15 Dokumentierte Daten für das Bewertungsverfahren der Mobilität von Stoffen als SC_{MOB} 63

Tabelle 5.16 SC_{MOB} - Bewertung der Datenbasis zur Mobilität 64

Tabelle 5.17 SC_{MOB} - Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit 65

Tabelle 5.18 SC_{MOB} - Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen 66

Tabelle 5.19 SC_{MOB} - Bewertung von sonstigen Ergebnissen zur Mobilität 66

Tabelle 5.20 Mobilität als SC_{MOB} von Substanzen über die Stoffcharakteristiken $SC_{LÖS}$ und SC_{ADS} (vereinfachtes Verfahren) 68

Tabelle 5.21 Dokumentierte Daten zur Bewertung der Aquatoxizität von Stoffen (SC_{AQU}) 69

Tabelle 5.22 SC_{AQU} - Bewertung der Datenbasis zur Aquatoxizität 70

Tabelle 5.23 SC_{AQU} - Berechnung des Eingangswertes EW_{AQU} zur Dosis-/Wirkungsbeziehung in der Aquatoxizität 71

Tabelle 5.24 Berechnung der Dosiszahl in der Aquatoxizität 72

Tabelle 5.25 SC_{AQU} - Bewertung von sonstigen Ergebnissen der Aquatoxizität 72

Tabelle 5.26 Charakterisierung von Umweltchemikalien hinsichtlich ihrer Aquatoxizität als SC_{AQU} – Gruppenzuordnung und vereinfachte Klassifizierung als SC_{LOEC} (mit $SC_{AQU} \sim SC_{LOEC}$) 73

Tabelle 6.1 Ableitung der duldbaren Körperdosis und des Gefahrenbezuges für den Menschen über Extrapolationsfaktoren aus der jeweiligen Datenbasis, Herstellung des Gefahrenbezugs mit Hilfe des IF und Beispielrechnung mit EF_a = 10, EF_b = 3, EF_c = 10, EF_d = 10 für Expositionen über Trinkwasser 78

Tabelle 6.2 Berechnung von Interpolationsfaktoren in Abhängigkeit der Expositionsdauer und der Kumulationstendenz von Umweltchemikalien (vgl. auch **Dieter und Henseling 2003**) 80

Tabelle 7.1 Schadstoffgruppen auf ALVF und deren relative Anteile auf WGT-Flächen 85

Tabelle 7.2 Ergebnisse der Bewertung WGT-Liegenschaften in Gefährdungsstufen (GS_{A-B} I – VI) für die Trinkwasserversorgung aufgeschlüsselt nach den Ländern Berlin (BE), Brandenburg (BB), Mecklenburg-Vorpommern (MV), Sachsen (SN), Sachsen-Anhalt (SN) und Thüringen (TH), (vgl. UFOPLAN 202 02 664 /UBA-FB 99-089,) **(Mulisch 1999)** 88

Tabelle 7.3 Verwertungsstand ehemaliger NVA-Objekte im Freistaat Sachsen **(Mulisch 1998)** 89

Tabelle 7.4 Verwertungsstand ehemaliger NVA-Objekte im Freistaat Sachsen **(Mulisch 1998)** 89

Tabelle 7.5 NVA-Liegenschaften in den Bewertungskategorien A, B und C 90

Tabelle 7.6 NVA-Liegenschaften in Gefährdungsstufen für Trinkwasser nach Kategorie A 90

Tabelle 7.7 Aufschlüsselung der NVA-Liegenschaften mit Gefahrenverdacht für Trinkwasserressourcen nach ehemaligen Nutzungskategorien 91

Tabelle 8.1 Identität und Stoffkonstanten von Hexogen 93

Tabelle 8.2 Relevante physiko-chemische Daten von Hexogen 95

Tabelle 8.3 Bewertungsraster SC_{MOB} für Hexogen 96

Tabelle 8.4 Darstellung von aquatoxikologischen Daten von Hexogen (Auszug) 97

Tabelle 8.5 Bewertungsraster SC_{AQU} für Hexogen 98

Tabelle 8.6 Bewertungsraster SC_{TOX} von Hexogen 101

Tabelle 8.7 Bewertungsraster SC_{BIO} für Hexogen 103

Tabelle 11.1.1 Ersteinschätzung der Altlastenrelevanz von chemischen Kampfstoffen - Hinreichende Daten für die Feststellung eines „Anscheinverdachtes“ 131

Tabelle 11.1.2 Ersteinschätzung der Altlastenrelevanz von Explosivstoffen - Hinreichende Daten für die Feststellung einer „Anscheingefahr“ 137

Tabelle 11.2.1 Leistungsbild für Planer- und Gutachterleistungen bei der Altlastensanierung 141

Tabelle 11.2.2 Material- und Datenrecherche (vgl. Historische Erkundung Punkt 3) 144

Tabelle 11.2.3 Kriterien zur Erstbewertung im Rahmen der Historischen Erkundung 145

Tabelle 11.2.4 Leistungsbild für Planer- und Gutachterleistungen bei der Altlastensanierung 146

Tabelle 11.3 Auswertung der Erstbewertung im FKST - Altlastprogramm **(FKST 1994)** zu kontaminationsverdächtigen Nutzungsbereichen und Verdachtskontaminanten 148

Tabelle 11.4.1 Bewertung der toxikologischen Datenbasis (vgl. **Dieter, Kaiser et al. 1990; Dieter 1994)** 159

Tabelle 11.4.2 Bewertung der Dosis-/Wirkungsbeziehungen 160

Tabelle 11.4.3 Bewertung der Karzinogenität von Stoffen über Risikozuschläge 161

Tabelle 11.4.4 Bewertung von sonstigen toxikologischen Prüfungen 161

Tabelle 11.5 Stoffcharakteristiken der Aquatoxizität von ausgewählten Umweltchemikalien 162

Tabelle 11.6.1 Identität und Stoffkonstanten von Nitrofen 163

Tabelle 11.6.2 Relevante physiko-chemische Daten von Nitrofen 165

Tabelle 11.6.3 Bewertungsraster SC_{MOB} für Nitrofen 167

Tabelle 11.6.4 Bewertungsraster SC_{AQU} von Nitrofen 169

Tabelle 11.6.5 Bewertungsraster SC_{TOX} von Nitrofen 173

Tabelle 11.6.6 Bewertungsraster SC_{BIO} von Nitrofen 175

Tabelle 11.6.7 Identität und Stoffkonstanten von Dodecylbenzolsulfonat 177

Tabelle 11.6.8 Relevante physiko-chemische Daten von Dodecylbenzolsulfonat 179

Tabelle 11.6.10 Zusammenfassende Darstellung von aquatoxikologischen Daten von Dodecylbenzolsulfonat 181

Tabelle 11.6.11 Bewertungsraster SC_{AQU} von Dodecylbenzolsulfonat 182

Tabelle 11.6.12 Untersuchungsergebnisse zur akuten Toxizität von DBS im Tierversuch 183

Tabelle 11.6.13 Bewertungsraster der SC_{TOX} von Dodecylbenzolsulfonat 184

Tabelle 11.6.14 Bewertungsraster SC_{BIO} von Dodecylbenzolsulfonat 188

Tabelle 11.6.15 Identität und Stoffkonstanten von Toxaphen 190

Tabelle 11.6.16 Relevante physiko-chemische Daten von Toxaphen 191

Tabelle 11.6.17 Bewertungsraster SC_{MOB} von Toxaphen 193

Tabelle 11.6.18 Zusammenfassende Darstellung von aquatoxikologischen Daten von Toxaphen (Auszug aus **(PAN 2003)**) 194

Tabelle 11.6.19 Bewertungsraster SC_{AQU} von Toxaphen 195

Tabelle 11.6.20 Bewertungsraster SC_{TOX} von Toxaphen 199

Tabelle 11.6.21 Bewertungsraster SC_{BIO} von Toxaphen 201

Tabelle 11.6.22 Identität und Stoffkonstanten von Ethylenglykol 203

Tabelle 11.6.23 Relevante physiko-chemische Daten von Ethylenglykol 204

Tabelle 11.6.24 Bewertungsraster SC_{MOB} von Ethylenglykol 205

Tabelle 11.6.25 Zusammenfassende Darstellung der aquatoxikologischen Daten von Ethylenglykol 206

Tabelle 11.6.26 Bewertungsraster der SC_{AQU} von Ethylenglykol 207

Tabelle 11.6.27 Bewertungsraster SC_{TOX} von Ethylenglykol 211

Tabelle 11.6.28 Bewertungsraster SC_{BIO} von Ethylenglykol 213

Tabelle 11.6.29 Identität und Stoffkonstanten von Iopromid 215

Tabelle 11.6.30 Relevante physiko-chemische Daten von Iopromid 216

Tabelle 11.6.31 Bewertungsraster der SC_{MOB} von Iopromid 217

Tabelle 11.6.32 Zusammenfassende Darstellung der aquatoxikologischen Daten von Iopromid 218

Tabelle 11.6.33 Bewertungsraster der SC_{AQU} von Iopromid 219

Tabelle 11.6.34 Bewertungsraster der SC_{TOX} von Iopromid 224

10.2 Bilder

Seite

Bild 4.1 Schematischer Aufbau der Gesamtbewertung des Risikos von Umweltkontaminanten für Trinkwasser 22

Bild 4.2 Arbeitsschritte bei der Bewertung aus den Komplexteilen A, B und C in die Gefährdungsstufen für Trinkwasser (GS) 36

Bild 5.1 Biochemischer Abbau von organischen und anorganischen Substanzen dargestellt als Bewertungszahl BZ_{BIO}, als Gruppeneinteilung (BIO-Gruppe) und als Stoffcharakteristik SC_{BIO} 59

Bild 5.2 Schematische Aussagen zur Stoffcharakteristik der umwelttoxikologischen Relevanz SC_{TOR} 62

Bild 5.3 Darstellung des Stoff-Charakterisierungs-Systems (SCS) 74

Bild 7.1 Schadstoffgruppen auf Altlastverdachtsflächen der WGT-Liegenschaften 84

Bild 7.2 Geschätzte umweltrelevante Massen von Altlaststoffen aus Abfällen chemischer Umwandlungs- und Syntheseprodukte (Schlüssel-Nr. 5) auf ALVF der WGT in Tonnen (t) 86

Bild 7.3 Anzahl der Altlastverdachtsflächen (ALVF) mit Abfällen aus chemischen Umwandlungs- und Syntheseprodukten (Schlüssel-Nr. 5) auf Liegenschaften der WGT 87

10.4 Abkürzungen und Glossar

AAV	Aufenthalts- und Abzugsvertrag
ADI	*Acceptable daily intake*, =akzeptable Tagesdosis; toxikologisch duldbare Exposition des Menschen gegenüber einem (absichtlich in die Umwelt ausgebrachten) Schadstoff in mg/kg KM/d
AG	Arbeitsgemeinschaft des BMGS "Auswirkungen militärischer Altlasten auf das Trinkwasser"
ALADIN	Altlasten-Dokumentations- und Informationssystem des Umweltbundesamtes
ALVF	Altlastverdachtsfläche(n)
AS	Arbeitsschritt(e); der Kriterienkatalog ist auf 28 Arbeitsschritten aufgebaut
BaP	Benzo-a-pyren; PAK, ($C_{20}H_{12}$)
Basiswert (BW)	Alte Bezeichnung für den „gesundheitlichen Leitwert (LW)“. Er bezeichnet die lebenslang gesundheitlich duldbare Konzentration eines Stoffes im Trinkwasser
BB	Belebungsbecken (Labor BB = Laborbelebungsbecken)
BB	Bundesland Brandenburg
BBodSchG	Bundesbodenschutzgesetz (vom 17.März 1998 BGBl. I S. 502)
BBodSchV	Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung
BE	Bundesland Berlin
Beurteilung von Gefahren	Abweichend von der in der Humantoxikologie üblichen Beurteilung der Vollständigkeit der wissenschaftlichen Datenlage (im Rahmen der toxikologischen Bewertung einer Stoffexposition) wird hier der Begriff „Beurteilung“ im Zusammenhang mit dem ordnungsrechtlichen Gefahrenbegriff benutzt. Zweck ist die Beantwortung der Frage, ob eine Gefahr (hier z.B. für Trinkwasser) vorliegt oder nicht.
BGA	Bundesgesundheitsamt
BGBl.	Bundesgesetzblatt
BMBau	Bundesbauministerium
BMF	Bundesministerium der Finanzen
BMGS	Bundesministerium für Gesundheit und soziale Sicherung
BMU	Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit
BSBW	Biochemischer Sauerstoffbedarf für den aeroben Abbau von in Wasser gelösten Stoffen im Respirometer, z.B. Warburg Gerät (W), nach einem standardisierten Verfahren ermittelt
BTEX	Benzol, Toluol, Ethylbenzol, Xylol
BVA	Bundesvermögensamt
BVerwG	Bundesverwaltungsgericht
Bw	Bundeswehr
BZ_{AQU}	Aquatoxikologische Bewertungszahl zwischen 1 – 100 für Umweltkontaminanten, nach einem standardisierten Verfahren ermittelt
BZ_{BIO}	Dimensionslose Bewertungszahl zwischen 1 - 100 für den biochemischen Abbau von Substanzen, nach einem standardisierten Verfahren ermittelt
BZ_{MOB}	Dimensionslose Bewertungszahl zwischen 1 - 100 für Mobilität von Substanzen, nach einem standardisierten Verfahren ermittelt
BZ_{TOX}	Toxikologische Bewertungszahl zwischen 1 - 100 für chemische Substanzen nach **Dieter et al.,** nach einem standardisierten Verfahren ermittelt
CKW	Chlorierte Kohlenwasserstoffe
CL	Stoffkonzentration in der Bodenlösung [mg/l]

CSB	Chemischer Sauerstoffbedarf für den aeroben Abbau von Stoffen mittels Dichromat und Schwefelsäure
$c_{Schadstoff}$	Schadstoffkonzentration
CT	Gesamtkonzentration des Schadstoffes im Boden [mg/kg TS] bzw. im Wasser [mg/l]
Dampf-druck	Der Dampfdruck ist definiert als der Druck des Dampfes einer Substanz unter Gleichgewichtsbedingungen. Literaturangaben in anderen Maßeinheiten wurden wie folgt umgerechnet: 1 atm = 760 mm Hg = 1010,8 mbar = 101.080 Pa 1 Torr = 1 mm Hg = 1,33 mbar = 133 Pa 1 mbar = 100 Pa = 1 hPa Darstellung: Der Dampfdruck wurde in der SI-Einheit Pascal (Pa) angegeben. Angaben bei Raumtemperatur (15-25 °C) wurden bevorzugt. Größenordnung: Der Dampfdruck einer sehr flüchtigen Substanz liegt im Bereich mehrerer tausend Pa, für Dichlormethan (Methylenchlorid) beispielsweise bei 58.400 Pa, während der Dampfdruck von DDT mit 23 x 10^{-6} Pa sehr gering ist (Werte jeweils bei 25°C).
DDA	Dichlordiphenylessigsäure; Metabolit von DDT
DDD	1,1-Bis-(4-chlorphenyl)-2,2-dichlorethan; Metabolit von DDT
DDR	Deutsche Demokratische Republik
DDT	Dichlor-diphenyl-trichlorethan; Insektizid
Dichte	Die Dichte einer Substanz (Ds) ist eine temperaturabhängige Größe und wird in [g/ml] (= [g/cm^3]) angegeben. Die Dichte Ds lässt sich aus der spezifischen Dichte berechnen. Die spezifische Dichte (D) einer Substanz (auch als relative Dichte bezeichnet) ist eine dimensionslose Größe und ist definiert als: $D = D_s / D_w$ mit D_s = Dichte einer Substanz in [g/ml] und D_w = Dichte von destilliertem Wasser in [g/ml]. Die Werte für die spezifische Dichte werden gewöhnlich angegeben als: $D (T_S / T_W)$ mit T_S = Temperatur der Substanz zum Zeitpunkt der Messung in [°C] und T_W = Temperatur des Wassers in [°C] Da die Dichte von destilliertem Wasser bei 4 °C exakt 1.0000 g/ml beträgt, entspricht die spezifische Dichte einer Substanz bei Tw = 4 °C genau der Dichte Ds dieser Substanz in [g/ml]. Da D_W darüber hinaus bei Temperaturen von bis zu 30 °C immer noch > 0,995 g/ml ist, wurden vereinfacht auch Werte der spezifischen Dichte bei 4 °C <= T_W <= 30 °C direkt als Werte der Dichte D_S in [g/ml] übernommen. Größenordnung: Elementares Cadmium weist eine Dichte von 8,7 g/ml auf, Cadmiumchlorid eine Dichte von 4,0 g/ml und Kupferchlorid eine Dichte von 3,4 g/ml. Organische Substanzen weisen häufig eine Dichte unter 1 g/ml (also unter der Dichte von Wasser) auf. Im Bereich über 1 g/ml liegen beispielsweise Naphthalin (1,18 g/ml), Anthrazen (1,28 g/ml), Tetrachlorkohlenstoff (1,584 g/ml) und Tribrommethan (2,876 g/ml). (Alle Werte beziehen sich auf 25°C unter Normaldruck.)
DIN	Deutsches Institut für Normung
DK	Dieselkraftstoff(e)
DNA	Desoxyribonukleinsäure (Erbsubstanz)
DNT	Dinitrotoluol

DOC	*Dissolved Organic Carbon* (gelöster organischer Kohlenstoff)
DT_{50}	*Disappearence Time* (Halbwertszeit eines Stoffes im Untergrund)
e	empfindlichste Schutzzielgruppe
E	Erwachsene als durchschnittlich empfindliche Schutzzielgruppe
EC	European Commission
EF	Extrapolationsfaktor zur Ableitung des TDI für einen Stoff mit Wirkungsschwelle (= Sicherheitsfaktor)
EF_a	Extrapolationsfaktor zur Abschätzung eines chronischen NOAEL durch Hochrechnung von subchronischer auf chronische Expositionsdauer (entfällt bei Vorliegen bewertbarer chronischer experimenteller oder epidemiologischer Untersuchungen)
EF_b	Extrapolationsfaktor zur Abschätzung eines $NOAEL_{TV}$ aus einem experimentellen $NOAEL_{TV}$ (entfällt bei Vorliegen bewertbarer [sub]chronischer epidemiologischer Daten) mit Hilfe der Konvention $NOAEL_{TV} = LOAEL_{TV} : EF_b$ oder: Extrapolationsfaktor zur Abschätzung eines $NOAEL_E$ aus einem epidemiologisch ermittelten $LOAEL_E$ mit Hilfe der Konvention $NOAEL_E = LOAEL_E : EF_b$ (entfällt bei bekanntem $NOAEL_E$ oder $LOAEL_e$ der $NOAEL_e$) oder: Extrapolationsfaktor zur Abschätzung eines $NOAEL_e$ aus einem $LOAEL_e$ mit Hilfe der Konvention $NOAEL_e = LOAEL_e : EF_b$ (entfällt bei bekanntem $NOAEL_e$)
EF_C	Extrapolationsfaktor zur Überbrückung der zwischenartlichen Varianz zwischen Mensch und Versuchstier mit Hilfe der Konvention $LOAEL_e = LOAEL_{TV} : SF_c$ bzw. $NOAEL_E = NOAEL_{TV} : EF_c$ (entfällt bei Vorliegen bewertbarer [sub]chronischer epidemiologischer Daten)
EF_d	Extrapolationsfaktor zur Überbrückung der innerartlichen Varianz beim Menschen, falls der $NOAEL_E$ ersatzweise aus einem Tierversuch abgeleitet wurde mit Hilfe der Konvention $NOAEL_e = NOAEL_E : EF_d$ oder: Extrapolationsfaktor zur Abdeckung der innerartlichen Varianz beim Menschen, falls der $NOAEL_E$ epidemiologisch ermittelt wurde mit Hilfe der Konvention $NOAEL_e = NOAEL_E : EF_d$ (entfällt bei bekanntem $LOAEL_e$ oder $NOAEL_e$)
EF_g	Gesamtextrapolationsfaktor zur Ableitung des TDI für einen Stoff mit Wirkungsschwelle
EF_{gh}	gesamter humanrelevanter Extrapolationsfaktor zur Ableitung des TDI für einen Stoff mit Wirkungsschwelle
EGVA	Eigenwasserversorgungsanlage (Hausbrunnen)
EGW	Einwohnergleichwert(e); Schmutzbeiwert eines Abwassers bezogen auf den Anteil, den ein Einwohner pro Tag einbringt
EU	Europäische Union
EWG	Europäische Wirtschaftsgemeinschaft
EZVA	Einzelwasserversorgungsanlage
$F_{(Gef)}$	Gefahrenfaktor für die Herleitung der gefahrenverknüpfenden Dosis GD aus dem TDI (= Interpolationsfaktor)
FK	Feldkapazität des Bodens [mm/dm]
FKST	Fachkommission Soforthilfe Trinkwasser
g	Gewichtseinheit Gramm

GD	gefahrenverknüpfte Dosis (GD = TDI · IF)
GR	gefahrverknüpftes Risiko
Gefahren-wert (GefW)	Alte Bezeichnung für den „gesundheitlichen Leitwert für kurzfristige Expositionen LW_{KE}“. Konzentration eines Stoffes in stoffspezifisch definierter Höhe oberhalb seines gesundheitlichen Leitwertes LW. Kurzfristige Leitwerte LW_{KE} sind im Vergleich zum LW nur während entsprechend kürzerer, also nicht lebenslanger Belastungszeiten gesundheitlich sicher.
Gl.	Gleichung
GS	Gefährdungsstufe für Trinkwasser
GS_A, GS_B, GS_C	Gefährdungsstufe I bis VI für Trinkwasser durch Altlasten bezogen auf die Bewertungskomplexteile A, B, C
GUS	Gemeinschaft Unabhängiger Staaten
ha	Flächenmaß Hektar [1 ha = 100 m x 100 m]
HCH	Hexachlorcyclohexan
Henry-Konstante	Die Henry-Konstante (H), teilweise auch als Luft-Wasser-Verteilungskoeffizient oder Löslichkeitskoeffizient bezeichnet, ist definiert als der Quotient des Partialdrucks einer Substanz in Luft und der Aktivität (angenähert der Konzentration) dieser Substanz in Wasser bei einer gegebenen Temperatur unter Gleichgewichtsbedingungen: H = p / c mit H: Henry-Konstante [Pa m^3/mol]; p: Dampfdruck [Pa]; c: Konzentration [mol/m3] Die Henry-Konstante kann auch in ihrer dimensionslosen Form (H*) angegeben werden, die wie folgt definiert ist: H* = H / (R T) mit: R: Ideale Gaskonstante (8,20575x10-5 atm m^3/mol K); T: Temperatur des Wassers in [Kelvin] Zur Angabe der Henry-Konstante in [Pa m^3/mol] wurden Angaben in [atm m^3/mol] mit 101.080 multipliziert. Größenordnung: Als Anhaltspunkt können die folgenden Werte dienen: H < 1,011 x 10^{-2} Pa m^3/mol: => Die Substanz weist eine geringe Flüchtigkeit auf. 1,011 x 10-2 Pa m^3/mol < H < 1,011 Pa m^3/mol: =>Die Substanz verflüchtigt sich langsam. 1,011 Pa m^3/mol < H < 101,1 Pa m^3/mol: => Die Verflüchtigung wird ein wichtiger Transport-Mechanismus. H > 101,1 Pa m^3/mol: =>Schnelle Verflüchtigung.
HR	akzeptiertes Hintergrundrisiko für gentoxische Substanzen ohne wirkungsfreien Dosisbereich ($HR_{E70} = 10^{-6}$; exponiert ist eine Population von durchschnittlich empfindlichen Erwachsenen während 70 Jahren)
HSO-Wert	Stoffspezifischer Wert der hygiensch-sensorischen-Obergrenze; Grenzkonzentration eines Stoffes, deren Unterschreitung eine hygienisch-sensorische Beeinträchtigung beim Menschen (noch) nicht erwarten lässt
HZK	Höchstzulässige Konzentration = aquatoxikologisch begründete Höchstkonzentration eines Stoffes in Gewässern [mg/l]
i.d.R.	In der Regel
IABG	Industrieanlagen - Betriebsgesellschaft Ottobrunn GmbH
IC_{50}	Inhibitorkonzentration, die auf 50% der Organismen wirkt

IF_{3C}, IF_{10C}	Interpolationsfaktor zur Berechnung eines LW_{KR} aus dem LW_{70} eines Stoffes der Gruppe C (die zulässige Überschreitungsdauer des LW_{70} beträgt 3 oder 10 Jahre)
$IF_{A,B}$	Interpolationsfaktoren zur Berechnung eines LW_{KE} aus dem LW eines Stoffes der Gruppe A oder B
k	Abbaukonstante bei Stoffumsetzungen
KCN	Kaliumzyanid
k_f-Wert	Durchlässigkeitsbeiwert für Böden [m/s]
Kfz	Kraftfahrzeug
KG	Kilogramm
KM	Körpermasse in Kilogramm [KG]
K_{OC}	Der K_{OC} (o.c.: "organic carbon", organischer Kohlenstoff) beschreibt den Verteilungskoeffizienten einer Substanz zwischen dem organischen Kohlenstoff im Boden und der wässrigen Phase des Bodens. Er lässt sich bestimmen aus dem Verteilungskoeffizienten (K) des Stoffes zwischen dem Gesamtboden und der wässrigen Phase, dividiert durch den Anteil organischen Kohlenstoffs (o.c.) im Boden in Prozent: Koc = (100 % / o.c.) K Mit K = Konzentration der Substanz im Boden in [mg/kg] / Konzentration der Substanz im Wasser in [mg/l]. Der K_{OC} lässt sich ferner aus dem log P_{OW} berechnen. Der K_{OC} ist eine temperaturabhängige, dimensionslose Größe, die angenähert unabhängig vom jeweiligen Boden ist. Experimentell bestimmte Werte werden berechneten Werten vorgezogen. Größenordnung: Sehr hohe K_{OC}-Werte zeigen eine gute Adsorbierbarkeit und somit geringe Mobilität im Boden an; z.B. Anilin mit K_{OC} = 1,9 ist im Boden sehr mobil, während Hexachlorbenzol mit K_{OC} = 3900 eine geringe Mobilität im Boden aufweist.
Kriterium A1.1	Liegenschaft mit ziviler oder analog ziviler Nutzungshistorie
KVN	Kontaminationsverdächtiger Nutzungsstandort. Standort oder Bereich, der aufgrund seiner Nutzungshistorie vermuten lässt, dass mit wasserrelevanten Schadstoffen in relevanten Mengen umgegangen wurde
l	Volumeneinheit Liter
LC_{50}	letale Konzentration für 50% der Versuchstiere
LD_{50}	letale Dosis für 50% der Versuchstiere
LOAEL	niedrigste Dosis eines Stoffes mit beobachteter schädlicher Wirkung (*lowest observed adverse effect level*)
$LOAEL_E$	- für die Allgemeinbevölkerung (gesunde Erwachsene)
$LOAEL_e$	- für die Allgemeinbevölkerung einschließlich der empfindlichsten Bevölkerungsgruppe
$LOAEL_{TV}$	- aus dem Tierversuch (für Versuchstiere)
LOEC	niedrigste Konzentration eines Stoffes mit beobachteter Wirkung (*lowest observed effect concentration*; hier als aquatoxikologischer Schwellenwert)

log P_{OW}	log P_{OW} (auch mit log K_{OW} bezeichnet) ist der dekadische Logarithmus des Verteilungskoeffizienten P_{OW} (*partition coefficient octanol/water*). P_{OW} gibt den Quotienten der Gleichgewichtskonzentrationen einer Substanz in n-Octanol und Wasser an und ist eine dimensionslose Größe. Hohe log P_{OW}-Werte lassen vermuten, dass die entsprechende Substanz ein großes Akkumulationspotential besitzt. Log P_{OW}-Werte können experimentell ermittelt oder aus der Wasserlöslichkeit abgeschätzt werden. Geschätzte und berechnete log P_{OW}-Werte sind weniger zuverlässig als gemessene Werte. Größenordnung: Relativ niedrige log P_{OW}-Werte sind z.B. für Benzidin (1,34) und Phenol (1,48) bekannt. Sehr viel höhere Werte werden beispielsweise für Di(n-butyl)phthalat (4,54) und DDT (6,28) angegeben.
Lösemittel-KW	Aliphatische und aromatische Kohlenwasserstoffe, die zudem Bestandteile von Kraftstoffen sind.
Lösemittel-OH	Alkohole, vor allem Methanol, daneben Ethanol und iso-Propanol
Lösemittel-X	Halogenierte Lösemittel
LW	lebenslang gesundheitlich duldbarer Leitwert (Höchstkonzentration) für Stoffe mit Wirkungsschwelle im Trinkwasser in [mg/l] oder [µg/l]
$LW_{1,5}$	Gesundheitlicher Leitwert bei kurzfristiger Exposition. Konzentration eines Stoffes im Trinkwasser, deren Überschreitung für Belastungszeiten >1,5 Jahre gesundheitlich unsicher wäre
LW_{10}	Gesundheitlicher Leitwert bei kurzfristiger Exposition. Konzentration eines Stoffes im Trinkwasser, deren Überschreitung für Belastungszeiten >10 Jahre gesundheitlich unsicher wäre
LW_{70}	Gesundheitlicher Leitwert für Exposition durch einen Stoff im Trinkwasser, deren Einhaltung für Belastungszeiten $\leqslant$70 Jahre gesundheitlich sicher ist
LW_{KE}	gesundheitlich duldbarer Leitwert für kurzfristige Expositionen (Höchstkonzentration) für Stoffe *mit* Wirkungsschwelle im Trinkwasser in [mg/l] oder [µg/l]
LW_{KR}	gesundheitlich duldbarer Leitwert für kurzfristiges Risiko (Höchstkonzentration) für Stoffe *ohne* Wirkungsschwelle im Trinkwasser in [mg/l] oder [µg/l]
LW_{SK}	gesundheitlich duldbarer Leitwert für Säuglinge und Kleinkinder (Höchstkonzentration) für Stoffe mit Wirkungsschwelle im Trinkwasser in [mg/l] oder [µg/l]
m	Längeneinheit Meter
m.W.	mit Wirkungsschwelle
MAGMA	Modell zur Abschätzung der Gefährdung durch militärische und Rüstungsaltlasten
mg	Gewichtseinheit Milligramm [1.000 mg = 1 g]
mg/kg TS	Konzentrationsangabe in Milligramm pro Kilogramm Trockensubstanz
mg/l	Konzentrationsangabe in Milligramm pro Liter
MKW	Mineralölkohlenwasserstoffe
Mol	Molekulargewicht eines Stoffe in g
MV	Bundesland Mecklenburg-Vorpommern
MW	Messwert
NAEL	vermutete oder als tatsächlich unterstellte Wirkungsschwelle eines Stoffes beim Menschen (*no adverse effect level*); nicht beobachtet

Nitrofen	Herbizid; [2,4-Dichlorphenyl-4-nitrophenylether]
NOAEL	höchste Dosis eines Stoffes ohne beobachtete schädliche Wirkung (*lowest observed adverse effect level*)
$NOAEL_E$	- für die Allgemeinbevölkerung (gesunde Erwachsene)
$NOAEL_e$	- für die Allgemeinbevölkerung einschließlich der empfindlichsten Bevölkerungsgruppe
$NOAEL_{TV}$	- aus dem Tierversuch (für Versuchstiere)
$NOAEL_{tv}$	- aus dem Tierversuch (für Versuchstiere einschließlich empfindlichster Spezies oder Teilgruppe)
NOEC	höchste Konzentration eines Stoffes ohne beobachtete Wirkung (*no observed effect concentration*; hier als aquatoxikologischer Schwellenwert)
NVA	Nationale Volksarmee (der DDR)
o.b.	oben bezeichnet
o.W.	ohne Wirkungsschwelle
OFD	Oberfinanzdirektion
PAK	Polycyclische(r) aromatische(r) Kohlenwasserstoff(e), (C_nH_m mit n≥10, m≥8)
PCB	Pentachlorbenzol, C_6HCl_5
PCBs	Polychlorierte Biphenyl(e), $(C_6H_nCl_m)_2$ mit $\sum$ n,m = 10 und m ≥ 1
PCDD	Polychloriert(e) Dibenzdioxin(e), $(C_{12}O_2H_nCl_m)$ mit $\sum$ n,m = 8 und m ≥ 1
PCDF	Polychlorierte Dibenzfurane, $(C_{12}OH_nCl_m)$ mit $\sum$ n,m = 8 und m ≥ 1
pH-Wert	Negativer dekadischer Logarithmus der molaren H_3O^+-Konzentration
Q_∞	Gleichgewichtsbeladung eines in Wasser gelösten Stoffes (Adsorbat) am Adsorbens [mg/g]
RKS	Rammkernsondierung
SC	Stoffcharakteristik als standardisierter Koeffizienten für die boden- und gewässerhygienisch bedeutsamen Eigenschaften von Umweltkontaminanten
SC → [Zahlenwert]	Stoffkoeffizient geht gegen [Zahlenwert]
SC_{ADS}	Stoffcharakteristik der Adsorbierbarkeit einer in Wasser gelösten Substanz nach einem standardisiertem Verfahren ermittelt
SC_{BIO}	Stoffcharakteristik der biochemischen aeroben Abbaubarkeit von in Wasser gelösten Substanzen nach einem standardisierten Verfahren ermittelt
$SC_{LÖS}$	Stoffcharakteristik der Wasserlöslichkeit von Substanzen
SC_{MOB}	Stoffcharakteristik der Mobilität eines Stoffes im Untergrund unter Berücksichtigung der Adsorptionseigenschaft und Löslichkeit in Wasser
SCS	Stoff-Charakterisierungs-System
SC_{TOR}	Stoffcharakteristik der umwelttoxikologischen Relevanz ($SC_{TOR} = SC_{TOX} + SC_{BIO}$) eines Stoffes unter Berücksichtigung der Toxizität und der biochemischen Abbaubarkeit
SC_{TOX}	Stoffcharakteristik der Toxizität von Substanzen
SM	Schwermetall(e)
SN	Freistaat Sachsen
ST	Bundesland Sachsen-Anhalt
stk.	stark kumulierend
STV	Sprengstofftypische Verbindung(en), z.B. TNT, DNT, Nitropenta u.a.
swk.	schwach oder nicht kumulierend
TCDD	Tetrachlordibenzdioxin, $(C_{12}O_2H_4Cl_4)$

TDI	Gesundheitlich duldbare tägliche Aufnahme in [mg/kg Körpermasse und Tag] (*tolerable daily intake*) für (nicht absichtlich ausgebrachte) Umweltkontaminanten
$t_G = t_{1/1}$	Ganzwertszeit (Verweilzeit) eines Stoffes im Untergrund
TH	Freistaat Thüringen
TNT	Trinitrotoluol [2,4,6-], ($C_7O_6H_5N_3$)
TRD	Tolerable resorbierte Dosis [mg/kg/d]
Tri	Trichlorethen (C_2HCl_3)
TrinkwV	Trinkwasserverordnung
TS	Trockensubstanz
TSB	Theoretisch möglicher Sauerstoffbedarf für den vollständigen (totalen) aeroben Abbau von Stoffen
TÜP	Truppenübungsplatz
TV	Tierversuch
TW	Trinkwasser
TWSZ	Trinkwasserschutzzone
TWSZ I, II, III	Trinkwasserschutzzonen I, II, III der öffentlichen Wasserversorgung; Schutzgebiete um die Wasserentnahmestelle(n), für die bestimmte Nutzungsbeschränkungen gelten
UBA	Umweltbundesamt
UdSSR	Union der Sozialistischen Sowjetrepubliken
UFOPLAN	Umweltforschungsplan des Bundes
ÜLA	Überleitungsabkommen
unit-risk	Unter "unit-risk" werden Abschätzungen des Krebsrisikos einer Substanz durch die EPA wiedergegeben, die mit Hilfe mathematischer Modelle extrapoliert wurden. Bei diesen Abschätzungen sind die Begriffe "unit-risk" und "slope factor" gebräuchlich, wobei sich "unit-risk" auf das Krebsrisiko pro Konzentration, "slope factor" hingegen auf das Krebsrisiko pro Dosis bezieht. Die hier dargestellten Werte geben das Krebsrisiko pro Konzentrations- oder Dosiseinheit (z. B. $\mu g/m^3$ für die inhalative Aufnahme und mg/kg/d für die orale Aufnahme) an. Somit stellen sie für die inhalative Aufnahme "unit-risk"-Werte und für die orale Aufnahme *slope factor*-Werte dar.
UV	Licht im ultravioletten Spektralbereich
VC	Vinylchlorid, (C_2H_3Cl)
VK	Vergaserkraftstoff(e)
VKK	Volkskreiskommando (der NVA)
VX	o-Ethyl-S-(2-(diisopropylamino)-ethyl)-methylthiophosphat; militärchemischer Nervenkampfstoff
WaBoLu	Institut für Wasser-, Boden- und Lufthygiene des UBA (bis 30. Juni 1994 des BGA)
WBV	Wehrbereichsverwaltung der Bundeswehr
WGK	Wassergefährdungsklasse
WGK 0 - 3	Wassergefährdungsklasse 0 - 3 (mit zunehmendem Gefährdungsgrad)
WGT	Westgruppe der Truppen
WHG	Wasserhaushaltsgesetz; XXV. Gesetz zur Ordnung des Wasserhaushalts vom 23.9.1986 (BGBl I S. 1529, ber. S. 1654) mit späteren Änderungen
WKK	Wehrkreiskommando (der NVA)
WVA	Wasserversorgungsanlage
X	ergänzender Zwischenschritt des Kriterienkatalogs im Bewertungsverfahren (ohne eigenes Bewertungsergebnis)

ZA, ZB, ZC	Zusatzkriterien der Bewertungskomplexteile A, B, C als Hilfsmittel für die Findung der jeweiligen Gefährdungsstufe
ZWVA	Zentrale Wasserversorgungsanlage

11 ANHANG

11.1 Auswahl von Altlasten-relevanten militärischen Kampfmitteln und Daten für die Erstbewertung zur Feststellung einer Anscheinsgefahr
11.1.1 Chemische Kampfstoffe
11.1.2 Explosivstoffe

11.2 Leistungsbild für Planer- und Gutachterleistungen mit Ergänzungen

11.3 Aus der Nutzungshistorie militärischer Liegenschaften abgeleitete kontaminationsverdächtige Nutzungsbereiche (KVN) und Verdachtskontaminanten (Targetstoffe) aus umweltrelevanten Vorgängen

11.4 Kurzdarstellung des Bewertungssystems BZ_{TOX} nach **Dieter 1994**

11.5 Aquatoxizität SC_{LOEC} - Beispiele für einige Umweltchemikalien

11.6 Stoffcharakterisierung nach SCS und Risikoquantifizierung für die aquatische Umwelt und die menschliche Gesundheit am Beispiel der Umweltkontaminanten

- Nitrofen
- Dodecylbenzolsulfonat
- Toxaphen
- Ethylenglykol
- Iopromid

11.1 Auswahl von Altlasten-relevanten militärischen Kampfmitteln und Daten für die Erstbewertung zur Feststellung einer Anscheinsgefahr

11.1.1 Chemische Kampfstoffe[53]

Chemische Kampfstoffe wurden in Deutschland während des 1. und 2. WK für den militärischen Einsatz zur „Einwirkung auf lebende Organismen zur Tötung oder Schädigung mit kurz oder lange dauerndem Verlust der Kampf-, Dienst- oder Arbeitsfähigkeit" industriell in großen Mengen hergestellt. Zur Anwendung kamen chemische Kampfstoffe jedoch ausschließlich während des 1. WK.

Die meisten chemischen Kampfstoffe sind Flüssigkeiten, deren unterschiedlicher Dampfdruck und deren Hydrolyseeigenschaften (neben anderen, äußeren Faktoren) im wesentlichen die Dauer der Wirksamkeit im Feld sowie den Aufnahmeweg in den Organismus bestimmen. Die toxische Wirksamkeit im Freien liegt bei Zeitspannen von wenigen Minuten (z.B. Sarin), kann aber unter günstigen klimatischen Bedingungen (Windstille, kein Niederschlag, geringe Temperatur) mehrere Monate (z.B. Soman, VX, S-Lost) anhalten.

Je nach ihrer Wirkung wurden die chemischen Kampfstoffe in Deutschland im 1. WK als Kreuz und im 2. WK als Ring farblich gekennzeichnet:

– Gelbkreuz, -ring	Substanzen mit niedrigem Dampfdruck und stark giftigen und ätzenden Eigenschaften, *ätzende Kampfstoffe / Hautkampfstoffe*	z.B. Lewisit, Schwefelloste, Stickstofflost
– Grünkreuz, -ring	Substanzen mit stark giftiger Wirkung auf die Atemwege, *erstickende Kampfstoffe / Nervenkampfstoffe*	z.B., Phosgen, Blausäure, Chlorcyan, *HN-3* / Soman, Sarin, Tabun, VX
– Blaukreuz, -ring	Substanzen mit geringer Flüchtigkeit und großer Reizwirkung, *Nasen-, Rachenreizstoffe*	Chlorarsenverbindungen, z.B. Adamsit, Clark I, Clark II
– Weißkreuz, -ring	Substanzen mit starker tränenerregender Wirkung, *Augenreizstoffe*	z.B. Chloracetophenon

Diese Einteilung der Substanzen in Hautkampfstoffe, Blut- und Nervenkampfstoffe, Nasen- und Rachenreizstoff und Augenreizstoffe ist nicht immer eindeutig, da sich im zeitlichen Verlauf und im Mechanismus der Schädigung unterschiedliche Erscheinungsbilder zeigen können.

Hautkampfstoffe

Als Substanzen mit niedrigem Dampfdruck und stark giftigen und ätzenden Eigenschaften werden Loste zu der Gruppe der Hautkampfstoffe gezählt. Schwefel(S)-Lost (*Yperit,* Dichlordiethylsulfid) wurde im 1. WK quantitativ am meisten von allen chemischen Kampfstoffen produziert. Die Produktion von Stickstoff (N) - Losten (HN-1, HN-2, HN-3) erfolgte im 2. WK (HN-3 im 2. WK als Grünring), jedoch nicht in bedeutenden Mengen. Die Verbindungen sind ölige Flüssigkeiten, die im offenen Gelände toxische Dampfkonzentrationen bilden.

[53] vgl. auch Kampfstofflexikon des Umweltbundesamtes **(Kopecz und Thieme 1996)**

Einwirkungen von S- und N-Losten auf den Körper werden zunächst nicht oder kaum wahrgenommen. Die Symptome (insbesondere flache, selten tiefe Gewebezerstörungen der Haut) setzen in Abhängigkeit von der Dosis langsam und erst nach Latenzzeiten von mehreren Stunden bis Tagen an. Die Latenzzeit ist für muskulöse Membranen (ungeschützte Augen, Bronchien) jedoch wesentlich kürzer.

Lewisit I (2-Chlorvinylarsindichlorid) wurde zunächst als Grünkreuz, später als Gelbkreuz-kampfstoff bezeichnet und im 1. WK produziert und eingesetzt; Ausgangsstoffe sind Acetylen, Arsentrichlorid und Aluminiumchlorid. Es enthält technisch als Nebenkomponente immer Lewisit II und Lewisit III. Lewisit wird über die Haut, Augen, durch Inhalation oder oral aufgenommen und verursacht lokale Reizungen und Schädigungen der Haut am Einwirkungsort sowie systemische Vergiftungen, die zum Tod führen können (Lewisit-Schock).

Erstickende Kampfstoffe / Blut- und Nervenkampfstoffe

Phosgen (Chlorkohlensäure) gehört zu den Grünkreuz- bzw. Grünringkampfstoffen, ist ein starkes Lungengift und führt zu Reizerscheinungen an Augen und Atemwegen. Laborierung allein oder in Mischung in Blaukreuzbrisantgeschossen mit Diphenylarsinchlorid, mit Chlorpikrin in Granaten, in Minen, in Phosgen-Nebelmittel-Gemischen. Produktion im 1. und 2. Weltkrieg; Einsatz im 1. WK, in dem die häufigsten Todesfälle (80%) bei Kampfstoffeinsätzen auf Phosgen zurückzuführen waren. Die Latenzzeit dauert oft mehrere Stunden bis Anzeichen von Vergiftungen (toxisches Lungenödem) klinisch erkennbar sind.

Zu den Gewebsatmungsgiften gehören vor allem Blausäure (HCN) und Halocyane (Chlorcyan). Blausäure kann über den Respirations- und Intestinaltrakt sowie durch die intakte Haut in den Organismus gelangen. Das Einwirken hoher Dosen führt innerhalb weniger Sekunden zum Tod.

Die Wirksamkeit von Nervenkampfstoffen des Typs organischer Phosphorsäure- bzw. Phosphonsäureverbindungen beruht im wesentlichen auf der Hemmung des Enzyms Acetylcholinesterase und der damit einhergehenden Anreicherung des Neurotransmitters Acetylcholin im synaptischen Spalt der Nerven. An den cholinergischen Synapsen führt dies zu unkontrollierter Überaktivität und schließlich zum Funktionsverlust der betreffenden Organe. Die einzelnen Nervenkampfstoffe Tabun, Sarin, Soman und VX unterscheiden sich vor allem in der wirksamen Dosis, die Unterschiede in der Wirkungsweise sind gering. Hauptsächliche Todesursache beim Menschen ist die Hemmung der Atmung im ZNS gefolgt von der peripheren Atemlähmung.

Tabun (Dimethylaminocyanphosphorsäureethylester) wurde während des 2. WK in Deutschland entwickelt und großtechnisch produziert (wird bis heute in den USA produziert). Unterschieden werden Tabun A (laboriert in Mischung mit 5 % Chlorbenzol als Stabilisator) und Tabun B (in Mischung mit 20 % Chlorbenzol). Tabun ist eine farblose bis bräunliche Flüssigkeit mit fruchtigem bis Bittermandel- / Amin-Geruch bei teilweise zersetztem Produkt.

Die Produktion von Sarin (Methylflourphosphorsäureisopropylester) während des 2. WK war gering (Labormaßstab). Die Großproduktion erfolgte erst zur Nachkriegszeit hauptsächlich in den USA. Sarin ist eine farblose bis gelbbraune Flüssigkeit mit leicht fruchtartigem Geruch.

Die Produktion von Soman war während des 2. WK in Deutschland nur gering, die großtechnische Produktion erfolgte erst in der Nachkriegszeit in der (vorwiegend in der UdSSR).

Nasen- Rachenreizstoffe

Adamsit (Diphenylaminarsinchlorid) wurde im 1. und 2. WK produziert. Die Laborierung erfolgte häufig mit pyrotechnischen Gemischen; oft in Mischung mit Chloracetophenon. Keine Veränderung der toxischen Eigenschaften selbst nach jahrelanger Lagerung im wässrigen Milieu. Adamsit ist detonationsbeständig. Clark I (Diphenylarsinchlorid) ebenfalls aus der Gruppe der

Blaukreuz- bzw. Blauringkampfstoffe laboriert in Granaten im 1. WK allein oder in Mischung mit Phosgen bzw. Tetrachlorethen. Einsatz als Aerosol im 1. WK. Clark I ist Vorprodukt von Clark II (Diphenylarsincyanid), welches ebenfalls im 1. WK als Aerosol eingesetzt wurde. Die Symptome (Nasen-, Rachen-, Kehlkopfreiz, Übelkeit, heftige Kopfschmerzen, Angstgefühl) entstehen nach Eindringen der feinsten Feststoffaerosole („Maskenbrecher") in die Schleimhäute und die Haut bereits nach Sekunden und nehmen nach Beendigung der Exposition sogar noch zu; die Schäden sind in der Regel jedoch reversibel.

Augenreizstoffe

Weißkreuz- bzw. Weißringkampfstoffe sind Substanzen mit starker tränenerregender Wirkung. Produktion und Anwendung im 1. WK. Militärisch wichtig sind die Substanzen Chloracetophenon (CN) und *o*-Chlorbenzylidenmalodinitril (CS), welche heute auch Verwendung als Reizstoff für polizeiliche Einsätze finden. Die Wirkung setzt sofort ein. Die Symptome sind bei zunehmender Dosierung Schmerzen der Augen, Lidkrampf, Hautwirkung bis zur Blasenbildung, schwere Augenschäden bis Augenverlust.

Tabelle 11.1.1 Ersteinschätzung der Altlastenrelevanz von chemischen Kampfstoffen - Hinreichende Daten für die Feststellung eines „Anscheinverdachtes“

Stoff	**chem. Bezeichnung** **CAS - Nr.** **Summenformel** **Stoffklasse**	**Verhalten in Wasser** **- Wasserlöslichkeit** **- Hydrolyseeigenschaften** **- Hydrolyseprodukte**	**Ökotoxizität** **Vergleichswerte**	**Verhalten in der Umwelt** **Persistenz / BSB_5**
Yperit (Senfgas) -Lost(S)	Dichlordiethylsulfid 505-60-2 $(C_2H_4Cl)_2S$ CKW	20°C 800 mg/l hydrolysiert allmählich zu Thiodiglycol + HCl hydrolysiert in Wasser über 2-Chlor-2'-hydroxydiethylsulfid zu 2,2'-Dihydroxydiethylsulfid und HCl.	sehr gefährlicher Wasserschadstoff; Schädigung von Fischen und Plankton	ungelöstes Dichlordiethylsulfid sinkt zu Boden und ist in stehenden Gewässern über lange Zeit (ev. Jahre beständig), Yperit - Dämpfe werden in der Luft langsam durch Luftfeuchtigkeit, Sauerstoff und Sonnenlicht entgiftet.
-Lost(N)	Stickstofflost 2,2,2''-Trichlorethylamin $C_6H_{12}Cl_3N$ Dichlordiethyl-N-ethylamin $C_6H_{13}Cl_2N$ tert. Amin, CKW	hydrolysiert im gelösten Zustand ziemlich schnell ($t_{1/2}$ 11min.) 20°C 160-500mg/l sehr langsame Hydrolyse hydroxylierte Derivate, Dimere + HCl; die teilhydrolisierten Zwischenprodukte bis hin zum Bis-(2-hydroxylethylaziridiniumchlorid sind gleichfalls toxisch.	sehr gefährlicher Wasserschadstoff.	Man darf erwarten, dass N - Yperit innerhalb weniger Wochen zu ungiftigen Produkten hydrolysiert. Ungelöste Substanz am Boden von Gewässern kann lange wirksam bleiben. Emulsionsbildung in höheren Konzentrationen (c>20 mg/l Elimination nur über Flockung möglich)

Stoff	**chem. Bezeichnung** **CAS - Nr.** **Summenformel** **Stoffklasse**	**Verhalten in Wasser** **- Wasserlöslichkeit** **- Hydrolyseeigenschaften** **- Hydrolyseprodukte**	**Ökotoxizität** **Vergleichswerte**	**Verhalten in der Umwelt** **Persistenz / BSB_5**
Lewisit I	2-Chlorvinylarsindichlorid 541-25-3 $(ClCHCH)AsCl_2$	20°C 500 mg/l hydrolysiert in Wasser zu 2-Chlorvinylarsinoxid + HCl wird in geringem Maße gelöst und hydrolysiert unter HCl - Abspaltung. Im Alkalischen erfolgt die Hydrolyse vollständig zum Arsenidsalz der Lauge und Ethin	sehr gefährlicher Wasserschadstoff, der in Gewässern zu Boden sinkt; als As-Verbindung stark toxisch für Wasserorganismen Vergleichswerte: Grenzwert in der ehem. DDR (akut, TW) 1µg/l [1]	hohe Persistenz, langfristig Mineralisierung zu Arsenit, -at [1] reagiert auch mit Luft- und Bodenfeuchte; durch Licht und Luft erfolgt Oxidation zur hautunwirksamen 2-Chlorvinylarsonsäure. Langfristig ist mit einer Mineralisierung zu Arsenit, Arsenat oder anderen Arsen-Verbindungen zu rechnen. In Gegenwart von Eisen erfolgt langsame Zersetzung unter Bildung von 2-Chlorvinylarsinoxid, welches noch eine beträchtliche hautreizende Wirkung besitzt.
Tabun	2-Dimethylaminocyanophosphorsäureethylester 77-81-6 $C_5H_{11}N_2O_2P$ Phosphonsäureester	hydrolysiert in Wasser unter Spaltung der P-CN und P-N zu Demethylamidophosphorsäureethylester+Dimethylamin+Cyanphosphorsäureethylester+Phosphorsäuremonoethylester + HCN	sehr gefährlicher Wasserschadstoff, der für Warmblüter und Wasserorganismen extrem toxisch ist. Auch das Hydrolyseprodukt HCN ist hochtoxisch für Fische und andere Wasserorganismen Vergleichswerte: Grenzwert der ehem. DDR (akut, TW) 6 µg/l [1]	nur bei Ausschluss von Licht, Luftfeuchtigkeit und Wasser (in Metallbehältern) relativ stabil.

Stoff	**chem. Bezeichnung** **CAS - Nr.** **Summenformel** **Stoffklasse**	**Verhalten in Wasser** **- Wasserlöslichkeit** **- Hydrolyseeigenschaften** **- Hydrolyseprodukte**	**Ökotoxizität** **Vergleichswerte**	**Verhalten in der Umwelt** **Persistenz / BSB_5**
Sarin	Methylfluorphosphonsäure-isopropylester 107-44-8 $C_4H_{10}FO_2P$ Phosphonsäureester	(20°C) 120 g/l unendlich löslich Hydrolysiert in Wasser langsam zu Isopropylmethylphosphat, in Gegenwart starker Alkalien auch weiter zu Methylphosphonsäure und Isopropanol. Hydrolysiert in Wasser (50% in ca. 50 Stunden) zu Fluorid + Isopropyl-methyl-phosphonat	sehr gefährlicher Wasserschadstoff extrem toxisch für Warmblüter und Wasserorganismen kumulative Wirkungen möglich Vergleichswerte: Grenzwert der ehem. DDR (akut, TW) 4 µg/l [1]	relativ beständig unter Ausschluss von Licht unf Feuchtigkeit. Längere Lagerung erfordert Stabilisatoren (Methanol, HKW, Amine) wird von starken Oxidationsmitteln oxidiert Elimination aus Wasser über alkalische Hydrolyse mittlere Persistenz, mittlere Halbwertzeit im Boden
CMPF	Methylflourphosphonsäure-cyclohexylester Phosphonsäureester	-	-	-
Soman	Methylfluorphosphonsäure-pinakolylester 96-64-0 $C_7H_{16}FO_2P$ Phosphonsäureester	langsame Hydrolyse zu HF und Pinacolylmethylphosphonat	sehr gefährlicher Wasserschadstoff extrem toxisch für Warmblüter und Wasserorganismen Vergleichswerte: Grenzwerte der ehem. DDR (TW, akut) 5 µg/l (TW, chron.) 0,05 µg/l	hohe photolytische Wirkung Elimination über alkalische Hydrolyse
Chloraceto-phenon	1-Chlor-2-Propanon 532-27-4 $C_6H_5COCH_2Cl$ Arom. CKW	hydrolysiert sehr langsam im Alkalischen zu Hydroxy-acetophenon	sehr gefährlicher Wasserschadstoff sehr gefährlicher Wasserschadstoff Vergleichswerte: Grenzwert der ehem. DDR (akut, TW) 1 µg/l	sehr langsam zersetzlich; ist in der Umwelt sehr lange persistent

Stoff	**chem. Bezeichnung** **CAS - Nr.** **Summenformel** **Stoffklasse**	**Verhalten in Wasser** **- Wasserlöslichkeit** **- Hydrolyseeigenschaften** **- Hydrolyseprodukte**	**Ökotoxizität** **Vergleichswerte**	**Verhalten in der Umwelt** **Persistenz / BSB_5**
Brombenzyl-cyanid	Brombenzylcyanid (alpha-) 5798-79-8 $C_6H_5CHBrCN$ aromatisches Nitril	in Wasser schwer löslich sehr hydrolysebeständig, in kaltem Wasser nahezu beständig	sehr gefährlicher Wasserschadstoff mit mäßig bis stark toxischer Wirkung für Wasserorganismen LD50 (Ratte) 100 mg/kg KG Vergleichswerte: Grenzwert der ehem. DDR (akut, TW) 0,001 µg/l	sehr langsam zersetzlich; wirkt noch nach 30 Tagen im Gelände photolytische Halbwertzeit 18,4 Persistenz mittel-hoch unter Normalbedingungen und Ausschluss von Licht, Luft und Feuchtigkeit stabil. Substanz greift zahlreiche Metalle an.
Adamsit	Diphenylaminarsinchlorid (Phenarsazinchlorid) 578-94-9 $NH(C_6H_4)_2AsCl$ org. Arsenverb.	unlöslich in Wasser in Wasser sehr hydrolysebeständig; als Aerosol schnelle Hydrolyse zu Diphenylaminarsinoxid + HCl .	Hydrolyseprodukt noch toxischer als Adamsit; sehr gefährlicher Wasserschadstoff; sehr gefährlicher Wasserschadstoff, der extrem toxisch für Wasser-organismen ist besitzt insektizide, bakterizide, fungizid Wirkung, ebenfalls das Hydrolyseprodukt Phenarsazinoxid	detonationsbeständig
Clark I	Diphenylarsinchlorid 712-48-1 $(C_6H_5)_2AsCl$ org. Arsenverb.	schwer löslich langsame Hydrolyse unter Freisetzung von HCl Diphenylarsinoxid	besitzt insektzide, bakterizide und fungizide Wirkung. ebenfalls Hydrolyseprodukt; Sehr gefährlicher Wasserschadstoff, hochtoxisch für Wasserorganismen. keine Toxizitätsminderung durch Hydrolyseprodukt	entfaltet seine Giftigkeit nur im Aerosol; Persistenz hoch (nach 50 Jahren im Boden noch unzersetzt)

Stoff	**chem. Bezeichnung** **CAS - Nr.** **Summenformel** **Stoffklasse**	**Verhalten in Wasser** **- Wasserlöslichkeit** **- Hydrolyseeigenschaften** **- Hydrolyseprodukte**	**Ökotoxizität** **Vergleichswerte**	**Verhalten in der Umwelt** **Persistenz / BSB_5**
Clark II	Diphenylarsincyanid 23525-22-6 $(C_6H_5)_2AsCN$ org. Arsenverb.	0,2 Masse% in Wasser kaum zersetzlich, sehr langsame Hydrolyse über Diphenylarsinoxid + HCN zum (stark reizenden) Bis-deipheylarsino-oxid In Wasser erfolgt langsame Hydrolyse unter Freisetzung von Cyanwasserstoff	sehr gefährlicher Wasserschadstoff hochtoxisch für Wasserorganismen	Hautschädigungen sind auch durch Clark II -haltiges Wasser möglich Unter Ausschluss von Feuchtigkeit stabil.
Phosgen	Chlorkohlensäure 75-44-5 $COCl_2$ Säurechlorid	rascher hydrolytischer Abbau zu Kohlensäure + HCl	bewirkt bei Pflanzen Plasmolyse ab 25 mg/l tödlich für Fische	stabil nur bei Ausschluss von Licht und Feuchtigkeit
in der ehemaligen DDR gelagerte bzw. in anderen Ländern (ev. ehemalige UDSSR) produzierte chem. Kampfstoffe				
VX	o-Ethyl-S-demethylaminoethyl-methyl-phosphonsäureester	-	Vergleichswerte: Grenzwert der ehem. DDR (TW, akut) 0,6 µg/l (TW, chron.) 0,06 µg/l	-
BZ	3-Chinuklidylbezilat N-Methyl-piperidyl bzw. -benzylat	-	-	psychotoxischer Kampfstoff
CS	o-Chlorbenzylidenmalono-dinitril Chlorbenzal-malonsäuredinitril	-	-	Augenreizstoff laboriert in Explosivwaffen

[1] Akademie der Wissenschaften der DDR (1984): Forschungsstelle für chemische Toxikologie der Wissenschaften der DDR. Verschiedene Stoffdatenblätter. Leipzig 1990

11.1.2 Explosivstoffe

In Deutschland wurde der Sprengstoff *Trinitrotoluol* (TNT) am häufigsten hergestellt und fand in Gieß- bzw. Pressladungen für Bomben-, Minen-, Granatenfüllungen, für Torpedos (z.B. in Mischungen mit *Ammoniumnitrat*, *Hexogen* oder *Hexanitrodiphenylamin*) Verwendung. Ausgangsstoffe für die Synthese von Toluol ($C_6H_5CH_3$) sind Salpetersäure (HNO_3) und Schwefelsäure (H_2SO_4). Für *1,3-Dinitrobenzol*, das vorwiegend im 1. Weltkrieg als Ersatzsprengstoff von TNT in Abwurfmunition benutzt wurde, sind die Ausgangsstoffe im wesentlichen Nitrobenzol und Nitriersäure.

Weitere wichtige Vertreter von Explosivstoffen sind u.a.:

2,4,6-Trinitrophenol wurde im 1. Weltkrieg als Pressladungen in Brisanzgranaten und zur Herstellung von *Bleipikrat* und *Kaliumpikrat* verwendet. Ausgangsstoffe für die Herstellung sind Phenol bzw. Dinitrophenol, Chlorbenzol, Natronlauge und Nitriersäure.

Hexogen wurde als Sekundärladung in Sprengkapseln, in Artillerie- und Unterwassergeschossen (in Press- und Schmelzkombination mit 30-40% TNT) sowie als Raketentreibstoff und (in Kombination mit Aluminiumpulver) für Torpedos verwendet. Ausgangsstoffe sind entsprechend den Produktionsverfahren Paraformaldehyd, Essigsäureanhydrid, Nitrobenzol; bzw. Hexamin, Salpetersäure, Ammoniumnitrat. Sulfaminsäure, Formaldehyd, Salpetersäure; bzw. Paraformaldehyd, Ammoniumnitrat, Acetanhydrid; Ammoniumnitrat, Acetanhydrid.

Ammoniumpikrat in Sprengladungen; Ausgangsstoffe sind Pikrinsäure und Ammoniak.

Nitropenta stoßempfindlicher als TNT; Verwendung auch als Initialsprengstoff in Pressladungen und in Sprengkapseln mit *Nitropentaerythrit*-Aufladung und sonstigen Sprengkapseln, für Zündschnüre und gewerbliche Sprengstoffe. Ausgangsstoffe sind Pentaerythrit und Nitriersäure.

Tetryl fand auch als Initialsprengstoff Verwendung in Sprengkapseln mit TNT-Tetranitromethylanilinaufladung und mit TNT in Granaten und Torpedos. Ausgangsstoffe sind Dimethylanilin bzw. Methanol und Anilin, Chlorbenzol, Methylamin, Nitriersäure.

Bleiazid wurde für Zündsätze oder als Zündsatz für Sprengkapseln mit *Tetryl*-Aufladung, *TNT-Tetryl*-Aufladung und *Nitropenta*-Aufladung verwendet. Ausgangsstoffe sind Bleinitrat und Natriumazid.

Quecksilberfulminat wurde benutzt als Zündsätze für Zündhütchen (Patronen und Geschosse) sowie zur Initialisierung für Sprengkapseln. Ausgangsstoffe sind Quecksilbersalze, Salpetersäure, Ethylalkohol bzw. Quecksilber(II)nitrat und Salpetersäure.

Tetrazen; Verwendung als Zündsätze für Sprengkapseln mit *Tetranitropentaerythrit*-Aufladung und Zusatz zu *Bleitrinitroresorcinat* in Zündhütchen. Ausgangsstoffe sind Natriumnitrat, Aminoguanidinsulfat und Essigsäure.

Bei der Pulverherstellung wurden der in *Nitroglyzerin* gelösten *Nitrocellulose* zur Stabilisierung *Diphenylamin* und als weitere Komponenten *Nitroguanidin*, *Dinitrotoluol*, *Hexogen* und *TNT* zugesetzt.

Nitroguanidin; Verwendung als Sprengstoff-Treibmittel-Gemisch als Füllmittel für Minen und Komponente in Treibsätzen für Feststoffraketen. Ausgangsstoffe sind Guanidinnitrat und Schwefelsäure.

Nitroglycerin; Verwendung als Pulver ohne bzw. mit Lösungsmittel (Aceton, Raketen-Festtreibstoffe, Dynamit, Sprenggelatine). Ausgangsstoffe sind Glycerin und Nitriersäure

Ammoniumnitrat; Verwendung in Gesteins- und Wettersprengstoffen und Raketentreibstoffen sowie in Mischungen mit *TNT* (Ammonite). Ausgangsstoffe sind Salpetersäure und Ammoniak.

Tabelle 11.1.2 Ersteinschätzung der Altlastenrelevanz von Explosivstoffen - Hinreichende Daten für die Feststellung einer „Anscheingefahr“

Stoff	**chem. Bezeichnung** **CAS - Nr.** **Summenformel** **Stoffklasse**	**Verhalten in Wasser** **- Wasserlöslichkeit** **- Hydrolyseeigensch.** **- Hydrolyseprodukte**	**Ökotoxizität**	**Verhalten in der Umwelt** **Persistenz / BSB_5**
Trinitrotoluol	TNT (2,4,6-) 118-96-7 $C_7H_5N_3O_6$ Nitroaromat	Wasserlöslichkeit (20°C) 130 mg/l	toxisch für Bakterien (Schwellenkonz. Pseudomonas putida 100 mg/l, Wasserpflanzen; akute Tox. (Ratte) = 700 mg/kg (mäßg giftig) stark giftig bis hoch giftig für Fische und Wasserorganismen; Schwellenkonz. Fische 1mg/l; Daphnia magna 10 mg/l (LC_{50}/24h=15mg/l)	In der Umwelt persistent, Übergang in das Grundwasser nachgewiesen; mikrobielle Metabolosierung zu Amino-dinitrotoluolen; biochem. abbaubar nach Adaption und in geringen Konzentrationen (bis 45% des therotischen BSB); chem. teil- bzw. schwer oxidierbar (Oxidationsrate Cl_2 bis zu 10%); durch Flockung nicht oder nur geringfügig eliminierbar In der Umwelt persistent, Übergang in das Grundwasser nachgewiesen; mikrobielle Metabolosierung zu Amino-dinitrotoluolen
Dinitrobenzol	Dinitrobenzol (1,3-) 99-65-0 $C_6H_4N_2O_4$ Nitroaromat	Wasserlöslichkeit (20°C) 20,9 g/l (0,3g/l) wird unter Umweltbedingungen nicht hydrolysiert	mäßig bis stark giftig für Fische und Wasserorganismen, Schwellenkonz. für Fische <10 mg/l $LC_{50/96\,h}$ Fische 7-10mg/l $LC_{50/48}$ h Daphnia m. 19mg/l geringe Bioakkumulation	*biochemisch schwer bzw. nicht oxidierbar; chem. schwer bzw. nicht oxidierbar.* unter anaeroben Bedingungen wird DNB mikrobiell zu aromatischen Aminen abgebaut, während mit Sauerstoff eine Ringspaltung und möglicherweise Mineralisation beobachtet wurde. *Adsorbierbarkeit an org. Material ist sehr gut; durch Flockung nicht / nur geringfügig eliminierbar.* Aufgrund der ermittelten Sorptionskoeffizienten ist mit einer weing stark ausgeprägten Bindung an Bodenpartikel zu rechnen, so Daß DNB zum Grundwasser relativ ungehindert sichern kann.

Stoff	**chem. Bezeichnung** **CAS - Nr.** **Summenformel** **Stoffklasse**	**Verhalten in Wasser** **- Wasserlöslichkeit** **- Hydrolyseeigensch.** **- Hydrolyseprodukte**	**Ökotoxizität**	**Verhalten in der Umwelt** **Persistenz / BSB_5**
Pikrinsäure	Trinitrophenol (2,4,6-) 88-89-1 $C_6H_3N_3O_7$ Nitroaromat	Wasserlöslichkeit (20°C) 11,1 g/l	mikrobielle Mutation, Chromosomenveränderung im Tierversuch; schwach giftig bis stark giftig für Wasserorganismen, Schwellenkonz. für Daphnia magma 1 mg/l. Schädlichkeitsgrenze Forelle 30 mg/l.	Biochemisch aerob nicht abbaubar; Adsorbierbarkeit an org. Material ist gut bis sehr gut; durch Flockung nicht oder nur geringfügig eliminierbar. wird unter anaeroben Bedingungen (Pseudomonas aeroginosa) langsam zu Pikraminsäure reduziert.
Hexogen	Trinitrohexahydro(1,3,5-)-triazin(1,3,5-) 121-82-4 $C_3H_6N_6O_6$ Heterocyclus	Wasserlöslichkeit (20°C) 44 mg/l	cancerogen im Tierversuch; toxisch für Fische und Wasserorganismen; $LC_{50/96h}$ (Barsch) 3,6 mg/l	Unter anaeroben Bedingungen mikorbieller Abbau Hexahydro-1-nitroso-3,5-dinitro-, Hexahydor-1,3-dinitroso-5-nitro-, Hexahydro-1,3,5-trinitroso-1,3,5-triazin, Hydrazin, 1,1- und 1,2-Dimethylhydrazin, Formaldehyd und Methanol.
Nitropenta	Pentaerythritrittetranitrat 78-11-5 $C_5H_8N_4O_{12}$ Salpetersäureester	Wasserlöslichkeit (20°C) 43 mg/l	schwach toxisch für Fische und Wasserorganismen; $LC_{50/24\ h}$ Dapnia m. 9700 g/l; Fische 27 g/l	Keine Angaben über Photolyse Mikrobieller stufenweiser Abbau in der Umwelt ist möglich
Tetryl	N-Methyl-N-2,4,6-tetranitroanilin 509-14-8 $C_7H_5N_5O_8$ Nitroaromat	Wasserlöslichkeit (20°C) 75 mg/l langsame Hydrolyse zu Pikrinsäure	Gefahr kumulativer Wirkungen	Photochemische Umsetzung zu N-Methylpicramid
Bleiazid	Blei(II)-azid 13424-46-9 $Pb(N_3)_2$ Schwermetallverb.	Wasserlöslichkeit (18°C) 230 mg/ll	Gefahr kumulativer Wirkungen	Nicht beständig gegen CO_2 der Luft

Stoff	**chem. Bezeichnung** **CAS - Nr.** **Summenformel** **Stoffklasse**	**Verhalten in Wasser** **- Wasserlöslichkeit** **- Hydrolyseeigensch.** **- Hydrolyseprodukte**	**Ökotoxizität**	**Verhalten in der Umwelt** **Persistenz / BSB_5**
Knallquecksilber	Quecksilberfulminat 628-86-4 $Hg(NOC)_2$ Quecksilberverb.	Wasserlöslichkeit (12°C) 700 mg/l	Gefahr kumulativer Wirkungen, toxisch für Wasserorganismen	Wie anorganische Quecksilberverbindungen
Tetrazen	1-(5-Tetrazolyl)-4-guanyltetrazenhydrat 31330-63-9 $C_2H_8N_{10}O$ Azen	unlöslich in Wasser schwach hygroskopisch	-	-
Nitroguanidin	2-Nitroguanidin 556-88-7 $CH_4N_4O_2$ Amin	Wasserlöslichkeit (20°C) 2,7 g/l	Chromosomenaberation bei Hamstern Ames-Test neg. LD_{50} o.Maus 4345 mg/kg KG	-
Nitroglycerin	Trinitroglycerin 55-63-0 $C_3H_5N_3O_9$ Salpetersäureester	Wasserlöslichkeit (20°C) 1,8 g/l schnelle Hydrolyse im alkalischen Milieu	mutagen im Ames-Test Gefahr kumulativer Wirkungen gefährlicher Wasserschadstoff, der für Wasserorganismen tödlich ist, keine Akkumulation in Fischen	keine Daten über Photolyse, mikrobielle Metabolosierung in Dinitroglycon (1,2-) und (1,3-) mikrobieller Abbau über das Di- und Mononitrat
Ammoniumnitrat	Ammonsalpeter 6484-52-2 NH_4NO_3 Nitrate	Wasserlöslichkeit (0°C) 1180 g/l	düngende Wirkung (Phytoplanktonproduktion) toxisch für Wasserorganismen ev. Nutzungsbeschränkungen bei TW-Gewinnung	Ammoniumnitrat ist ein starkes Oxidationsmittel. Bei Zersetzung Emission von NO_x

Stoff	**chem. Bezeichnung** **CAS - Nr.** **Summenformel** **Stoffklasse**	**Verhalten in Wasser** **- Wasserlöslichkeit** **- Hydrolyseeigensch.** **- Hydrolyseprodukte**	**Ökotoxizität**	**Verhalten in der Umwelt** **Persistenz / BSB_5**
Nitrocellulose	Cellulosehexanitrat 9004-70-0 Salpetersäureester	unlöslich in Wasser	wenig gefährlicher Wasserschadstoff, keine akut toxischen Wirkungen auf Fische u.a. Wasserorganismen bzw. 1g/l; Wasserorganismen können jedoch durch enthaltene Lösungsmittel beeinträchtigt werden	Alkalien hydrolysieren die Ester-Bindung und Greifen das Cellulosemolekül an

11.2 Leistungsbild für Planer- und Gutachterleistungen mit Ergänzungen

Die nachfolgende Tabelle 11.2.1 zeigt eine Kurzform des Leistungsbildes Altlasten, erarbeitet von der AHO-Fachkommission „Kontaminierte und kontaminationsverdächtige Standorte – Altlasten“ zuzüglich Vorschläge von Ergänzungen, die aus Sicht der Trinkwasserhygiene notwendig erscheinen.

Tabelle 11.2.1 Leistungsbild für Planer- und Gutachterleistungen bei der Altlastensanierung[54]

Grundleistungen	**Besondere Leistungen**
***Ergänzung:* Phase 0: Feststellung einer Anscheinsgefahr (Erstverdacht) durch die zuständigen Behörden (Umweltamt, Gesundheitsamt)**	
Leistungsstufe I: Historische Erkundung 1 Grundlagenermittlung für die Historische Erkundung	
Klären der Aufgabenstellung - Ermitteln des Leistungsumfangs - Ermitteln der zu beachtenden Randbedingungen	Prüfen und Korrigieren von vorhandenem Karten- und Datenmaterial
Ortsbesichtigung zur Prüfung der Zugänglichkeit des Grundstücks	Erstellen eines Sicherheits- und Gesundheitsschutzplans für die Begehung
Zusammenstellen aller bereits vom Auftraggeber zur Verfügung gestellten Unterlagen, Daten und Informationen	Einholen erforderlicher Genehmigungen für Besichtigungen
Ermitteln der vorhandenen Randbedingungen räumlicher, zeitlicher, nutzungsspezifischer und intensitätsmäßiger Art	
Zusammenfassung der Ergebnisse in Berichtsform	
2 Aufstellen des Erkundungsprogramms	
Festlegen der zu befragenden Informationsquellen in Abstimmung mit dem Auftraggeber	
Aufstellen und Begründen des Erkundungsprogramms mit Auflistung aller Informationsquellen und den daraus zu erwartenden Sachbeiträgen	
3 Material- und Datenrecherche	
Bestandsaufnahme vor Ort mit Aufnahme von für die Erstbewertung relevanten Sachverhalten, ggf. in mehreren Schritten	Einbeziehen von Unterlagen, deren Beschaffung im Einzelfall mit besonderem Aufwand verbunden ist
Anfordern, Beschaffen, Sichten und Zusammenstellen von Unterlagen, Daten und Informationen für die Historische Erkundung über - Eigentumsverhältnisse, - Geologie, Hydrogeologie, - Nutzung, - Bebauung, - Ver- und Entsorgungsleitungen, - umweltrelevante Ereignisse, - vorangegangene Untersuchungen,	Zur Verfügung stellen von Unterlagen aus eigenem Archiv Auswerten von Spezialkarten (z.B. geophysikalische Karten, Kriegsschadenkarten) Befragen von Anwohnern, Zeitzeugen und/oder Betriebsangehörigen Berücksichtigen ortsüblich nicht zuständiger Ämter, Archive oder behördlicher Institutionen *Einbeziehung des Gesundheitsamtes und Wasserversorgungsunternehmens bei Fragen der regionalen Wasserversorgung*

54 aus AHO-FK „Altlasten“ Stand 15.3.1996, Bundesanzeiger 3/96

Grundleistungen	Besondere Leistungen
4 Auswertung und Erstbewertung	
Auswerten und Erstbewertungen der vorliegenden Unterlagen, Daten und Informationen - Auswerten und Verknüpfen von Informationen bezüglich allgemeiner Angaben, Standort-/Umgebungskriterien, Stoffinventar, Vorkommnissen und bisherigen Maßnahmen - Bewertung der Ergebnisse im Hinblick auf die Aufgabenstellung - Hinweise auf weiteren Handlungsbedarf	
5 Dokumentation und Präsentation der Ergebnisse der Historischen Erkundung	
Dokumentieren der verwendeten Unterlagen, Daten und Informationen	Weitere Präsentation von verschiedenen Gremien auf Anordnung des Auftraggebers
Dokumentieren der Ergebnisse in geeigneter schriftlicher, graphischer und zeichnerischer Form unter Angabe der jeweiligen Quellen	Ergebnisse zur EDV gestützten Weiterverarbeitung präsentieren

Hinweise und Ergänzungen zu den Grundleistungen

Ergänzung: Phase 0: Auslösung der Erkundungen durch Feststellung einer Anscheinsgefahr (Erstverdacht)

Die Feststellung einer Anscheinsgefahr ist eine beprobungslose Ersterkundung eines räumlich und zeitlich abgegrenzten Untersuchungsbereichs durch die zuständigen Behörden. Sie dient der Auslösung von Altlasten-Erkundungsmaßnahmen im Falle von potentielle Gefahren durch Umweltkontaminanten im Umfeld von sensiblen Nutzungsbereichen, z.B. von Trinkwasser-gewinnungsanlagen.
Aus den Ergebnissen der Ersterkundung lassen sich erste Kenntnisse über *potentielle Emissionsquellen* aus früheren (bis zur heutigen) Nutzung ableiten.

Phase I:

Ziel der Historischen Erkundung

Die Historische Erkundung ist eine beprobungslose Datenaufnahme eines räumlich und zeitlich abgegrenzten Untersuchungsbereich.
Aus den Ergebnissen der Historischen Erkundung lassen sich detaillierte Kenntnisse über *potentielle Emissionsquellen* aus früheren (bis zur heutigen) Nutzung ableiten. Sie umfasst nicht die „Altlastenerfassung", die für die Ausweisung altlastenverdächtiger Flächen im Rahmen einer sich eventuell anschließenden Technischen Erkundung angewendet wird, sondern liefert hierfür die Basisdaten bzw. zeigt frühzeitig den weiteren bzw. keinen weiteren Handlungsbedarf an.
Die Historische Erkundung soll die Wirtschaftlichkeit einer Gesamtmaßnahme erhöhen und überzogene Maßnahmen vermeiden helfen.

Punkt 1 Grundlagenermittlung

Klären der Aufgabenstellung ist die eindeutige Beschreibung des Untersuchungsgegenstandes.
Der Bearbeitungsumfang ist bei der Ermittlung des Leistungsumfangs zwischen Auftragnehmer und Auftraggeber abzustimmen. Es ist darauf zu achten, dass der Erfolg der Historischen Erkundung nicht durch Beschränkung des Leistungsumfangs gefährdet wird.
Der Zweck der Erkundung (z.B. Beweissicherung, Verkauf, Sanierung, usw.) und die Angabe der aktuellen und beabsichtigten Nutung (Besitzer, Pächter, Nutzer), der Zeitraum der Bearbeitung und der Ansprechpartner sowie die räumlichen Randbedingungen (Ort, Größe,

Lage) sind bei der Ermittlung der zu beachtenden Randbedingungen zu klären und zu dokumentieren.
Die Ortsbesichtigung sollte mit dem Auftraggeber gemeinsam durchgeführt werden. Sie dient dazu, einen ersten Eindruck von der Fläche und den Zugänglichkeiten zu erhalten.
Beim Zusammenstellen aller bereits vom Auftraggeber zur Verfügung gestellten Unterlagen, Daten und Informationen sind zur Vermeidung unnötiger Recherchen bereits vorliegende Informationen über Eigentumsverhältnisse, Geologie/Hydrogeologie, Nutzung, Bebauung, vorangegangene Untersuchungen und umweltrelevante Ereignisse zusammenzustellen und zu sichten.
Das Zusammenfassen der Ergebnisse in Berichtsform beinhaltet die Darstellung der Ergebnisse der Grundlagenermittlung, die im Zuge der weiteren Bearbeitung aller Beteiligten als Voraussetzung für die zu erbringende Leistung dient. Bei einer vertraglich vereinbarten Verkürzung der Leistungsstufe der Historischen Erkundung auf Wunsch des Auftraggebers ist an dieser Stelle festzulegen, auf welche Informationsgehalte verzichtet werden soll und welche Konsequenzen sich daraus für die späteren Arbeitsschritte ergeben.

Punkt 2 Aufstellen des Erkundungsprogramms
Ein Untersuchungsbereich kann in mehrere Objekte unterteilt werden, um bei einzelnen Objekten Teilleistungen des gesamten Leistungsumfangs entfallen zu lassen.
Um hinreichende Aussagen in der Auswertung und der sich anschließenden Bewertung machen zu können, wird mit dem Feststellen der zu befragenden Informationsquellen in Abstimmung mit dem Auftraggeber bestimmt, welche der in der Material- und Datenrecherche aufgelisteten Quellen zu den aus der Grundlagenermittlung bekannten Informationen noch zu recherchieren sind. Die zu befragenden Informationsquellen werden mit dem Auftraggeber abgestimmt. Hierbei ist festzulegen, ob für die Informationsbeschaffung aus bestimmten Quellen besondere Aufwendungen erforderlich sind.
Nach Abstimmung der zu befragenden Informationsquellen anhand der regionalen Behördenstrukturen und Verhältnisse sind diese beim Aufstellen und Begründen des Erkundungsprogramms mit Auflistung aller Informationsquellen und den daraus zu erwartenden Sachbeiträgen darzustellen. Sollten aufwendige Befragungen von Zeitzeugen oder Recherchen erforderlich werden, so ist dies zu begründen und der Aufwand mit dem Auftraggeber abzustimmen.

Punkt 3 Material- und Datenrecherche
Die Bestandsaufnahme vor Ort mit Aufnahme von für die Erstbewertung relevanten Sachverhalten, ggf. in mehreren Schritten, dient im wesentlichen dem Erfassen potentieller Emissionsquellen, der derzeitigen Nutzung und augenscheinlich kontaminationsverdächtiger Bereiche. Weiterhin sollten folgende Sachverhalte bei der Bestandsaufnahme vor Ort Berücksichtigung finden:

- Untergliederung nach Flurstücken (bei Bedarf auch angrenzende Bereiche),
- Bebauung und Anlagen,
- Geräte,
- Verfahrenstechniken der Produktion,
- Einsatz, Lagerung, Wege und Entsorgung von umweltrelevanten Stoffen (gasförmig, flüssig, fest) sowie
- Zugänglichkeit des Grundstücks, Versiegelung, Freiflächen, Vegetation.

Alle Sachverhalte sind in geeigneter Weise zu dokumentieren (Beschreibung, Fotos, Lagepläne usw.). Das Anfordern, Beschaffen, Sichten und Zusammenstellen von Unterlagen, Daten und Informationen für die Historische Erkundung ist i.d.R. der aufwendigste Teil der Historischen Erkundung (vgl. Tabelle A1.1).

Punkt 4 Auswertung und Erstbewertung

Das Auswerten und Erstbewerten der vorliegenden Unterlagen, Daten und Informationen wird untergliedert in:

- Auswerten und Verknüpfen der Informationen bezüglich allgemeiner Angaben, Standort-/ Umgebungskriterien, Stoffinventar, Vorkommnissen und bisherigen Maßnahmen (vgl. Tabelle 11.2.2)
- Bewertung der Ergebnisse im Hinblick auf die Aufgabenstellung (vgl. Tabelle 11.2.3)

Hinweise auf weiteren Handlungsbedarf enthalten z.B. Informationen über die Notwendigkeit von Sofortmaßnahmen bzw. Empfehlungen zur Notwendigkeit und Umfang einer sich anschließenden Technischen Erkundung im Hinblick auf

- zu untersuchende Schadstoffe und
- Eingrenzung von Untersuchungsbereichen.

Tabelle 11.2.2 Material- und Datenrecherche (vgl. Historische Erkundung Punkt 3)

Information	Anlaufstelle	Unterlagen
Eigentumsverhältnisse	Grundbuchamt Handelsregister Liegenschaftsamt	Grundbuch-, Flurkartenauszüge Aktenauszug Aktenauszug aus Verkauf und Verwertung
Geologie/Hydrogeologie	Geologisches Landesamt / AG-Unterlagen	Schichtenverzeichnisse, geologische Übersichtskarten
Nutzung	Handelsregister Baubehörde /-amt Umweltbehörde /-amt und Ordnungsamt Bibliotheken, Stadtarchive / AG-Unterlagen	Registerauszüge Aktenvermerke, Protokolle Genehmigungen, Lage- und Baupläne, Vermerke Firmenbeschreibungen, Stadt- bzw. Ortsentwicklungen Firmenunterlagen
Bebauung	Vermessungsamt Grundbuchamt Baubehörde /-amt Staats-/ Landesarchiv /AG-Unterlagen IHK Literatur	Luftbilder, Grundkarten Flurkarten Lage- und Baupläne, Vermerke, Situationsberichte, Grundrisse, Betriebsbeschreibungen Grundkarten, Kriegsschadenkarten Grundkarten, Altgutachten Angaben über Firmen (Produktion, Produkte) Zusammenhänge bzgl. der Nutzung (z.B. Produktionsverfahren)
Ver- und Entsorgungsleitungen	Baubehörde/ -amt Wasserbehörde Versorgungsunternehmen	Bestandspläne Bestandspläne Bestandspläne
Umweltrelevante Ereignisse	Umweltbehörde /-amt Gesundheitsamt Kampfmittelräumdienst Baubehörde /-amt	Gutachten, Berichte Schadensmeldungen, Beschwerden Luftbilder, Kriegsschadenkarten

Information	Anlaufstelle	Unterlagen
		Kriegsschadenvermerke
Vorangegangene Untersuchungen	Altlasten(hinweise)-kataster Umweltbehörde /-amt / AG-Unterlagen	Altgutachten, Aktenvermerke Aktenvermerke Altgutachten

Tabelle 11.2.3 Kriterien zur Erstbewertung im Rahmen der Historischen Erkundung

Entwicklungen der Eigentumsverhältnisse	Chronologie, Rechtsnachfolge
Geologie / Hydrogeologie	Geologische Situation (geologische Lage, Höhenlage (GOK), Schichtenaufbau) Hydrogeologische Situation (Grundwasserstockwerke, Grundwassernutzung, Stauwasserbereich, Fließrichtungen)
Entwicklungen bezüglich der Nutzung	Kurzdarstellung der Nutzungsgeschichte nach Branchen Altstandort: Produktionsvorgänge und Arbeitsabläufe bei Industrie/Gewerbe/ Pflanzenbau (Produktions-/ Arbeitsabläufe, Produktionsanlagen und Werkstätten, Art und Menge der Rohstoffe, Zwischen- und Endprodukte, Hilfsmittel, Betriebs-/ Arbeitsstoffe, potentielle Schadstoffemissionsquellen des Produktions-/ Arbeitsablaufes) Altablagerung: Aufbau der Deponie, Nutzungsgeschichte mit Angaben über Art und Menge der abgelagerten Stoffe Logistik (Lagerung, Transportwege) Versorgungseinrichtungen (Wasser-/ Energieverbrauch) Entsorgungseinrichtungen (Arten, Herkunft, Aufbereitung und Abnehmer von Abfällen und Abwasser) Wohn-/ Verwaltungsgebäude
Entwicklung bezüglich Lage und Bebauung	Ortsangabe, Bezeichnung, Begrenzung und Größe des Grundstücks Lage und Bebauungsfolge/ -änderung von Gebäuden, Anlagen, Deponie-, Lager- und Stellplätzen, Zufahrts- und Transportwegen
Ver-/ Entsorgungseinrichtungen	Versorgungseinrichtungen (Brunnen, eigene und fremde Strom- und Wasserversorgung) Entsorgungseinrichtungen (Siel, Entwässerungsanlagen, Aufbereitungsanlagen, Behälter, Sickergruben)
Umweltrelevante Ereignisse	Störfälle, Schadensfälle, Beschwerden Kriegseinflüsse (Kriegsschäden an Gebäuden und Anlagen unter Berücksichtigung der Freisetzung von Schadstoffen, zurückgebliebene Kampfmittel)
Vorangegangene Untersuchungen	Beschreibung bekannter Schadstoffpotentiale auf dem Gelände Angaben für Schadstoffgruppen bzw. einzelne Parameter bezüglich - Lage, Ausbreitung, Beweglichkeit, Emissionsquellen von Kontaminationen - Medium: Boden, Bodenluft, Wasser, Gebäudebestandteile - Größenordnung der Konzentrationen - Vergleich mit Referenz-, Leit-, Richtwerten

Tabelle 11.2.4 Leistungsbild für Planer- und Gutachterleistungen bei der Altlastensanierung

Grundleistungen	**Besondere Leistungen**
Leistungsstufe II: Technische Erkundung[55] 1 Grundlagenermittlung für die Technische Erkundung	
Klären der Aufgabenstellung - Abgrenzen des Untersuchungsbereichs - Ermitteln des Leistungsumfangs - Ermitteln der zu beachtenden Randbedingungen inkl. Arbeitssicherheit bei der Ortsbesichtigung Ortsbesichtigung - Aufnahme der für die Technische Erkundung relevanten Sachverhalte, ggf. in mehreren Schritten - Prüfen der Zugänglichkeit und der Probenahmemöglichkeiten sowie sonstiger auf die Ausführung der geplanten Erkundungsmaßnahmen einwirkende Standortgegebenheiten Zusammenstellung aller dem Auftragnehmer vom Auftraggeber übergebenen/übermittelten Unterlagen, Daten und Informationen inkl. der Ergebnisse der Historischen Erkundung Auswerten, Zusammenstellen und Bewerten dieser Unterlagen, Daten und Informationen im Hinblick auf Vollständigkeit und Aktualität Formulieren von Entscheidungshilfen für die Auswahl anderer an der Planung fachlich Beteiligter Dokumentieren der Ergebnisse in Berichtsform	Vervollständigen und ggf. Aktualisieren der vorhandenen Unterlagen, Daten und Informationen. Durchführen von Beweissicherungsverfahren
2 Aufstellen des Untersuchungsprogramms	
Festlegen der Untersuchungsparameter *(Prioritätskontaminanten gem. dem in dieser Arbeit vorgestellten Verfahren)* in Abstimmung mit dem Auftraggeber, *dem Gesundheitsamt und dem Umweltamt* Aufstellen und Begründen des Untersuchungsprogramms mit Aufschluss und Analyseverfahren, erforderlichen Messgenauigkeiten und Bestimmungsgrenzen in Abstimmung mit dem Auftraggeber und den fachlich Beteiligten Erstellen einer Kostenberechnung Zusammenstellung des Untersuchungsprogramms in Berichtsform	Erstellung eines Arbeitsplans (Sicherheitsplan) für die Technische Erkundung Erstellen von Betriebsanweisungen Erstellen eines Projektablaufplans für die Technische Erkundung Erarbeiten der Unterlagen für die erforderlichen öffentlich-rechtlichen Verfahren einschließlich der Anträge auf Ausnahmen und Befreiungen
3 Vorbereitung der Vergabe	
Mengenermittlung und Aufgliederung nach Einzelpositionen Aufstellen der Verdingungsunterlagen, insbesondere Anfertigen der Leistungsbeschreibungen mit Leistungsverzeichnissen sowie den besonderen	

[55] Die Technische Erkundung wird unterteilt in eine orientierende und ein Detailerkundung; das komplette Leistungsbild wird dann mehrfach durchlaufen

Grundleistungen	**Besondere Leistungen**
Vertragsbedingungen	
4 Mitwirken bei der Vergabe	
Einholen von Angeboten Prüfen und Werten der Angebote einschließlich Aufstellen eines Preisspiegels für die Erkundungsarbeiten Mitwirken bei Verhandlungen mit Bietern Fortschreiben der Kostenberechnung Mitwirken bei der Auftragserteilung	
5 Untersuchungsüberwachung	
Überwachen der Ausführung auf das Einhalten des Untersuchungsprogramms Festlegen der Aufschlusspunkte und des Messstellenausbaus Führen eines Bautagebuchs Gemeinsames Aufmaß mit den ausführenden Unternehmen Abnahme von Lieferungen und Leistungen im Hinblick auf die Einhaltung des Untersuchungsprogramms Rechnungsprüfung und Kostenkontrolle Mitwirken bei behördlichen Abnahmen	Fachtechnische Betreuung mit ständiger Anwesenheit inkl. Probenahme
6 Oberleitung	
Koordination aller fachlich Beteiligten Sicherheitstechnische Koordination	Einschalten der Fachbauleitung Hinzuziehen eines Sicherheitsingenieurs
7 Auswertung und Beurteilung	
Auswerten und Beurteilen der Ergebnisse der Technischen Erkundung Abschätzen der schutzgut- und nutzungs-bezogenen Risiken Beschreiben des weiteren Handlungsbedarfs Abrechnen der Gesamtmaßnahme und Kosten-feststellung	Erstellen einer Kostenschätzung im Sinne einer KVM-Bau Erstellen von hydraulischen Modellen Erstellen und Erläutern von Zwischenberichten Fallstudien (Sensitivitätsanalysen) Erstellen von Gefährdungsabschätzungen für Trinkwasser
8 Dokumentation und Präsentation	
Dokumentieren der Technischen Erkundung und ihrer Ergebnisse	Weitere Erläuterungen zur Technischen Erkundung Ergebnisse zur EDV-gestützten Weiterverarbeitung präsentieren

Es wird weiterhin vorgeschlagen, die Sanierungszielwerte und Planungskonzepte in den Leistungsstufen III: „Sanierungsuntersuchung“ und IV: „Sanierungsplanung und –überwachung“ sowie V „Fachgutachterliche Begleitung“ und VI: „Oberleitung und Dokumentation“ bei Untersuchungen von Altlasten im Umfeld von Trinkwassergewinnungs-anlangen an den im Rahmen dieser Arbeit vorgestellten Verfahren zu orientieren.

11.3 Aus der Nutzungshistorie militärischer Liegenschaften abgeleitete kontaminationsverdächtige Nutzungsbereiche (KVN) und Verdachtskontaminanten (Targetstoffe) aus umweltrelevanten Vorgängen

Tabelle 11.3 Auswertung der Erstbewertung im FKST - Altlastprogramm **(FKST 1994)** zu kontaminationsverdächtigen Nutzungsbereichen und Verdachtskontaminanten

lfd. Nr.	Militärischer kontaminationsverdächtiger Nutzungsbereich (KVN) und Ergänzungsinformation	Umweltrelevante Vorgänge	Verwendete bzw. ermittelte typische trinkwasserrelevante Schadstoffe)*	Schadstoffpotential)** [Minimum / ∅ / Maximum]	Kommentar
1	illegale Entsorgung geschobene Flächen wilde Deponien	Abfälle aller Art (z.B. Sperrmüll, Kampfmittel, Pestizide und sonstige Sonderabfälle)	u.a. Kampfmittel, Herbizide, MKW, Altöl, SM, Lösemittel-X, Lösemittel-KW, Abfallsäuren, DDT, HCH, Chlorparaffine, PCB, Reste von Farben und Lacken)***	4 / 5 / 6	Hohes Kontaminationspotential wg. unbekanntem Ort und unbekannter Zusammensetzung. => Hohes Gefahrenpotential durch latente Expositionen in Grund- bzw. Rohwasser für die Trinkwassergewinnung
2	Großtankanlagen von Armee und Luftstreitkräften · Tankbehälter bis 2000 m^3, meist unterirdisch · Pipelines, Umfüllanlagen, Verlade- und Übergabeeinrichtungen	· Handhabungsverluste · Leckagen an Tankbehältern und Leitungssystemen	DK, VK, Kerosin, Hydraulik- und Schmieröle, Ethylenglykol und Propandiol, Lösemittel-OH, PAK)****	4 / 5 / 6	i.d.R. hohe Kraftstoffverluste über einen langen Zeitraum
3	Tankstelle mit Behältergruppen · stationär und für Manöver · Zapfstellen für Kfz. und Panzerfahrzeuge	Ausgabe von Kraftstoffen und anderen Betriebsstoffen Sammlung und Zwischenlagerung von verbrauchten Betriebsstoffen Kontinuierliche Handhabungsverluste	VK, DK, Altöle, Getriebe- und Motorenöle PAK	4 / 5 / 6	Betankung spez. im Manövereinsatz (WGT) z.T. im freien Gefälle ohne Zapfhahnverschluss => örtlich sehr hohe Belastung

lfd. Nr.	Militärischer kontaminationsverdächtiger Nutzungsbereich (KVN) und Ergänzungsinformation	Umweltrelevante Vorgänge	Verwendete bzw. ermittelte typische trinkwasserrelevante Schadstoffe)*	Schadstoffpotential)** [Minimum / ∅ / Maximum]	Kommentar
		beim Zapfen Leckagen an Behältern und Rohrleitungen, Überfüllung Erhöhtes Risiko bei militärischen Übungen			
4	Brandplätze z.T. auf Truppenübungsplätzen (TÜP) z.T. in der Nähe von Munitionslagern	Verbrennen von Kampfmitteln und analogen Stoffen Verbrennung von Altölen und –fetten in Gruben	Kampfmittel und Kampfmittelmetabolite SM, PAK, PCDD, PCDF)*****	3 / 4 / 6	Punktuelles hohes Kontaminationspotential durch Kampfmittelreste und deren Umsetzungsprodukte sowie Fette und Öle (Problem: viele Brandplätze sind nicht mehr auffindbar!).
5	Vorstartlinie Wartung und Versorgung von Flugzeugen Tanklager	Hauptverteilung von Kraft- und Schmierstoffen unter Zeitdruck Freisetzung größerer Mengen Treibstoff, Hydrauliköle und Schmierstoffe	Kerosin, VK, Hydrauliköle, Schmieröle, Ethylenglykol, Propandiol, Chlorparaffine, Lösemittel-OH, Harnstoff, PAK	4 / 4 / 5	Hohes Kontaminationspotential analog der Betankungseinheiten für Landstreitkräfte (s. lfd. Nr. 3): Grundwassersondierungen unbedingt erforderlich.
6	Abstellflächen für Fahrzeuge aller Art (LKW, Panzer, Amphibienfahrzeuge u.a.) Mit und ohne Bodenabdichtung	Vorbereitung der Technik auf Wartung und Instandsetzung z.T. Durchführung der Wartung Handhabungsverluste von Betriebsstoffen Leckagen an der Technik	Altöl, VK, DK, Konservierungsöle, Getriebe- und Motorenöle, Ethylenglykol, Propandiol PAK Abwässer	3 / 5 / 5	Geringe Belastung nur bei Bodenabdichtung und Kanalisation (z.T. nur bei NVA-Stellflächen)

lfd. Nr.	Militärischer kontaminationsverdächtiger Nutzungsbereich (KVN) und Ergänzungsinformation	Umweltrelevante Vorgänge	Verwendete bzw. ermittelte typische trinkwasserrelevante Schadstoffe)*	Schadstoffpotential)** [Minimum / ∅ / Maximum]	Kommentar
7	Panzerfahrschulstrecken (Panzerübungsgelände)	Wartung für Technik Betankung Leckagen aus Unfällen Ungeordnete Ablagerungen	DK, Treib- und Schmierstoffe SM (z.B. ausgelaufene Batterien) Ethylenglykol, Propandiol MKW PAK, Phenole Herbizide DDT	4 / 4 / 5	Flächiges Kontaminationspotential => Gefahr von latenten Expositionen; Nachsorge kaum möglich
8	Transformatorenanlagen · PCBs als Isolierflüssigkeit	Undichtigkeiten, Havarien, Brände	PCBs, PCDD, PCDF	2 / 4 / 6	Punktuelles Kontaminationspotential mit langlebigen Gefahrstoffen;
9	Feldbetankung Tankeinrichtungen Provisorische Wartung von schwerem Gerät	Mobile Betankung aus Tankfahrzeugen (behelfsmäßig und improvisiert) und Austausch sonstiger Betriebsstoffe mit hohen Handhabungsverlusten	VK, DK, Motorenöle	3 / 4 / 5	z.T. hohes Kontaminationspotential, z.T. flächige Kontaminationen durch Standortwechsel bei Betankungsvorgängen
10	Lager (ohne Munition) Offen oder überdacht Befestigter oder unbefestigter Untergrund	Umfüllvorgänge Unsachgemäße Lagerung, z.B. bei ungereinigtem Leergut Leckagen, Überfüllung Handhabungsverluste	Hydrauliköle, Schmierfette Altöle, Konservierungsöle, Lösemittel-KW, Lösemittel-X, Lösemittel-OH Ethylenglykol, Propandiol, Farben, Lacke	3 / 4 / 5	Kontaminationspotential durch relativ harmlose Stoffe wie Kalium- und Natriumchlorid bis zu hochtoxischen Substanzen (z.B. KCN im Einzelfall)

lfd. Nr.	Militärischer kontaminationsverdächtiger Nutzungsbereich (KVN) und Ergänzungsinformation	Umweltrelevante Vorgänge	Verwendete bzw. ermittelte typische trinkwasserrelevante Schadstoffe)*	Schadstoffpotential)** [Minimum / ∅ / Maximum]	Kommentar
			Herbizide, DDT, HCH, PCB, Chlorparaffine, Chemik. aller Art		
11	Instandsetzungseinrichtungen · standortfeste Großtechnik	Waschen, Entfetten Beizen, Brünieren Spülen Konservieren, Ölen	Tenside (auch kationische Tenside), Lösemittel-X, Lösemittel-KW, Mineralsäuren, SM, Laugen (vorwiegend Natronlauge), Schmiermittel, MKW	3 / 4 / 4	Gegenseitige Beeinflussung verschiedener Schadstoffe (Toxizitätspotential, Inhibitorwirkung, Lösungsvermittlung)
12	Großgaragen und Abstellflächen für Technik im militärischen Bereich · Kfz · Panzer · spez. Ketten- und Amphibienfahrzeuge	· Wartungsarbeiten · Konservierung und Entkonservierung · Vorbereitung zur Lackierung sowie Spezialanstrich · Handhabungsverluste · Leckagen von Betriebsstoffen	VK, DK, MKW, Getriebe-, Motoren- und Konservierungsöle, Lösemittel-X, Lösemittel-KW, Ethylenglykol und Propandiol, SM	3 / 4 / 4	Potentiell großflächige Kontaminationen infolge meist unversiegelter Flächen
13	Munitionslager Zentrale Lager unselbständige Lager Freilager von Lösungs- und Korrosionsmitteln Waffenwerkstätten	Aufnahme, Bevorratung und Ausgabe von Munition Munitionsarbeiten auf Freiflächen Delaborierungsarbeiten und Vernichtung von Munition (offener Umgang mit Explosivstoffen) Freisetzung von Korrosions- und	Kampfmittel Konservierungsöle Lösemittel-X Herbizide	2 / 4 / 5	In Waffenwerkstätten eher geringes Kontaminationspotential

lfd. Nr.	Militärischer kontaminationsverdächtiger Nutzungsbereich (KVN) und Ergänzungsinformation	Umweltrelevante Vorgänge	Verwendete bzw. ermittelte typische trinkwasserrelevante Schadstoffe)*	Schadstoffpotential)** [Minimum / ∅ / Maximum]	Kommentar
		Lösemitteln Instandhaltung und Wartung von Munition Instandhaltung, Wartung und Reinigung von Waffen und Munition Einsatz von Herbiziden in großen Mengen und über längere Zeiträume			
14	Waschanlagen Waschplätze Waschrampen Vorwiegend für Panzer Auch andere Fahrzeuge mit oder ohne LFA mit oder ohne Filter	Mechanische Reinigung Einsatz von Tensiden u. Lösemitteln Abwaschen von Konservierungsölen (auch Imitationsmittel) Einsatz von Tensiden	Tenside, spezielle Tenside)****** Lösemittel-X, Lösemittel-KW Emulgatoren / Demulgatoren VK, DK, MKW Altöle, Konservierungsöle Imitationsmittel Emulsionen, Abwässer Ethylenglykol, Propandiol	2 / 4 / 5	Bei Einsatz von Tensiden entstehen beständige Emulsionen, die sich über LFA nicht trennen lassen. Alternative: Auftrennen mit Demulgatoren oder Einsatz spezieller Tenside (auf Silikatbasis) und Anwendung von CO_2 (Anwendung nur vereinzelt bei ehemaligen NVA-Waschanlagen). Auf WGT-Liegenschaften vorwiegend Einsatz von Lösemittel-X, und z.T. Lösemittel-KW mit hohem bis sehr hohem Kontaminationspotential
15	Hangars · Flugzeugstellplätze · Wartungshallen	Unterbringung und Wartung der Flugzeuge, Kontrolldurchsichten, Instandsetzungen	Kerosin, Hydrauliköle, Schmieröle, Ethylenglykol, Propandiol, Lösemittel-X sowie Chlorbrommethan und	2 / 3 / 5	

lfd. Nr.	Militärischer kontaminationsverdächtiger Nutzungsbereich (KVN) und Ergänzungsinformation	Umweltrelevante Vorgänge	Verwendete bzw. ermittelte typische trinkwasserrelevante Schadstoffe)*	Schadstoffpotential)** [Minimum / ∅ / Maximum]	Kommentar
			Dibromtetrafluorethen, SM, Chromsäure, Harnstoff, Lösemittel-OH, Altöle		
16	Ausbildungsplatz für chemische Kampfstoffe · Lager für chemische Waffen sowie Schutz- und Entgiftungsmittel · chemisches Labor	Handhabung, Analyse und Dekontamination Anwendung von Imitaten, Brand- und Nebelmitteln Verluste bei Lager- und Umfüllprozessen	Originalkampfstoffe Chemische Imitationsmittel Entgiftungsmittel Brandmittel (Napalm und Analoge) Nebelmittel Chlorkalk	1 / 4 / 5	Hohes Kontaminationspotential bei unvorschriftsmäßiger Handhabung von chemischen Kampfstoffen (Yperit, Adamsit u.a.), Imitationen für VX und Sarin auf der Basis von substituierten phosphororganischen Verbindungen; notfalls Anwendung analog strukturierter konventioneller Insektizide
17	Leichtflüssigkeits- und Fettabscheider Sand- und Schlammfang	Defekte Becken Unregelmäßige Wartung Unsachgemäßer Umgang mit kontaminiertem Schlamm	DK, VK, Kerosin Öle aller Art Lösemittel-X, Lösemittel-KW Reste von Farben und Lacken	2 / 3 / 5	Abscheider sind z.T. Waschanlagen, sehr selten Kläranlagen nachgeschaltet und nehmen Abwässer aus Instandsetzungs-einrichtungen auf. Ein Kontaminationspotential ist durch Überlastung der Abscheider (hohe und stark schwankende Abwasserbeschaffenheit) und durch mangelhafte Wartung gegeben.

lfd. Nr.	Militärischer kontaminationsverdächtiger Nutzungsbereich (KVN) und Ergänzungsinformation	Umweltrelevante Vorgänge	Verwendete bzw. ermittelte typische trinkwasserrelevante Schadstoffe)*	Schadstoffpotential)** [Minimum / ∅ / Maximum]	Kommentar
18	Schieß- und Sprengplätze für Handfeuerwaffen, Panzer und Artillerie Schießstellung Schießbahn Zielgebiet Ausbildungsplätze	An- und Abfahren der System bzw. Zugmittel Zwischenlagerung von Kartuschen Schussabgabe Imitationsmittel z.T. wilde Ablagerungen	Kampfmittel und –metabolite, MKW, Treib- und Schmierstoffe, Konservierungsöle, PAK, SM	2 / 3 / 5	Kontaminationspotential vor allem durch Kampfmittel aller Art
19	Flugfeld · Haupt- und Nebenrollbahnen · Start- und Landebahnen	Belastungen aus Flugzeugabgasen Reifen- und Pistenabrieb Enteisungs-, Feuerlösch- und Düngemittel Pestizide Kerosin in der Anflugschneise	MKW, PAK, Ammoniak, Nitrit, SM, Enteisungsmittel: Lösemittel-OH und Harnstoff, Schaumlöschmittel, Herbizide, DDT, HCH	2 / 3 / 4	Im allgemeinen großflächige Kontaminationseffekte mit geringer bis mittlerer Belastung
20	Kläranlagen < 50 EGW Kleinkläranlage > 50 EGW 2-stufig als mechanische und biologische Behandlung Klärgruben Oxidationsgräben, -teiche Kanalisation	Funktionsbeeinträchtigung durch unvollständige Schlammräumung Bodenkontamination durch ungeordnete Ablagerung des Schlamms Undichtigkeiten im Rohrsystem Rückstände aus Abscheidern	Schlamm mit PAK, MKW und SM Tenside	2 / 3 / 4	Bodenkontaminationspotential in Abhängigkeit der zugeführten Abwassertypen (z.B. Wäschereiabwässer) bei Überlastung und Funktionsstörungen

lfd. Nr.	Militärischer kontaminationsverdächtiger Nutzungsbereich (KVN) und Ergänzungsinformation	Umweltrelevante Vorgänge	Verwendete bzw. ermittelte typische trinkwasserrelevante Schadstoffe)*	Schadstoffpotential)** [Minimum / ∅ / Maximum]	Kommentar
21	Krankenversorgung der Truppe · Lazarette, Hospitäler · Arzneimittellager · Werkstätten	Leckagen und sonstige Verluste beim Umgang mit Krankenhausabfällen, Arzneimittelresten, Krankenhausabwässern	Pharmaka, infektiöses und radioaktives Material bzw. Abwässer, Desinfektionsmittel, Lösemittel-OH, sonstige (Sonder-)Abfälle	2 / 3 / 4	Zu beachten sind neben mikrobiologischen Einwirkungen biochemisch resistente Pharmazeutika, die sich im Wasserkreislauf anreichern können
22	Großwäschereien, Reinigungen	Belastung bei fehlender oder mangelhafter Abwasserreinigung	Tenside, Lösemittel-X, Abwässer, MKW	2 / 2 / 5	Anfall stark belasteter Abwässer, z.T. in Gemeinschaftsanlagen gereinigt: Ortslage klären!
23	Schutzeinrichtungen der Landstreitkräfte Gefechts- und Unterstände Geschlossene und offene Deckungen für Flugzeuge	Übungseinsätze Pflege- und Wartungsarbeiten Oftmalige Betankung Enteisungen	Kerosin, VK, Konservierungsöle, Kampfmittel, Lösemittel-OH, PAK	2 / 2 / 4	Nur vereinzelt hohe Kontaminationspotentiale durch wilde Ablagerungen von Kampfmitteln
24	Versorgungseinrichtungen · (Groß-)Bäckereien · (Groß-)Küchen · Kantinen · sonst. Wirtschaftsgebäude	Spülen, Desinfektion, Abwasser, Abfälle	Tenside, kationische waschaktive Substanzen, Desinfektionsmittel, Küchenabfälle, ungeklärte Abwässer, Fette	2 / 2 / 4	kationische Tenside sind auch Lösungsvermittler, sie können aber mit unverbrauchten Desinfektionsmitteln biochemische Umsetzungen blockieren. Zu beachten ist auch das Schadstoffpotential in unmittelbarer Umgebung (z.B. Abgänge von Transformatorenölen)
25	Enteisungsanlagen · Flugfelder · Flugzeuge	Einsatz chemischer Auftaumittel	Lösemittel-OH, Harnstoff	2 / 3 / 3	witterungsabhängig hoher Einsatz von Auftaumitteln. Hohes Kontaminationspotential für

lfd. Nr.	Militärischer kontaminationsverdächtiger Nutzungsbereich (KVN) und Ergänzungsinformation	Umweltrelevante Vorgänge	Verwendete bzw. ermittelte typische trinkwasserrelevante Schadstoffe)*	Schadstoffpotential)** [Minimum / ∅ / Maximum]	Kommentar
					Grundwasser wegen großer zeitlicher Abstände und biochemisch guter Abbaubarkeit praktisch nicht gegeben.
26	Tierhaltung (ausschließlich bei WGT)	Tierhaltung, -schlachtung und -verwertung	Abwässer und Abfälle aus Stallungen, Schlachthausabwässer, Tierkadaver, -abfälle, Desinfektions- und Reinigungsmittel	2 / 2 / 3	hygienische Probleme bisher nur vereinzelt auf WGT-Liegenschaften bekannt
27	Raketenstellungen · Raketenbasen · Lager für Raketentreibstoffe	· Unterirdische Anlagen · mobile Abschussbasen · Lagerhaltung	MKW, Raketentreibstoffe · Samin · Oxidator Melange	2 / 2 / 2	Durch hohe Sicherheitsbestimmungen praktisch geringes Kontaminationspotential für Rohwasser gegeben
28	Heizhäuser	Kohlenlagerplätze Verbrennungsanlagen Warmwasserverwertung	MKW	1 / 2 / 3	Bodenbelastung mit wassergefährdenden Stoffen unerheblich
29	analog zivile Liegenschaften II · außerhalb rein militärischer Objekte · vorwiegend in Sperrbereichen	Wohnhäuser mit Garagen-, Wartungs- und Reparaturbereichen; Kontaminationen bei unbefestigten oder defekter Bodenabdichtung möglich	MKW, As, PAK	1 / 1 / 3	Kontaminationspotential auf Basis von Bewertungskomplexteil A klären
30	Bombodrome Bombenabwurfplatz	Munitionsreste und Blindgänger	SM, PAK	1 / 2 / 2	Kontaminationspotential mit flächig verteilten Verunreinigungen

lfd. Nr.	Militärischer kontaminationsverdächtiger Nutzungsbereich (KVN) und Ergänzungsinformation	Umweltrelevante Vorgänge	Verwendete bzw. ermittelte typische trinkwasserrelevante Schadstoffe)*	Schadstoffpotential)** [Minimum / ∅ / Maximum]	Kommentar
31	Radar- und Funkstationen, Nachrichteneinheiten	Bisherige Recherchen ließen keine bis geringe umweltrelevante Vorgänge erkennen	MKW (Spuren)	1 / 1 / 2	Meist unterirdische Anlage mit Versorgungseinrichtungen
32	Kernwaffenlager	kleinkalibrige Kernwaffen Ausbildungsplätze	MKW, Nebelmittel	1 / 1 / 2	Durch hohe Sicherheitsbestimmungen praktisch kein Kontaminationspotential für Rohwasser gegeben
33	Truppenunterkünfte Feste Unterkünfte (auf Kasernenanlagen) Mobile Unterkünfte (Zeltplätze)	Mehrzweckobjekte, Verwaltungsgebäude, Sporteinrichtungen	Lösemittel-KW	1 / 2 / 6	Erfahrungsgemäß punktuelles Kontaminationspotential durch falschen Einsatz von Lösungsmitteln; (sonstige Nutzungen in Mehrzweckobjekten beachten, z.B. Tankanlagen (lfd.Nr. 6), Werkstätten u.a.)
34	analog zivile Liegenschaften I · außerhalb rein militärischer Objekte · vorwiegend in Sperrbereichen	Wohnhäuser, Schulungsobjekte, Erholungsheime, Kulturhäuser, Sportanlagen, Verwaltungsliegenschaften, Wehrkreiskommandos, Befehlsstände	Offensichtlich keine Altlastverdachtsflächen mit wassergefährdenden Substanzen	1 / 1 / 1	Aus Sicht der Trinkwasserhygiene kein Kontaminationspotential

Legende

)* Aufgeführt werden wichtige auf der jeweiligen Liegenschaft verwendete Schadstoffe ausschließlich mit Trinkwasserrelevanz und solche, die auf Altlastverdachtsflächen, im Grundwasser oder im Trinkwasser analytisch erfasst wurden. In großen Mengen aufgefundene „inerte" Stoffe bleiben hier unberücksichtigt. Das sind vor allem Bauschutt, Kohlen, Kohlenstaub, Haus- und Sperrmüll, leere Patronenhülsen, nicht schadstoffbelasteter Schrott, Siedlungsabfälle, Papier-, Pappe-, Textil- und Holzabfälle, Altreifen, elektrische Kabel, Plastikabfälle, Glas aller Art sowie asbesthaltige Materialien.

)** Abstufung des Schadstoff- /Kontaminationspotentials: 1 = kein, 2 = gering, 3 = mittel, 4 = erheblich, 5 = hoch, 6 = sehr hoch

)* Nachstehende Kampfmittel (Initialsprengstoffe, brisante Sprengstoffe und Treibmittel) und deren Metabolite wurden ermittelt und erfasst.
Hexogen, 2,4,6-Trinitrotoluol, 2,4-Dinitrotoluol, 2,6-Dinitrotoluol, 1,3,5-Trinitrobenzol, Dinitrobenzol, Nitrophenole, 2,4,6-Trinitrophenol (Pikrinsäure), Nitroglycerin, Nitroglykol, Nitrozellulose, Bleiazid, 2-Nitroguanidin, 2,4,6-Trinitrophenol, 2,4,6-Trinitro-m-xylol, 1,3,5-Trinitrobenzol, N-Methyl-N-2,4,6-tetranitroanilin (Tetryl), Bis-(2-hydroxyethylether)-dinitrat (Diethylenglykol), Acenaphthylen, Acenaphten, 1,3,5,7-Tetranitro-2,4,6,8-tetracylohexan (Octogen), Pentaerythrittetranitrat (Nitropenta), Quecksilberfulminat sowie die Nitrosulfonsäuren: 2,4-Dinitrotoluol-3-sulfonsäure, 2,4-Dinitrotoluol-5-sulfonsäure, 4-Amino-2-nitrotoluol-3-sulfonsäure, 2-Amino-4-nitrotoluol-5-sulfonsäure und die Summenparameter: PAK und Nitroaromaten
Die am meisten im militärischen Bereich eingesetzten Herbizide waren offensichtlich:
2,4,5-T (2,4,5-Trichlorphenoxiessigsäure), 2,4-D (2,4-Dichlorphenoxiessigsäure), 2-Methyl-4-chlorphenoxiessigsäure, Atrazin, Simazin, Bromuron, Ametryn, Nitrofen und Kaliumchlorat
MKW = Mineralölkohlenwasserstoffe auf der Basis der TrinkwV (gelöste oder emulgierte Kohlenwasserstoffe; Mineralöle)
SM = Schwermetalle, umfasst in jeweils unterschiedlichen Mengen: Pb, Cd, Cu, Ni, Hg, Cr und Fe.
Lösemittel-X = halogenierte organischen Kohlenwasserstoffe mit 1 oder 2 C-Atomen als Parameter der TrinkwV
1,1,1-Trichlorethan, Trichlorethen (Tri), Tetrachlorethen, Dichlormethan, Tetrachlormethan (Tetra), 1,2-Dichlorethan und im Ausnahmefall Dichlordibrommethan, Trichlormethan (Chloroform), Dibromtetrafluorethen.
Dazu gehören die Metabolite Vinylchlorid (Chlorethen) und Bromdichlormethan.
Lösemittel-KW = aliphatische und aromatische Kohlenwasserstoffe, die zudem Bestandteile von Kraftstoffen sind:
Kohlenwasserstoffe aliphatischer Natur sind diesbezüglich vor allem n-Hexan, cyclo-Hexan, n-Octan, iso-Octan und die angewandten aromatischen Verbindungen der BTEX-Gruppe Benzol, Toluole, Ethylbenzol, Xylole
Abfallsäuren umfassen insgesamt je nach Verwendungszweck:
Salzsäure, Schwefelsäure, Salpetersäure und Phosphorsäure
Bis in die 80er Jahren hinein wurden auf dem Gebiet der ehemaligen DDR vor allem folgende Insektizide im militärischen Bereich eingesetzt:
DDT,
HCH (Hexachlorcyclohexan) und
verschiedene Phosphororganika
Chlorparaffine sind Imprägnier- und Schmiermittel mit einer Kettenlänge von C10 bis C30 und unterschiedlichem Chloranteil.
PCBs = Polychlorierte Biphenyle mit unterschiedlichem Chloranteil

)** DK = Dieselkraftstoff, VK = Vergaserkraftstoffe, Kerosin = Flugbenzin
Ethylenglykol und Propandiol dienen als Kühlflüssigkeiten
Lösemittel-OH = Alkohole, vor allem Methanol, daneben Ethanol und iso-Propanol
PAK = Polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe als Parameter der TrinkwV:
Benzo-(a)-Pyren, Fluoranthen, Benzo-(b)-Fluoranthen, Benzo-(k)-Fluoranthen, Benzo-(ghi)-Perylen, Indeno-(1,2,3-cd)-Pyren sowie Nitrobenzanthron (aus Dieselkraftstoff)

)*** PCDD = Polychlorierte Dibenzdioxin(e); PCDF = Polychloriertes Dibenzfuran(e)

)****** Tenside = waschaktive Substanzen, vorwiegend als anionaktive Substanz Alkylbenzolsulfonat (mittlere Kettenlänge: Dodecylbenzolsulfonat) und als nichtionische Substanz Alkylphenolpolyglykolether (mittlere Kettenlänge: Nonylphenolpolyglykolether). Für die Panzerwäsche der NVA kamen z.T. spezielle Tenside zum Einsatz.

11.4 Kurzdarstellung des Bewertungssystems BZ_{TOX} nach DIETER

Die Bewertung umfasst die Prüfung in 5 Kategorien (5 Feldern) hinsichtlich

- der Vollständigkeit der getesteten Kriterien,
- der Angaben zur Dosis-/Wirkungsbeziehung,
- der Karzinogenität,
- sonstiger toxikologischer Prüfungen
- der Humantoxizität.

Durch die Einbeziehung von Ergebnissen aus Untersuchungen zu Struktur-Aktivitäts-Beziehungen (SAB) zu den o.g. Kriterien des BZ_{TOX}-Rasters können bei der Beurteilung der Vollständigkeit der Datenbasis in Feld 1 (unter der gleichen Bezeichnung wie der entsprechenden tierexperimentellen Kriterien) zuzügliche Wichtungspunkte vergeben werden. Das entsprechende Kriterium erhält für die Zugrundelegung von SAB-Daten den Index *Y*[56]. Die vorhandenen Stoffdaten werden in Feld 1 in acht toxikologisch relevanten Teilbereichen dokumentiert und ihrer Bedeutung entsprechend durch unterschiedliche Punktzahlen gewichtet (vgl. Tabelle 11.4.1).

Tabelle 11.4.1 Bewertung der toxikologischen Datenbasis (vgl. **Dieter, Kaiser et al. 1990; Dieter 1994)**

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{TOX})

	Wichtungs-punkte
subchronische Toxizität:	1 ( )
chronische Toxizität:	3 ( )
Reproduktionstoxizität:	2 ( )
subchronische Immuntoxizität:	1 ( )
chronische Immuntoxizität:	2 ( )
Toxikokinetik:	1 ( )
Biochemie:	1 ( )
Mutagenität:	1 ( )
Summe:	.....

Die Summe der Wichtungspunkte zeigt die Bewertbarkeit des Stoffes an (1 - 3 Punkte = nicht bewertbar, 4 - 8 Punkte = vorläufig bewertbar, 9 - 12 Punkte = bewertbar).

Die Angaben zur Dosis-/Wirkungsbeziehung werden in Feld 2 in einen Eingangswert umgerechnet und vorhandene Datenlücken durch Addition von Korrekturwerten systematisiert (vgl. Tabelle 11.4.2). Dabei wird zunächst über Sicherheitsfaktoren (SF) das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Laborspezies sowie die voraussichtlich starke Kumulationstendenz der Substanz im Säuger berücksichtigt. Der Eingangswert wird weiterhin korrigiert bei unvollständiger Datenbasis im subchronischen, chronischen bzw. reproduktionstoxischen Bereich. Ergebnisse aus SAB-Untersuchungen können als zusätzliche Informationen zur Bestätigung chronischer oder subchronischer Daten herangezogen werden (sie können allerdings z.Z. tierexperimentelle Daten für diese Expositionszeiten nicht ersetzen). Das Ergebnis der Bewertung der Dosis-/Wirkungsbeziehung in Feld 2 ist die Dosiszahl des Stoffes.

[56] Ergebnisse aus SAB können in Feld 2, Feld 3 und Feld 4 die tierexperimentelle Datenbasis ergänzen (vgl. Kapitel 5.2.2).

Tabelle 11.4.2 Bewertung der Dosis-/Wirkungsbeziehungen

Feld 2: Angaben zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{TOX})

	NOAEL/LOAEL	(Quelle)
subchronische Toxizität:		( )
chronische Toxizität:		( )
Reproduktionstoxizität:		( )
subchronische Immuntoxizität:		( )
chronische Immuntoxizität:		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (EW)

a) niedrigster experimenteller NOAEL : ..... (g/kg/d)
b) niedrigster abgeschätzter NOAEL : ..... (g/kg/d) — neg.^{10}log = ... (a)
neg.^{10}log = ... (b)

c) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Laborspezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt — ^{10}log = ... (c)

d) SF = 10 für voraussichtlich starke Kumulation der Substanz im Säuger (Halbwertszeit der Elimination >1 a) — ^{10}log = ... (d)

Eingangswert: 2.1.1 (a+c+d) oder 2.1.2 (b+c+d) = ...

2.2 Dosiszahl DZ_{TOX} (Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis)

niedrigster experimenteller oder abgeschätzter NOAEL stammt aus

subchron. Bereich	chronischer Bereich	Reprotox. Bereich
für das Fehlen des chronischen Bereichs	für das Fehlen des subchron. Bereichs	für das Fehlen des chron. Bereichs
+ 2	+ 1	+ 2
für das Fehlen des Reprotox. Bereichs	für das Fehlen des Reprotox. Bereichs	für das Fehlen des subchron. Bereichs
+ 1	+ 1	+ 1

Korrektur = ...

2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2 DWB:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) = Dosiszahl = ...

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) = Dosiszahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = ...

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = ...

Das Vorhandensein von Daten zur Karzinogenität wird in Feld 3 über so genannte Risikozuschläge (RZ) von RZ 11 (für Stoffe, die nicht adäquat getestet sind, jedoch aufgrund der Strukturdaten keinen Verdacht auf karzinogene Wirkung aufweisen), RZ 22 (für Stoffe, die oral nicht karzinogen bei adäquater Testung wirken, jedoch über andere Expositionspfade karzinogene Wirkung haben bzw. haben können), RZ 33 (für Stoffe, deren Initiatorwirkung im Tierversuch zweifelhaft ist, bei denen aber aus Tier- bzw. Strukturdaten ein begründeter Anfangsverdacht auf karzinogene Wirkung besteht), und RZ 100 (für eindeutig humankarzinogene Stoffe) bewertet. Ergebnisse aus SAB-Untersuchungen gehen bei der Bildung des Risikozuschlages in den Gruppen canc B_2 und D ein (vgl. Tabelle 11.4.3).

Tabelle 11.4.3 Bewertung der Karzinogenität von Stoffen über Risikozuschläge

Feld 3: Karzinogenität (canc)
(Kennzeichnung für nichtorale Studien: i = inhalativ, d = dermal)

canc A = eindeutig humankarzinogen ($RZ=BZ_{TOX}=100$)
canc B_1 = eindeutig karzinogen im Tierversuch als Initiator oder Anfangsverdacht aus Humandaten bei wahrscheinlicher Initiatorwirkung ($RZ=BZ_{TOx}=100$)
canc B_2 = Initiatorwirkung im Tierversuch zweifelhaft, aber begründeter Anfangsverdacht aus Tier- oder Strukturdaten (RZ = 33)
canc B_3 = oral wie Gruppe C; andere Pfade aber wie $B_2/B_1/A$ (RZ = 22)
canc C = nicht karzinogen bei adäquater Testung
canc D = nicht adäquat getestet, aber kein Verdacht aus Strukturdaten (RZ = 11)

Einstufung der Karzinogenität der Substanz: Gruppe ..... => RZ = ...

In Feld 4 werden die sonstigen toxikologischen Prüfungen Toxikokinetik, Biochemie und Mutagenität hinsichtlich ihres Versuchsumfangs und -ergebnisses bewertet. Unterschieden werden die Aussagen „Ergebnis positiv oder Stoff nicht ausreichend getestet", „Stoff ausreichend getestet, aber Bewertung strittig" und „Stoff ausreichend getestet, aber Ergebnis negativ". Die Summation pro Spalte liefert eine dreistellige stoffspezifische Toxizitätszahl, die zu einer einstelligen Toxizitätszahl modifiziert wird (vgl. Tabelle 11.4.4).

Tabelle 11.4.4 Bewertung von sonstigen toxikologischen Prüfungen

Feld 4: Sonstige toxikologische Prüfungen

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
Toxikokinetik:	Quelle	Quelle	Quelle
Kumulationstendenz in Säugern (>=24 h)	( )	( )	( )
Reaktive Metabolite	( )	( )	( )
Plazentagängigkeit	( )	( )	( )
Biochemie:			
Blutbild, Serum, Immunzellenstatus } Veränderungen	( )	( )	( )
Enzym, Hormon, Transmitter } Veränderungen	( )	( )	( )
Metallhomöostase Veränderungen	( )	( )	( )
Mutagenität:			
DNA-Schäden	( )	( )	( )
Punktmutationen	( )	( )	( )
Chromosomenmutationen	( )	( )	( )
Summe = Toxizitätszahl (ToxZ) =			

modifizierte Toxizitätszahl (**MToxZ**) =
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Die BZ_{TOX} ist das Produkt der Dosiszahl aus Feld 2 mit der modifizierten Toxizitätszahl aus Feld 4 zuzüglich des in Feld 3 berechneten Risikozuschlages. Werden überwiegend Daten aus SAB-Untersuchungen der toxikologischen Bewertung zugrunde gelegt, wird der hieraus berechnete SC_{TOX}-Wert mit dem Index Y (=SC_{TOX-Y}) gekennzeichnet (vgl. Tabelle 5.4).

11.5 Aquatoxizität SC_{LOEC} - Beispiele für einige Umweltchemikalien

Tabelle 11.5 Stoffcharakteristiken der Aquatoxizität von ausgewählten Umweltchemikalien

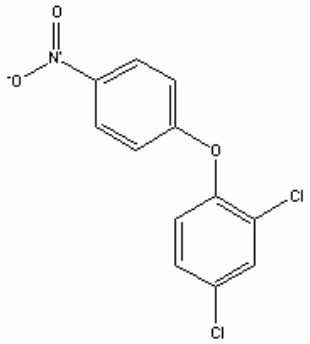
Substanz	LOEC [mg/l]	LC_{50} [mg/l]	Fischart	SC_{LOEC}	Herkunftsbereich / Verbindungsklasse
Aldrin	0,25	0,16	Karpfen	2,0	A,D
DDT	0,05	0,07	Regenbogen-forelle	2,0	D
Hexabotyldistannoxan	0,04	0,07	Guppy	2,0	A
Phenol	12	24	Barsch	1,5	B
Benzol	15	37	Guppy	1,5	B
Toluol	30	61	Guppy	1,5	B
Hydrogencarbonat	> 500	> 500	Karpfen	1,0	G

11.6 Stoffcharakterisierung und Risikoquantifizierung von Umweltkontaminanten für die aquatische Umwelt und die menschliche Gesundheit

11.6.1 Kriterien der Stoffcharakteristik für die trinkwasserhygienische Bewertung

- **Nitrofen [1836-75-5]**

Tabelle 11.6.1 Identität und Stoffkonstanten von Nitrofen

Strukturformel:	
Andere Bezeichnungen:	Benzene, 2,4-dichloro-1-(4-nitrophenoxy)-; Ether, 2,4-dichlorophenyl p-nitrophenyl; FW 925; Niclofen; Nitraphen; Nitrochlor; Nitrophen; Nitrophene; NIP; TOK; TOK E 25; 2,4-Dichlorophenyl p-nitrophenyl ether; 2,4-Dichlorophenyl 4-nitrophenyl ether; 4-(2,4-Dichlorophenoxy)nitrobenzene, Trizilin
Stoffgruppe:	Diphenylether
CAS-Nr.	1836-75-5
Summenformel	$C_{12}H_7Cl_2NO_3$
Stoffbeschreibung	farblose bis braune Kristalle
Molekulargewicht [g/Mol]	284.0982

o Herkunftsbereich und Gruppencharakteristik

Nitrofen gehört als herbizider und fungizider Wirkstoff in Pflanzenschutzmitteln (PSM) [57] zu den Stoffen, die absichtlich in die Umwelt eingebracht werden, um dort eine definierte Wirkung zu erzielen und damit eigentlich zu der Gruppe A der Herkunftsbereiche (vgl. Tabelle 5.1). Nitrofen wurde 1964 in den USA entwickelt, weltweit von einer US-Firma auf den Markt eingeführt und war in den alten Bundesländern bis 1980 zugelassen. Vor 1981 war Nitrofen in den USA und später auch in Europa und Asien als PSM für die Behandlung von verschiedenen Pflanzenarten wie Broccoli, Zwiebeln u.a. registriert. Der Wirkstoff wurde als Bestandteil verschiedener PSM (Kombinationspräparate) vor allem zur Bekämpfung ein- und

[57] vgl. auch TrinkwV 2001, Anlage 2 (zu § 6 Abs. 2) chemische Parameter Teil 1 Parameter 10 Pflanzenschutzmittel und Biozidprodukte ... bedeuten: organische Insektizide, organische Herbizide, organische Fungizide, organische Nematizide, org. Rodentizide, org. Schleimbekämpfungsmittel, verwandte Produkte (u.a. Wachstumsregulatoren) und die relevanten Metaboliten, Abbau- und Reaktionsprodukte. Es brauchen nur solche Pflanzenschutzmittel und Biozidprodukte überwacht zu werden, deren Vorhandensein in einer bestimmten Wasserversorgung wahrscheinlich sind. Der Grenzwert von 0,0001 mg/l gilt jeweils für die einzelnen Pflanzenschutzmittel und Biozidprodukte ... Parameter 11 bezeichnet die Summe der bei dem Kontrollverfahren nachgewiesenen und mengenmäßig bestimmten einzelnen Pflanzenschutzmittel und Biozidprodukte mit dem Grenzwert von 0,0005 mg/l.

zweikeimblättriger Unkräuter insbesondere in Winterweizen, aber in anderen Ländern auch in einer Reihe anderer Kulturen (Gemüseanbau, Reis) eingesetzt. Die Anwendungsmengen lagen bei ca. 2 bis 6 kg/ha Anbaufläche. In China, Japan und dem Fernen Osten wurde es grundsätzlich im Reisanbau angewendet. Die Zulassung ist danach nicht mehr verlängert worden, da eine Risikoanalyse des Herstellers kanzerogene und teratogene Effekte bei Versuchstieren in Konzentrationen erzeugte, bei denen gesundheitliche Schäden beim Menschen unter den in der landwirtschaftlichen Praxis notwendigen Anwendungsmengen nicht auszuschließen waren. In Deutschland besteht für nitrofenhaltige PSM gemäß Pflanzenschutz-Anwendungsverordnung seit 1988 in den alten Bundesländern bzw. sein 1990 in den neuen Bundesländern ein vollständiges Anwendungsverbot[58]. Im Bewertungsraster wird es daher der Gruppe D „Altlasten durch kontaminierte Industrie-, Gewerbe-, Militär- und Rüstungsstandorte sowie unkontrolliert abgelagerte Sonderabfälle und Unfallorte“ zugeordnet.

Tatsächlich hat Nitrofen im Jahr 2002 in Deutschland für Schlagzeilen gesorgt, als Rückstände in verschiedenen Lebensmitteln (insbesondere Öko-Produkte) nachgewiesen wurden, die bereits an die Verbraucher gelangt waren. Die höchsten Rückstandsgehalte fanden sich in Putenfleisch und in Eiern aus ökologischer Erzeugung. Die Ursache hierfür war die Verfütterung von hochkontaminierten Futtermitteln, u.a. Futterweizen. Die eigentliche Ursache lag aber nicht in der bestimmungsgemäßen Anwendung als Pflanzenschutzmittel. Vielmehr konnte man eine Lagerhalle, in der Trizilin[59] in korrodierten Fässern gemeinsam mit Öko-Getreide gelagert worden war, als einzelne Quelle bestimmen. Sekundärkontaminationen z.B. in Futtermittelwerken, Reinigungs- und Trocknungsanlagen für Getreide, Gerätschaften (einschl. Probenahmegeräte), Transportmitteln oder Getreidepartien anderer Erzeuger, wurden durch Waren aus dieser Lagerhalle verursacht. Die Exposition ist damit durch die Vernachlässigung bzw. Negierung des Vorsorgeprinzips an einem Punkt entstanden und hat zu erheblichen Auswirkungen[60] geführt, z.B.:

- In Verdachtsproben von Lebensmitteln wurden Konzentrationen von bis zu 0,8 mg/kg Putenfleisch bestimmt.
- Bei Futtermitteln lagen Untersuchungsergebnisse von 1.983 Proben vor. Bei 6,6% der amtlichen Proben war Nitrofen nachweisbar.
- Durch die Sperrung von Öko-Betrieben waren von deren Produktion ca. 20% der Eierproduktion, 20% der Mastschweineproduktion, 15% der Putenerzeugung und 10% der Hähnchenmast betroffen.

Nitrofen ist ein schnell wirkendes, selektives Kontaktherbizid, das sowohl über das Blatt als auch über die Wurzel aufgenommen wird. Der Wirkstoff wird in der Pflanze verteilt und unter Lichteinfluss zu einem aggressiven Radikal umgebaut, dass die Zellmembran angreift und zerstört. Zudem stören Diphenylether wie Nitrofen auch die Bildung von Chlorophyll, indem sie die Aktivität des Enzyms Protoporphyrinogen-Oxidase hemmen, das für die Bildung des grünen Farbstoffes gebraucht wird.

---

[58] Nach der Verordnung über Anwendungsverbote für Pflanzenschutzmittel (Pflanzenschutz-Anwendungsverordnung) ist Nitrofen in Anlage 1 als Substanz Nr. 35 geführt. Für diese Stoffe besteht ein vollständiges Anwendungsverbot.

[59] In der ehemaligen DDR war Nitrofen in den Produkten "Trizilin" und Trizilin 25" enthalten. In "Namedit", Plantulin", "Trazalex" und Trazalex extra" wurde Nitrofen mit anderen Wirkstoffen wie 2,4-D oder Simazin kombiniert. Hergestellt wurden die Produkte vom VEB Chemiekombinat Bitterfeld und dem VEB Berlin-Chemie in Ostberlin.

[60] Neben den wirtschaftlichen Auswirkungen sind gesundheitliche Auswirkungen durch den Verzehr der kontaminierten Lebensmittel vom BMGS bestätigt worden **(BMG 2002**; **BGVV 2002b)**.

Nitrofen ist ein weißes bis braunes kristallines Pulver; es färbt sich bei Lichteinwirkung dunkel. Technisches Nitrofen ist eine braune feste Masse mit leichtem Duft und besteht zu 95% aus dem Wirkstoff und ca. 3% Verunreinigungen mit p-Chlornitrobenzol, 1% Dichlorphenol und 1% Substanzen unbekannter Zusammensetzung.

Da ein vollständiges Anwendungsverbot in den alten Bundesländern seit 1988 und in den neuen Bundesländern seit 1990 gilt, sind Expositionspfade über Direktkontakt eher eine Ausnahme. Der verbleibende Expositionspfad für die Allgemeinheit ist der indirekte z.B. über kontaminierte Lebensmittel bzw. Trinkwasser. Nitrofen wurde in natürlichen Gewässern im Umfeld von Anwendungsgebieten in Belgien in Konzentrationen von 0,2 mg/m^3 gefunden. **(Deleu und Copin 1979)**. In einer 4-monatigen japanischen Studie wurden Wasserproben von 4 Flüssen auf Nitrofen untersucht, die an 11 Einzugsgebieten von Reisfeldern liegen. Dabei konnte Nitrofen nur in einigen Proben nachgewiesen werden, wobei die höchsten Konzentrationen bei 0,003 - 0,021 ppb [µg/l] während der ersten Maiwoche lagen. Nach 8 Wochen waren keine Nitrofenkonzentrationen mehr nachweisbar.

- **Stoffliche Mobilität - SC_{MOB}**

Physiko-chemische Daten

Die Geruchsschwelle in Wasser wird mit 0,58 bis 1,38 mg/l angegeben **(Shardina 1972)**. Der Schmelzpunkt von Nitrofen liegt zwischen 64 °C und 71 °C, der Dampfdruck ist mit 0,001066 Pa bei 40 °C bis 0,05332 Pa bei 70 °C zu gering, um eine direkte Exposition über die Luft zu begründen. Die Verbindung ist relativ unlöslich in Wasser (0,7 bis 1,2 mg/l bei 22 °C) aber leicht löslich in den meisten organischen Lösemitteln **(Ambrose, Larson et al. 1971)** (vgl. Tabelle 11.6.1 und 11.6.2).

Tabelle 11.6.2 Relevante physiko-chemische Daten von Nitrofen

Schmelzpunkt [°C]	70
Siedepunkt [°C]	180-190
Dichte [g/ml bei 20 °C]	1,33
Dampfdruck [Pa]	0,001066 Pa bei 40 °C bis 0,05332 Pa bei 70 °C
Löslichkeit [g/l 20 °C H_2O]	<0,001 bei 20 °C
Verteilungskoeffizient log P_{OW}	4,64 [extrapolierter Wert], **3,4** (GSBL 1996); 5.534 (US EPA)
Sorptionskoeffizient K_{OC}	4.400
Henry-Konstante [Pa·m^3/mol]	6,82 [25 °C]
Hydrolyse	stabil auch in Säuren und Basen

Nitrofen adsorbiert bei der Anwendung stark an den oberflächlichen Bodenmaterialien, so dass ein Durchwandern bis zum Grundwasser nur sehr langsam erfolgt. In natürlichen Gewässern reichert sich Nitrofen im Sediment sowie ganz erheblich in der aquatischen Flora und Fauna (z.B. in Fischen) an. In die Luft gelangte Nitrofen als Aerosol bei der Sprühanwendung bzw. adsorbiert an Staub- und Bodenpartikeln, an denen es dann einer raschen Photolyse unterliegt (vgl. Tabelle 11.6.6).

Laut landwirtschaftlicher Handbücher der ehemaligen DDR geht die Wirkung von Nitrofen durch die starke Adsorption an Bodenmaterialien bei Anwendung von 10 kg/ha innerhalb von 6 Wochen stark zurück. Andere Studien zeigen, dass Nitrofen in der Umwelt persistent sein kann. Die Substanz zeigt im Feld - möglicherweise nur bei niedrigen Temperaturen - eine höhere

Persistenz, als aufgrund von Labordaten erwartet. Im Boden im Dunkeln erwies sich Nitrofen nach Angaben der Biologischen Bundesanstalt als sehr persistent. In der Praxis verringerte sich der Nitrofengehalt im Boden innerhalb von 100 Tagen auf ein Viertel und nahm danach nur noch langsam ab. Nach einigen Jahren war kein Nitrofen mehr im Boden nachweisbar. Nitrofen, was in einem 3-jährigem Feldversuch auf die Oberflächen von drei verschiedenen Bodenmaterialen aufgebracht (versprüht) wurde, war nach 12 Monaten im Bereich von 46% (sandiger Lehm), 40% (schwerer Lehm) und 38% (Silty Lehmerde) der Anfangskonzentrationen nachweisbar. Wesentliche Restkonzentrationen verblieben in allen drei Erden nach dem Gesamtversuchszeitraum. Dabei hatte das eingesetzte Nitrofen mindestens die oberste Bodenschicht von 5 - 10 cm durchlaufen (leaching).

Die Konzentration von Nitrofen in Wasser (gesättigte Lösung) geht in Gegenwart von Bodenmaterial auf 1/100 zurück (0,01 ppm). Der K_{OC} von 4.400 verweist auf eine starke Bindungsfähigkeit.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.3):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK)

Informationen sind zu 6 von 12 relevanten Teilbereichen erhältlich. Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien wurden 8 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe II).

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit (EW_{MOB})

In die Bewertung gehen die Studie von **Fadayoni 1977** mit Q_∞ = 95 mg/g und die Wasserlöslichkeit mit 1,0 mg/l (20°C) ein. Hieraus errechnet sich ein Eingangswert von 2,45.

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Keine Vereinfachungen.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Die sonstigen Stoffdaten ergeben eine Mobilitätszahl von 304. Für Nitrofen wurde ein hoher Biokonzentrationsfaktor von 9.460 ermittelt **(HSDB 2002a)**. Die Verbindung dissoziiert nicht in Wasser und bildet im Boden keine komplexen Verbindungen. Wegen des geringen Dampfdrucks ist mit einer schnellen Ausgasung von Nitrofen aus dem Untergrund nicht zu rechnen. Mit der Dichte von 1,33 hat Nitrofen in Substanz die Eigenschaft, im Grundwasserleiter nach unten abzusinken (*sinker*). Die Konzentration am Punkt der Beurteilung wird aufgrund der geringen Wasserlöslichkeit als gering eingeschätzt ($\leq$10 µg/l).

Bewertungszahl für die Mobilität und Stoffcharakteristik SC_{MOB}:

Aus dem ermittelten Eingangswert EW_{MOB} 2,45 aus Feld 2 und der modifizierten Mobilitätszahl MMobZ 3 aus Feld 4 errechnet sich die Bewertungszahl für die Mobilität BZ_{MOB}

$0 \leq BZ_{MOB} = -$ (Eingangswert · MMobZ) + 100 $\leq 100 = -$ (2,45 · 3) + 100 $\leqslant$ 100

BZ_{MOB} =92,7 und **SC_{MOB} = 3,85**.

Ausweislich der vorliegenden physiko-chemischen Daten reichert sich Nitrofen in der Umwelt an. Die Substanz liegt vorwiegend an Bodenpartikel adsorbiert vor bzw. wird von Flora und Fauna aufgenommen und dort metabolisiert (vgl. auch biochemischer Abbau vgl. Kap. 8.1.1.5). Der Übergang in das Grundwasser erfolgt langsam und es entstehen nur niedrige Konzentrationen.

Tabelle 11.6.3 Bewertungsraster SC_{MOB} von Nitrofen

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{MOB})

	Wichtungs-punkte	
standardisierte Laborprüfmethode	3	( )
Feldversuch	1	(X)
Adsorbierbarkeit an AK	3	( )
Adsorbierbarkeit an Ads.-Harzen	2	( )
Adsorbierbarkeit Boden	1	(X)
Löslichkeit in Wasser	3	(X)
Verteliungskoeffizient log P_{ow}	1	( )
Henry-Konstante	1	( )
Dampfdruck	1	(X)
pk_a (für ionisierbare Substanzen)	1	( )
Sorptionskoeffizent K_{oc}	1	(X)
Dichte	1	(X)

Gruppeneinstufung

I	1 - 4 Punkte
II	5 - 13 Punkte
III	14 - 19 Punkte

Summe: 8 **Gruppe:** II

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit (EW_{MOB})

		(Quelle)
a) Wasserlöslichkeit S (Lit_{max}-Wert mg/l]		
- .... °C		( )
- Umrechungsfaktor		
- 20 °C	1	( )
b) Adosrbierbarkeit:C_{ads} (Lit_{min}-Wert mg/g]		
- AK		( )
- Harz		( )
- Boden	95	(Fadayoni 1977)
- Schätzung aus K_{OC} bzw. P_{OW}	95	(geschätzt aus K_{OC})

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) höchster experiment. Lös.-Wert:..... (mg/l)x 9/1000+, max. 10)1 = 1,00 ..... (a)
b) experiment.Ads.-Wert (-x+100): ..5. (mg/g)x9/100+1, max. 10) = 1,45 ..... (b)
c) geschätzter Ads.-Wert (-x+100): ..... (mg/g)x9/100+1, max. 10) = ... (c)

d) SF = 10 bei berechnetem Ads.-Wert: ^{10}log = ... (d)
e) SF = 1-10 zur Überbrückung der Varianz Ads.-Materialien ^{10}log = ... (e)
f) SF = 10 zur Überbrückung der Varianz Labor / Feld ^{10}log = ... (f)

Eingangswert: 2.1.1 (a+b+d+e+f) oder 2.1.2 (a+c+d+e+f) = 2,45

Ergebnis (Freitext):

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Charakterisierung:

Aggregatzustand unter Normalbedinungen: **fest**
Siedepunkt [°C]: **180 - 190**
Schmelzpunkt [°C]: **70**
Dichte [g/m³ bei 20 °C]: **1,33**
Viskosität [mPa · s]:
Oberflächenspannung:
Dampfdruck [Pa]: **0,001066**
Löslichkeit [g/l 20 °C H_2O]: **0,001**
Dampfsättigungskonzentration [g/m³] bei 20 °C:
Verteilungskoeffizient log P_{OW}: **3,4**
Sorptionskoeffizient K_{OC}: 4.400
pk_s (Dissoziationsgradkurve unter Annahme pH = 5)
Henry-Konstante [Pa m²/mol]: **6,82**
Remobilisierung von Metallionen durch Komplexbildung [log K_k]:
Sättigungskonzentration [g/m³]:
Biokonzentrationsfaktor (Fische): **9.460**

Berechnungsgrundlagen:

Henry-Koeffizient: $H = C_g/C_w$ = (p [Pa] · M [g/mol]) / (S [mg/l] · 8314 · T [K]
Verteilungskoeffizient: log P_{ow} = -0,662 log $C_{s,w}$ [mol/l] + 0,710
Adsorptionskoeffizient: $K_{OC} = 100 \cdot C_{ads}/C_W$ (T) / (0,58 · % org. Materie)(o.m.) mit o.m. = o.c. / 0,58; $K_{OC} = 0,4\ P_{OW}$ => $K = K_{OC} \cdot$ % o.c. /100 und $C_{ads} = K \cdot C_W$

Vereinfachungen:

Abschätzung der Wasserlöslichkeit S aus P_{OW}: log S = 3,05 - 1,29 Log P_{OW}
BKF (Fische) = $C_{BIO} / C_w = k_1$ (Aufnahme) / k_2 (Abgabe) = 0,048 P_{OW}
Konz. am Punkt der Beurteilung: C_A =! 0,1 S_A
=>min. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\ (min)}$ = S / C · V_S mit C = $C_{Sickerwasser}$
max. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\ (max)}$ = S / C · V_S mit C = LW
Volatilität: $t_{1/2}$ = ln 2 · 215,7$^{1/2}$ [2710 * 28,3 / H]
Verzög.-F. (VF) und Lipophil.: Beispiel P_{OW} 200 => VF 2,2; P_{OW} 4000 => VF 7,9
floater / sinker: Dichte Substanz < / > Dichte Wasser

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	negativ oder nicht ausreichend	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis positiv
	Quelle	Quelle	Quelle
Biokonzentration(BKF):	( )	( )	(X)
Dissoziation:	(X)	( )	( )
Komplexbildung:	(X)	( )	( )
Volatilität:	(X)	( )	( )
floater / sinker:	( )	( )	(X)
Konz. am Punkt der Beurteilung	( )	( )	(X)
min/max. kontaminiertes GW-Volumen	( )	( )	(X)

Summe = Mobilitätszahl (MobZ) = 3 0 4

modifizierte Mobilitätszahl (**MMobZ**) = 3
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

VK_{MOB}:	EW_{MOB}:	MobZ:	BZ_{MOB}:	SC_{MOB}
II	2,45	3	92,7	3,85

o Aquatoxizität - SC_{AQU}

Die Biokonzentration von Nitrofen in Fischen kann erheblich sein **(HSDB 2002a)**. In der Literatur finden sich zahlreiche Untersuchungen mit unterschiedlichen Spezies und Endpunkten (vorwiegend $LC_{50/48\ Std}$); NOEC- bzw. LOEC-Werte liegen nicht vor. Die niedrigste letale Konzentration, bei der 50% der Versuchstiere (Glanzfisch) sterben, liegt bei 2,1 mg/l **(Kramer 1986)**. Weitere Untersuchungsergebnisse an Fischen liegen vor an *Notropis atherinoiedes* ($LC_{96/48\ Std}$ = 2,1 mg/l) und an Kleinkrebsen *Daphnia pulex* ($LC_{50/48\ Std}$ = 0,19 mg/l).

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.4):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Informationen sind zu 4 von 12 toxikologisch relevanten Teilbereichen erhältlich.

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 14 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage vorläufig bewertbar (Gruppe II).

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-Wirkungs-Beziehung

Der Bewertung wird der LC_{50} aus der Fisch-Tox-Studie von **Kramer 1986** bezogen auf den Endpunkt Mortalität zugrunde gelegt. Unter Berücksichtigung der SF_c – SF_e wird für Nitrofen ein Eingangswert EW_{AQU} von 15,59 errechnet.

Feld 3: Berechnung der Dosiszahl

Für das Fehlen des (semi-)chronischen Bereichs wird eine Korrektur von +2* gegenüber dem EW_{AQU} vorgenommen. Die Dosiszahl DZ_{AQU} lautet 17,59*.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Nitrofen wird von Wasserorganismen aufgenommen. Gemessene Konzentrationen in Fischen lagen z.B. in einem mehrwöchigen Versuchsansatz mit Karpfen bei bis zu 10,4 mg/kg. Der Biokonzentrationsfaktor für Fische wird auf BKF 9.460 geschätzt **(Lyman 1982)**.

Die weiteren ökotoxikologischen Endpunkte sind mit positivem Ergebnis ausreichend getestet bzw. als nicht ausreichend getestet bewertet worden. Hieraus ergibt sich eine Aquatox-Zahl (AquZ) von 600 und eine modifizierte Aquatox-Zahl (MAquZ) von 6.

Aquatoxikologische Bewertungszahl und Stoffcharakteristik SC_{AQU}:

Aus der ermittelten Dosiszahl DZ_{AQU} 17,59* aus Feld 3 und der modifizierten Aquatox-Zahl MAquZ 6 aus Feld 4 errechnet sich die Bewertungszahl für die Aquatoxizität BZ_{AQU}

$0 \leq BZ_{AQU}$ = (Dosiszahl $\cdot$ mod. Aquatox-Zahl) = 17,59* $\cdot 6 \leq 100$

BZ_{AQU} = 100* und **SC_{AQU-X} = 2,00**.

Nitrofen wird vorläufig in die Aquatox-Gruppe I als „extrem toxisch" für Fische eingestuft. Für andere Wasserorganismen, insbesondere für Daphnien, wird Nitrofen ebenfalls vorläufig in die Aquatox-Gruppe I „extrem toxisch" eingestuft.

Tabelle 11.6.4 Bewertungsraster SC_{AQU} von Nitrofen

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{AQU})

	Wichtungspunkte
1 Akute Fischtoxizität:	
- LC_{50}	5 (x)
- LC_5	1 ( )
- LC_{100}	1 ( )
- LC_{100}	1 ( )
2 (semi-)chronische Fischoxizität:	
- LOEC	8 ( )
- NOEC	10 ( )
3 Strukturanalyse (SAB):	4 ( )
4 Sonstige Ergebnisse:	
- Kleinkrebse	4 (x)
- Bakterien	5 ( )
- Protozoen	1 ( )
- Algen	2 (x)
- Bioakkumulationsfaktor	3 (x)

Gruppeneinstufung

I	0 - 5 Punkt
II	6 - 20 Punkte
III	21 - 45 Punkte

Summe: 14 **Gruppe:** II

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{AQU})

	L_0-Werte	Spezies	(Quelle)
akute Toxizität:			
- LC_{50}	2,1		(Kramer 1986)
- LC_5			( )
- LC_{10}			( )
- LC_{100}			( )
(semi-)chronische Toxizität:			
- LOEC			( )
- NOEC			( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller NOEC : .... (mg/l) neg.^{e}ln · 1,9 +14 = ... (a)

b) niedrigster abgeschätzter Wert 2,1 (mg/l) neg.^{e}ln · 1,9 +14 = 12,59 (b)

c) SF = 10 zur Abschätzung NOEC aus LOEC ^{10}log = 1 (c)

d) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Spezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt ^{10}log = 1 (d)

e) SF = 10 zur Abschätzung LOEC aus LC_{50} ^{10}log = 1 (e)

f) SF = 10 für das Fehlen standard. Bedingungen ^{10}log = ... (f)

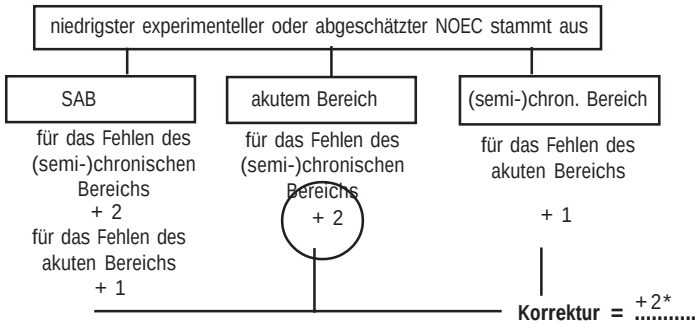
g) SF = 3 Umrechnung aus SAB in NOEC ^{10}log = ... (g)

Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = 15,59

Feld 3: Berechnung der Dosiszahl (DZ_{AQU})

Übertrag Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = 15,59

3.1 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis
(korrigierte Dosiszahl wird mit * gekennzeichnet)



3.2 Beurteilung der Substanz im Feld 2 EW_{AQU}:

3.2.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = ...

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = ...

3.2.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g)+Korrektur* = Dosiszahl = 17,59*

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g)+Korrektur* = Dosiszahl = ...

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
	Quelle	Quelle	Quelle
4.1 Kleinkrebse (EC_{50})			
- Daphnie pulex	(x)	( )	( )
4.2 Bakterien (Test, Spezies:)			
- Spezies:	(x)	( )	( )
4.3 Protozoen (Test:)			
- Ciliaten, Amöben, Glockentierchen	(x)	( )	( )
4.4 Algen (Hemmungstest IC_{50})			
- planktische Grünalgen	(x)	( )	( )
- Blaualgen	(x)	( )	( )
4.5 Bioakkumulationsfaktor (c_{Fisch} / c_{H2O})	(x)	( )	( )

Summe = Aquatoxizitätszahl (AquZ) = 6 | 0 | 0

modifizierte Aquatoxizitätszahl (**MAquZ**) = 6
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Beurteilungsprofil:	**VK:**	**EW:**	**DZ:**	**AquZ:**	**BZ_{AQU}:**	**SC_{AQU-X}:**
Fischtoxizität	14	15,59	17,59*	600	100*	2,0

o Toxizität - SC_{TOX}

Die Mehrzahl der mit Nitrofen durchgeführten toxikologischen Studien stammen aus den 60er, 70er und 80er Jahren. Die jüngeren Studien zeigen Ergebnisse von speziellen Fragestellungen, in denen Nitrofen als Modellsubstanz zur Untersuchung von Schadwirkungen auf das Hormonsystem und insbesondere für teratogene sowie mutagene Effekte verwendet wurde. Eine umfassende toxikologische Bewertung des Wirkstoffes wurde im Jahre 1983 sowohl durch die UNO gemeinsam mit der WHO **(FAO/WHO 1983)**, als auch von der *International Agency for Research on Cancer* **(IARC 1983)** durchgeführt. Die toxikologischen Basisdaten sind in der Tabelle 11.6.5 zusammengefasst.

Neben der krebsauslösenden Wirkung, die im Tierversuch festgestellt wurde, besteht für Nitrofen auch der Verdacht, endokrine Wirkungen (hormonähnliche Wirkungen) zu besitzen bzw. auszulösen. Es ist weiterhin embryoschädigend (Lungenmissbildungen). Zur Wirkung beim Menschen gibt es derzeit keine toxikologischen Daten, die Ergebnisse der Tierversuche belegen aber einen ausreichenden Verdacht auf mögliche Kanzerogenität (Krebserzeugung) beim Menschen. Die Substanz reizt die Augen, die Haut und die Atemwege. Wiederholter bis andauernder Hautkontakt kann Dermatitis hervorrufen **(HSDB 2002a)**.

Die akute Toxizität von Nitrofen an Labortieren wurde von **(Burke Hurt, Smith et al. 1983)** zusammengefasst, der orale LD_{50}-Werte von 2.400 bis 3.600 mg/kg Körpermasse (KM) bei Ratten und Mäusen angibt. In anderen Studien werden orale LD_{50} über Verfütterung im Bereich von 410 bis 3.580 mg/kg für Ratten **(Ambrose, Larson et al. 1971; Shardina 1972)** und von 780 bis 1.620 mg/kg für Kaninchen angegeben **(Shardina 1972)**. Akute Vergiftungserscheinungen sind verminderte Aktivität, beschleunigte Atmung und Störungen des Atemrythmus, Hyperthermie gefolgt von Tremor und starken Krämpfen. Der Tod tritt in der Regel innerhalb von 2 bis 8 Tagen auf **(Burke Hurt, Smith et al. 1983)**.

Zur subchronischen Toxizität liegen 2 orale 13-Wochen-Studien an Ratten vor **(Ambrose, Larson et al. 1971; O'Hara, Chan et al. 1983)**. In der Studie von Ambrose konnte keine Dosis ohne Effekte ermittelt werden (Dosisbereiche 100, 500, 2.500, 13.500 und 5.000 ppm im Futter). Die Studie von **O'Hara** wurde in die Bewertung aufgenommen (s.u.).

Es liegen nur chronische Studien zur Karzinogenität vor (vgl. Bewertung).

Die teratogenen Eigenschaften von Nitrofen wurden in zahlreichen Studien seit den 70iger Jahren dargestellt **(Ambrose, Larson et al. 1971; Kimbrough, Gaines et al. 1974; Milman, Ward et al. 1978; NCI 1978; NCI 1979; Costlow und Manson 1981; Stone und Manson 1981; Gray, Kavlock et al. 1982; Costlow, Hirsekorn et al. 1983; Gray und Kavlock 1983; IARC 1983; Kavlock und Gray 1983; Kavlock und Gray 1983; O'Hara, Chan et al. 1983; Raub, Mercer et al. 1983; Unger, Van Goethem et al. 1983; Kang, Zolna et al. 1986)**. Die meisten von ihnen wurden durchgeführt, um die dem teratogenen Effekt zugrunde liegenden Mechanismen zu prüfen. Die dazu verwendeten Konzentrationen waren meist so hoch, dass sie für eine Risikobetrachtung nicht geeignet sind. Eine Dosis ohne entwicklungstoxische Wirkungen von Nitrofen ist bisher weder bei Ratten noch bei Mäusen experimentell ermittelt worden. Neben der Karzinogenität sind die entwicklungstoxischen Eigenschaften als das wesentliche Risiko einer Exposition gegenüber Nitrofen anzusehen, weil diese Effekte bereits bei sehr niedrigen Dosierungen und nach nur kurzzeitiger bzw. einmaliger Anwendung des Wirkstoffs nachweisbar waren.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.5):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Informationen sind zu 5 von 8 toxikologisch relevanten Teilbereichen erhältlich bzw. werden für die Bewertung herangezogen, u.a.:

- 1 Studie zur subchronischen Toxizität (Ratte oral über Nahrung, 13 Wochen, m, Konz. 0, 100, 500 und 2500 ppm). Beobachtete stat. sign. Effekte: Körpergewicht ↓, Veränderungen der klin.-chem. Parameter: Proteine, Albumin, Globulin, Cholesterin↑ und Glukose ↓, Testis-, Nieren-, und Lebergewicht ↑, histol. Veränderungen der Leber (alles ab 500 ppm); keine reproduktionstoxischen Veränderungen (Fertilität, Schwangerschaft, Geschlechterverhältnis). [NOAEL 100 ppm] **(O'Hara, Chan et al. 1983)**.

Es liegen 9 weitere orale Studien zur Reproduktionstoxizität vor. Nitrofen zeigte frucht- bzw. entwicklungsschädigende Wirkungen bei Ratten und Mäusen. Bei Mäusen wurden Hydrocephalus und Mikrophthalmie beobachtet, darüber hinaus Gaumenspalten und eine verzögerte Skelettentwicklung. Eine Dosis ohne erkennbare fruchtschädigende Wirkungen konnte nicht festgestellt werden. In einer Mehrgenerationsstudie an Ratten wurden bei Dosierungen ab 100 mg/kg im Futter (= 6,7 mg/kg/d) eine Zunahme von Totgeburten und insbesondere eine erhöhte postnatale Sterblichkeit der Nachkommen festgestellt. Bei Nitrofenkonzentrationen ab 10 mg/kg im Futter (= 0,67 mg/kg/d) ergaben sich Hinweise auf eine verminderte Konzeptionsrate **(BGVV 2002a)**. Bei Ratten traten bei einmaliger Verabreichung von 150 mg/kg/d am 11. Tag der Trächtigkeit Missbildungen wie Deformationen des Herzens, Hydronephrose und insbesondere Zwerchfellausbuchtungen (Hernien) auf. Die mehrfache Verabreichung kleinerer Dosen führte ebenfalls zu entsprechenden Missbildungen. Die verminderte Lebensfähigkeit der Nachkommen scheint vorrangig mit einer Verzögerung der Lungenreifung (Hypoplasie der Lungen) im Zusammenhang zu stehen **(Alfonso, Arnaiz et al. 1996).** Die Wirkungen insbesondere auf das Zwerchfell und die Lungen sind so spezifisch, dass Nitrofen als positive Referenzsubstanz für die Untersuchung entsprechender Fragestellungen Verwendung findet, vgl. z.B. **(Guilbert, Gebb et al. 2000; Kitano, Korimilli et al. 2000a; Kitano, Korimilli et al. 2000b).**

Ein NOAEL konnte wie bei den Mäusestudien nicht festgestellt werden, da auch in der niedrigsten geprüften Dosis noch das Gewicht verschiedener Organe reduziert war**,** vgl. insbesondere **(Kang, Zolna et al. 1986, Manson, Brown et al. 1984, Kavlock und Gray 1983, Costlow und Manson 1981, Raub, Mercer et al. 1983, Stone und Manson 1981, Chase-Deesing, Kavlock et al. 1986, Francis 1989)**.

Die Studie von **Unger 1982** ist als Primärliteratur nicht verfügbar, wird aber ausführlich von **Thomas 1986** beschrieben. Es wurden Dosen (oral, Ratte) von 0, 0,15, 0,45, 1,39, 4,17, 12,50 und 25 mg/kg KG/d vom 7. Tag der Schwangerschaft bis zum 15. Tag der Laktation oral verabreicht (Ratte). Dosisabhängige Effekte zeigten sich hinsichtlich der Überlebensrate der Jungtiere nach der Geburt und dem Auftreten von Zwerchfellhernien. Bei der Dosis-Gruppe 1,39 mg/kg/d zeigte sich ein statistisch signifikanter Unterschied zur Kontrollgruppe, es gab allerdings bereits in der 0,15-Dosis-Gruppe betroffene Junge bzw. Würfe. Da nur tote bzw. sterbende Tiere auf Missbildungen untersucht wurden, ist die Studie zur Ableitung eines LOEL oder NOEL nur beschränkt zu benutzen. Andere Untersuchungen zeigten, dass die von Nitrofen ausgelösten Effekte (einschließlich der Bildung von Zwerchfellhernien) nicht unbedingt letal sind. Die niedrigste angewendete Dosis von 0,15 mg/kg/d wird daher als LOAEL gewertet, aus dem mit dem Faktor 10 ein NOAEL von 0,015 mg/kg/d abgeschätzt wird.

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 6 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage vorläufig bewertbar (Gruppe II).

Feld 2: Angaben zur Dosis-Wirkungs-Beziehung

In die Bewertung geht die Studie von **Unger 1982** mit dem abgeschätzten NOAEL von 0,015 mg/kg/d ein (diese wird untersetzt durch die dermale Studie von **Costlow, Hirsekorn et al. 1983**; Endpunkt: Auftreten von geweiterten Nieren bei dermaler Applikation).

Wegen des Fehlens von Daten aus dem chronischen Bereich wird der Eingangswert von 4,82 um +2* korrigiert, so dass sich eine Dosiszahl von 6,82* errechnet.

Feld 3: Karzinogenität

Daten zur karzinogenen Wirkung am Menschen liegen nicht vor, jedoch Langzeitstudien an Ratten und Mäusen. Nitrofen gilt aufgrund dieser Studien als eindeutig karzinogen im Tierversuch und als mögliches Humankarzinogen. Bei Untersuchungen an Beagle-Hunden (m/w, oral, 2 Jahre) mit Dosen 0, 20, 200 und 2000 ppm (entsprechend 0, 0,5, 5 und 50 mg/kg/d) wurde in der 2000 ppm-Gruppe ein signifikant erhöhtes Leber-/Körpergewichts-Verhältnis beobachtet. Weitere Effekte wie Überlebensrate, allgemeiner Gesundheitszustand, Zunahme im Körpergewicht (KG), Nahrungsaufnahme, Veränderungen der Blut- bzw. Urinwerte wurden, gemessen im 3-Monatsintervall, nicht festgestellt. Ebenfalls konnten in keiner Gruppe histopathologische Veränderungen gefunden werden. Der NOEL war 200 ppm (5 mg/kg KG/d).

Bei Verabreichung über die Nahrung erhöht (technisches) Nitrofen signifikant das Auftreten hepatocellulärer Karzinome und Adenome bei der Maus (m/w), Hämangiosarkome der Leber oder der Milz bei männlichen Mäusen bzw. anaplastische Adenokarzinome des Magens bei weiblichen Ratten **(NCI 1978; NCI 1979; IARC 1983)**.

Im Feld Karzinogenität wird Nitrofen in die Gruppe B1 eingestuft.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Nitrofen wird nach oraler Verabreichung nur teilweise aus dem Darm aufgenommen, weitgehend metabolisiert und innerhalb von 96 Stunden vorrangig in den Faeces (75%) und nur zu einem geringen Teil (<15-20%) im Harn ausgeschieden. Im Körper wird es auf viele Organe und Gewebe verteilt. Die höchsten Konzentrationen wurden im Fettgewebe gemessen. Bei oraler Applikation von (14)-C markiertem Nitrofen im Rattenversuch (w) wurde eine erhöhte Radioaktivität auch im Embryonalgewebe festgestellt; es konnten hier 4 Metaboliten analysiert werden: 4'-Amino- und 4'-Acetylamino-Derivate sowie 2 hydroxylierte Derivate **(Costlow und Manson 1983)**.

Die meisten der p-Nitrogruppen im Phenylring der Biphenyl-Ether-Herbizide inkl. Nitrofen werden zu Aminen reduziert gefolgt von Acetylierung. Die am anderen Phenolring substituierten Chloratome werden reduziert bzw. durch Hydroxylgruppen ersetzt und in einigen Fällen neu angeordnet. Die Spaltung der Etherbindung wurde bei Nitrofen beobachtet **(Aizawa 1982)**.

Versuche mit Amino-Derivaten von Nitrofen an homogenisierter Leber von Ratten und Erythrozyten von Ratten bzw. Menschen führten zur Bildung von Methämoglobin. Die wesentlichen gemessenen Metabolite beim Schaf (Dosis 40 mg/kg markiertes Nitrofen, oral) waren 2,4-Dichlorphenyl-4-aminophenylether, 2,4-Dichlor-5-hydroxyphenyl-4-nitrodiphenyl-ether, 2,4-Dichlorphenol und 2-Chlorphenyl-4-nitrophenylether **(IARC 1983)**.

Tabelle 11.6.5 Bewertungsraster SC_{TOX} von Nitrofen

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{TOX})

	Wichtungspunkte	
subchronische Toxizität:	1 (X)	
chronische Toxizität:	3 ( )	
Reproduktionstoxizität:	2 (X)	
subchronische Immuntoxizität:	1 ( )	Gruppeneinstufung
chronische Immuntoxizität:	2 ( )	
Toxikokinetik:	1 (X)	I 1 - 3 Punkte
Biochemie:	1 (X)	II 4 - 8 Punkte
Mutagenität:	1 (X)	III 9 - 12 Punkte

Summe: 6 **Gruppe:** II

Feld 3: Karzinogenität (canc)

(Kennzeichnung für nichtorale Studien: i = inhalativ, d = dermal)

canc A = eindeutig humankarzinogen ($RZ = BZ_{TOX} = 100$)
canc B_1 = eindeutig karzinogen im Tierversuch als Initiator oder Anfangsverdacht aus Humandaten bei wahrscheinlicher Initiatorwirkung ($RZ = BZ_{TOx} = 100$)
canc B_2 = Initiatorwirkung im Tierversuch zweifelhaft, aber begründeter Anfangsverdacht aus Tier- oder Strukturdaten (RZ = 33)
canc B_3 = oral wie Gruppe C; andere Pfade aber wie $B_2/B_1/A$ (RZ = 22)
canc C = nicht karzinogen bei adäquater Testung
canc D = nicht adäquat getestet, aber kein Verdacht aus Strukturdaten (RZ = 11)

Einstufung der Karzinogenität der Substanz: Gruppe B_1 **=> RZ =** +100

Feld 2: Angaben zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{TOX})

	NOAEL / LOAEL	(Quelle)
subchronische Toxizität:		( )
chronische Toxizität:		( )
Reproduktionstoxizität:	0,17	(Costlow 1983)
subchronische Immuntoxizität:	0,15	(Unger 1983)
chronische Immuntoxizität:		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller NOAEL : ..... (g/kg/d) neg.^{10}log = ... (a)
b) niedrigster abgeschätzter NOAEL : $1,5 \cdot 10^{-5}$ (g/kg/d) neg.^{10}log = 4,82 (b)
c) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Laborspezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt ^{10}log = ... (c)
d) SF = 10 für voraussichtlich starke Kumulation der Substanz im Säuger (Halbwertszeit der Elimination >1 a) ^{10}log = ... (d)

Eingangswert: 2.1.1 (a+c+d) oder 2.1.2 (b+c+d) = 4,82

2.2 Dosiszahl DZ_{TOX} (Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis) (korrigierte Dosiszahl wird mit * gekennzeichnet)

niedrigster experimenteller oder abgeschätzter NOAEL stammt aus

subchron. Bereich	chronischer Bereich	Reprotox. Bereich
für das Fehlen des chronischen Bereichs + 2	für das Fehlen des subchron. Bereichs + 1	für das Fehlen des chron. Bereichs (+ 2)
für das Fehlen des Reprotox. Bereichs + 1	für das Fehlen des Reprotox. Bereichs + 1	für das Fehlen des subchron. Bereichs + 1

Korrektur = +2*

2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2 DWB:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) = Dosiszahl = ...
oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) = Dosiszahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = ...
oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = 6,82*

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
Toxikokinetik:	Quelle	Quelle	Quelle
Kumulationstendenz in Säugern (> = 24 h)	(x)	( )	( )
Reaktive Metabolite	(x)	( )	( )
Plazentagängigkeit	(x)	( )	( )
Biochemie:			
Blutbild, Serum, Immunzellenstatus } Veränderungen	(x)	( )	( )
Enzym, Hormon, Transmitter } Veränderungen	(x)	( )	( )
Metallhomöostase Veränderungen	(x)	( )	( )
Mutagenität:			
DNA-Schäden	(x)	( )	( )
Punktmutationen	(x)	( )	( )
Chromosomenmutationen	(x)	( )	( )

Summe = Toxizitätszahl (ToxZ) = 9 | 0 | 0

modifizierte Toxizitätszahl (**MToxZ**) = 9
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Feld 5: Humantoxikologie

a) Erfahrungen am Menschen (Freitext):

Keine verfügbaren Humandaten. Ausreichende Beweise für krebserzeugende Wirkung im Tierversuch (IARC, 1987)

b) vorhandene Werte:

IARC Gruppe 2B

Beurteilungsprofil:	VK_{TOX}:	EW_{TOX}:	canc:	ToxZ:	BZ_{TOX}:	SC_{TOX-X}:
oral	II	6,82*	B_1	900	100*	4,0

Aus mehreren Untersuchungen geht hervor, dass Nitrofen im Ames-Test mutagen wirkte (Punkt- oder Genmutation). Im Unterschied dazu erwies sich Nitrofen in anderen Testsystemen, u.a. in Säugerzellen und in Tierversuchen, konsistent als negativ, so dass z.Z. keine eindeutigen Aussagen zum mutagenen Potential von Nitrofen gemacht werden können (*in vitro* Cytogenetik: Chromosomenaberationen (neg.), Schwesterchromatidenaustausch (neg.), Maus lymphoma (pos.), Salmonella (pos) **(IARC 1983; Dunkel 1984)**.

Sonstige toxikologische Prüfungen zur Ermittlung der Toxizitätszahl ergeben 5 positive Befunde. Die übrigen 4 Kriterien werden als nicht oder nicht ausreichend getestet eingestuft, so dass die Toxizitätszahl 900 erhalten wird.

Toxikologische Bewertungszahl und toxikologische Stoffcharakteristik SC_{TOX}:

$0 \leqslant BZ_{TOX}$ = Dosiszahl · mod. Toxiziätszahl + RZ = 6,82 · 9 + 100 $\leqslant 100$

BZ_{TOX} + 100* und **SC_{TOX-X} = 4,0**

Nitrofen erhält wegen der vorliegenden Daten zur karzinogenen Wirkung im Tierversuch die toxikologische Bewertungszahl 100*. Der Wert der toxikologischen Substanzcharakteristik SC_{TOX-X} ist 4,0. Die Substanz ist als hoch toxisch und eindeutig karzinogen im Tierversuch als Inititator eingestuft.

- **Biochemischer Abbau - SC_{BIO}**

Im allgemeinen wird Nitrofen in allen Systemen (Tiere, Pflanzen, Boden und Wasser) metabolisch abgebaut. Der Abbau erfolgt i.d.R. über die Reduktion der Nitrogruppe, die Konjugation der resultierenden Aminogruppe, die Hydroxylierung des Dichlorphenylrings und die Bildung von natürlich auftretenden Stoffen bis hin zur Umwandlung in CO_2. Die wesentlichen Metaboliten im Boden sind Aminonitrofen, Formamidonitrofen, Acetamidonitrofen, Hydroxy-Acetamidonitrofen und Hydroxy-Propionamidonitrofen (vgl. z.B. **FAO/WHO 1983**).

Das an der Oberfläche von Böden adsorbierte Nitrofen wird über Photolyse und biochemischen Abbau abgebaut. Der biochemische Abbau erfolgt in Überschwemmungsgebieten rasch (Halbwertszeit 10 Tage bei 30 °C). Bei der Untersuchung des Verbleibs von Diphenylether-Herbiziden auf gefluteten Reisfeldern wurde die Halbwertszeit für Nitrofen mit 16 Tagen angegeben **(Kearney 1975)**. Nitrofen wurde unter aeroben und anaeroben Bedingungen langsam in einer Abwasserkultur, jedoch nur in Gegenwart einer externen Kohlenstoff- und Energiequelle, abgebaut **(Alexander 1981)**. Nach 88 Tagen Inkubationszeit wurde ein Abbau um 6% (aerob) bzw. 4% (anaerob) erreicht **(Yamada 1981)**.

Im Boden erfolgte der Abbau von Nitrofen durch Bodenmikroorganismen langsam während der ersten Woche. Die Verbindung war über weitere 3 Wochen beständig, wenn sie die einzige Kohlenstoffquelle darstellte. Nach Zugabe von anderen Kohlenstoffquellen ging der Abbau weiter. In einem Abbauversuch in Fließgewässern verblieben nach 50 Tagen Inkubationszeit 1% des Nitrofens (bei 20° C). Im Laborexperiment verblieben nach 16 Wochen Inkubationszeit 16% bzw. 47% der ursprünglichen Konzentration in sandigem Lehm bzw. in Düngererde. Die Halbwertszeit von Nitrofen war mit 10 Tagen bei einer Temperatur von 30° C in der Erde eines überfluteten Hochwassergebietes wesentlich niedriger als in Hochlanderde, auch wenn der Wassergehalt bei der Feldkapazität lag (verschiedene japanische Literaturquellen zitiert in **(HSDB 2002a)**. Im Laborexperiment verblieben nach 16 Wochen Inkubationszeit 16% bzw. 47% der ursprünglichen Konzentration in sandigem Lehm bzw. in Düngererde **(Murty, Miles et al. 1982)**.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.6):

Tabelle 11.6.6 Bewertungsraster SC_{BIO} von Nitrofen

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{BIO})

Bio-Bereiche	Wichtungspunkte (WP) Serie / Wert	mehrere Serien / Werte
1 Aerober Abbau		
1.1 Standardisierte Prüfmethode:		
1.1.1 Testung nach Adaption (z.B. Warburg)	30 ( )	40 ( )
1.1.2 Testung inkl. Adaption (z.B. *screening*)	25 ( )	35 ( )
1.2 Andere Laborprüfungen		
1.2.1 Labor BB	25 ( )	35 (x)
1.2.2 Batch-Test	8 ( )	12 ( )
1.2.3 Standardverdünnungsverfahren (z.B. BSB_5)	6 ( )	8 ( )
1.3 Industrielle bzw. kommunale biologische Reinigungsanlage		
1.3.1 dominanter Inhaltsstoff	20 ( )	25 ( )
1.3.2 nicht dominanter Inhaltsstoff	12 ( )	15 ( )
1.4 Feldversuche		
1.4.1 Oberflächenwasser	10 ( )	15 ( )
1.4.2 Grundwasser	8 ( )	12 ( )
1.4.3 Brakwasser	6 ( )	10 ( )
1.4.4 Boden	6 ( )	10 ( )
1.5 Strukturanalyse (SAB)		
1.5.1 Basis homologie Reihe	25 ( )	
1.5.2 Basis Strukturformel	20 ( )	
2 Anaeber Abbau		
2.1 Labor-/Feldversuche	4 (x)	
3 Chemischer Abbau		
3.1 Fotolyse	3 (x)	
3.2 Hydrolyse	2 ( )	
3.3 TOC, DOC, CSB-Cr	1 ( )	
3.4 CSB-Mn	0 ( )	
4 Wasserlöslichkeit		
4.1 standard. Methode	4 (x)	
4.2 berechnet	2 ( )	
5 Inhibitärwirkung		
5.1 experimentell	4 (x)	
5.2 Strukturanalyse	2 ( )	
6 Bioakkumulation		
6.1 experimentell	4 (x)	
6.2 berechnet	2 ( )	

Summe: 54

I	0 - 8 Punkte	nicht bewertbar
II	9 - 25 Punkte	vorläufig bewertbar
III	26 - 60 Punkte	bewertbar

Gruppe: III

Feld 2a: Eingangswert zum Abbauverhalten (EW_{BIO})

	(%)	(Quelle)
Standardisierte Prüfmethode:	6	(Bridge 1979)
		( )
Praktische Prüfmethode:		( )
		( )
Strukturanalyse (SAB):		( )
		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller Abbau : 6 ..... % (neg./10 + 11)·1,5 = 15,6 (a)

b) niedrigster abgeschätzter Abbau : .....% (neg./10 + 11)·1,5 = ... (b)

c) SF = 10; bei Anwendnung von SAB $^{10}\log$ = ... (c)

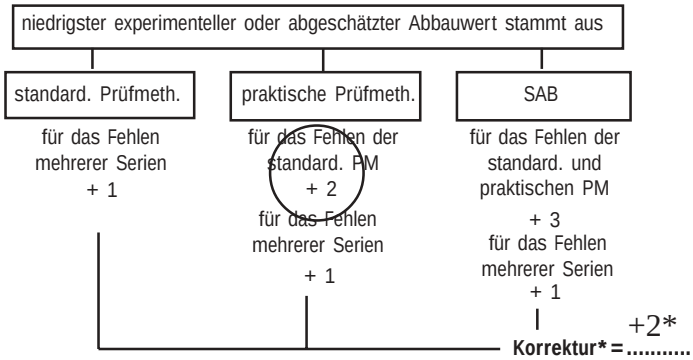
d) SF = 10; bei sehr langsamem biochemischem Umsatz $^{10}\log$ = 1 ... (d)

Übertrag 2a = 16,6

Feld 2b: Berchnung der Abbauzahl (AZ)

Übertrag aus 2a = 16,6

2.2 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis
(korrigierte Abbauzahl wird mit * gekennzeichnet)



2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Bio-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) = Abbauzahl = ...

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) = Abbauzahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) + 2.2 Korrektur * = Abbauzahl = 18,6*

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) + 2.2 Korrektur * = Abbauzahl = ...

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation (mod)

mod C = keine Hydrolyse und keine Photolyse bei adäquater Testung (AA = 0)
mod D = nicht adäquat getestet, aber keine Hydrolyse oder Photolyse aufgrund von Strukturdaten (AA=0)
mod B_2 = strukturelle Voraussetzungen für Hydrolyse oder Photolyse (AA = -5)
mod B_1 = langsame Hydrolyse oder Photolyse (AA = -10)
mod A = rasche Hydrolyse oder Photolyse experimentell gesichert (AA = -20)

Einstufung phys./chem. Modifikation: **Gruppe** B2 **=> AA =** -5

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
4.1 aerober Abbau:	Quelle	Quelle	Quelle
- Inhibitorwirkung < 10 mg/l	(x)	( )	( )
< 1 mg/l	( )	( )	(x)
- $t_{1/2}$ (Feldversuch) > 1 Jahr	( )	( )	(x)
> 10 Jahre	( )	( )	(x)
- Adaptionszeit > 25 Tage	( )	( )	(x)
4.2 anaerober Abbau:			
- toxikol. relevante stabile Metabolite	(x)	( )	( )
4.3 sonstige Parameter:			
- Wasserlöslichkeit < 10 mg/l	(x)	( )	( )
< 1 mg/l	(x)	( )	( )
- Bioakkumulation	(x)	( )	( )

Summe = Biozahl (BioZ) = 5 | 0 | 4

modifizierte Biozahl (**MBioZ**) = 5
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

VL_{BIO}:	EW_{BIO}:	AZ_{BIO}:	BioZ:	BZ_{BIO}	SC_{BIO-X}
III	16,6	18,6*	504	88*	1,88

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 54 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe III).

Feld 2: Angaben zum Abbauverhalten

Bewertet werden die Ergebnisse der Studie von **Yamada 1981** mit 6% Abbau innerhalb von 88 Tagen. Es errechnet sich ein Eingangswert von 16,6. Für das Fehlen von Daten aus standardisierten Untersuchungen wird der Eingangswert um +2 korrigiert. Die Abbauzahl beträgt 18,6.

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation

Nitrofen ist unter Umweltbedingungen stabil gegenüber einem hydrolytischen Abbau. Die Substanz wird an der Bodenoberfläche rasch photolysiert (Halbwertszeit 10 Tage bei 30 °C), jedoch sehr langsam in Hochlanderde. Es erfolgt die Einstufung in die Gruppe mod B_2 (mit AZ = -5).

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Die sonstigen Prüfungen zum biochemischen Abbau führen auf eine Biozahl von 504. Die modifizierte Biozahl (MbioZ) lautet 5.

Biochemische Bewertungszahl und SC_{BIO}:

$0 \leqslant BZ_{BIO}$ = Abbauzahl · mod. Biozahl + mod = 18,6* · 5 - 5 = 88* und **SC_{BIO-X} = 1,88**

Nitrofen wird aufgrund der vorliegenden Daten in SC_{BIO-X} = 1,88 (BIO-Gruppe C „schwer abbaubar") eingestuft. Die Substanz unterliegt in der Umwelt nur einem geringen biochemischem Umsatz. Auch bei wesentlich verlängerter Reaktionszeit gibt es nur eine geringe Zunahme der Abbaurate.

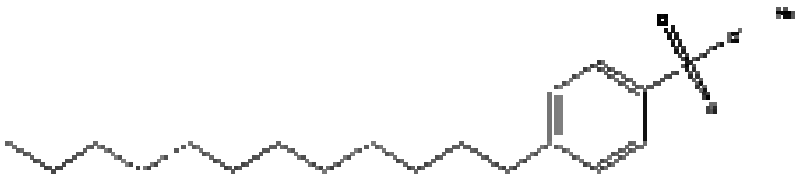
o 8.1.1.6 Umwelttoxikologische Relevanz – SC_{TOR}

SC_{TOX} + SC_{BIO-X} = **SC_{TOR-X} = 5,88**

Nitrofen erwies sich als in der Umwelt biochemisch stabil und als stark toxisch. Die umwelttoxikologische Relevanz der Substanz ist mit SC_{TOR} = 5,88 sehr hoch. Das Schadstoffrisiko ist „sehr hoch". Eine Kontrollerfordernis ist bei Kontaminationsverdacht unbedingt gegeben.

- **Dodecylbenzolsulfonat [25155-30-0]**

Tabelle 11.6.7 Identität und Stoffkonstanten von Dodecylbenzolsulfonat

Strukturformel:	
Andere Bezeichnungen:	Laurylbenzolsulfonsäure; Natriumsalz mit linearer C_{12}-Kette: Natriumdodcylbenzolsulfonat; Natriumlaurylbenzolsolfonat; Ultrawet XK; Nacconol; Santomerse; Sulframin 1238; sodium dodecylphenylsulfonate; AA-9; AA-10; abeson nam; bio-soft D-40; bio-soft D-60; bio-soft D-62; bio-soft D-35x; calsoft f-90; calsoft L-40; calsoft L-60; conco aas-35; conco aas-40; conco aas-65; conco aas-90; conoco c-50; conoco c-60; conoco sd 40; detergent hd-90; mercol 25; mercol 30; naccanol nr; naccanol sw; nacconol 40f; nacconol 90f; nacconol 35SL; neccanol sw; pilot hd-90; pilot sf-40; pilot sf-60; pilot sf-96; pilot sf-40b; pilot sf-40fg; pilot SP-60; richonate 1850; richonate 45b; richonate 60b; santomerse 3; santomerse no. 1; santomerse no. 85; solar 40; solar 90; sulfapol; sulframin 85; sulframin 90; sulframin 40; sulframin 40ra; sulframin 1238 slurry; sulframin 1250 slurry; ultrawet k; ultrawet 60k; ultrawet kx; ultrawet sk; stepan ds 60; ultrawet 1t; marlon a 350; marlon a; maranil; marlon a 375; siponate ds 10; trepolate f 40; conoco c 550; kb (surfactant); nansa sl; santomerse me; merpisap ap 90p; nansa ss; trepolate f 95; nansa hs 80; deterlon; ultrawet 99ls; sulfuril 50; F 90; elfan wa; sandet 60; steinaryl nks 50; sinnozon; NANSA HS 85S; C 550; KB; HS 85S; nansa hf 80; arylan sbc; marlon 375a; X 2073; conco aas 35H; neopelex 05; richonate 40b; DS 60; pelopon a; sulframin 1240; 35SL; SDBS; dodecyl benzenesulfonic acid, sodium salt; sodium dodecyl benzenesulfonate; Sodium Laurylbenzenesulfonate; Arylsulfonat;
Stoffgruppe:	amphoteres Tensid, Gruppe der linearen Alkylbenzolsulfonsäuren und -sulfonate (LAS)
CAS-Nr.	25155-30-0
Summenformel	$C_{18}H_{30}O_3S$
Stoffbeschreibung	Pulver / Paste, weiß bis gelb (fest bei 21 °C)
Molekulargewicht [g/Mol]	326

o Herkunftsbereich und Gruppencharakteristik

Dodecylbenzolsulfonat (DBS) wird als anionisches Detergents in Waschmitteln, Spülmitteln und Reinigungsmitteln verwendet. Weitere Verwendungen finden sich in den Bereichen der Arzneimittel, Lebensmittel/Bedarfsgegenstände, von technischen Hilfsstoffen, der Pflanzenschutz- und Desinfektionsmittel, der Körperpflege und als Zwischenprodukt in der industriellen Verwendung.

Der Verbrauch in Deutschland lag 1989 bei ca 60.000 t/a, 1995 bei ca. 37.000 t/a (zum Vergleich der Verbrauch in USA und Kanada lag in den 80iger Jahre, wie auch in Westeuropa, bei ca. 270.000 t/a). Der Gehalt in Waschmittelpulver liegt bei ca. 10-15% und in Flüssigwaschmitteln bei ca. 40%. Die insgesamt in die Umwelt eintretene Menge ist seit 1976 weltweit von ca. 500.000 t/a auf <200.000 t/a um über die Hälfte zurückgegangen **(Biedlingmaier 1983)**.

Dodecylbenzolsulfonat gehört zur Gruppe A der Herkunftsbereiche von Umweltkontaminanten (vgl. Tabelle 5.1). Der in die Umwelt gelangende Anteil wird auf 20% geschätzt; eine flächenhafte Exposition ist gegeben **(Stephenson 1977)**[61].

DBS ist ein weißer bis gelber Feststoff (in Handelsformen als Granulat, Pulver, Flocken, Paste). Der Aggregatzustand bei 21 °C ist fest.

In Oberflächengewässern wurden Konzentrationen von 0-2 mg/l gefunden (April 1987 bis März 1988 im *Lake Teganuma*). In Fließgewässern wurden im Ablauf von Abwasserreinigungsanlagen folgende Konzentrationen (im Abstand zur Einlaufstelle) gemessen (1988): 270 µg/l (0,8 km), 150 µg/l (7 km), 120 µg/l (11,7 km), 80 µg/l (25,3 km), 40 µg/l (48 km), 10 µg/l (87 km). Die durchschnittliche Jahreskonzentration wurde in Fließgewässern mit 222 µg/l gemessen (Fluss Tamagawa in Japan) **(HSDB 2002b)**.

In Sedimenten wurden Konzentrationen von 0,1 mg DBS/kg (marine Sedimente an Einleitstellen von Kläranlagen an der spanischen Küste) bis 275 mg DBS/kg (marine Sedimente einer kleinen Bucht in Süd-Dakota) **(HSDB 2002b)**.

o Stoffliche Mobilität - SC_{MOB}

Physiko-chemische Daten

DBS wird als geruchlos bzw. mit leicht öligem Geruch beschrieben. Der Schmelzpunkt liegt bei über 300 °C, der Dampfdruck wird in der Literatur nicht genau, sondern nur als „äußerst gering" beschrieben **(NTP 2003a)**. DBS ist sehr gut in Wasser löslich und kann dort zur (Seifen-) Blasenbildung führen. Die Löslichkeit in Wasser wird unterschiedlich angegeben: 5.000 -10.000 mg/l (19 °C) **(NTP 2003a)** bzw. 300.000 mg/l **(WHO 1994)**. In den meisten organischen Lösungsmitteln ist DBS leicht löslich (z.B. 95% Ethanol 1-10 g/l, Aceton >100 g/l). DBS reagiert mit Säuren unter Bildung giftiger Schwefeloxide **(WHO 1994,** vgl. auch Tabellen 11.6.7 und 11.6.8).

Aufgrund des niedrigen Dampfdrucks erfolgt ein Verdampfen aus Böden bzw. Gewässern nur sehr langsam und ist als unbedeutend anzusehen (nicht flüchtig). In der Luft können jedoch gesundheitsschädliche Partikelkonzentrationen beim Dispergieren des Pulvers erreicht werden.

DBS wird als sehr mobil in Böden beschrieben. Sowohl aus (feuchten und trockenen) Böden als auch aus Wasser (vgl. Henry-Konstante) wird DBS als nicht flüchtig bezeichnet.

[61] Die Schätzung von Stephenson von 100% Eintrag in die Umwelt berücksichtigt nicht, dass ein Teil in Kläranlagen (ca. 82-86%), also in der Technosphäre, abgebaut wird; ein weiterer Anteil wird bereits vorher im (zur Technosphäre gehörenden Kanalnetz abgebaut.

Biokonzentration, Adsorption an Sedimenten und Hydrolyse werden in der Literatur nicht als bestimmende Größen von DBS in aquatischen Systemen charakterisiert Das Salz der Säure dissoziiert zur anionischen Form (pK_a 2,554); keine weitere Hydrolyse **(HSDB 2002b)**.

Tabelle 11.6.8 Relevante physiko-chemische Daten von Dodecylbenzolsulfonat

Schmelzpunkt [°C]	>300 (WHO 1994)
Siedepunkt [°C]	(nicht verfügbar)
Dichte [g/ml bei 20 °C]	1,0
Dampfdruck [Pa]	$3{,}053082710^{-13}$ (äußerst gering)
Löslichkeit [g/l 20 °C H_2O]	5-10; **300** (WHO 1994), *0,8* (HSDB 2002b)
Verteilungskoeffizient log K_{OW}	*1,96* (errechnet aus Löslichkeit 800 mg/l Wasser) ; 0,450 (WHO 1994)
Sorptionskoeffizient K_{OC}	K = 51.000 - 96.000 l/kg; Boden K = 20 l/kg (Rippen), *110,5* (Lyman 1982); $1{,}71 \cdot 10^4$ (über SAB errechnet vgl. (HSDB 2002b)
Henry-Konstante [$Pa \cdot m^3/mol$]	$6{,}3631 \cdot 10^{-3}$ (HSDB 2003)
Hydrolyse / Dissoziation	-

Der log-K_{OW} wird >2,2 angegeben; dieser Wert zeigt, dass keine signifikante Bioakkumulation erwartet werden kann **(Greim 1994).** Der geschätzte K_{OC}-Wert von 110,5 **(Lyman 1982)** lässt auf eine hohe Mobilität im Boden schließen; die Adsorption von DBS im Untergrund wird stark durch den Bodentyp bestimmt **(Acher und Yaron 1977)**.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.9):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (DL)

Informationen sind zu 9 von 12 relevanten Teilbereichen erhältlich (vgl. Bewertungsraster SC_{MOB}). Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien wurden 15 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe III).

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit (EW_{MOB})

In die Bewertung geht die Adsorbierbarkeit mit Q_∞ = 25 mg/g **(Wotzka 1984)** und die Wasserlöslichkeit mit 300.000 mg/l (20°C) **(HSDB 2002b)**. Hieraus errechnet sich ein Eingangswert von 18,75.

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Der K_{OC} 110,5 unterstützt die Aussage des Eingangswertes.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Die sonstigen Stoffdaten ergeben eine Mobilitätszahl von 700. Für DBS wurde ein geringer Biokonzentrationsfaktor von 130 für Goldorfen ermittelt **(HSDB 2002b)**. Die Verbindung dissoziiert nicht in Wasser und bildet keine komplexen Verbindungen. Aufgrund des geringen Dampfdrucks ist mit einer Ausgasung von DBS-Verunreinigungen aus Böden oder Gewässern nicht zu rechnen. Die Konzentration am Punkt der Beurteilung (Grenzfläche zwischen gesättigter und ungesättigter Bodenzone) wird aufgrund der hohen Wasserlöslichkeit als sehr hoch eingeschätzt (>30 g/l).

Bewertungszahl für die Mobilität und Stoffcharakteristik SC_{MOB}:

Aus dem ermittelten Eingangswert EW_{MOB} 18,75 aus Feld 2 und der modifizierten Mobilitätszahl (MMobZ) 7 aus Feld 4 errechnet sich die Bewertungszahl für die Mobilität BZ_{MOB}

Tabelle 11.6.9 Bewertungsraster SC_{MOB} von Dodecylbenzolsulfonat

Kommentar:

Tensid in Wasch- und Reinigungsmitteln (Anteil heute zu 10-15% in Waschmitteln und 40% in Flüssigwaschmitteln)
Produktion weltweit: ca. 1.800.000 t / a (1987)
Verbrauch in Deutschland ca. 3 g je Einwohner und Tag

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{MOB})

	Wichtungs-punkte	
standardisierte Laborprüfmethode	3	(x)
Feldversuch	1	(x)
Adsorbierbarkeit an AK	3	(x)
Adsorbierbarkeit an Ads.-Harzen	2	( )
Adsorbierbarkeit Boden	1	( )
Löslichkeit in Wasser	3	(x)
Verteilungskoeffizient log P_{OW}	1	(x)
Henry-Konstante	1	(x)
Dampfdruck	1	(x)
pk_a (für ionisierbare Substanzen)	1	( )
Sorptionskoeffizient K_{oc}	1	(x)
Dichte	1	(x)

Gruppeneinstufung

I	1 - 4 Punkte
II	5 - 13 Punkte
III	14 - 19 Punkte

Summe: 15 **Gruppe:** III

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit (EW_{MOB})

		(Quelle)
a) Wasserlöslichkeit S (Lit_{max}-Wert mg/l]		
- .... °C		( )
- Umrechungsfaktor		
- 20 °C	300.000	( )
b) Adosrbierbarkeit:C_{ads} (Lit_{min}-Wert mg/g]		
- AK	25	( )
- Harz		( )
- Boden		( )
- Schätzung aus K_{OC} bzw. P_{OW}		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) höchster experiment. Lös.-Wert: $3\,10^5$ (mg/l)x 9/1000+1, max. 10) = 10 (a)
b) experiment.Ads.-Wert (-x+100): 75 (mg/g)x9/100+1, max. 10) = 7,75 (b)
c) geschätzter Ads.-Wert (-x+100): ..... (mg/g)x9/100+1, max. 10) = ... (c)

d) SF = 10 bei berechnetem Ads.-Wert: neg.^{10}log = ... (d)
e) SF = 1-10 zur Überbrückung der Varianz Ads.-Materialien neg.^{10}log = ... (e)
f) SF = 10 zur Überbrückung der Varianz Labor / Feld neg.^{10}log = 1 (f)

Eingangswert: 2.1.1 (a+b+d+e+f) oder 2.1.2 (a+c+d+e+f) = 18,75

Ergebnis (Freitext):

niedrige Adsorbierbarkeit und hohe Wasserlöslichkeit => DBS liegt vorwiegend im Wasser vor, dissoziiert unter Umweltbedingungen praktisch nicht

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Charakterisierung:

Aggregatzustand unter Normalbedinungen: fest, farblos
Molare Masse: ca. 326 g/mol
Siedepunkt [°C]: -
Schmelzpunkt [°C]: >300
Dichte [g/cm³]: 1,0
Viskosität [mPa · s]:
Oberflächenspannung:
Dampfdruck [Pa]: $3{,}054 \cdot 10^{-13}$
Dampfsättigungskonzentration [g/m³] bei 20 °C:
Log P_{OW}: 1,96 (berechnet aus Löslichkeit 800 mg/l)
K_{OC}: 110,5
pk_s (Dissoziationsgradkurve unter Annahme pH = 5): -
Henry-Konstante [Pa m²/mol]: $6{,}36 \cdot 10^{-3}$
Remobilisierung von Metallionen durch Komplexbildung [log K_k]:
Sättigungskonzentration [g/m³]: 300.000
Biokonzentrationsfaktor (Fische): 130 (Goldorfe, HSDB) / nicht bedeutend

Berechnungsgrundlagen:

Henry-Koeffizient: $H = C_g/C_w$ = (p [Pa] · M [g/mol]) / (S [mg/l] · 8314 · T [K]
Verteilungskoeffizient: log P_{ow} = -0,662 log $C_{s,w}$ [mol/l] + 0,710
Adsorptionskoeffizient: $K_{OC} = 100 \cdot C_{ads}/C_W$ (T) / (0,58 · % org. Materie)(o.m.) mit o.m. = o.c. / 0,58; K_{OC} = 0,4 P_{OW} => K= K_{OC} · % o.c. /100 und $C_{ads} = K \cdot C_W$

Vereinfachungen:

Abschätzung der Wasserlöslichkeit S aus P_{OW}: log S = 3,05 - 1,29 Log P_{OW}
BKF (Fische) = C_{BIO} / C_w = k_1 (Aufnahme) / k_2 (Abgabe) = 0,048 P_{OW}
Konz. am Punkt der Beurteilung: C_A =! 0,1 S_A
min. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\,(min)}$ = S / C · V_S mit C = $C_{Sickerwasser}$
max. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\,(max)}$ = S / C · V_S mit C = LW
Volatilität: $t_{1/2}$ = ln 2 · $215{,}7^{1/2}$ [2710 * 28,3 / H]
Verzög.-F. (VF) und Lipophil.: Beispiel P_{OW} 200 => VF 2,2; P_{OW} 4000 => VF 7,9
floater / sinker: Dichte Substanz < / > Dichte Wasser

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	negativ oder nicht ausrei-	ausreichend getestet, aber	ausreichend getestet, Er-
	Quelle	Quelle	Quelle
Biokonzentration (BKF):	(x)	( )	( )
Dissoziation:	(x)	( )	( )
Komplexbildung:	(x)	( )	( )
Volatilität:	(x)	( )	( )
floater / sinker:	(x)	( )	( )
Konz. am Punkt der Beurteilung	(x)	( )	( )
min/max. kontaminiertes GW-Volumen	(x)	( )	( )

Summe = Mobilitätszahl (MobZ) = 7 | 0 | 0

modifizierte Mobilitätszahl (MMobZ) = 7
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

VK_{MOB}:	EW_{MOB}:	MobZ:	BZ_{MOB}:	SC_{MOB}
III	18,75	700	0	2,0

$0 \leq BZ_{MOB} = -$ (Eingangswert · MMobZ) + 100 = - (18,75 · 7) + 100 ≤ 100

$BZ_{MOB} = 0$ und **$SC_{MOB} = 2 + 2 \cdot BZ_{MOB} / 100 = 2{,}00$**.

Ausweislich der vorliegenden physiko-chemischen Daten reichert sich Dodecylbenzolsulfonat nicht in der Umwelt an. Die Substanz liegt vorwiegend wassergelöst vor. Der Übergang in das Grundwasser erfolgt aufgrund der hohen Mobilität im Boden schnell und in hohen Konzentrationen.

- **Aquatoxizität - SC_{AQU}**

Daten zur Fischtoxizität liegen von den Spezies *Leciscus idus, brachydanio rerio, Samo gaidneri, Pimephales promelas, Lepomis macrochirus, Poecilia reticulata* vor (vgl. Tabelle 11.6.10). Vergleichsweise wurden die ökotoxikologischen Daten für den Wasserfloh dargestellt.

Tabelle 11.6.10 Zusammenfassende Darstellung von aquatoxikologischen Daten von Dodecylbenzolsulfonat

Spezies	Effekt	Literatur
Leciscus idus (Goldorfe)	$LC_{50/48\ Std}$ = 3,2 mg/l	(Goßler und Miess 1987)
brachydanio rerio (Zebrabärbling)	$LC_{50/48\ Std}$ = 7,8 m g/l	(Greim 1994)
Pimephales promelas (Elritze)	$LC_{50/48\ Std}$ = 4,7 mg/l NOEC = 1,0 mg/l	(Verschueren 1996) (Kimerle 1989)
Lepomis macrochirus (Blauer Sonnenbarsch)	$LC_{50/48\ Std}$ = 3,7 mg/l	(Turnbull, DeMann et al. 1954)
Poecilia reticulata	$LC_{50/24\ Std}$ > 10,0 mg/l	(Greim 1994)
Rita rita (Süßwasserfisch)	$LC_{50/48\ Std}$ > 7,3 mg/l	(Roy 1988)
Daphnia magna (Wasserfloh)	$LC_{50/48\ Std}$ = 5,4 mg/l $EC_{50/48\ Std}$ = 2,2 mg/l NOEC = 1,0 mg/l	(Bringmann und Kühn 1980) (Phipps, Harden et al. 1984) (Kimerle 1989)

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.11):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Informationen sind zu 4 von 12 toxikologisch relevanten Teilbereichen erhältlich.

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 27 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe III).

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-Wirkungs-Beziehung

Der Bewertung zugrunde gelegt wird der NOEC von 1,0 mg/l aus der Fisch-Tox-Studie von **Kimerle 1989** mit *Pimephales promelas* und dem Endpunkt Wachstumshemmung. Aufgrund dieser Versuchsergebnisse wird für Dodecylbenzolsulfonat ein Eingangswert (EW_{AQU}) von 14,0 errechnet.

Tabelle 11.6.11 Bewertungsraster SC_{AQU} von Dodecylbenzolsulfonat

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{AQU})

	Wichtungspunkte
1 Akute Fischtoxizität:	
- LC_{50}	5 (x)
- LC_5	1 ( )
- LC_{100}	1 ( )
- LC_{100}	1 ( )
2 (semi-)chronische Fischoxizität:	
- LOEC	8 ( )
- NOEC	10 (x)
3 Strukturanalyse (SAB):	4 ( )
4 Sonstige Ergebnisse:	
- Kleinkrebse	4 (x)
- Bakterien	5 (x)
- Protozoen	1 ( )
- Algen	2 ( )
- Bioakkumulationsfaktor	3 (x)

Gruppeneinstufung

I	5 Punkt
II	6 - 20 Punkte
III	21 - 45 Punkte

Summe: 27 **Gruppe:** III

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{AQU})

	L_0-Werte	Spezies	(Quelle)
akute Toxizität:			
- LC_{50}			( )
- LC_5			( )
- LC_{10}			( )
- LC_{100}			( )
(semi-)chronische Toxizität:			
- LOEC			( )
- NOEC	1,0 mg/l	Fisch	(Pillard 1955)

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller NOEC : 1 ..... (mg/l) neg.^{e}ln · 1,9 + 14 = 14 ..... (a)

b) niedrigster abgeschätzter Wert : ..... (mg/l) neg.^{e}ln · 1,9 + 14 = ... (b)

c) SF = 10 zur Abschätzung NOEC aus LOEC ^{10}log = ... (c)

d) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Spezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt ^{10}log = ... (d)

e) SF = 10 zur Abschätzung LOEC aus LC_{50} ^{10}log = ... (e)

f) SF = 10 für das Fehlen standard. Bedingungen ^{10}log = ... (f)

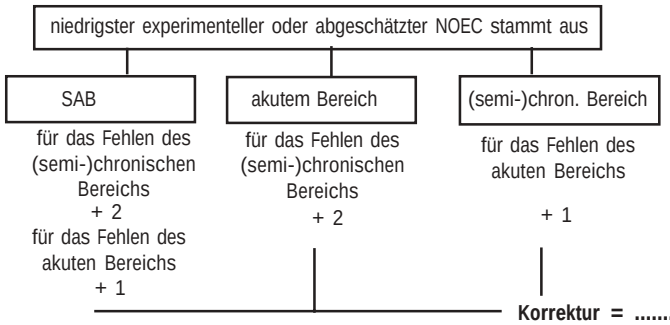
g) SF = 3 Umrechnung aus SAB in NOEC ^{10}log = ... (g)

Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = 14

Feld 3: Berechnung der Dosiszahl (DZ_{AQU})

Übertrag Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = 14

3.1 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis
(korrigierte Dosiszahl wird mit * gekennzeichnet)



3.2 Beurteilung der Substanz im Feld 2 EW_{AQU}:

3.2.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = 14

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = ...

3.2.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g)+Korrektur* = Dosiszahl = ...

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g)+Korrektur* = Dosiszahl = ...

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
	Quelle	Quelle	Quelle
4.1 Kleinkrebse (EC_{50})			
- Daphnie pulex	(x)	( )	( )
4.2 Bakterien (Test, Spezies:)			
- Spezies:	(x)	( )	( )
4.3 Protozoen (Test:)			
- Ciliaten, Amöben, Glockentierchen	(x)	( )	( )
4.4 Algen (Hemmungstest IC_{50})			
- planktische Grünalgen	(x)	( )	( )
- Blaualgen	(x)	( )	( )
4.5 Bioakkumulationsfaktor (c_{Fisch} / c_{H2O})	( )	( )	(x)

Summe = Aquatoxizitätszahl (AquZ) = 5 0 1

modifizierte Aquatoxizitätszahl (**MAquZ**) = 5
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Beurteilungsprofil:	VK:	EW:	DZ:	AquZ:	BZ_{AQU}:	SC_{AQU}:
Fischtoxizität	27	14	14	501	70	1,70

Feld 3: Berechnung der Dosiszahl

Aufgrund der Datenlage ergeben sich keine Korrekturwerte. Die Dosiszahl (DZ_{AQU}) 14,0 ist identisch mit dem Eingangswert (EW_{AQU}).

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Dodecylbenzolsulfonat wird von Wasserorganismen aufgenommen. Viele der sonstigen aquatoxikologischen Prüfungen sind bei positivem Ergebnis ausreichend getestet bzw. als nicht ausreichend getestet bewertet. Für DBS wurde ein geringer Biokonzentrationsfaktor von 130 für Goldorfen ermittelt **(HSDB 2002b)**. Es ergibt sich eine Aquatox-Zahl (AquZ) von 501 und mod. Aquatox-Zahl (MAquZ) von 5.

Aquatoxikologische Bewertungszahl und Stoffcharakteristik SC_{AQU}:

Aus der ermittelten Dosiszahl DZ_{AQU} 14,0 aus Feld 3 und der modifizierten Aquatox-Zahl MAquZ 5 aus Feld 4 errechnet sich die Bewertungszahl für die Aquatoxizität BZ_{AQU}

$0 \leq BZ_{AQU}$ = (Dosiszahl · mod. Aquatox-Zahl) = 14 · 5 ≤ 100

BZ_{AQU} = 70 und **SC_{AQU} = 1,70**.

Dodecylbenzolsulfonat wird in die Aquatox-Gruppe II als „hoch toxisch" für Fische eingestuft. Für andere Wasserorganismen, insbesondere für Daphnien, wird Dodecylbenzolsulfonat ebenfalls als hoch toxisch eingestuft.

- **Toxizität - SC_{TOX}**

Die Substanz reizt die Haut beim Menschen. Wiederholter bis andauernder Hautkontakt kann Dermatitis hervorrufen; Sensibilisierung oder allergische Reaktionen sind selten. Übelkeit, Erbrechen und Durchfall sind die üblichen toxischen Wirkungen bei akuter Exposition **(HSDB 2002b)**, die zur Dehydration und Elektrolytabnormitäten bzw. Azidose führen können. Die Aufnahme von nichtionischen oder anionischen Detergentien ist beim Menschen aufgrund dieser Wirkung (Durchfall, Erbrechen) selbst begrenzend. Die Resorption akut systemisch wirkender Dosen ist aufgrund der gastrointestinalen Reizeffekte wenig wahrscheinlich. Bei Ratte und Maus wurden Symptome (Krämpfe, Benommenheit, Paralyse) beobachtet, die auf nervöse Störungen schließen lassen **(GESTIS 2003)**.

Aufnahme der Substanz in den Körper durch Inhalation und durch Verschlucken. Eine Verdampfung unter Normalbedingungen (20 °C) ist zwar unbedeutend; eine schädliche Partikelkonzentration in der Luft kann jedoch bei der Verarbeitung des Pulvers schnell erreicht werden (Arbeitsschutz).

In der Literatur finden sich vorwiegend Untersuchungen zur akuten Toxizität im Tierversuch (vgl. Tabelle 11.6.12). Beim Kaninchen liegt die akut tödliche Dosis zwischen 200 - 1.260 mg/kg **(Gilbert 1984)**.

Tabelle 11.6.12 Untersuchungsergebnisse zur akuten Toxizität von DBS im Tierversuch

Studie	Applikat.-Weg	Spezies	Dosierung [mg/kg KG]	Referenz
LD_{50}	oral	Maus	1.330	CIVS
LD_{50}	oral	Ratte	438	CIVS
LD_{50}	oral	Ratte	1.260	CIVS

Bewertung: (vgl. Tabelle 11.6.13)

Tabelle 11.6.13 Bewertungsraster SC_{TOX} von Dodecylbenzolsulfonat

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{TOX})

	Wichtungspunkte	
subchronische Toxizität:	1 (X)	
chronische Toxizität:	3 (X)	
Reproduktionstoxizität:	2 (X)	
subchronische Immuntoxizität:	1 ( )	Gruppeneinstufung
chronische Immuntoxizität:	2 ( )	
Toxikokinetik:	1 (X)	I 1 - 3 Punkte
Biochemie:	1 (X)	II 4 - 8 Punkte
Mutagenität:	1 (X)	III 9 - 12 Punkte

Summe: 9 **Gruppe:** III

Feld 3: Karzinogenität (canc)

(Kennzeichnung für nichtorale Studien: i = inhalativ, d = dermal)

canc A = eindeutig humankarzinogen ($RZ = BZ_{TOX} = 100$)
canc B_1 = eindeutig karzinogen im Tierversuch als Initiator oder Anfangsverdacht aus Humandaten bei wahrscheinlicher Initiatorwirkung ($RZ = BZ_{TOX} = 100$)
canc B_2 = Initiatorwirkung im Tierversuch zweifelhaft, aber begründeter Anfangsverdacht aus Tier- oder Strukturdaten (RZ = 33)
canc B_3 = oral wie Gruppe C; andere Pfade aber wie $B_2/B_1/A$ (RZ = 22)
canc C = nicht karzinogen bei adäquater Testung
canc D = nicht adäquat getestet, aber kein Verdacht aus Strukturdaten (RZ = 11)

Einstufung der Karzinogenität der Substanz: Gruppe C **=> RZ =** .....

Feld 2: Angaben zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{TOX})

	NOAEL / LOAEL	(Quelle)
subchronische Toxizität:	30	(Greim 1994)
chronische Toxizität:		( )
Reproduktionstoxizität:		( )
subchronische Immuntoxizität:		( )
chronische Immuntoxizität:		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (EW)

a) niedrigster experimenteller NOAEL : 0,03 (g/kg/d) neg.^{10}log = 1,52 (a)
b) niedrigster abgeschätzter NOAEL : ..... (g/kg/d) neg.^{10}log = ... (b)
c) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Laborspezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt ^{10}log = ... (c)
d) SF = 10 für voraussichtlich starke Kumulation der Substanz im Säuger (Halbwertszeit der Elimination > 1 a) ^{10}log = ... (d)

Eingangswert: 2.1.1 (a+c+d) oder 2.1.2 (b+c+d) = 1,52

2.2 Dosiszahl DZ_{TOX} (Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis)

niedrigster experimenteller oder abgeschätzter NOAEL stammt aus

subchron. Bereich	chronischer Bereich	Reprotox. Bereich
für das Fehlen des chronischen Bereichs	für das Fehlen des subchron. Bereichs	für das Fehlen des chron. Bereichs
+ 2	+ 1	+ 2
für das Fehlen des Reprotox. Bereichs	für das Fehlen des Reprotox. Bereichs	für das Fehlen des subchron. Bereichs
+ 1	+ 1	+ 1

Korrektur = ...

2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2 DWB:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) = Dosiszahl = 1,52

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) = Dosiszahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = ...

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = ...

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
Toxikokinetik:	Quelle	Quelle	Quelle
Kumulationstendenz in Säugern (>=24 h)	( )	( )	(X)
Reaktive Metabolite	( )	( )	(X)
Plazentagängigkeit	(X)	( )	( )
Biochemie:			
Blutbild, Serum, Immunzellenstatus } Veränderungen	(X)	( )	( )
Enzym, Hormon, Transmitter } Veränderungen	(X)	( )	( )
Metallhomöostase Veränderungen	(X)	( )	( )
Mutagenität:			
DNA-Schäden	( )	( )	(X)
Punktmutationen	( )	( )	(X)
Chromosomenmutationen	( )	( )	(X)

Summe = Toxizitätszahl (ToxZ) = 4 | 0 | 5

modifizierte Toxizitätszahl (**MToxZ**) = 4
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Feld 5: Humantoxikologie

a) Erfahrungen am Menschen (Freitext):

b) vorhandene Werte:

Beurteilungsprofil:	VK_{TOX}:	EW_{TOX}:	DZ_{TOX}:	canc:	ToxZ:	BZ_{TOX}:		SC_{TOX}:
oral	III	1,52	1,52	C	405	6,1		1,18

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Bei beruflicher Exposition gegenüber ca. 3,6 mg DBS/m^3 wurde über Veränderungen des Blutbildes berichtet (keine näheren Angaben). Tierexperimentell wurden nach oraler bzw. dermaler Applikation entsprechende Befunde jedoch nicht erhalten **(GESTIS 2003)**.

Informationen sind zu 5 von 8 toxikologisch relevanten Teilbereichen erhältlich, u.a.:

- Mehrere Studien zur subakuten, subchronischen oder chronischen Toxizität:
  Ratte oral:
  - bei 2.000 mg/kg im Futter keine Wirkung **(Paynter 1960)**.
  - bei 10.000 - 20.000 mg/kg im Futter nach 33 Tagen leichtes Zurückbleiben des Körpergewichts **(Paynter 1960)**.
  - bei 125, 250 und 500 mg/kg KG über 30 Tage verringerte Körpergewichtszunahme und Futterverwertung, jedoch keine Veränderungen von Blut- und klinischen Werten; bei 500 mg/kg Zunahme des Lebergewichts **(Gilbert 1984)**.
  - bei 5.000 mg/kg im Futter bzw. 1000 mg/l Trinkwasser über 2 Jahre keine Wirkungen **(Kästner 1990)**.
  - bei 5.000 mg /kg Futter über 12 Wochen kein Einfluss auf Körpergewichtszunahme, Nahrungsaufnahme, hämatologische Parameter oder Urinparameter sowie keine Anzeichen für anormale Änderungen in der Histopathologie **(Gilbert 1984)**.
  - Studie zur subchronischen Toxizität (Ratte über Nahrung, 90 Tage): Keine stat. sign. Effekte hinsichtlich Veränderungen von Körpergewicht, Wachstum, Nahrungsaufnahme, Lebensdauer, Blut- oder Urinwerte, Organgewichte, und Gewebe (Histologie) **(Kay 1965)**.
  - bei 0,02, 0,1 oder 0,5% im Futter über 2 Jahre keine Änderungen des Körpergewichts, keine Änderungen der hämatologischen Parameter und kein Hinweis auf ungewöhnliche makroskopische oder mikroskopische Veränderungen **(Gilbert 1984)**.
  - die Toxizität von DBS wurde in unterschiedlichen tierexperimentellen Untersuchungen an Ratten und Mäusen getestet: Die Resultate dieser Studien zeigen keine schwerwiegende Toxizität und einen oralen NOAEL von 150 mg/kg/d. Subchronisch wurden keine toxischen Effekte bei Dosen bis 250 mg/kg/d beobachtet. Orale Dosen von 1000-2000 mg/kg/d führten dagegen zu Nieren- und Leberschäden, reduziertem KG und Durchfall bei Ratten und Mäusen. Bei Mäusen führten Expositionen von 200 mg/kg/d und 1000 mg/kg/d zu einer erhöhten Sterblichkeitsrate. Bei Hunden führte die Fütterung von 125 mg/kg/d über 2 Jahre nachweislich zu Leberschäden **(Nordic chemicals und Söderlund 1993)**.
- Ratte, Affe:
  - Na-Salz von C10-C13: NOAEL = 30 - 340 mg/kg KG/d **(Greim 1994)**.
- Mehrere Studien zur Reproduktionstoxizität:
  Ratte: bei 0,1 und 1,0% LAS (*linear alkyl benzene*) im Futter keine signifikanten Änderungen in Körpergewicht oder Nahrungsaufnahme, keine reproduktiven Indikatoren, keine Änderungen im Säugeverhalten, keine Fötus-Anomalien, keine teratogenen Wirkungen **(Gilbert 1984)**; Ratte: Na-Salz von C_{10}-C_{13}: in

Mehrgenerationenstudie weder embryotoxisch noch teratogen; Maus: Na-Salz von C_{10}-C_{13}: in für die Muttertiere toxischen Dosen embryotoxisch oder teratogen;
Krallenfrosch: stark embryotoxisch bei 50 mg/l (80% der Eier ohne Zellteilung, Rest nur Zweiteilung), keine teratogene Wirkung bei 50 mg/l **(Dupert 1987)**.

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien wurden 9 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage gut bewertbar (Gruppe III).

Feld 2: Angaben zur Dosis-Wirkungs-Beziehung

Untersuchungen an verschiedenen Spezies (orale Applikation an Ratte, Hund, Affe) ergaben Hinweise, dass DBS toxische Wirkungen auf die Leber und den Verdauungstrakt besitzen können, u.a. wurden Beeinflussung der Leber- und Verdauungsenzyme beobachtet **(GESTIS 2003)**. In die Bewertung geht der niedrigste NOAEL der Studie von **(Greim 1994)** mit 30 mg/kg/d ein.

Feld 3: Karzinogenität

Daten zur karzinogenen Wirkung am Menschen liegen nicht vor. In Ratten (2 Jahre oral) bei 0,02, 0,1 oder 0,5% im Futter kein Hinweis auf Krebs erzeugende Wirkung **(Gilbert 1984; Hüls AG 1988; Kästner 1990)**. Die verfügbaren Daten zeigen, dass DBS kein Karzinogen im Tierexperiment an Ratten bis zu oralen Dosen von 250 mg/kg/d ist **(Nordic chemicals und Söderlund 1993)**.

Im Feld Karzinogenität wird Dodecylbenzolsulfonat in die Gruppe C eingestuft.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Anhaltspunkte für den Stoffwechsel beim Menschen liegen aus einigen Tierexperimenten vor. Oral aufgenommenes (radioaktiv markiertes) Na-DBS wurde nachfolgend in verschiedene Organe verteilt: Leber, Niere, Blut, Lungen, Milz, Gehirn). Weitere Untersuchungen ergaben, dass in die Leber gelangtes DBS dort zunächst unverändert verbleiben konnte, und im Gegensatz zu linearen Alkylsulfonaten mit geringeren Kettenlängen nur langsam metabolisiert wurde. Ausscheidungswege sind über die Faeces und Urin **(GESTIS 2003)**. Ausscheidung mehr als 80-90% innerhalb von 24 Stunden **(Nordic chemicals und Söderlund 1993)**.

Bisherige Ergebnisse zeigen keine gentoxischen Wirkungen: Im Ames-Test nicht mutagen **(Gilbert 1984; Hüls AG 1988)**; in Rattenleber-Zellen nicht mutagen **(Gilbert 1984)**; im Dominant-letal-Assay in Mäusen nicht mutagen **(Gilbert 1984)**; Na-Salz von C_{10}-C_{13} nicht mutagen **(Greim 1994)**.

Sonstige toxikologische Prüfungen zur Ermittlung der Toxizitätszahl ergeben 4 positive Befunde. Die übrigen 5 Kriterien werden als negative Ergebnisse bewertet, so dass die Toxizitätszahl 405 erhalten wird.

Toxikologische Bewertungszahl und toxikologische Stoffcharakteristik SC_{TOX}:

$0 \leqslant BZ_{TOX}$ =Dosiszahl · mod. Toxiziätszahl + RZ. = 1,52 · 4 $\leqslant 100$

BZ_{TOX} = 6,1 und **SC_{TOX} = 1,18**

Dodecylbenzolsulfonat wird aufgrund der vorliegenden Tierversuchsdaten zur Toxizität und Karzinogenität die toxikologische Bewertungszahl 6,1 zugeordnet. Der Wert der toxikologischen Substanzcharakteristik ist SC_{TOX} 1,18. DBS ist schwach toxisch und nicht karzinogen bei adäquater Testung.

- **Biochemischer Abbau - SC_{BIO}**

Für Dodecylbenzolsulfonat liegen verschieden Ergebnisse zum biochemischen Abbau vor:

- Aerober Abbau:

In 23 Testsystemen zum aeroben Abbau von LAS wurde es um 0% bis 98% abgebaut. In 14 Tests mit Homologenmischungen und Einzelhomologen durch Ringspaltung (CO_2-Bildung) erfolgte ein Abbau zwischen 4% und 98% in 3 Std. bis 28 Tagen **(Schöberl 1989)**.

OECD-Screening Test: 76% DOC **(Gerike 2979)**; 95% Primärabbau **(Berth 1988; Schöberl 1988)**; bei 20 mg/l 90% Abbau **(Sanchez 1989)**.

Closed-Bottle-Test: 55-65% Sauerstoffverbrauch **(Schöberl 1988; Hüls AG 1988)**; in 30 Tagen 65% BSB **(UBA 1982)**.

EMPA-Test: nach 5 Tagen ca. 64% Mineralisation, nach ca. 18 Tagen 89% **(Brüschweiler 1988)**; nach 7 Tagen ca. 52% Elimination (DOC), nach 14 Tagen 61% **(Lahl 1986)**.

BSB: 91-96%, CSB: 81-86% Transformation **(Alabaster 1962)**.

CO_2-Test: bei 20 mg/l in 40 Tagen 71% Mineralisierung, Halbwertszeit 4,1 Tage **(Larson 1983)**.

OECD-Bestätigungstest: nach Adaption rasche Transformation, in 20 Tagen >95% **(Gilbert 1984)**; 93-97% **(Schöberl 1988)**.

In kontinuierlicher Laborkläranlage 50% Mineralisierung (CO_2, H_2O, H_2SO_4), 7% aliphatische und 37 % aromatische Zwischenprodukte sowie 6% unverändert **(Hüls AG 1988)**.

In Kläranlage mit 8 Std. Verweilzeit 88-95% Transformation **(Pitter 1964)**. Entfernung in Kläranlagen, 1. Klärstufe 26% **(Rapaport 1990)**. Entfernung in 9 Kläranlagen 98-99% **(Woltering 1987)**.

Bilanz aus einer Kläranlage (über 14 Tage, Belebtschlamm, ca. 1989): Entfernung in der Vorklärung 32%, davon 50% durch mikrobielle Transformation; biologische Transformation im Belebungsbecken > 97T, davon <1% durch Adsorption, Entfernungsrate über die gesamte Anlage 98-99%, davon 82-87% durch mikrobielle Transformation, LAS-Gehalte im Faulschlamm 7.000 mg/kg, hauptsächlich aus der Vorklärung.

- Anaerober Abbau:

In Faulschlamm (über 6 Monate) keine anaerobe Transformation **(Giger 1989)**. In anaerobem Seewasser (bei 25-27 °C und 2 mg/l DBS) liegt die Halbwertszeit bis zur Ringspaltung bei 57 Tagen **(Urano 1985)**.

Abbau im Grundwasser: Halbwertszeit 2 Tage; in kontaminiertem Grundwasser (max. 2 mg/l) gute mikrobielle Transformation **(Rippen 1997)**.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.14):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 54 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage gut bewertbar (Gruppe III).

Feld 2: Angaben zum Abbauverhalten

Bewertet werden die Ergebnisse der Studie von **Gilbert 1984** mit 95% Abbau innerhalb 20 Tagen. Es errechnet sich ein Eingangswert von 2,25. Dabei liegen ausreichend Daten vor, so dass keine Korrekturen notwendig sind. Die Abbauzahl entspricht damit dem Eingangswert.

Tabelle 11.6.14 Bewertungsraster SC_{BIO} von Dodecylbenzolsulfonat

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{BIO})

Bio-Bereiche	Wichtungspunkte (WP) Serie / Wert	mehrere Serien / Werte
1 Aerober Abbau		
1.1 Standardisierte Prüfmethode:		
1.1.1 Testung nach Adaption (z.B. Warburg)	30 ( )	40 ( )
1.1.2 Testung inkl. Adaption (z.B. *screening*)	25 ( )	35 (x)
1.2 Andere Laborprüfungen		
1.2.1 Labor BB	25 ( )	35 ( )
1.2.2 Batch-Test	8 ( )	12 ( )
1.2.3 Standardverdünnungsverfahren (z.B. BSB_5)	6 ( )	8 ( )
1.3 Industrielle bzw. kommunale biologische Reinigungsanlage		
1.3.1 dominanter Inhaltsstoff	20 ( )	25 ( )
1.3.2 nicht dominanter Inhaltsstoff	12 ( )	15 ( )
1.4 Feldversuche		
1.4.1 Oberflächenwasser	10 ( )	15 ( )
1.4.2 Grundwasser	8 ( )	12 ( )
1.4.3 Brakwasser	6 ( )	10 ( )
1.4.4 Boden	6 ( )	10 ( )
1.5 Strukturanalyse (SAB)		
1.5.1 Basis homologie Reihe	25 ( )	
1.5.2 Basis Strukturformel	20 ( )	
2 Anaeber Abbau		
2.1 Labor-/Feldversuche	4 (x)	
3 Chemischer Abbau		
3.1 Fotolyse	3 (x)	
3.2 Hydrolyse	2 ( )	
3.3 TOC, DOC, CSB-Cr	1 ( )	
3.4 CSB-Mn	0 ( )	
4 Wasserlöslichkeit		
4.1 standard. Methode	4 (x)	
4.2 berechnet	2 ( )	
5 Inhibitärwirkung		
5.1 experimentell	4 (x)	
5.2 Strukturanalyse	2 ( )	
6 Bioakkumulation		
6.1 experimentell	4 (x)	
6.2 berechnet	2 ( )	

Summe: 54

I	0 - 20 Punkte	nicht bewertbar
II	21 - 40 Punkte	vorläufig bewertbar
III	41 - 60 Punkte	bewertbar

Gruppe: III

Feld 2a: Eingangswert zum Abbauverhalten (EW_{BIO})

	(%)	(Quelle)
Standardisierte Prüfmethode:	95	(Bridge 1979)
		( )
Praktische Prüfmethode:		( )
		( )
Strukturanalyse (SAB):		( )
		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller Abbau : 95 % (neg./10 + 11)·1,5 = 2,25 (a)

b) niedrigster abgeschätzter Abbau : .....% (neg./10 + 11)·1,5 = ... (b)

c) SF = 10; bei Anwendnung von SAB ^{10}log = ... (c)

d) SF = 10; bei sehr langsamem biochemischem Umsatz ^{10}log = ... (d)

Übertrag 2a = 2,25

Feld 2b: Berechnung der Abbauzahl (AZ)

Übertrag aus 2a = 2,25

2.2 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis
(korrigierte Abbauzahl wird mit * gekennzeichnet)

niedrigster experimenteller oder abgeschätzter Abbauwert stammt aus

standard. Prüfmeth.	praktische Prüfmeth.	SAB
für das Fehlen mehrerer Serien + 1	für das Fehlen der standard. PM + 2 für das Fehlen mehrerer Serien + 1	für das Fehlen der standard. und praktischen PM + 3 für das Fehlen mehrerer Serien + 1

Korrektur* = ...

2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Bio-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) = Abbauzahl = 2,25

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) = Abbauzahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) + 2.2 Korrektur * = Abbauzahl = ...

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) + 2.2 Korrektur * = Abbauzahl = ...

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation (mod)

mod C = keine Hydrolyse und keine Photolyse bei adäquater Testung (AA = 0)
mod D = nicht adäquat getestet, aber keine Hydrolyse oder Photolyse aufgrund von Strukturdaten (AA=0)
mod B_2 = strukturelle Voraussetzungen für Hydrolyse oder Photolyse (AA = -5)
mod B_1 = langsame Hydrolyse oder Photolyse (AA = -10)
mod A = rasche Hydrolyse oder Photolyse experimentell gesichert (AA = -20)

Einstufung phys./chem. Modifikation: **Gruppe** B2 **=> AA =** -5

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
4.1 aerober Abbau:	Quelle	Quelle	Quelle
- Inhibitorwirkung < 10 mg/l	( )	( )	(x)
< 1 mg/l	( )	( )	(x)
- $t_{1/2}$ (Feldversuch) > 1 Jahr	( )	( )	(x)
> 10 Jahre	( )	( )	(x)
- Adaptionszeit > 25 Tage	( )	( )	(x)
4.2 anaerober Abbau:			
- toxikol. relevante stabile Metabolite	(x)	( )	( )
4.3 sonstige Parameter:			
- Wasserlöslichkeit < 10 mg/l	( )	( )	(x)
< 1 mg/l	( )	( )	(x)
- Bioakkumulation	( )	( )	(x)

Summe = Biozahl (BioZ) = 108

modifizierte Biozahl (**MBioZ**) = 1
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

VL_{BIO}:	EW_{BIO}:	AZ_{BIO}:	BioZ:	BZ_{BIO}	SC_{BIO}
III	2,25	2,25	108	0	1,00

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation

Ein hydrolytischer Abbau unter Umweltbedingungen ist unwahrscheinlich. Dodecylbenzolsulfonat wird im Wasser nur photolytisch abgebaut (Maximum bei 215 nm, keine Angaben zu Halbwertszeiten **(HSDB 2002b)**. Es erfolgt eine Einstufung in die Gruppe mod B_2 (mit AA = -5).

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Beim Abbau kann sich Formaldehyd bilden. Ansonsten sind alle Prüfungen aus Feld 4 negativ. Es ergibt sich eine Biozahl (BioZ) von 108 und eine modifizierte Biozahl (MBioZ) von 1.

Biochemische Bewertungszahl und SC_{BIO}:

$0 \leqslant BZ_{BIO}$ = Abbauzahl · mod. Biozahl + mod = 2,25 · 1 - 5 = $0 \leqslant 100$

BZ_{BIO} = 0 und **SC_{BIO} = 1,00**

DBS wird aufgrund der vorliegenden Daten in SC_{BIO} = 1,00 (BIO-Gruppe A „leicht abbaubar") eingestuft. Die Dissimilation ist vollständig und die Abbaurate weitestgehend konzentrationsunabhängig.

- **Umwelttoxikologische Relevanz - SC_{TOR}**

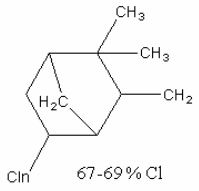
Dodecylbenzolsulfonat erwies sich als biochemisch in kurzer Zeit vollständig abbaubar sowie als schwach toxisch und nicht karzinogen bei adäquater Testung. Die umwelttoxikologische Relevanz von DBS ist niedrig und hat einen Wert von

SC_{TOR} = 2,18 mit $6 \geq SC_{TOR} = SC_{TOX} + SC_{BIO} \geq 2$.

Das Schadstoffrisiko ist „sehr gering". Ein Kontrollerfordernis ist kaum gegeben.

- **Toxaphen [8001-35-2]**

Tabelle 11.6.15 Identität und Stoffkonstanten von Toxaphen

Strukturformel:	
Andere Bezeichnungen:	Chloriertes 2,2-Dimethyl-3-methylennorbornan, Polychlorcamphen, CHLORINATED CAMPHENE (TOXAPHENE) (CAMPHECHOR); chlorinated champhene; clor chem t-590; compound 3956; Coopertox; crestoxo; cristoxo; cristoxo 90; estonox; fasco-terpene; Geniphene; gyphene; Hercules 3956; hercules toxaphene; kamfochlor; melipax; Motox; octachlorocamphene; Penphene; phenacide; Phenatox; polychlorocamphene; Polychlorinated camphenes; Polychorinated camphenes; Strobane-T; strobane t-90; toxadust; toxakil; toxaphene; Toxaphene ; toxon 63; vertac
Stoffgruppe:	Halogenkohlenwasserstoffe, aliphatisch, ungesättigt
CAS-Nr.	8001-35-2
Summenformel	$C_{10}H_{10}Cl_8$
Stoffbeschreibung	gelb bis brauner wachsartiger Stoff mit charakteristischem Geruch (HSDB 2003c)
Molekulargewicht [g/Mol]	empirisches Molekulargewicht 413,81 (HSDB 2003c)

o Herkunftsbereich und Gruppencharakteristik

Der chlorierte Kohlenwasserstoff Toxaphen wurde Mitte der 40er Jahre in den USA als Breitbandinsektizid auf den Markt gebracht. Seitdem wurde es gegen eine Vielzahl von Pflanzenschädlingen bei fast allen landwirtschaftlichen Kulturarten eingesetzt (großflächig im Baumwoll-, Obst-, Erdnuss- und Gemüseanbau). Weitere Anwendungsgebiete lagen in der Bekämpfung von Ektoparasiten bei Vieh und als Picizid (fischtötendes Mittel) sowie als Rodentizid zur Bekämpfung von Feldmäusen **(VonRumker, Lawleww et al. 1974)**.

Toxaphen ist ein Substanzgemisch aus chloriertem Camphen (über 670 Einzelstoffe), das 67 - 69% Chlor enthält. Herstellung und Verwendung als Fraß- und Kontaktinsektizid, das gegenüber anderen Insektiziden den Vorteil der Bienenungefährlichkeit besitzt. Identifiziert sind bisher 177 Einzelkomponenten, von denen aber nur wenige strukturell aufgeklärt sind **(HSDB 2003c)**.

Toxaphen war neben den Cyclodieninsektiziden und DDT international das am häufigsten angewandte Insektizid. Seit Anfang der 70iger Jahre und mit dem Anwendungsverbot von DDT im Jahr 1972 stieg die Produktion von Toxaphen stark an. Von den weltweit bis 1997 produzierten 409.000 t wurden 1974 allein in den USA 55.000 Tonnen verbraucht. In der ehemaligen DDR in Fahlberg-List/Magdeburg wurden von 1955 bis 1990 45.946 t Toxaphen-Wirkstoff, also ca. 1/10 des Weltverbrauchs, davon 7.465 t zwischen 1985-1990, hergestellt; hiervon wurde ca. 1/3 exportiert. Zu Beginn der 80iger Jahre wurde die Produktion und Anwendung von Toxaphen in vielen Ländern verboten bzw. eingeschränkt (u.a. Kanada, USA[62], Frankreich). In der DDR und im gesamten Ostblock blieb Toxaphen dagegen bis 1990 noch ein weit verbreitetes Insektizid **(Xu 1994)**.

[62] In den USA konnten Restbestände von Toxaphen noch bis 31.12.1986 verwendet werden

Produktion und Anwendung zielten auf eine direkte Freigabe von Toxaphen in der Umwelt. Da sowohl die Produktion als auch die Anwendung seit Jahren verboten bzw. über die POP-Konvention weltweit geächtet sind, wird Toxaphen wie DDT der Gruppe D (Altlasten) zugeordnet. Eine Exposition des Menschen gegenüber der Substanz ist wegen ihrer weitreichenden Anwendung und ihres Umweltverhaltens möglich.

In der Atmosphäre wurden als Hintergrundwerte Konzentrationen von <0,02 bis zu 3,3 ng/m^3 (Bermuda, 1973-74) bzw. - als Maximalwert in der Literatur - 8.700 ng/m^3 gemessen **(Rice, Samson et al. 1985; HSDB 2003c)**.

In Sedimenten von Fließgewässern wurden Konzentrationen zwischen 0,1 bis 13,18 ppm gemessen (Mississippi, 1966-67, 548 Proben). In Böden konnten Konzentrationen bis zu 46,58 ppm nachgewiesen werden (im Mittel <1 ppm). Der Nachweis von Toxaphen gelang i.d.R. nur in den oberen 5 cm des Bodens. Ab 20 cm abwärts ist Toxaphen im Boden nicht mehr nachweisbar **(HSDB 2003c)**.

Toxaphen wurde auch in Regenwasser (über dem Michigan See) in Konzentrationen zwischen 9 und 30 ng/l gefunden **(Saleh 1991)**. In Oberflächengewässern wurden in den USA im Mittel Konzentrationen von 0,05 ppb gemessen (insgesamt 7.325 Probenahmepunkte, 1980-82, max. Konzentration. 0,29 ng/l Lake Superiore, **HSDB 2003**).

Toxaphen wurde im Wasser von mehren kalifornischen Wasserwerken nachgewiesen (keine Konzentrationsangaben). Die Wanderung des Toxaphens vom Oberboden in das Grundwasser wurde bereits 2 Monate nach der Anwendung bewiesen. Toxaphen war im Grundwasser beständig und konnte noch mindestens 1 Jahr lang nachgewiesen werden **(HSDB 2003c)**.

- **Stoffliche Mobilität - SC_{MOB}**

Physiko-chemische Daten

Toxaphen besitzt einen typischen leichten Terpengeruch (Geruchsschwelle in Wasser 0,0052 mg/l, **NTP 2003b**). Alkalien, Bestrahlung mit UV-Licht und höhere Temperaturen (≥150 °C) zersetzen es rasch unter Chlorwasserstoffabspaltung und Verlust der insektiziden Wirkung **(Büchel 1977)**. Da je nach Charge technisches Toxaphen aus mindesten 175 Einzelkomponenten in unterschiedlichen Verhältnissen besteht **(Casida, Holmstead et al. 1974)**, sind in der Literatur nicht immer definierte Werte, sondern i.d.R. Wertebereiche der physiko-chemischen Parameter zu finden. Z.B. schwankt je nach Zusammensetzung der Schmelzpunkt zwischen 65 bis 95 °C (vgl. Tabellen 11.6.15 und 11.6.16).

Tabelle 11.6.16 Relevante physiko-chemische Daten von Toxaphen

Schmelzpunkt [°C]	65 – 90 (Korte, Scheunert et al. 1979)
Siedepunkt [°C]	(zerfällt)
Dichte [g/ml bei 20 °C]	1,6 (HSDB 2003c)
Dampfdruck [Pa]	$8{,}91 \cdot 10^{-4}$ (HSDB 2003c)
Löslichkeit [g/l 20 °C H_2O]	0,555 (Murphy, Mullin et al. 1987), 3,00 (HSDB 2003c)
Verteilungskoeffizient log P_{OW}	2,47 – **5,9** (WHO 1994),
Sorptionskoeffizient K_{OC}	$2{,}1 \cdot 10^{+5}$ (bis 10^{+6} für die Mischung), immobil (HSDB 2003c)
Henry-Konstante [Pa·m^3/mol]	$5{,}92 \cdot 10^{-11}$ (Murphy, Mullin et al. 1987)

Toxaphen ist mit 0,55 mg/l nur sehr wenig in Wasser löslich (leicht löslich in den meisten organischen Lösungsmitteln, dabei leichter löslich in aromatischen als in aliphatischen Kohlenwasserstoffen). Wenn die Verbindung in die Luft versprüht wird, liegt Toxaphen sowohl als Gas als auch in partikulärer Form vor. Die Dampfphase von Toxaphen wird durch photochemisch gebildete Hydroxylradikale in der Atmosphäre abgebaut (Halbwertszeit 4,7 bis 8,4 Tage), während die partikuläre Phase sedimentiert bzw. ausgewaschen wird. Die direkte Photolyse bzw. Hydrolyse werden in der Literatur als unbedeutende Abbauprozesse beschrieben. Aufgrund der hohen K_{OC}-Werte des Gemisches (s.o.) wird Toxaphen im Boden als immobil beschrieben. In Säulenversuchen jedoch erscheinen 25 bis 68 % des aufgetragenen Toxaphens im Eluat. Ein Ausdampfen aus feuchten Bodenoberflächen kann aufgrund des Henry-Koeffizienten ein wichtiger Prozess sein. Wegen der hohen Adsorptionsfähigkeit wird jedoch der Verdampfungsprozess abgeschwächt. Studien an Baumwollpflanzen zeigen, dass das Verdampfen von Pflanzenoberflächen ein wesentlicher Prozess ist, um Toxaphen aus dem Boden in die Luft zu übertragen **(HSDB 2003c)**.

In natürlichen Gewässern sinkt Toxaphen zum Sediment ab und wird dort adsorbiert **(HSDB 2003c)**. An Sedimenten unter natürlichen Bedingungen in einem See adsorbiertes Toxaphen lässt sich unter Laborbedingungen in Wasser nicht mehr desorbieren **(Callahan 1979)**. Die Gleichgewichtsbeladung wurde aufgrund von Laborversuchen des Instituts für Wasserwirtschaft (IfW) auf Q_∞ = 100 mg/g (Gruppe A/B) geschätzt **(Wotzka 1984)**. Biokonzentrationsfaktoren zwischen 3.100 und 69.000 bei Fischen zeigen eine starke Anreicherung und dementsprechend sehr hohe Konzentrationen in aquatischen Organismen **(HSDB 2003c)**.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.17):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (DL)

Informationen sind zu 9 von 12 relevanten Teilbereichen erhältlich (vgl. Bewertungsraster SC_{MOB}). Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 13 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage vorläufig bewertbar (Gruppe II).

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit (EW_{MOB})

Der Bewertung wird der von **Wotzka 1984** geschätzte Wert von Q_∞ = 100 mg/g zugrunde gelegt. Dieser Wert wird gestützt durch die hohen K_{OC} bis 10^{+6}. Die Wasserlöslichkeit wird zu 3 mg/l (20°C) angenommen. Über einen SF errechnet sich ein Eingangswert von 2,02.

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Der K_{OC} 10^{+6} wurde für die Berechnung des Vergleichswertes herangezogen.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Die sonstigen Stoffdaten ergeben eine Mobilitätszahl von 313. Es wurde ein sehr hoher Biokonzentrationsfaktor von 69.000 eingesetzt (s.o.). Die Verbindung dissoziiert nicht in Wasser und bildet keine komplexen Verbindungen. Wegen des geringen Dampfdrucks ist mit einer Ausgasung von Toxaphen aus Böden oder Gewässern nur bedingt zu rechnen. Die Maximalkonzentration am Punkt der Beurteilung wird aufgrund der Wasserlöslichkeit auf ≤0,3 mg/l eingeschätzt.

Bewertungszahl für die Mobilität und Stoffcharakteristik SC_{MOB}:

Aus dem ermittelten Eingangswert EW_{MOB} 2,02 aus Feld 2 und der modifizierten Mobilitätszahl (MMobZ) 3,5 aus Feld 4 errechnet sich die Bewertungszahl für die Mobilität BZ_{MOB}

$0 \leq BZ_{MOB}$ = - (Eingangswert MMobZ) + 100 ≤ 100 = - (2,02 · 3,5) + 100

BZ_{MOB} = 92,9 und **SC_{MOB} = 3,86**.

Tabelle 11.6.17 Bewertungsraster SC_{MOB} von Toxaphen

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{MOB})

	Wichtungs-punkte	
standardisierte Laborprüfmethode	3	(x)
Feldversuch	1	(x)
Adsorbierbarkeit an AK	3	( )
Adsorbierbarkeit an Ads.-Harzen	2	( )
Adsorbierbarkeit Boden	1	(x)
Löslichkeit in Wasser	3	(x)
Biokonzentrationsfaktor log P_{OW}	1	(x)
Henry-Koeffizient	1	(x)
Dampfdruck	1	(x)
pk_a (für ionisierbare Substanzen)	1	( )
K_{oc}, log P_{OW}	1	(x)
Dichte	1	(x)

Gruppeneinstufung

I	1 - 4 Punkte
II	5 - 13 Punkte
III	14 - 19 Punkte

Summe: 13 ..... **Gruppe:** II .....

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit (EW_{MOB})

		(Quelle)
a) Wasserlöslichkeit S (Lit_{max}-Wert mg/l]		
- .... °C		( )
- Umrechungsfaktor		
- 20 °C	3,0	(HSDB)
b) Adosrbierbarkeit:C_{ads} (Lit_{min}-Wert mg/g]		
- AK	>100	(Wotzka)
- Harz		( )
- Boden		( )
- Schätzung aus K_{OC} bzw. P_{OW}	>100	( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) höchster experiment. Lös.-Wert: 3,0 (mg/l)x 9/1000+1, max. 10) = 1,02 (a)
b) experiment.Ads.-Wert (-x+100): 0 (mg/g)x9/100+1, max. 10) = 0 (b)
c) geschätzter Ads.-Wert (-x+100): ..... (mg/g)x9/100+1, max. 10) = ... (c)

d) SF = 10 bei berechnetem Ads.-Wert: ^{10}log = ...(d)
e) SF = 1-10 zur Überbrückung der Varianz Ads.-Materialien ^{10}log = ... (e)
f) SF = 10 zur Überbrückung der Varianz Labor / Feld ^{10}log = 1... (f)

Eingangswert: 2.1.1 (a+b+d+e+f) oder 2.1.2 (a+c+d+e+f) = 2,02 .....

Ergebnis (Freitext):

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Charakterisierung:

Aggregatzustand unter Normalbedinungen: fest, farblose Kristalle
Molare Masse: 413,81 g/mol
Siedepunkt [°C]:
Schmelzpunkt [°C]: 65-90
Dichte [k/cm³]: 1,6
Viskosität [mPa · s]:
Oberflächenspannung:
Dampfdruck [Pa]: $8,61 \cdot 10^{-4}$
Dampfsättigungskonzentration [g/m³] bei 20 °C:
Log P_{OW}: 2,47-5,8
K_{OC}: $2,1 \cdot 10^5$
pk_s (Dissoziationsgradkurve unter Annahme pH = 5)
Henry-Konstante [Pa m²/mol]: $5,92 \cdot 10^{-11}$
Remobilisierung von Metallionen durch Komplexbildung [log K_k]:
Sättigungskonzentration [g/m³]: 3
Biokonzentrationsfaktor (Fsiche): 69000

Berechnungsgrundlagen:

Henry-Koeffizient: $H = C_g/C_w$ = (p [Pa] · M [g/mol]) / (S [mg/l] · 8314 · T [K]
Verteilungskoeffizient: log P_{ow} = -0,662 log $C_{s,w}$ [mol/l] + 0,710
Adsorptionskoeffizient: $K_{OC} = 100 \cdot C_{ads}/C_W$ (T) / (0,58 · % org. Materie)(o.m.) mit o.m. = o.c. / 0,58; K_{OC} = 0,4 P_{OW} => K= K_{OC} · % o.c. /100 und C_{ads}= K · C_W

Vereinfachungen:

Abschätzung der Wasserlöslichkeit S aus P_{OW}: log S = 3,05 - 1,29 Log P_{OW}
BKF (Fische) = C_{BIO} / C_w = k_1 (Aufnahme) / k_2 (Abgabe) = 0,048 P_{OW}
Konz. am Punkt der Beurteilung: C_A =! 0,1 S_A
min. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\ (min)}$ = S / C · V_S mit C = $C_{Sickerwasser}$
max. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\ (max)}$ = S / C · V_S mit C = LW
Volatilität: $t_{1/2}$ = ln 2 · $215,7^{1/2}$ [2710 * 28,3 / H]
Verzög.-F. (VF) und Lipophil.: Beispiel P_{OW} 200 => VF 2,2; P_{OW} 4000 => VF 7,9
floater / sinker: Dichte Substanz < / > Dichte Wasser

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	negativ oder nicht ausreichend	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis positiv
	Quelle	Quelle	Quelle
Biokonzentration (BKF):	( )	( )	(x)
Dissoziation:	(x)	( )	( )
Komplexbildung:	(x)	( )	( )
Volatilität:	( )	(x)	( )
floater / sinker:	(x)	( )	( )
Konz. am Punkt der Beurteilung	( )	( )	(x)
min/max. kontaminiertes GW-Volumen	( )	( )	(x)

Summe = Mobilitätszahl (MobZ) = 3 | 1 | 3

modifizierte Mobilitätszahl (MMobZ) = 3,5
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

VK_{MOB}:	EW_{MOB}:	MobZ:	BZ_{MOB}:	SC_{MOB}
II	2,02	313	92,9	3,86

Toxaphen liegt aufgrund des geringen Dampfdrucks vorwiegend im Boden und im Wasser vor. Der Übergang vom Boden in das Grundwasser erfolgt wegen der sehr hohen adsorptiven Eigenschaften und der geringen Wasserlöslichkeit nur äußerst langsam. Die Substanz reichert sich daher vorwiegend in den oberen Bodenschichten und in der belebten Umwelt an.

- **Aquatoxizität - SC_{AQU}**

Zur Wirkung auf aquatische Lebewesen liegen Untersuchungsergebnisse von Mikroorganismen (Prokarionten, Eukaryonten), Wasserpflanzen, Mollusken, Krebstieren und Fischen vor (vgl. Tabelle 11.6.18).

Tabelle 11.6.18 Zusammenfassende Darstellung von aquatoxikologischen Daten von Toxaphen (Auszug aus **(PAN 2003)**)

Spezies	Endpunkt	Effekt
Regenbogenforelle	Mortalität	LC_{50} = 10,6 µg/l
Gelbbarsch	Mortalität	LC_{50} = 12,0 µg/l
Edelsteinkärpfling	Mortalität	LC_{50}= 1,1 µg/l
Daphnia pulex	Mortalität	LC_{50} = 14,2 µg/l
Acartia tonsa	Mortalität	LC_{50} = 0,11 µg/l
Auster	Mortalität	LC_{50} > 16,0 µg/l

Für Salz- und Süßwasserfische sowie Wirbellose, die sehr empfindlich gegenüber Toxaphen sind, zeigten sich chronische Effekte in Form von Wachstumshemmungen und reduzierter Vermehrungsrate sowie bei Fischen auch in Form von Wirbelsäulenanomalien bei Expositionen gegenüber Konzentrationen von 54 - 299 ng/l **(Eisler und Jacknow 1985)**.

Toxaphen ist extrem giftig für Fische. Salzwasserfische reagieren empfindlicher als Süßwasserfische. Letalität kann bereits bei einer Toxaphenkonzentration von 0,07 µg (Salzwasserfische) bzw. 1,6 µg/l (Süßwasserfische) auftreten **(U.S. EPA 1980)**. NOEC-Werte sind daher nicht verfügbar.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.19):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Informationen sind zu 6 von 12 toxikologisch relevanten Teilbereichen erhältlich.

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 20 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe II).

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-Wirkungs-Beziehung

Der Bewertung wird der LC_{50} = 0,0011 mg/l der Fisch-Tox-Studie der U.S. EPA mit dem Endpunkt Mortalität zugrunde gelegt **(U.S. EPA 1980)**. Aufgrund dieser Versuchsergebnisse und der Berücksichtigung der SF_c und SF_e wird für Toxaphen ein Eingangswert (EW_{AQU}) von 28,94 erhalten.

Feld 3: Berechnung der Dosiszahl

Für das Fehlen des (semi-)chronischen Bereichs wird die Dosiszahl gegenüber dem Eingangswert (EW_{AQU}) um +2* korrigiert: Es ergibt sich eine vorläufige Dosiszahl (DZ_{AQU}) von 30,94*.

Tabelle 11.6.19 Bewertungsraster SC_{AQU} von Toxaphen

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{AQU})

	Wichtungspunkte	
1 Akute Fischtoxizität:		
- LC_{50}	5	(x)
- LC_5	1	( )
- LC_{100}	1	( )
- LC_{100}	1	( )
2 (semi-)chronische Fischoxizität:		
- LOEC	8	( )
- NOEC	10	( )
3 Strukturanalyse (SAB):	4	( )
4 Sonstige Ergebnisse:		
- Kleinkrebse	4	(x)
- Bakterien	5	(x)
- Protozoen	1	(x)
- Algen	2	(x)
- Bioakkumulationsfaktor	3	(x)

Gruppeneinstufung

I	5 Punkt
II	6 - 20 Punkte
III	21 - 45 Punkte

Summe: 20 **Gruppe:** II

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{AQU})

	L_0-Werte	Spezies	(Quelle)
akute Toxizität:			
- LC_{50}	0,0011 mg/l		(PAN 2003)
- LC_5			( )
- LC_{10}			( )
- LC_{100}			( )
(semi-)chronische Toxizität:			
- LOEC			( )
- NOEC			( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller NOEC : ..... (mg/l) neg.^{e}ln · 1,9 + 14 = ... (a)

b) niedrigster abgeschätzter Wert $1{,}1 \cdot 10^{-3}$ (mg/l) neg.^{e}ln · 1,9 + 14 = 26,94 (b)

c) SF = 10 zur Abschätzung NOEC aus LOEC ^{10}log = 1 ..... (c)

d) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Spezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt ^{10}log = ... (d)

e) SF = 10 zur Abschätzung LOEC aus LC_{50} ^{10}log = 1 ..... (e)

f) SF = 10 für das Fehlen standard. Bedingungen ^{10}log = ... (f)

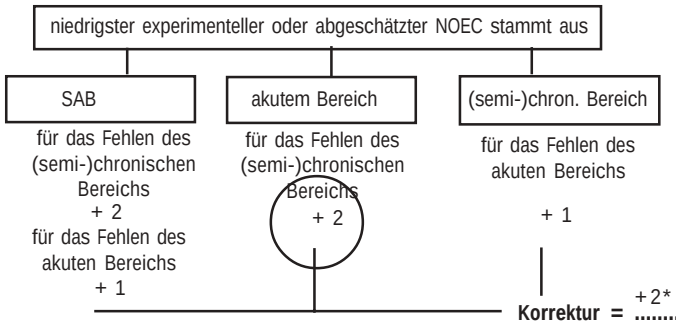
g) SF = 3 Umrechnung aus SAB in NOEC ^{10}log = ... (g)

Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = 28,94

Feld 3: Berechnung der Dosiszahl (DZ_{AQU})

Übertrag Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = 28,94

3.1 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis
(korrigierte Dosiszahl wird mit * gekennzeichnet)



3.2 Beurteilung der Substanz im Feld 2 EW_{AQU}:

3.2.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = 30,94*

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = ...

3.2.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g) + Korrektur* = Dosiszahl = ...

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) + Korrektur* = Dosiszahl = ...

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
	Quelle	Quelle	Quelle
4.1 Kleinkrebse (EC_{50})			
- Daphnie pulex	(x)	( )	( )
4.2 Bakterien (Test, Spezies:)			
- Spezies:	(x)	( )	( )
4.3 Protozoen (Test:)			
- Ciliaten, Amöben, Glockentierchen	(x)	( )	( )
4.4 Algen (Hemmungstest IC_{50})			
- planktische Grünalgen	(x)	( )	( )
- Blaualgen	(x)	( )	( )
4.5 Bioakkumulationsfaktor (c_{Fisch} / c_{H2O})	(x)	( )	( )

Summe = Aquatoxizitätszahl (AquZ) = 6 | 0 | 0

modifizierte Aquatoxizitätszahl (**MAquZ**) = 6
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Beurteilungsprofil:	VK:	EW:	DZ:	AquZ:	BZ_{AQU}:	SC_{AQU-X}:
Fischtoxizität	20	28,94	30,94*	600	100*	2,00

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Toxaphen wird von Wasserorganismen aufgenommen. Konzentrationen in Fischen lagen bei 3 - 8 mg/kg. Der Biokonzentrationsfaktor für Fische wird auf bis zu BKF 20.600 geschätzt **(Schimmel und Patrick 1977)**.

Alle sonstigen ökotoxikologischen Endpunkte sind der Gruppe „positives Ergebnis bzw. nicht ausreichend getestet" zugeordnet. Es ergibt sich eine Aquatox-Zahl (AquZ) von 600 und eine modifizierte Aquatox-Zahl (MAquZ) von 6.

Aquatoxikologische Bewertungszahl und Stoffcharakteristik SC_{AQU}:

Aus der vorläufigen Dosiszahl (DZ_{AQU}) 30,94* aus Feld 3 und der modifizierten Aquatox-Zahl (MAquZ) 6 aus Feld 4 errechnet sich die Bewertungszahl für die Aquatoxizität BZ_{AQU}

$0 \leq BZ_{AQU}$ = (Dosiszahl · mod. Aquatox-Zahl) = 30,94* · 6 ⩽ 100

BZ_{AQU} =100* und **SC_{TOX-X} = 2,00**.

Toxaphen wird in die Aquatox-Gruppe I als „extrem toxisch" für Fische eingestuft. Für andere Wasserorganismen ist Toxaphen vorläufig ebenfalls in die Aquatox-Gruppe I als extrem toxisch einzustufen.

- **Toxizität - SC_{TOX}**

Zu Toxaphen gibt es sehr viele Untersuchungen und Veröffentlichungen (ca. 2.385 Fundstellen allein in der Datenbank PUBMED unter insgesamt ca. 7.500 Fundstellen im TOXNET). Ein umfassendes toxikologisches Profil wurde im Jahr 1996 vom U.S. Department of Health and Human Services erstellt **(Anonymous 1996)**.

Studien an Labortieren zeigen, dass Toxaphen im Intestinaltrakt gut resorbiert wird. Die Resorption über die Haut ist vergleichsweise gering. Nach der Resorption verteilt sich die Substanz im gesamten Körper, jedoch bevorzugt auf das Fettgewebe, wo auch noch nach Monaten radioaktiv markiertes Toxaphen gemessen wird. 70% des Toxaphens werden über die Faeces, jedoch z.T. auch über den Urin ausgeschieden. Im Rattenversuch werden innerhalb von 9 Tagen 52,6% des Toxaphens wieder ausgeschieden, hiervon 37% über die Faeces.

Die toxische Wirkung des technischen Toxaphens kann sich signifikant von einzelnen Toxaphenanteilen unterschieden. Durch Umkristallisation aus Methanol kann Toxaphen in eine ölige (Toxikant A) bzw. eine kristalline (Toxikant B) Form getrennt werden. Sie besitzen bei Mäusen und Ratten eine 14 bzw. 6-mal höhere akute Toxizität als das technische Toxaphen **(Casida, Holmstead et al. 1974; Khalifa, Mon et al. 1974)**. Nach Wiedervereinigung beider Fraktionen im ursprünglichen Verhältnis besitzt die Mischung das gleiche Wirkungsspektrum wie die Ausgangssubstanz. Weiterhin lässt sich ein Toxizitätsunterschied zwischen den isolierten Fraktionen und den Einzelverbindungen erkennen. **Saleh, Turner et al. 1977** haben versucht eine tox. Struktur-Aktivitäts-Beziehung (SAB) aufzustellen. Dabei hat sich gezeigt, dass die Wirksamkeit insbesondere vom Vorhandensein von Chloratomen an bestimmten Stellen im Molekül abhängt, während der Chlorierungsgrad eine untergeordnete Rolle spielt. Das Substitutionsmuster an den Kohlenstoffatomen 8 und 9 scheint den größten Einfluss auf die Wirkung zu haben. Die Substituierung von Chloratomen an diesen Stellen kann zu einer 20- bis 30-fachen Erhöhung der Toxizität führen, während die Chlorierung an anderen Stellen zu einer Toxizitätserniedrigung führt.

Toxaphen wirkt beim Menschen nach inhalativer oder oraler Aufnahme hoher Dosen (im Grammbereich) akut toxisch und u.U. tödlich (Lungenödem, Gehirnblutung, Herzstillstand). Im Vordergrund der akuten Toxizität steht beim Menschen die Wirkung auf das ZNS (u.U. mit Tod durch Erschöpfung). In Langzeitstudien im Hochdosisbereich werden Wirkungen auf das

ZNS und Hypertrophie der Leber, begleitet durch steigende mikrosomale Enzymaktivität und histologische Veränderungen in der Leber, beobachtet. Nieren, Milz und die Nebenniere wurden ebenfalls als Zielorgane der Toxaphen induzierten Toxizität identifiziert. Insgesamt liegen zur akuten Toxizität 26 Studien, zur subakuten Toxizität 24 Studien, zur chronischen Toxizität 11 Tierversuche vor (Ratte, Maus, Hamster, Hund), hiervon mehrere Studien zur Reproduktions- bzw. Entwicklungstoxizität, neurologischen Toxizität sowie Kanzerogenität (Ratte und Maus) **(Anonymous 1996)**. Die jüngsten Studien wurden an Affen (*Macaca fascicularis*) durchgeführt **(Arnold, Bryce et al. 2001; Bryce, Iverson et al. 2001; Tryphonas, Arnold et al. 2001)**.

Symptome der Exposition können sein: Übelkeit, Verwirrung, Zuckungen / Krämpfe an Armen und Beinen, Zyanose, Augenschmerzen, Kopfschmerzen, Schwindel, Unterleibschmerzen, Durchfall, Schwäche, Somnolenz, allergische Dermatitis, Koma und Tod.

Im Bereich der akuten Toxizität variiert die orale LD_{50} je nach Labortier, Lösungsmittel, Applikationsform und Hersteller. Für Ratten zeigen sich LD_{50}-Werte zwischen 80 und 293 mg/kg **(Boyd und Taylor 1971; ATSDR 1995)**. Die Gabe von 80 mg/kg/d Toxaphen für 5 Tage an männliche Mäuse führte zu 75% Mortalität **(Epstein, Arnold et al. 1972)**. Trächtige Ratten und Mäuse sind offensichtlich besonders empfindlich gegenüber Toxaphen, da die letale Dosis zwischen der Hälfte und einem Zehntel derjenigen bei nicht trächtigen Ratten bzw. Mäusen liegt **(Chernoff und Carver 1976; Chernoff, Setzer et al. 1990)**. Bei Dosen von 6 mg/kg/d über 21 Tage wurde im Versuchansatz mit Mäusen keine Mortalität beobachtet **(Crowder, Lanzaro et al. 1980)**.

Im subchronischen und chronischen Bereich zeigen sich hauptsächlich folgende Endpunkte: reduziertes Körpergewicht, Lebertoxizität (erhöhtes Lebergewicht, Zunahme mikrosomaler Enzymaktivität), biliäre Exkretion von Imipramin, reduziertes Nierengewicht, reduziertes Thymusgewicht, histologische Veränderungen der Leber (Anisokaryosis bzw. Kernpolymorphie) und Nieren, Immuntoxizität (z.B. 46%ige Abnahme von IgG bei der Ratte **(Koller, Exon et al. 1983)** Entwicklungstoxizität, endokrine und hämatologische Veränderungen, Neurotoxizität (reduziertes Gewicht des Gehirns, Tremor) und Kanzerogenität an Ratte (follikelepitheliale Karzinome, Adenome der Schilddrüse) und Maus (hepatozellulare Karzinome).

Die wesentlichen Ergebnisse werden in der folgenden Bewertung zitiert.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.20):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Informationen sind zu 8 von 8 toxikologisch relevanten Teilbereichen erhältlich.

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 12 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe III).

Feld 2: Angaben zur Dosis-Wirkungs-Beziehung

Der Bewertung werden die Studien von **Chu et al. 1986** (Endocr Ratte (m), NOAEL 0,35 / LOAEL 1,8, 13 Wochen) und 1988 (Leber, Ratte (m), NOAEL 0,35 / LOAEL 1,8, 13 Wochen) sowie die Studie von **Olsen et al. 1980** (Entwicklungstoxizität Ratte (w), 62 Tage) zugrunde gelegt. **Chu et al 1986** untersuchte Sprangue-Dawley Ratten über 13 Wochen mit 0, 4, 20, 100 und 500 ppm Toxaphen im Futter. Die Autoren berechneten daraus Dosen von 0, 0,35, 1,8, 8,6, und 45,9 mg/kg/d für männliche bzw. 0, 0,5, 2,6, 12,6, und 63 mg/kg/d für weibliche Tiere. Neben hämatologischen Untersuchungen wurden nach Abschluss der Studie die Organe Gehirn, Herz, Milz, Leber und Nieren und andere Organe auf histopathologische Veränderungen untersucht. Toxaphen zeigte keine klinischen Symptome der Toxizität, sowohl Nahrungsaufnahme als auch das Körpergewicht waren gegenüber der Kontrollgruppe identisch. Das relative Lebergewicht war bei der 500 ppm Gruppe (m/w) statistisch signifikant erhöht. Bei

den männlichen Tieren der 500 ppm Gruppe war zudem auch das relative Gewicht der Nieren erhöht. Ab 500 ppm wurde bei beiden Geschlechtern die Induktion der Leber-Mikrosomal-Enzyme Anilinhydroxylase und Aminopyrindemethylase beobachtet.

Histopathologische Untersuchungen wurden an den Zielorganen Leber, Nieren und Schilddrüse bei allen Dosisgruppen durchgeführt. Dosisabhängige histologische Veränderungen wurden im Lebergewebe bei beiden Geschlechtern hauptsächlich in Form peripheraler Basophilie und Anisokariose beobachtet. In den Nieren wurden bei männlichen und weiblichen Tieren dosisabhängig strukturelle Wechsel proximaler Tubuli hervorgerufen, in manchen Fällen verbunden mit fokaler Nekrose. Die schweren Niereneffekte beschränken sich auf die männlichen Tiere der 500 ppm-Gruppe. Toxaphen verursachte geringe bis mittlere Veränderungen der Schilddrüsenzellen. Die Ergebnisse der Studie von Chu 1986 mit dem NOAEL von 0,35 mg/kg/d werden bestätigt durch die Studie von **Chu 1988** mit dem NOAEL 0,36 mg/kg/d bei den gleichen Endpunkten **(Chu, Villeneuve et al. 1986; Chu, Secours et al. 1988)**. Die perinatale Exposition von Toxaphen über 47 Tage beeinträchtigte die Schwimmfähigkeit in Holzman-Ratten am 10., 11. und 12. Tag nach der Geburt **(Olson, Matsumura et al. 1980)**. Die Ergebnisse dieser Studie zeigen, dass Toxaphen ein entwicklungstoxisches-Potential besitzt. In der Literatur bis 2000 konnten keine Ergebnisse von chronischen Studien mit vergleichsweise geeigneten NOAEL- oder LOAEL-Werten und toxikologischen Endpunkten recherchiert werden, so dass die vorliegenden chronischen Daten der NCI Studie **(NCI 1977)** nicht in die Bewertung eingehen. Eine aktuelle Studie zu Effekten von Toxaphen auf das Immunsystem von Affen (*Macaca fascicularis,* (5 m, 0,8mg/kg/d), (10 w, 0,1, 0,4 und 0,8 mg/kg/d), oral, 75 Wochen) führte bei den Dosisgruppen 0,4 und 0,8 mg/kg/d zu signifikant reduzierten primären anti-SRBC-IgG bei den weiblichen Tieren sowie zu primären bei den männlichen und zu primären und sekundären anti-SRBC-IgM Antworten in den weiblichen Tieren (NOAEL (w) = 0,1 mg/kg/d) **(Tryphonas, Arnold et al. 2001)**.

Feld 3: Karzinogenität

In der Literatur gibt es keine hinreichenden Daten, die einen direkten Zusammenhang zwischen Toxaphen-Exposition und der Entstehung von Krebs beim Menschen beweisen. Zwei Langzeitstudien mit Toxaphen an Ratten und Mäusen haben in beiden Spezies eine karzinogene Wirkung gezeigt. Toxaphen wurde während 18 Monaten in Dosen von 0, 7, 20 und 50 ppm an 54 B6C3F1-Mäuse/Geschlecht/Gruppe im Futter verabreicht. Die Tiere wurden 6 Monate nach der Behandlung weiter beobachtet. Es traten Leberkarzinome und Adenome in beiden Geschlechtern auf, statistisch signifikant in männlichen Tieren ab 50 ppm **(Litton Bionetics 1978)**.

In einer zweiten Studie wurden 50 Osborne-Mendel-Ratten/Geschlecht/Gruppe (Dosen 556, 1112 ppm (m) und 540, 1080 ppm (w)) und 50 B6C3F1 Mäuse/Geschlecht/Gruppe (Dosen 99, 198 ppm für (m) und (w)) während 80 Wochen gegenüber Toxaphen im Futter exponiert. Während der anschließenden Beobachtungsphase von 28-30 Wochen zeigten sich in den Ratten statistisch signifikante und dosisabhängige Zunahmen von Schilddrüsenkrebs (Adenome und Karzinome) bei beiden Geschlechtern. In den Mäusen nahm die Häufigkeit von Leberkrebs statistisch signifikant und dosisabhängig zu **(NCI 1977)**. Die EPA stuft deshalb Toxaphen in die Gruppe B2 (wahrscheinliches Humankarzinogen) für orale Expositionen ein. Der von IRIS berechnete *slope factor* (o) 1,1 mg/kg/d führt zu einem *drinking water unit risk* von $3{,}2 \cdot 10^{-5}$ pro µg/l bzw. einer Konzentration von 0,03 µg/l Toxaphen bei einem akzeptierten Risiko von 10^{-6}. Toxaphen wird wegen der vorliegenden Daten in die Gruppe B1 als „eindeutig karzinogen im Tierversuch als Initiator oder Anfangsverdacht aus Humandaten bei wahrscheinlicher Initiatorwirkung“ eingestuft (RZ=100).

Tabelle 11.6.20 Bewertungsraster SC_{TOX} von Toxaphen

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{TOX})

	Wichtungspunkte	
subchronische Toxizität:	1 (X)	
chronische Toxizität:	3 (X)	
Reproduktionstoxizität:	2 (X)	
subchronische Immuntoxizität:	1 (X)	Gruppeneinstufung
chronische Immuntoxizität:	2 (X)	
Toxikokinetik:	1 (X)	I 1 - 3 Punkte
Biochemie:	1 (X)	II 4 - 8 Punkte
Mutagenität:	1 (X)	III 9 - 12 Punkte

Summe: 12 **Gruppe:** III

Feld 3: Karzinogenität (canc)

(Kennzeichnung für nichtorale Studien: i = inhalativ, d = dermal)

canc A = eindeutig humankarzinogen ($RZ = BZ_{TOX} = 100$)
canc B_1 = eindeutig karzinogen im Tierversuch als Initiator oder Anfangsverdacht aus Humandaten bei wahrscheinlicher Initiatorwirkung ($RZ = BZ_{TOX} = 100$)
canc B_2 = Initiatorwirkung im Tierversuch zweifelhaft, aber begründeter Anfangsverdacht aus Tier- oder Strukturdaten (RZ = 33)
canc B_3 = oral wie Gruppe C; andere Pfade aber wie $B_2/B_1/A$ (RZ = 22)
canc C = nicht karzinogen bei adäquater Testung
canc D = nicht adäquat getestet, aber kein Verdacht aus Strukturdaten (RZ = 11)

Einstufung der Karzinogenität der Substanz: Gruppe B_1 **=> RZ =** +100

Feld 2: Angaben zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{TOX})

	NOAEL / LOAEL	(Quelle)
subchronische Toxizität:	0,35 (0,36) / 1,8	(Chu 1886, Chu 1988)
chronische Toxizität:		( )
Reproduktionstoxizität:	(0.02)	(Olson 1980)
subchronische Immuntoxizität:		( )
chronische Immuntoxizität:	0,1 (w)	(Tryphonas 2001)

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (EW)

a) niedrigster experimenteller NOAEL 0,0001 (g/kg/d) neg.^{10}log = 4 (a)
b) niedrigster abgeschätzter NOAEL : ..... (g/kg/d) neg.^{10}log = ... (b)
c) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Laborspezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt ^{10}log = ... (c)
d) SF = 10 für voraussichtlich starke Kumulation der Substanz im Säuger (Halbwertszeit der Elimination >1 a) ^{10}log = ... (d)

Eingangswert: 2.1.1 (a+c+d) oder 2.1.2 (b+c+d) = 4

2.2 Dosiszahl DZ_{TOX} (Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis)

niedrigster experimenteller oder abgeschätzter NOAEL stammt aus

subchron. Bereich	chronischer Bereich	Reprotox. Bereich
für das Fehlen des chronischen Bereichs + 2	für das Fehlen des subchron. Bereichs + 1	für das Fehlen des chron. Bereichs + 2
für das Fehlen des Reprotox. Bereichs + 1	für das Fehlen des Reprotox. Bereichs + 1	für das Fehlen des subchron. Bereichs + 1

Korrektur = ...

2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2 DWB:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) = Dosiszahl = 4

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) = Dosiszahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = ...

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = ...

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
Toxikokinetik:	Quelle	Quelle	Quelle
Kumulationstendenz in Säugern (> = 24 h)	(X)	( )	( )
Reaktive Metabolite	(X)	( )	( )
Plazentagängigkeit	(X)	( )	( )
Biochemie:			
Blutbild, Serum, Immunzellenstatus } Veränderungen	(X)	( )	( )
Enzym, Hormon, Transmitter } Veränderungen	(X)	( )	( )
Metallhomöostase Veränderungen	(X)	( )	( )
Mutagenität:			
DNA-Schäden	(X)	( )	( )
Punktmutationen	(X)	( )	( )
Chromosomenmutationen	(X)	( )	( )

Summe = Toxizitätszahl (ToxZ) = 9 | 0 | 0

modifizierte Toxizitätszahl (**MToxZ**) = 9
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Feld 5: Humantoxikologie

a) Erfahrungen am Menschen (Freitext):

b) vorhandene Werte:

Beurteilungsprofil:	VK_{TOX}:	EW_{TOX}:	DZ_{TOX}:	canc:	ToxZ:	BZ_{TOX}:		SC_{TOX}:
oral	III	4	4	B_1	900	100		4,0

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Studien zeigen, dass Toxaphen gut im Intestinaltrakt oder über die Lungen (weniger über die Haut) aufgenommen und dann im ganzen Körper verteilt wird. Von der Ratte werden 52,6% von oral dosiertem Toxaphen innerhalb von 9 Tagen (37 % über Faeces als ionisiertes Chlorid, 15% über Urin) ausgeschieden. Weniger als 10% der Dosis wurden in verschiedenen Geweben gefunden. In einem anderen Versuchansatz wurden 20% der Aktivität von radioaktiv markiertem Toxaphen in der Atemluft nachgewiesen. Abhängig von der Dosis führte die chronische Exposition zur Akkumulation von Toxaphen bzw. chlorierten Metaboliten im Fettgewebe. Ratten metabolisieren Toxaphen i.d.R. über reduktive Dechlorierung in der Leber **(HSDB 2003c)** zu minderchlorierten bzw. vollständig dechlorierten Metaboliten. Gentoxische Effekte wurden *in vitro* **(Griffin und Hill 1978; Hooper, Ames et al. 1979; Sobti, Krishan et al. 1983; Mortelmans, Haworth et al. 1986)** und *in vivo* **(Epstein, Arnold et al. 1972; Samosh 1974)** untersucht. S. typhimurium Tests zeigen ohne S9 Aktivierung eine höhere Mutationsrate. In Zellen aus Lymphozytenkulturen von Toxaphen-exponierten Personen treten chromosomale Aberrationen häufiger auf, als in solchen, von nicht exponierten Personen. Der Anstieg des Schwester-Chromatiden-Austauschs im Versuchsansatz mit Lungenfibroblasten vom V79-*chinese hamster* ist nicht stat. signifikant. Obwohl das mutagene Potenzial nicht sehr hoch erscheint, lassen die vorliegenden Daten vermuten, dass Toxaphen gentoxische Effekte beim Menschen auslöst. Die Mehrzahl der bis 2002 durchgeführten Mutagenitätsstudien sind positiv **(IRIS 2002)**.

Toxikologische Bewertungszahl und toxikologische Stoffcharakteristik SC_{TOX}:

$0 \leq BZ_{TOX}$ = Dosiszahl · modifizierte Toxizitätszahl + RZ = 4 · 9 + 100 ≤ 100

BZ_{TOX} = 100 und **SC_{TOX} = 4,00**

Toxaphen erhält wegen der vorliegenden Daten zur karzinogenen Wirkung im Tierversuch die toxikologische Bewertungszahl 100*. Der Wert der toxikologischen Substanzcharakteristik SC_{TOX} ist 4,0. Die Substanz ist als stark toxisch und eindeutig karzinogen im Tierversuch als Inititator eingestuft.

- **Biochemischer Abbau - SC_{BIO}**

Sowohl zum aeroben als auch zum anaeroben Abbau liegen Untersuchungsergebnisse von Toxaphen vor.

Unter aeroben Bedingungen ist ein biochemischer Abbau von Toxaphen-Komponenten mit mehr als 3 Cl-Atomen nicht bzw. kaum zu erwarten. Halbwertszeiten werden mit 1 bis 11 Jahren angegeben. Toxaphen wird im Boden innerhalb von 6 Wochen nicht abgebaut. Im Oberflächenwasser verhält sich Toxaphen sehr persistent: kein Abbau innerhalb von 5 Jahren **(HSDB 2003c)**.

Untersuchungsergebnisse zeigen, dass Toxaphen unter anaeroben Bedingungen durch reduktive Dechlorierung zu niedriger chlorierten Metaboliten abgebaut wird; Abbau im Boden > 80% bzw. in Sedimenten zwischen 48,4 - 48,8% innerhalb von 30 Tagen. Der Abbau ist während der warmen Sommermonate rascher als während der kalten Winterzeit **(HSDB 2003c)**.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.21):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 29 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage vorläufig bewertbar (Gruppe II).

Tabelle 11.6.21 Bewertungsraster SC_{BIO} von Toxaphen

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{BIO})

Bio-Bereiche	Wichtungspunkte (WP) Serie / Wert	mehrere Serien / Werte
1 Aerober Abbau		
1.1 Standardisierte Prüfmethode:		
1.1.1 Testung nach Adaption (z.B. Warburg)	30 ( )	40 ( )
1.1.2 Testung inkl. Adaption (z.B. *screening*)	25 ( )	35 ( )
1.2 Andere Laborprüfungen		
1.2.1 Labor BB	25 ( )	35 ( )
1.2.2 Batch-Test	8 ( )	12 ( )
1.2.3 Standardverdünnungsverfahren (z.B. BSB_5)	6 ( )	8 ( )
1.3 Industrielle bzw. kommunale biologische Reinigungsanlage		
1.3.1 dominanter Inhaltsstoff	20 ( )	25 ( )
1.3.2 nicht dominanter Inhaltsstoff	12 ( )	15 ( )
1.4 Feldversuche		
1.4.1 Oberflächenwasser	10 ( )	15 (x)
1.4.2 Grundwasser	8 ( )	12 ( )
1.4.3 Brakwasser	6 ( )	10 ( )
1.4.4 Boden	6 ( )	10 (x)
1.5 Strukturanalyse (SAB)		
1.5.1 Basis homologie Reihe	25 ( )	
1.5.2 Basis Strukturformel	20 ( )	
2 Anaeber Abbau		
2.1 Labor-/Feldversuche	4 (x)	
3 Chemischer Abbau		
3.1 Fotolyse	3 (x)	
3.2 Hydrolyse	2 ( )	
3.3 TOC, DOC, CSB-Cr	1 ( )	
3.4 CSB-Mn	0 ( )	
4 Wasserlöslichkeit		
4.1 standard. Methode	4 (x)	
4.2 berechnet	2 ( )	
5 Inhibitärwirkung		
5.1 experimentell	4 ( )	
5.2 Strukturanalyse	2 ( )	
6 Bioakkumulation		
6.1 experimentell	4 (x)	
6.2 berechnet	2 ( )	

Summe: 29

I	0 - 20 Punkte	nicht bewertbar
II	21 - 40 Punkte	vorläufig bewertbar
III	41 - 60 Punkte	bewertbar

Gruppe: II

Feld 2a: Eingangswert zum Abbauverhalten (EW_{BIO})

	(%)	(Quelle)
Standardisierte Prüfmethode:		( )
		( )
Praktische Prüfmethode:	0	(Bauer 1991)
		( )
Strukturanalyse (SAB):		( )
		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller Abbau : 0 % (neg./10 + 11)·1,5 = 16,5 (a)

b) niedrigster abgeschätzter Abbau : .....% (neg./10 + 11)·1,5 = ... (b)

c) SF = 10; bei Anwendnung von SAB $^{10}\log$ = ... (c)

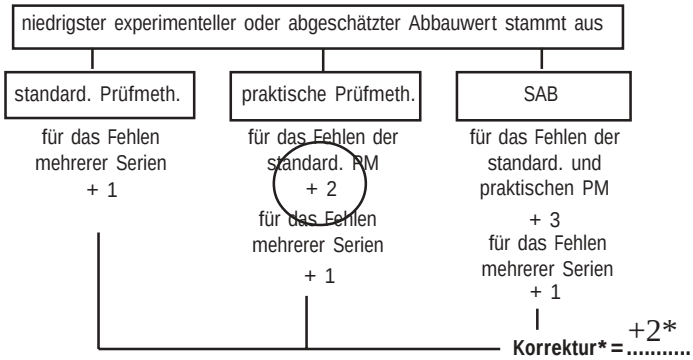
d) SF = 10; bei sehr langsamem biochemischem Umsatz $^{10}\log$ = 1 (d)

Übertrag 2a = 17,5

Feld 2b: Berechnung der Abbauzahl (AZ)

Übertrag aus 2a = 17,5

2.2 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis
(korrigierte Abbauzahl wird mit * gekennzeichnet)



Korrektur* = +2*

2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Bio-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) = Abbauzahl = ...

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) = Abbauzahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) + 2.2 Korrektur * = Abbauzahl = 19,5*

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) + 2.2 Korrektur * = Abbauzahl = ...

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation (mod)

mod C = keine Hydrolyse und keine Photolyse bei adäquater Testung (AA = 0)
mod D = nicht adäquat getestet, aber keine Hydrolyse oder Photolyse aufgrund von Strukturdaten (AA=0)
mod B_2 = strukturelle Voraussetzungen für Hydrolyse oder Photolyse (AA =-5)
mod B_1 = langsame Hydrolyse oder Photolyse (AA = -10)
mod A = rasche Hydrolyse oder Photolyse experimentell gesichert (AA = -20)

Einstufung phys./chem. Modifikation: **Gruppe** A **=> AA =** -10

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
4.1 aerober Abbau:	Quelle	Quelle	Quelle
- Inhibitorwirkung < 10 mg/l	(x)	( )	( )
< 1 mg/l	(x)	( )	( )
- $t_{1/2}$ (Feldversuch) > 1 Jahr	(x)	( )	( )
> 10 Jahre	( )	( )	(x)
- Adaptionszeit > 25 Tage	(x)	( )	( )
4.2 anaerober Abbau:			
- toxikol. relevante stabile Metabolite	(x)	( )	( )
4.3 sonstige Parameter:			
- Wasserlöslichkeit < 10 mg/l	( )	( )	(x)
< 1 mg/l	( )	( )	(x)
- Bioakkumulation	(x)	( )	( )

Summe = Biozahl (BioZ) = 6 | 0 | 3

modifizierte Biozahl (**MBioZ**) = 6
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

VL_{BIO}:	EW_{BIO}:	AZ_{BIO}:	BioZ:	BZ_{BIO}	SC_{BIO-X}
II	17,5	19,5*	603	100*	2,00

Feld 2: Angaben zum Abbauverhalten

Bewertet werden die Ergebnisse der in **(HSDB 2003c)** zitierten Arbeiten zum aeroben Abbau mit 0% Abbau in Wasser innerhalb 5 Jahren. Es errechnet sich, über einen SF wegen des sehr langsamen biochemischen Umsatzes, ein Eingangswert von 17,5. Für das Fehlen von Tests standardisierter Prüfmethoden wird eine Korrektur um +2* vorgenommen. Die Abbauzahl lautet daher 19,5*.

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation

Ein hydrolytischer Abbau unter Umweltbedingungen ist unwahrscheinlich. Der photolytische Abbau in der Atmosphäre wird mit 4,7 bis 8,4 Tagen angegeben. In wässriger Lösung gilt die Photolyse als weniger bedeutend. Es erfolgt eine Einstufung in die Gruppe mod B_1 (mit AZ = -10).

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Der Biokonzentrationsfaktor für aquatische Organismen liegt mit 3.100 bis 69.000 in Fischen sehr hoch. Es ergibt sich eine Biozahl von 603.

Biochemische Bewertungszahl und SC_{BIO}:

$0 \leqslant BZ_{BIO}$ = Abbauzahl $\cdot$ mod. Biozahl + mod = 19,5* $\cdot$ 6 - 10 = 100* $\leqslant$ 100

BZ_{BIO} = 100* und **SC_{BIO-X} = 2,0**

Toxaphen wird aufgrund der vorliegenden Daten in SC_{BIO} = 2,0 (BIO-Gruppe D „nicht abbaubar“) eingestuft. Es findet auch bei stark verlängerter Reaktionszeit kein biochemischer Abbau statt.

- **Umwelttoxikologische Relevanz - SC_{TOR}**

Toxaphen erwies sich als in der Umwelt beständig, mäßig toxisch sowie eindeutig karzinogen im Tierversuch bei adäquater Testung. Die umwelttoxikologische Relevanz von Toxaphen erreicht die höchste Priorität mit

SC_{TOR-X} = 6 bei $6 \geq SC_{TOR} = SC_{TOX} + SC_{BIO-Z} \geq 2$

Das Schadstoffrisiko ist „sehr hoch“; eine Kontrollerfordernis ist „unbedingt gegeben“.

- **Ethylenglykol [107-21-1]**

Tabelle 11.6.22 Identität und Stoffkonstanten von Ethylenglykol

Strukturformel:	
Andere Bezeichnungen:	Ethandiol, 1,2-; Dihydroxyethan; Ethylenalkohol; Ethylenglykol; Etilenglikol; Glycol; Glycoshell; Glykol; MEG; Monoethylenglykol; NCI C00920; Polysolv DE high gravity; Surfynol; Vapor; Ethan-1,2-diol; Monoethylglykol; Polysolv DE (high gravity); 1,2-Ethanediol; Ethanediol, 1,2-; 1,2-Dihydroxyethan; Dihydroxyethan, 1,2-; Ethylene glycol
Stoffgruppe:	Alkohl
CAS-Nr.	107-21-1
Summenformel	$C_2H_6O_2$
Stoffbeschreibung	farblose, gelb bis blaugrüne hygroskop. Flüssigkeit, brennbar
Molekulargewicht [g/Mol]	62,07

o Herkunftsbereich und Gruppencharakteristik

Ethylenglykol wird vielfältig eingesetzt, so u.a. als Arzneimittel, als Düngemittel in der Landwirtschaft, in Farben und Lacken, als technischer Hilfsstoff, als Lösemittel, in Kunststoffen sowie als Pflanzenschutzmittel, als Desinfektionsmittel, bei der Körperpflege und als Waschmittel. Es findet Verwendung z.B. als Frostschutzmittel in Kühl- und Heizsystemen, in Bohr- und Schneidflüssigkeiten, in Zusammensetzungen von Drucktinten; es dient als industrielles Feuchthaltemittel, Weichmacher für Cellophan, Stabilisator für Sojabohnenschaum sowie bei der Eindämmung von Öl- und Benzinbränden. Die Verbindung findet sich auch in Zusammensetzungen von Sprengstoffen, sowie in Weichmachern, Elastomeren, synthetischen Wachsen und Fasern (Terylen, Dacron); als Zwischenprodukt für Polyethylenterephthalat, Polyester, Polyurethane, als Wärmeübertragungsflüssigkeit für Solarkollektoren, als Komponente in feuerbeständigen Hydraulikflüssigkeiten; als Metallreinigungsmittel von Metallüberzügen. Weiterhin wird es als Stabilisator in Latexfarben, Lösemittel für Tinten und Klebstoffe, als Fleckentferner, als suspendierendes Medium für Elektrolytkondensatoren und als Kühlschmierstoff bzw. Schmierfähigkeitsverbesserer verwendet **(DIMDI 2003)**. Zum überwiegenden Teil wird Ethylenglykol als Zwischenprodukt für die Herstellung von Polymeren (ca. 65%) und zu geringeren Teilen als Frostschutzmittel in Kühlflüssigkeiten (ca. 20%) eingesetzt.

Zur Produktion liegen Daten aus den Ende 80iger- bzw. Anfang 90iger-Jahren vor, die eine Schätzung auf ca. 7 Millionen t pro Jahr weltweit bzw. ca. 240.000 t allein in Deutschland zulassen. Ethylenglykol wird den Gruppen A und B der Herkunftsbereiche zugeordnet. Produktion und Anwendung zielen nicht auf eine direkte Freigabe von Ethylenglykol in die Umwelt, jedoch sind flächenhafte Expositionen aufgrund der vielfältigen Nutzungen zu erwarten.

Die hohe Produktionsmenge und vielfältige Nutzung von Ethylenglykol lassen den Eintrag in die Umwelt über verschiedene Ströme erwarten. Die Einträge von Ethylenglykol in die

Atmosphäre bei der Verarbeitung und Anwendung sind nicht quantifizierbar und wurden auch nicht nachgewiesen. Ethylenglykol wird wegen seines hohen Dampfdruckes vorwiegend in der Dampfphase der Umgebungsatmosphäre vorliegen. Diesbezüglich liegen lediglich Daten aus Arbeitsplatzmessungen in der Größenordnung von 0,2 mg/m^3 vor **(HSDB 2003b)**. Der Eintrag in die Umwelt durch Abwässer bei der Herstellung von Ethylenglykol wurde in Deutschland auf <30 t, der Eintrag durch Leckagen und Unfälle in die Hydro- und Geosphäre grob auf >2000 t/a geschätzt **(BUA 1991)**.

- **Stoffliche Mobilität - SC_{MOB}**

Physiko-chemische Daten

Ethylenglykol hat einen charakteristischen schwach süßlichen Geruch (Geruchsschwelle 25 ppm). Es reagiert mit starken Oxidationsmitteln, starken Basen und ist nur sehr schwer entzündbar. Beim Verbrennen entstehen giftige Dämpfe.

Die physiko-chemischen Parameter sind in den Tabellen 11.6.22 und 11.6.23 zusammengestellt.

Tabelle 11.6.23 Relevante physiko-chemische Daten von Ethylenglykol

Schmelzpunkt [°C]	-13
Siedepunkt [°C]	198
Dichte [g/ml bei 20 °C]	1,1135
Dampfdruck [Pa bei 20 °C]	7
Löslichkeit [g/l 20 °C H_2O]	1000
Verteilungskoeffizient log P_{OW}	1,34
Sorptionskoeffizient K_{OC}	4
Henry-Konstante [Pa·m^3/mol]	$8 \cdot 10^{-6}$

Ethylenglykol ist mit 1.000 mg/l sehr gut in Wasser löslich. Die Dampfphase von Ethylenglykol wird durch photochemisch gebildete Hydroxylradikale abgebaut (Halbwertszeit ca. 50 Stunden, vgl. auch photochemischer Abbau). Ein geschätzter K_{OC} von 4 zeigt, dass Ethylenglykol im Boden sehr mobil ist bzw. nicht an Bodenmaterialien adsorbiert wird. Die niedrige Henry-Konstante verweist auf geringe Verflüchtigung aus feuchten Böden bzw. Oberflächenwässern. Biokonzentrationsfaktoren zwischen 0,21 und 10 für Fische lassen sehr geringe Anreicherungen in aquatischen Lebewesen erwarten **(HSDB 2003b)**.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.24).

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (DL)

Informationen sind zu 11 von 12 relevanten Teilbereichen erhältlich (vgl. Bewertungsraster SC_{MOB}). Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien wurden 18 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe III).

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit (EW_{MOB})

Der Bewertung der Adsorbierbarkeit wird der von Wotzka 1984 geschätzte Wert von Q_∞ <2 mg/g zugrunde gelegt. Dieser Wert wird gestützt durch den K_{OC} 4 **(HSDB 2003b)**. Die Wasserlöslichkeit wird mit 1000.000 mg/l (20°C) angegeben. Es ergibt sich ein Eingangswert von 19,9.

Tabelle 11.6.24 Bewertungsraster SC_{MOB} von Ethylenglykol

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{MOB})

	Wichtungs-punkte	
standardisierte Laborprüfmethode	3	(x)
Feldversuch	1	(x)
Adsorbierbarkeit an AK	3	(x)
Adsorbierbarkeit an Ads.-Harzen	2	(x)
Adsorbierbarkeit Boden	1	(x)
Löslichkeit in Wasser	3	(x)
Biokonzentrationsfaktor log P_{OW}	1	(x)
Henry-Koeffizient	1	(x)
Dampfdruck	1	(x)
pk_a (für ionisierbare Substanzen)	1	( )
K_{oc}	1	(x)
Dichte	1	(x)

Gruppeneinstufung

I	1 - 4 Punkte
II	5 - 13 Punkte
III	14 - 19 Punkte

Summe: 18 **Gruppe:** III

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit (EW_{MOB})

		(Quelle)
a) Wasserlöslichkeit S (Lit_{max}-Wert mg/l]		
- .... °C		( )
- Umrechungsfaktor		
- 20 °C	1.000.000	(HSDB)
b) Adosrbierbarkeit:C_{ads} (Lit_{min}-Wert mg/g]		
- AK	<2	(Wotzka)
- Harz		( )
- Boden		( )
- Schätzung aus K_{OC} bzw. P_{OW}	1	( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) höchster experiment. Lös.-Wert: 3,0 (mg/l)x 9/1000+1, max. 10) = 10 (a)
b) experiment.Ads.-Wert (-x+100): 0 (mg/g)x9/100+1, max. 10) = 9,9 (b)
c) geschätzter Ads.-Wert (-x+100): ..... (mg/g)x9/100+1, max. 10) = ... (c)

d) SF = 10 bei berechnetem Ads.-Wert: neg.^{10}log = ...(d)
e) SF = 1-10 zur Überbrückung der Varianz Ads.-Materialien neg.^{10}log = ... (e)
f) SF = 10 zur Überbrückung der Varianz Labor / Feld neg.^{10}log = ... (f)

Eingangswert: 2.1.1 (a+b+d+e+f) oder 2.1.2 (a+c+d+e+f) = 19,9

Ergebnis (Freitext):

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Charakterisierung:

Aggregatzustand unter Normalbedinungen: flüssig
Molare Masse: 62,07 g/mol
Siedepunkt [°C]: 198
Schmelzpunkt [°C]: -13
Dichte [g/cm³]: 1,1135
Viskosität [mPa · s]:
Oberflächenspannung:
Dampfdruck [Pa]: $8 \cdot 10^{-6}$
Dampfsättigungskonzentration [g/m³] bei 20 °C:
Log P_{OW}: 1,34
K_{OC}: 4
pk_s (Dissoziationsgradkurve unter Annahme pH = 5)
Henry-Konstante [Pa m²/mol]: $8 \cdot 10^{-6}$
Remobilisierung von Metallionen durch Komplexbildung [log K_k]:
Sättigungskonzentration [g/m³]:
Biokonzentrationsfaktor (Fiche): 5,0 Mittelwert

Berechnungsgrundlagen:

Henry-Koeffizient: $H = C_g/C_w$ = (p [Pa] · M [g/mol]) / (S [mg/l] · 8314 · T [K]
Verteilungskoeffizient: log P_{ow} = -0,662 log $C_{s,w}$ [mol/l] + 0,710
Adsorptionskoeffizient: $K_{OC} = 100 \cdot C_{ads}/C_W$ (T) / (0,58 · % org. Materie)(o.m.) mit o.m. = o.c. / 0,58; K_{OC} = 0,4 P_{OW} => K= K_{OC} · % o.c. /100 und C_{ads}= K · C_w

Vereinfachungen:

Abschätzung der Wasserlöslichkeit S aus P_{OW}: log S = 3,05 - 1,29 Log P_{OW}
BKF (Fische) = C_{BIO} / C_w = k_1 (Aufnahme) / k_2 (Abgabe) = 0,048 P_{OW}
Konz. am Punkt der Beurteilung: C_A =! 0,1 S_A
=>min. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\ (min)}$ = S / C · V_S mit C = $C_{Sickerwasser}$
max. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\ (max)}$ = S / C · V_S mit C = LW
Volatilität: $t_{1/2}$ = ln 2 · $215{,}7^{1/2}$ [2710 * 28,3 / H]
Verzög.-F. (VF) und Lipophil.: Beispiel P_{OW} 200 => VF 2,2; P_{OW} 4000 => VF 7,9
floater / sinker: Dichte Substanz < / > Dichte Wasser

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	negativ oder nicht ausreichend	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis positiv
	Quelle	Quelle	Quelle
Biokonzentration (BKF):	(x)	( )	( )
Dissoziation:	(x)	( )	( )
Komplexbildung:	(x)	( )	( )
Volatilität:	(x)	( )	( )
floater / sinker:	( )	( )	(x)
Konz. am Punkt der Beurteilung	(x)	( )	( )
min/max. kontaminiertes GW-Volumen	(x)	( )	( )

Summe = Mobilitätszahl (MobZ) = 6 | 0 | 1

modifizierte Mobilitätszahl (MMobZ) = 6
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

VK_{MOB}:	EW_{MOB}:	MobZ:	BZ_{MOB}:	SC_{MOB}
III	19,0	601	0	2,00

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Keine Vereinfachungen.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Die sonstigen Stoffdaten führen zu der Mobilitätszahl von 601. Die Maximalkonzentration am Punkt der Beurteilung wird aufgrund der hohen Wasserlöslichkeit auf ≤ 100 g/l geschätzt.

Bewertungszahl für die Mobilität und Stoffcharakteristik SC_{MOB}:

Aus dem ermittelten Eingangswert (EW_{MOB}) von 19,8 aus Feld 2 und der modifizierten Mobilitätszahl (MMobZ) 6 aus Feld 4 errechnet sich die Bewertungszahl für die Mobilität BZ_{MOB}

$0 \leq BZ_{MOB} = -$ (Eingangswert MMobZ) $+ 100 \leq 100 = -$ (19,8 · 6) + 100

$BZ_{MOB} = 0$ und **$SC_{MOB} = 2{,}00$**.

Ethylenglykol liegt wegen seiner sehr hohen Wasserlöslichkeit und des mittleren Dampfdrucks vorwiegend im Wasser bzw. in der Luft vor. Der Übergang vom Boden in das Grundwasser erfolgt wegen der sehr geringen adsorptiven Eigenschaften und der hohen Wasserlöslichkeit sehr schnell. Die Substanz sinkt im Grundwasserkörper ab (vgl. auch biochemischer Abbau).

- **Aquatoxizität - SC_{AQU}**

Zur Wirkung auf aquatische Lebewesen liegen Untersuchungsergebnisse von Mikroorganismen (Prokarionten, Eukaryonten), Wasserpflanzen, Invertebraten (*Daphnia magna*, *Ceriodaphnia dubia* u.a.) und Fischen vor **(Conway, Waggy et al. 1983)** (vgl. Tabelle 11.6.25).

Tabelle 11.6.25 Zusammenfassende Darstellung der aquatoxikologischen Daten von Ethylenglykol

Spezies	Endpunkt	Effekt	Literatur
Crynebacterium dephteriae	Wachstumshemmung	NOEC = 55 g/l	(Bazzicalupo und Portella 1952)
Flagellat Entosiphon sulcatum	Zellvermehrungs-hemmtest	$LC_{50/96\ Std}$ = 35 g/l	(Bringmann 1978)
Glockentierchen	Zellvermehrungs-hemmtest	$LC_{50/96\ Std}$ = 31 g/l	(Bringmann und Kühn 1980)
Daphnia magna	akute Toxizität	$LC_{50/48\ Std}$ = 46,3 g/l	(Gersich, Blanchard et al. 1986)
Daphnia magna	akute Toxizität	$LC_{50/48\ Std}$ = 18 g/l	(Lebkowska 1978)
Elritze	akute Toxizität	$LC_{50/24\ Std}$ > 10,0 g/l	(Conway, Waggy et al. 1983)
Goldorfe	akute Toxizität	$LC_{50/24\ Std}$ > 5,0 g/l	(Bridié, Wolf et al. 1979)
Pimephales promelas	Wachstumshemmung	NOEC = 3,3 g/l	(Pillard 1995)

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.26):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Informationen waren zu 7 von 12 toxikologisch relevanten Teilbereichen erhältlich.

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 30 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe III).

Tabelle 11.6.26 Bewertungsraster SC_{AQU} von Ethylenglykol

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{AQU})

	Wichtungspunkte
1 Akute Fischtoxizität:	
- LC_{50}	5 (x)
- LC_5	1 ( )
- LC_{100}	1 ( )
- LC_{100}	1 ( )
2 (semi-)chronische Fischoxizität:	
- LOEC	8 ( )
- NOEC	10 (x)
3 Strukturanalyse (SAB):	4 ( )
4 Sonstige Ergebnisse:	
- Kleinkrebse	4 (x)
- Bakterien	5 (x)
- Protozoen	1 (x)
- Algen	2 (x)
- Bioakkumulationsfaktor	3 (x)

Gruppeneinstufung

I	0 - 5 Punkt
II	6 - 20 Punkte
III	21 - 45 Punkte

Summe: 30 **Gruppe:** III

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{AQU})

	L_0-Werte	Spezies	(Quelle)
akute Toxizität:			
- LC_{50}			( )
- LC_5			( )
- LC_{10}			( )
- LC_{100}			( )
(semi-)chronische Toxizität:			
- LOEC			( )
- NOEC	3,3 g/l	Fisch	(Pillard 1955)

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller NOEC : 3.300 (mg/l) neg.^{e}ln · 1,9 + 16 = 0,6 ..... (a)

b) niedrigster abgeschätzter Wert : ..... (mg/l) neg.^{e}ln · 1,9 + 16 = ... (b)

c) SF = 10 zur Abschätzung NOEC aus LOEC ^{10}log = ... (c)

d) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Spezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt ^{10}log = ... (d)

e) SF = 10 zur Abschätzung LOEC aus LC_{50} ^{10}log = ... (e)

f) SF = 10 für das Fehlen standard. Bedingungen ^{10}log = ... (f)

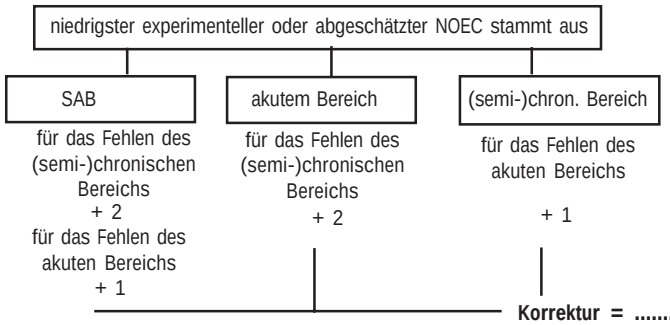
g) SF = 3 Umrechnung aus SAB in NOEC ^{10}log = ... (g)

Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = 0,6

Feld 3: Berechnung der Dosiszahl (DZ_{AQU})

Übertrag Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = 0,6

3.1 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis
(korrigierte Dosiszahl wird mit * gekennzeichnet)



3.2 Beurteilung der Substanz im Feld 2 EW_{AQU}:

3.2.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = 0,6

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = ...

3.2.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g)+Korrektur* = Dosiszahl = ...

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g)+Korrektur* = Dosiszahl = ...

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
	Quelle	Quelle	Quelle
4.1 Kleinkrebse (EC_{50})			
- Daphnie pulex	(x)	( )	( )
4.2 Bakterien (Test, Spezies:)			
- Spezies:	(x)	( )	( )
4.3 Protozoen (Test:)			
- Ciliaten, Amöben, Glockentierchen	(x)	( )	( )
4.4 Algen (Hemmungstest IC_{50})			
- planktische Grünalgen	(x)	( )	( )
- Blaualgen	(x)	( )	( )
4.5 Bioakkumulationsfaktor (c_{Fisch} / c_{H2O})	( )	( )	(x)

Summe = Aquatoxizitätszahl (AquZ) = 5 | 0 | 1

modifizierte Aquatoxizitätszahl (**MAquZ**) = 5
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Beurteilungsprofil:	**VK:**	**EW:**	**DZ:**	**AquZ:**	**BZ_{AQU}:**	**SC_{AQU}:**
Fischtoxizität	30	0,6	0,6	501	3	1,03

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-Wirkungs-Beziehung

Der Bewertung wird der NOEC von 3.300 mg/l aus der Fisch-Tox-Studie mit *Pimephales promelas* und dem Endpunkt Wachstumshemmung zugrunde gelegt **(Pillard 1995)**. Die Regressionsgerade wird an diesen hohen Konzentrationsbereich angepasst (vgl. Tabelle 11.6.26). Ethylenglykol erhält den Eingangswert (EW_{AQU}) 0,6.

Feld 3: Berechnung der Dosiszahl

Wegen der guten Datenlage sind keine Korrekturfaktoren erforderlich. Die Dosiszahl (DZ_{AQU}) ist mit dem Eingangswert (EW_{AQU}) identisch.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Die meisten der sonstigen aquatoxikologischen Endpunkte sind bei positivem Ergebnis ausreichend getestet bzw. als nicht ausreichend getestet bewertet. Es ergibt sich eine Aquatox-Zahl (AquZ) von 501 und eine modifizierte Aquatox-Zahl (MAquZ) von 5.

Aquatoxikologische Bewertungszahl und Stoffcharakteristik SC_{AQU}:

Aus der ermittelten Dosiszahl (DZ_{AQU}) von 0,6 aus Feld 3 und der modifizierten Aquatox-Zahl MAquZ aus Feld 4 errechnet sich die Bewertungszahl für die Aquatoxizität BZ_{AQU}

$0 \leq BZ_{AQU}$ = (Dosiszahl · mod. Aquatox-Zahl) = 0,6 · 5 $\leqslant$ 100

BZ_{AQU} = 3 und **SC_{TOX} = 1,03**.

Ethylenglykol wird als „kaum toxisch" für Fische und andere Wasserorganismen in die Aquatox-Gruppe V eingestuft.

- **Toxizität - SC_{TOX}**

Die klinischen Symptome von Ethylenglykolvergiftungen im Tierversuch und beim Menschen lassen sich in vier Stadien unterteilen: Im Stadium 1 steht die zentralnervöse Depression im Vordergrund, die häufig durch Erregungszustände eingeleitet wird. Bei sehr hoher Dosis kann es bereits in diesem Frühstadium zum Koma bzw. Tod kommen. Im Stadium 2 treten hauptsächlich Wirkungen auf Herz und Lunge auf, die schließlich zum Tod durch Atemlähmung führen können. Das Stadium 3 ist, besonders nach wiederholter Aufnahme, durch metabolische Azidose und Nierenschädigung gekennzeichnet, die zur Urämie führen kann. Im Stadium 4 treten degenerative Schädigungen des ZNS auf. Die Toxizität beruht in allen Stadien hauptsächlich auf der Wirkung der Stoffwechselprodukte. Die Aldehyd-Zwischenstufen werden für die cytotoxischen Wirkungen verantwortlich gemacht. Das Auftreten cerebraler Symptome trifft zeitlich mit dem größten Anfall an Glykolaldehyd im Metabolismus zusammen. Dieser Metabolit scheint auch für die cardiopulmonären Symptome verantwortlich zu sein **(Balazs, Jackson et al. 1982)**. Die Akkumulation der bei der Metabolisierung entstehenden Glykolsäure ist maßgeblich verantwortlich für die sich entwickelnde Azidose. Diese und die Präzipitation von Calciumoxalat in der Niere sind ausschlaggebend für das Kreislaufversagen und die Nierenschädigung **(Richardson 1973; Jacobson und McMartin 1986)**.

Studien an Labortieren zeigen, das Ethylenglykol nach oraler Aufnahme sehr schnell resorbiert wird **(Gessner, Parke et al. 1960)**. In einem Zeitraum von zwei bzw. drei Tagen nach der Applikation schieden Kaninchen nach Dosierungen von 0,1 - 2,0 g radioaktiv markiertem Ethylenglykol /kg bis zu 60% der Radioaktivität als CO_2 über die Atemluft und 20 bis 30% über den Urin aus. In höheren Dosierungen (>2 g/kg) wurde nahezu die Hälfte der Radioaktivität über den Urin als nicht metabolisiertes Ethylenglykol ausgeschieden **(vgl. BUA 1991)**.

Zur akuten Toxizität liegen verschiedene Studien vor. Morphologisch werden eine Zerstörung der Tubulusepithelien, interstitielles Ödem und hämorrhagische Nekrosen in der Nierenrinde beschrieben **(Winek, Shingleton et al. 1979; Grauer, Thrall et al. 1984)**. Die orale LD_{50} schwankt je nach Labortier und Applikationsform in der Literatur erheblich, z.B. für Ratten zwischen 10,02 mg/kg **(Koleva 1976)** und 8540 mg/kg **(Smyth, Seaton et al. 1941)**.

Ethylenglykol führt beim Menschen zum gleichen pathologischen Bild, wie in den oben für verschiedene Tierarten beschrieben Stadien: Wirkungen auf ZNS, Herz-Lunge, Nierenversagen, degenerative ZNS-Erscheinungen. Die kleinste letale Dosis wird auf 100 ml/Person (70 kg) geschätzt **(Gaultier, Conso et al. 1976)**. In einer Studie wird davon berichtet, dass Arbeiter über 20 Jahre lang bei der Herstellung von Ethylenglykol Raumluftkonzentrationen von 0,1 bis 5,0 mg/m^3 ausgesetzt waren, ohne dass Vergiftungserscheinungen beobachtet wurden **(Filatova, Smirnova et al. 1982)**. Über einen Zeitraum von einem Monat und 20 bis 22 Stunden pro Tag wurden 20 männliche Freiwillige einer mittleren täglichen Ethylenglykol-konzentration zwischen 3 und 67 mg/m^3 ausgesetzt. Punktuelle Belastungen von 140 mg/m^3 und 200 mg/m^3 waren wegen starker Reizungen der Atemwege nur über 1 - 2 Minuten zu ertragen. Ein NOAEL konnte wegen der starken Schwankungen der Exposition nicht festgelegt werden **(Wills, Cluston et al. 1974)**.

Im oralen subchronischen und chronischen Bereich zeigten sich im Tierversuch hauptsächlich folgende Endpunkte: Anstieg des Calciumgehaltes im Urin verbunden mit einer Calciumoxalatausfällung in der Niere, Abnahme des Körpergewichts, Abnahme von Organgewichten, Erniedrigung des Hämoglobingehaltes, des Hämatokrit, sowie der Zahl der Erythro- und Leukozyten bei weiblichen Tieren. Bei männlichen Tieren war die Zahl der Leukozyten dagegen signifikant erhöht. Hier zeigten sich auch dosisabhängig histopathologische Veränderungen in Form von Nierenläsionen als tubuläre Dilatation, Degeneration und Nekrose sowie akute Entzündungserscheinungen und intratubläre Ablagerungen von Eiweiß und Calciumoxalatkristallen, erhöhte Mortalitätsraten und erhöhter Futter- und Wasserverbrauch (vgl. **(Blood, Elliott et al. 1962; David und Uerlings 1964; Blood 1965; Gaunt, Hardy et al. 1974; Melnick 1984; DePass, Garman et al. 1986; Robinson, Pond et al. 1990).** Hinsichtlich der Nierentoxizität reagierten die männlichen Tiere allgemein empfindlicher als die weiblichen **(Robinson, Pond et al. 1990)**. Untersuchungen an Rhesusaffen über 3 Jahre (2 männliche Tiere mit 0,2% = 96 mg/kg/d und 1 weibliches Tier mit 0,5% = 240 mg/kg/d Ethylenglykol im Futter) zeigten röntgenologisch keinen Hinweis auf Calcifikation und Läsionen der Nieren **(Blood, Elliott et al. 1962)**.

Zur oralen Reproduktionstoxizität von Ethylenglykol wurden mehrere Studien **(Maronpot, Zelenak et al. 1983; Schuler, Hardin et al. 1984; Price, Kimmel et al. 1985; Yin, Liu et al. 1986; Price, George et al. 1988; Tyl, Price et al. 1993)** mit den zusammengefassten evaluierten Endpunkten für Maternaltoxizität: Dauer der Gestationsperiode, Gewichte von Leber und gravider Uteri, Nierengewichte, und hinsichtlich der Embryotoxizität: Fötusgewicht, Anzahl und Anteil missgebildeter lebender bzw. Föten, Skelettveränderungen u.a. durchgeführt. Dabei wurden bei Ratten und Mäusen signifikante maternale und teratogene, aber auch teratogene ohne maternale Effekte beobachtet. Zur Wirkung auf die Fertilität wurden Mehrgenerationsstudien durchgeführt **(Nagano, Nakayama et al. 1984; Lamb, Maronpot et al. 1985; DePass, Woodside et al. 1986)**. Dabei zeigten sich fetotoxische und teratogene Wirkungen ab einer Dosis von > 1.600 mg/kg/d in Form von anatomischen Veränderungen bei den Schädel- und Achsenskeletten, Lippenspalten in der Nachkommenschaft der F_1-Generation sowie ein statistisch signifikanter Rückgang der Anzahl der Würfe/fertilem Paar, der Durchschnittszahl an lebenden Jungen/Wurf und des Mittelwertes des Lebendgewichtes der Jungen bei der Nachkommenschaft der F_0-Generation. Die niedrigere Dosis ohne sign. Wirkung lag bei 800 mg/kg/d.

Die wesentlichen Ergebnisse werden in der folgenden Bewertung zitiert (vgl. Tabelle 11.6.27).

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Informationen sind zu 7 von 8 toxikologisch relevanten Teilbereichen erhältlich.

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 10 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe III).

Feld 2: Angaben zur Dosis-Wirkungs-Beziehung

In die Bewertung geht die chronische Studie von **DePass et al. 1986** ein. In ihr wurden Gruppen von 130 m und 130 w Ratten sowie 80 m und 80 w CD-1 Mäusen täglich über 2 Jahre lang ethylenglykolhaltiges Futter verabreicht, so dass die Aufnahme 0, 40, 200 bzw. 1000 mg/kg/d betrug. Die Endpunkte waren Mortalitätsraten, Körper- und Organgewichte sowie Histopathologie, bei den Ratten darüber hinaus Futter- und Wasserverbrauch, klinische Chemie, Hämatologie und Urinanalyse. Der NOAEL für Ratten lag bei 40 mg/kg/d[63] (und für Mäuse bei nur eingeschränkter Untersuchung bei 1000 mg/kg/d). Dieser NOAEL liegt unterhalb demjenigen für reproduktionstoxische Effekte (ca. 200-250 mg/kg/d). Die Bewertung führt auf einen Eingangswert von 1,39; er ist mit der Dosiszahl identisch.

Feld 3: Karzinogenität

In der Literatur gibt es keine Daten, die auf einen Zusammenhang zwischen Ethylenglykol-Exposition und der Entstehung oder Verstärkung von Krebs beim Menschen hinweisen. Es liegen mehrere Untersuchungen (2 subkutane und 3 Fütterungsstudien) an Ratten bzw. Mäusen auf kanzerogene Wirkungen vor **(Blood 1965; Mason, Cate et al. 1971; DePass, Garman et al. 1986; Dunkelberg 1987; NTP 1993)**. Weder bei Ratten noch bei Mäusen wurden Hinweise für ein karzinogenes Potential von Ethylenglykol gefunden. Vereinzelt aufgetretene Tumore waren nicht auf die Behandlung mit Ethylenglykol zurückzuführen. Ethylenglykol wird daher in die Gruppe C „nicht karzinogen bei adäquater Testung" eingestuft.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Toxikokinetisch (siehe auch oben) entstehende kritische Metabolite sind Glykolaldehyd und Glykolsäure. Durch Hemmung der Enzyme Alkoholdehydrogenase und Aldehydoxidase lässt sich die toxische Wirkung von Ethylenglykol verhindern. Zur Veränderungen des Blutbildes s.o. Daten zu immuntoxikologischen Wirkungen liegen nicht vor. Ethylenglykol führte bei der höchsten Dosierung bei männlichen Mäusen im Knochenmark zu einer Verminderung der ^{59}Fe-Inkorporation, die als Parameter der Erythropoese in Milz und Knochenmark benutzt wird **(Hong, Canipe et al. 1988)**.

Gentoxische Effekte wurden *in vitro* und *in vivo* untersucht. S. typhimurium Tests zeigen ohne und mit S9 Aktivierung in Konzentrationen von 0 bis 10.000 µg/Platte keine mutagene Aktivität. Ebenso konnte im SOS-Chromotest keine DNA-schädigende Wirkung nachgewiesen werden. In Tests auf Induktion von Schwester-Chromatiden-Austausch und Chromosomen-aberrationen an Chinesischen Hamstern war Ethylenglykol weder mit noch ohne metabolische Aktivierung mutagen **(Clark, Marshall et al. 1979; Pfeiffer und Dunkelberg 1980; Ballantyne 1985; Slesinski, Guzzie et al. 1986; Dunkelberg 1987)**. Punktmutationen wurden in Maus-Lymphomazellen beobachtet **(Brown, Bruch et al. 1980)**, die Versuchsbedingungen werden allerdings als „äußerst fragwürdig" **(BUA 1991)** eingestuft. *In vivo* Tests verliefen überwiegend negativ. Im Test an *Drosophila melanogaster* traten rezessiv letale Mutationen auf, jedoch keine chromosomale Aberrationen. Im Versuchsansatz mit Mäusen zeigte sich im Mikrokerntest nach oraler und intraperitonealer Applikation ab Dosen von 3,125 ml/kg Ethylenglykol ein Anstieg der Zahl von Mikrokernen. Ein vermehrtes Auftreten von Chromosomenanomalien wurde nicht beobachtet **(Conan, Foucault et al. 1979)**.

[63] abweichend von den Autoren, die in ihrer Studie einen NOAEL von 200 mg/kg/d ableiten **(IRIS 2002)**.

Tabelle 11.6.27 Bewertungsraster SC_{TOX} von Ethylenglykol

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{TOX})

	Wichtungspunkte	
subchronische Toxizität:	1	(x)
chronische Toxizität:	3	(x)
Reproduktionstoxizität:	2	(x)
subchronische Immuntoxizität:	1	(x)
chronische Immuntoxizität:	2	( )
Toxikokinetik:	1	(x)
Biochemie:	1	(x)
Mutagenität:	1	(x)

Gruppeneinstufung

I	1 - 3 Punkte
II	4 - 8 Punkte
III	9 - 12 Punkte

Summe: 10 **Gruppe:** III

Feld 3: Karzinogenität (canc)

(Kennzeichnung für nichtorale Studien: i = inhalativ, d = dermal)

canc A = eindeutig humankarzinogen ($RZ = BZ_{TOX} = 100$)
canc B_1 = eindeutig karzinogen im Tierversuch als Initiator oder Anfangsverdacht aus Humandaten bei wahrscheinlicher Initiatorwirkung ($RZ = BZ_{TOx} = 100$)
canc B_2 = Initiatorwirkung im Tierversuch zweifelhaft, aber begründeter Anfangsverdacht aus Tier- oder Strukturdaten (RZ = 33)
canc B_3 = oral wie Gruppe C; andere Pfade aber wie $B_2/B_1/A$ (RZ = 22)
canc C = nicht karzinogen bei adäquater Testung
canc D = nicht adäquat getestet, aber kein Verdacht aus Strukturdaten (RZ = 11)

Einstufung der Karzinogenität der Substanz: Gruppe C **=> RZ** 0

Feld 2: Angaben zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{TOX})

	NOAEL / LOAEL	(Quelle)
subchronische Toxizität:		( )
chronische Toxizität:	40 mg/kg&d	(DePass 1986)
Reproduktionstoxizität:		( )
subchronische Immuntoxizität:		( )
chronische Immuntoxizität:		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller NOAEL 0,04 (g/kg/d) neg.^{10}log = 1,39 (a)
b) niedrigster abgeschätzter NOAEL : ..... (g/kg/d) neg.^{10}log = ... (b)
c) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Laborspezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt ^{10}log = ... (c)
d) SF = 10 für voraussichtlich starke Kumulation der Substanz im Säuger (Halbwertszeit der Elimination > 1 a) ^{10}log = ... (d)

Eingangswert: 2.1.1 (a+c+d) oder 2.1.2 (b+c+d) = 1,39

2.2 Dosiszahl DZ_{TOX} Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis (korrigierte Dosiszahl wird mit * gekennzeichnet)

niedrigster experimenteller oder abgeschätzter NOAEL stammt aus

subchron. Bereich	chronischer Bereich	Reprotox. Bereich
für das Fehlen des chronischen Bereichs + 2	für das Fehlen des subchron. Bereichs + 1	für das Fehlen des chron. Bereichs + 2
für das Fehlen des Reprotox. Bereichs + 1	für das Fehlen des Reprotox. Bereichs + 1	für das Fehlen des subchron. Bereichs + 1

Korrektur = ...

2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2 DWB:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) = Dosiszahl = 1,39
oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) = Dosiszahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = ...
oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = ...

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
Toxikokinetik:	Quelle	Quelle	Quelle
Kumulationstendenz in Säugern (>=24 h)	( )	( )	(x)
Reaktive Metabolite	(x)	( )	( )
Plazentagängigkeit	(x)	( )	( )
Biochemie:			
Blutbild, Serum, Immunzellenstatus: Veränderungen	(x)	( )	( )
Enzym, Hormon, Transmitter: Veränderungen	(x)	( )	( )
Metallhomöostase: Veränderungen	(x)	( )	( )
Mutagenität:			
DNA-Schäden	( )	( )	(x)
Punktmutationen	( )	(x)	( )
Chromosomenmutationen	( )	( )	(x)

Summe = Toxizitätszahl (ToxZ) = 513

modifizierte Toxizitätszahl (**MToxZ**) = 5,5
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Feld 5: Humantoxikologie (HTox)

a) Erfahrungen am Menschen (Freitext):

b) vorhandene Werte:

Beurteilungsprofil:	VK_{TOX}:	EW_{TOX}:	canc:	ToxZ:	BZ_{TOX}:	SC_{TOX}:
oral	III	1,39	C	513	7,65	1,23

Das Ergebnis von Feld 4 der sonstigen toxikologischen Prüfungen ist die Toxizitätszahl 513 und die modifizierte Toxizitätszahl von 5,5.

Toxikologische Bewertungszahl und toxikologische Stoffcharakteristik SC_{TOX}:

$0 \leq BZ_{TOX}$ = Dosiszahl · modifizierte Toxizitätszahl = 1,39 · 5,5 ≤ 100

BZ_{TOX} = 7,65 und **SC_{TOX} = 1,23**

Die Substanz erhält aufgrund der vorliegenden Daten die toxikologische Bewertungszahl 7,65. Der Wert der toxikologischen Substanzcharakteristik SC_{TOX} ist 1,23.

Ethylenglykol erwies sich als schwach toxisch und nicht karzinogen bei adäquater Testung.

- **Biochemischer Abbau - SC_{BIO}**

Ethylenglykol ist unter aeroben und anaeroben Bedingungen biochemisch leicht abbaubar. Sowohl im aquatischen Bereich, als auch in Böden mit ausreichender Feuchte ist von einer Elimination durch biochemischen Abbau auszugehen. Aus diesem Grund und wegen seiner geringen Adsorptionsfähigkeit an Böden, ist eine Geoakkumulation nicht zu erwarten.

Zum biochemischen Abbau von Ethylenglykol gibt es umfangreiche Untersuchungen. Eine Zusammenfassung bietet die *Hazard Substances Data Base* (HSDB). Der aerobe Abbau erfolgt in <1-4 Tagen vollständig, der theoretische Sauerstoffbedarf wird allerdings auch innerhalb mehrerer Wochen nicht zu 100% erreicht **(HSDB 2003b)**. In Oberflächenwasser erfolgt der vollständige Abbau bei 20 °C bereits nach 3 Tagen **(Evans und David 1974)**. Bei einer Konzentration von 100 mg/l werden 83-96% des theoretischen Sauerstoffbedarfs innerhalb von 14 Tagen durch Belebtschlamm als Inoculum erreicht **(CITI 1992)**. Im BSB_{20} *screening*-Test wurde Ethylenglykol zu 51, 80, 85 und 97% innerhalb von 5, 10, 15 und 20 Tagen biooxidiert **(Waggy G. T. et al. 1994)**. Ethylenglykol wird bei einer Anfangskonzentration von 111 mg/l im Grundwasser zu 7, 48, 78 und 100% innerhalb von 2, 3, 4 und 6 Tagen abgebaut **(McGahey und Bouwer 1992)**.

Unter anaeroben Bedingungen wird Ethylenglykol in einer Konzentration von 30 mg/l und angereichert mit Glukose innerhalb von 7 Tagen vollständig abgebaut **(HSDB 2003b)**.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.28):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 54 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe III).

Feld 2: Angaben zum Abbauverhalten

Bewertet werden die Ergebnisse der Studie von **(McGahey und Bouwer 1992)**. Sie zeigen 97%igen Abbau in Grundwasser innerhalb 20 Tagen. Es errechnet sich ein Eingangswert von 1,3. Es liegen ausreichend Daten vor, so dass keine Korrekturfaktoren notwendig sind. Die Abbauzahl ist damit gleich hoch wie der Eingangswert.

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation

Ein hydrolytischer Abbau unter Umweltbedingungen ist unwahrscheinlich. Ethylenglykol, welches sich in der Dampfphase befindet, wird durch Reaktion mit Hydroxylradikalen in der Atmosphäre photochemisch abgebaut (Halbwertszeit ca. 50 Stunden, **HSDB 2003b**). Es erfolgt eine Einstufung in die Gruppe mod B_2 (mit AZ = -5).

Tabelle 11.6.28 Bewertungsraster SC_{BIO} von Ethylenglykol

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{BIO})

Bio-Bereiche	Wichtungspunkte (WP) Serie / Wert	mehrere Serien / Werte
1 Aerober Abbau		
1.1 Standardisierte Prüfmethode:		
1.1.1 Testung nach Adaption (z.B. Warburg)	30 ( )	40 ( )
1.1.2 Testung inkl. Adaption (z.B. *screening*)	25 ( )	35 (x)
1.2 Andere Laborprüfungen		
1.2.1 Labor BB	25 ( )	35 ( )
1.2.2 Batch-Test	8 ( )	12 ( )
1.2.3 Standardverdünnungsverfahren (z.B. BSB_5)	6 ( )	8 ( )
1.3 Industrielle bzw. kommunale biologische Reinigungsanlage		
1.3.1 dominanter Inhaltsstoff	20 ( )	25 ( )
1.3.2 nicht dominanter Inhaltsstoff	12 ( )	15 ( )
1.4 Feldversuche		
1.4.1 Oberflächenwasser	10 ( )	15 ( )
1.4.2 Grundwasser	8 ( )	12 ( )
1.4.3 Brakwasser	6 ( )	10 ( )
1.4.4 Boden	6 ( )	10 ( )
1.5 Strukturanalyse (SAB)		
1.5.1 Basis homologie Reihe	25 ( )	
1.5.2 Basis Strukturformel	20 ( )	
2 Anaeber Abbau		
2.1 Labor-/Feldversuche	4 (x)	
3 Chemischer Abbau		
3.1 Fotolyse	3 (x)	
3.2 Hydrolyse	2 ( )	
3.3 TOC, DOC, CSB-Cr	1 ( )	
3.4 CSB-Mn	0 ( )	
4 Wasserlöslichkeit		
4.1 standard. Methode	4 (x)	
4.2 berechnet	2 ( )	
5 Inhibitärwirkung		
5.1 experimentell	4 (x)	
5.2 Strukturanalyse	2 ( )	
6 Bioakkumulation		
6.1 experimentell	4 (x)	
6.2 berechnet	2 ( )	

Summe: 54

I	0 - 8 Punkte	nicht bewertbar
II	9 - 25 Punkte	vorläufig bewertbar
III	26 - 60 Punkte	bewertbar

Gruppe: III

Feld 2a: Angaben zum Abbauverhalten (EW_{BIO})

	(%)	(Quelle)
Standardisierte Prüfmethode:	97	(Bridge 1979)
		( )
Praktische Prüfmethode:		( )
		( )
Strukturanalyse (SAB):		( )
		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller Abbau : 97 % (neg./10 + 11)1,5 = 1,95 (a)
b) niedrigster abgeschätzter Abbau : ..... % (neg./10 + 11)1,5 = ... (b)
c) SF = 10; bei Anwendnung von SAB ^{10}log = ... (c)
d) SF = 10; bei sehr langsamem biochemischem Umsatz ^{10}log = ... (d)

Übertrag 2a = 1,95

Feld 2b: Angaben zum Abbauverhalten (AZ)

Übertrag aus 2a = 1,95

2.2 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis
(korrigierte Dosiszahl wird mit * gekennzeichnet)

niedrigster experimenteller oder abgeschätzter Abbauwert stammt aus

standard. Prüfmeth.	praktische Prüfmeth.	SAB
für das Fehlen mehrerer Serien + 1	für das Fehlen der standard. PM + 2 für das Fehlen mehrerer Serien + 1	für das Fehlen der standard. und praktischen PM + 3 für das Fehlen mehrerer Serien + 1

Korrektur* = ...

2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2 AV:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Bio-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) = Abbauzahl = 1,95

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) = Abbauzahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) + 2.2 Korrektur * = Abbauzahl = ...

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) + 2.2 Korrektur * = Abbauzahl = ...

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation (mod)

mod C = keine Hydrolyse und keine Photolyse bei adäquater Testung (AA = 0)
mod D = nicht adäquat getestet, aber keine Hydrolyse oder Photolyse aufgrund von Strukturdaten (AA=0)
mod B_2 = strukturelle Voraussetzungen für Hydrolyse oder Photolyse (AA =-5)
mod B_1 = langsame Hydrolyse oder Photolyse (AA = -10)
mod A = rasche Hydrolyse oder Photolyse experimentell gesichert (AA = -20)

Einstufung phys./chem. Modifikation: **Gruppe** B2 **=> AZ =** -5

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
4.1 aerober Abbau:	Quelle	Quelle	Quelle
- Inhibitorwirkung < 10 mg/l	( )	( )	(x)
< 1 mg/l	( )	( )	(x)
- $t_{1/2}$ (Feldversuch) > 1 Jahr	( )	( )	(x)
> 10 Jahre	( )	( )	(x)
- Adaptionszeit > 25 Tage	( )	( )	(x)
4.2 anaerober Abbau:			
- toxikol. relevante stabile Metabolite	( )	( )	(x)
4.3 sonstige Parameter:			
- Wasserlöslichkeit < 10 mg/l	( )	( )	(x)
< 1 mg/l	( )	( )	(x)
- Bioakkumulation	( )	( )	(x)

Summe = Biozahl (BioZ) = 0 | 0 | 9

modifizierte Biozahl (**MBioZ**) = 0
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

DL_{BIO}:	EW_{BIO}:	AZ:	mod:	BioZ:	BZ_{BIO}	SC_{BIO}
III	1,56	1,95	B_2	009	0	1,0

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Die sich beim Abbau bildenden Metabolite sind nicht stabil, sondern werden biochemisch innerhalb von Tagen abgebaut. In höheren Konzentration findet eine Wachstumshemmung durch Inhibitorwirkung statt. Bei Prüfung der Wirkung von Glykol auf Bakterien aus einer kommunalen Kläranlage im Gärröhrchentest lag die Schädlichkeitsgrenze bei 5 g/l. Nach 16 Std. Inkubation von Mikroorganismen eines Belebtschlamms bei 22 °C wurde ein EC50-Wert von >10g/l festgestellt **(Conway, Waggy et al. 1983)**.

Biochemische Bewertungszahl und SC_{BIO}:

$0 \leqslant BZ_{BIO}$ = Abbauzahl $\cdot$ mod. Biozahl + mod = 1,95 $\cdot 0 - 5 \leqslant 100$

$BZ_{BIO} = 0$ und **$SC_{BIO} = 1,0$**

Ethylenglykol wird aufgrund der vorliegenden Daten in SC_{BIO} = 1,0 (BIO-Gruppe A „leicht abbaubar“) eingestuft. Die Dissimilation ist vollständig. Die Abbaurate ist weitestgehend konzentrationsunabhängig.

- **Umwelttoxikologische Relevanz - SC_{TOR}**

Ethylenglykol erwies sich als biochemisch in kurzer Zeit vollständig abbaubar sowie als schwach toxisch und nicht karzinogen bei adäquater Testung. Die umwelttoxikologische Relevanz von Ethylenglykol ist niedrig und hat einen Wert von

$SC_{TOR} = 2,23$ bei $6 \geq SC_{TOR} = SC_{TOX} + SC_{BIO} \geq 2$

Das Schadstoffrisiko ist „sehr gering“; eine Kontrollerfordernis ist „kaum gegeben“.

- **Röntgenkontrastmittel (RKM) Iopromid [73334-07-3]**

Pharmazeutische Substanzen sind Umweltkontaminanten, die insbesondere dort, wo relativ kleine geschlossene Wasserkreisläufe für die Trinkwasserversorgung genutzt werden, bereits zu Mikroverunreinigungen des Trinkwassers führen. So tragen jodhaltige Röntgenkontrastmittel (RKM) aus Krankenhausabwässern erwiesenermaßen zum AOX-Gehalt kommunaler Abwasser bei **(Steger-Hartmann, Lange et al. 1999)**.

Diese Substanzen werden seit Jahrzehnten in der Röntgendiagnostik zur Erhöhung des Kontrastes, z.B. in der Angiographie, Urographie und der Choleographie sowie in der Computertomographie eingesetzt. Verwendung finden u.a. Iothalamat, Diatrizoat, Iopamidol, Iohexol, Iopromid, Iotrolan. Ziel ihrer Anwendung ist eine Erhöhung der Dichteunterschiede zwischen dem darzustellenden Organ und dem umgebenden Gewebe.

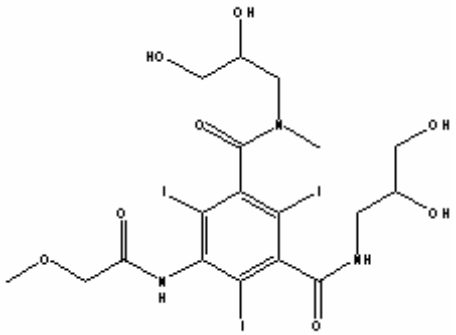
Die Entwicklung der Angiographie-Kontrastmittel erfolgte in den Zwanziger-Jahren parallel zu der Entwicklung der Angiographie-Technik. Als Ausgangssubstanz diente das relativ unverträgliche Natriumjodid. Die weitere Entwicklung verlief über jodierte Pyridinverbindungen zu den weniger toxischen und besser kontrastgebenden Derivaten der Trijodbenzoesäure, von der auch die neuen nicht-ionischen Kontrastmittel abgeleitet wurden **(Hofmeister 1989)**.

Iodierte RKM, wie Iopromid werden in Dosen bis ca. 200 g pro Person angewendet. Die Ausscheidungsrate über den Urin liegt bei 80% am ersten Tag nach der Anwendung **(Mützel, Langer et al. 1989)**.

Die meisten nichtionischen RKM bestehen aus Derivaten der Amino-3-Iod-Isophthalsäure**.** Als Modellsubstanz für diese Gruppe wird Iopromid gewählt.

Bei Iopromid handelt es sich um ein nicht-ionisches monomeres Kontrastmittel, das 3 verschiedene Substituenten an dem trijodierten Benzolring besitzt.

Tabelle 11.6.29 Identität und Stoffkonstanten von Iopromid

Strukturformel:	
Andere Bezeichnungen:	Iopromide
Stoffgruppe:	RKM
CAS-Nr.	73334-07-3
Summenformel	$C_{18}H_{24}I_3N_3O_8$
Stoffbeschreibung	nicht-ionisches Röntgenkontrastmittel
Molekulargewicht [g/Mol]	791.1164

- **Herkunftsbereich und Gruppencharakteristik**

Iopromid gehört wie alle RKM als pharmazeutisches Produkt zu den Stoffen, die trotz bestimmungsgemäßer Anwendung in die Umwelt gelangen, und damit zur Gruppe A der Herkunftsbereiche (vgl. Tabelle 5.1). Iopromid wurde 1978 durch die Fa. Schering als Ultravist-300 entwickelt. In einem Milliliter enthält diese Präparat 0,623 g Iopromid in wässriger Lösung. Ultravist-300 wird in der Röntgen-Diagnostik, u.a. für die Angiographie und die Urographie, sowie in der Computertomographie eingesetzt. Jährlich werden ca. 130 Tonnen des Präparates in Deutschland verkauft **(Steger-Hartmann, Lange et al. 1999)**. Der in die Umwelt gelangte Anteil wird auf >90% geschätzt; eine flächenhafte Exposition ist möglich, da die Verbindung stabil ist.

- **Stoffliche Mobilität - SC_{MOB}**

Iopromid dissoziiert nicht in wässriger Lösung; die Jodatome sind stabil gebunden **(Hofmeister 1989)**. Es besitzt jedoch eine gute Wasserlöslichkeit von 770 g/l entsprechend 0,97 mol pro Liter gem. Angaben des Herstellers Schering AG **(Steger-Hartmann, Lange et al. 1999)**. Der Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient beträgt $4,7 \cdot 10^{-3}$ ($\log P_{ow}$ = -2,33). Dies charakterisiert Iopromid als sehr hydrophil. Auch in hoch konzentrierten wässrigen Lösungen besitzt Iopromid eine niedrige Osmolarität und Viskosität **(Hofmeister 1989)**. Die hohe Wasserlöslichkeit und die niedrige Lipophilität deuten auf eine sehr geringe Tendenz zur Adsorption, z.B. an Abwasserschlämmen, Sedimenten oder Böden. Der sehr niedrige Dampfdruck von weniger als 10^{-8} Pa zeigt eine unbedeutende Verdunstung an (vgl. Daten aus Tabelle 11.6.29 und Tabelle 11.6.30). Weitere physikalische Größen der Substanz in Lösung (als Ultravist-300) sind ein pH-Wert von 6,5 bis 8,0, eine Viskosität von 8,7 mPa s bei 20 °C, bei 37 °C von 4,6 mPa s, ein osmotischer Druck von 1,59 mPa bei 37 °C und eine Osmolarität von 0,61 Osm/kg bzw. 0,43 Osm/l Lösung bei 37 °C.

Tabelle 11.6.30 Relevante physiko-chemische Daten von Iopromid

Schmelzpunkt [°C]	-
Siedepunkt [°C]	-
Dichte [g/ml bei 20 °C]	1,33 (Berlex 2003)
Dampfdruck [Pa]	$2{,}11 \cdot 10^{-26}$ (SRC 2003)
Löslichkeit [g/l 20 °C H_2O]	0,023 (SRC 2003); 770 (Steger-Hartmann, Lange et al. 1999)
Verteilungskoeffizient log P_{OW}	-2,05 (SRC 2003)
Sorptionskoeffizient K_{OC}	1 (geschätzt aus log P_{OW})
Henry-Konstante [$Pa \cdot m^3/mol$]	$1{,}33 \cdot 10^{-26}$ (SRC 2003)

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.31):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Informationen sind zu 6 von 12 relevanten Teilbereichen erhältlich (vgl. Bewertungsraster SC_{MOB}). Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 10 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund dieser Datenlage vorläufig bewertbar (Gruppe II).

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit

Der Bewertung wird ein aus dem Log P_{OW} geschätzter K_{OC} 1 zugrunde gelegt. Hieraus wird wiederum der $Q_\infty \leq 2$ mg/g geschätzt. Die Wasserlöslichkeit wird mit 770 g/l angenommen. Über einen SF für die Schätzberechnungen ergibt sich ein Eingangswert von 18,37.

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Für die Berechnungen wurden starke Vereinfachungen angenommen: Berechnung des K_{OC} aus dem Log P_{OW}.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Iopromid besitzt, wie RKM allgemein, ein sehr geringes Bioakkumulationspotenzial. Es dissoziiert nicht in wässriger Lösung und wird im Untergrund nicht komplex gebunden. Die Volatilität spielt keine Rolle. Aufgrund seiner Dichte wird Iopromid im Grundwasser absinken. Die Konzentration am Punkt der Beurteilung (Eintritt in die gesättigte Bodenzone) wird mit ≤77 g/l als sehr hoch eingestuft. Aufgrund dieser Daten wird auch das potentiell kontaminierbare Grundwasservolumen als groß eingeschätzt.

Bewertungszahl für die Mobilität und Stoffcharakteristik SC_{MOB}:

Aus dem ermittelten Eingangswert EW_{MOB} 18,37 aus Feld 2 und der modifizierten Mobilitätszahl (MMobZ) 6 aus Feld 4 errechnet sich die Bewertungszahl für die Mobilität BZ_{MOB}

$0 \leq BZ_{MOB} = -$ (Eingangswert MMobZ) $+ 100 \leq 100 = -$ (18,37 · 6) + 100

$BZ_{MOB} = 0$ und **$SC_{MOB} = 2{,}0$**

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass Iopromid wegen seiner physiko-chemischen Daten, als Umweltkontaminant vorwiegend und sehr schnell im Umweltkompartiment Wasser wieder zu finden ist.

Tabelle 11.6.31 Bewertungsraster SC_{MOB} von Iopromid

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{MOB})

	Wichtungs-punkte	
standardisierte Laborprüfmethode	3	(x)
Feldversuch	1	( )
Adsorbierbarkeit an AK	3	( )
Adsorbierbarkeit an Ads.-Harzen	2	( )
Adsorbierbarkeit Boden	1	( )
Löslichkeit in Wasser	3	(x)
Verteilungskoeffizient log P_{OW}	1	(x)
Henry-Konstante	1	(x)
Dampfdruck	1	(x)
pk_a (für ionisierbare Substanzen)	1	( )
SorptionskoeffizientK_{oc}	1	( )
Dichte	1	(x)

Gruppeneinstufung

I	1 - 4 Punkte
II	5 - 13 Punkte
III	14 - 19 Punkte

Summe: 10 **Gruppe:** II

Feld 2: Eingangswert zur Wasserlöslichkeit und Adsorbierbarkeit (EW_{MOB})

		(Quelle)
a) Wasserlöslichkeit S (Lit_{max}-Wert mg/l]		
- .... °C		( )
- Umrechungsfaktor		
- 20 °C	770.000	(Steger-Hartmann 1999)
b) Adosrbierbarkeit:C_{ads} (Lit_{min}-Wert mg/g]		
- AK		( )
- Harz		( )
- Boden		( )
- Schätzung aus K_{OC} bzw. P_{OW}	>2	( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) höchster experiment. Lös.-Wert: 700.000 (mg/l)x 9/1000+1, max. 10) = 10 (a)
b) experiment.Ads.-Wert (-x+100): ..... (mg/g)x9/100+1, max. 10) = ... (b)
c) geschätzter Ads.-Wert (-x+100): >98 (mg/g)x9/100+1, max. 10) = 7,37 (c)
d) SF = 10 bei berechnetem Ads.-Wert: ^{10}log = 1 (d)
e) SF = 1-10 zur Überbrückung der Varianz Ads.-Materialien ^{10}log = ... (e)
f) SF = 10 zur Überbrückung der Varianz Labor / Feld ^{10}log = ... (f)

Eingangswert: 2.1.1 (a+b+d+e+f) oder 2.1.2 (a+c+d+e+f) = 18,37

Ergebnis (Freitext):

Feld 3: Stoffbeschreibung und Berechnungsgrundlagen

Charakterisierung:

Aggregatzustand unter Normalbedinungen: fest, farblose Kristalle
Molare Masse: 791.1164
Siedepunkt [°C]:
Schmelzpunkt [°C]:
Dichte [g/cm³]: 1,33
Viskosität [mPa · s]:
Oberflächenspannung:
Dampfdruck [Pa]: $2{,}11 \cdot 10^{-26}$
Dampfsättigungskonzentration [g/m³] bei 20 °C:
Log P_{OW}: -2.05
K_{OC}: 1 (geschätzter Wert)
pk_s (Dissoziationsgradkurve unter Annahme pH = 5)
Henry-Konstante [Pa m²/mol]: $1{,}33 \cdot 10^{-26}$
Remobilisierung von Metallionen durch Komplexbildung [log K_k]:
Sättigungskonzentration [g/m³]:
Biokonzentrationsfaktor (Fsiche):

Berechnungsgrundlagen:

Henry-Koeffizient: $H = C_g/C_w$ = (p [Pa] · M [g/mol]) / (S [mg/l] · 8314 · T [K]
Verteilungskoeffizient: log P_{ow} = -0,662 log $C_{s,w}$ [mol/l] + 0,710
Adsorptionskoeffizient: $K_{OC} = 100 \cdot C_{ads}/C_W$ (T) / (0,58 · % org. Materie)(o.m.) mit o.m. = o.c. / 0,58; $K_{OC} = 0{,}4\ P_{OW}$ => K= K_{OC} · % o.c. /100 und $C_{ads} = K \cdot C_W$

Vereinfachungen:

Abschätzung der Wasserlöslichkeit S aus P_{OW}: log S = 3,05 - 1,29 Log P_{OW}
BKF (Fische) = $C_{BIO} / C_w = k_1$ (Aufnahme) / k_2 (Abgabe) = 0,048 P_{OW}
Konz. am Punkt der Beurteilung: C_A =! 0,1 S_A
min. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\,(min)} = S / C \cdot V_S$ mit C = $C_{Sickerwasser}$
max. kontaminiertes GW-Volumen = $V_{kont.\,(max)} = S / C \cdot V_S$ mit C = LW
Volatilität: $t_{1/2}$ = ln 2 · $215{,}7^{1/2}$ [2710 * 28,3 / H]
Verzög.-F. (VF) und Lipophil.: Beispiel P_{OW} 200 => VF 2,2; P_{OW} 4000 => VF 7,9
floater / sinker: Dichte Substanz < / > Dichte Wasser

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	negativ oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis positiv
	Quelle	Quelle	Quelle
Biokonzentration (BKF):	(x)	( )	( )
Dissoziation:	(x)	( )	( )
Komplexbildung:	(x)	( )	( )
Volatilität:	(x)	( )	( )
floater / sinker:	( )	( )	(x)
Konz. am Punkt der Beurteilung	(x)	( )	( )
min/max. kontaminiertes GW-Volumen	(x)	( )	( )

Summe = Mobilitätszahl (MobZ) = 601

modifizierte Mobilitätszahl (MMobZ) = 6
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

VK_{MOB}:	EW_{MOB}:	MobZ:	BZ_{MOB}:	SC_{MOB}
II	18,37	601	0	2,00

- **Aquatoxizität - SC_{AQU}**

Es liegen Ergebnisse zur akuten Fischtoxizität an 2 Spezies sowie sonstige ökotoxikologische Prüfungen an Kleinkrebsen und Bakterien vor **(Steger-Hartmann, Lange et al. 1999)** (vgl. Tabelle 11.6.32).

Tabelle 11.6.32 Zusammenfassende Darstellung der aquatoxikologischen Daten von Iopromid

Spezies	Endpunkt	Effekt
Vibrio fisheri	Leuchbakterienhemmtest	$EC_{50/30\ min.}$ > 10,0 g/l
Pseudomonas putica	Wachstumshemmung	$EC_{10/16\ Std.}$ > 10,0 g/l
Scendedesmus subspicatus	Wachstumshemmung	$EC_{50/72\ Std.}$ > 10,0 g/l
Daphnia magna	Bewegungshemmung	$EC_{50/24\ Std.}$ > 10,0 g/l
Daphnia magna	Reproduktion Chronische Toxizität	$EC_{50/22\ Tage}$ > 10,0 g/l NOEC ≥ 1,0 g/l
Danio rerio	Mortalität	$LC_{50/96\ Std}$ > 10,0 g/l
Leuciscus idus	Mortalität	$LC_{50/48\ Std}$ > 10,0 g/l

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.33):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Die bewertbaren aquatoxikologischen Basisdaten sind in der Tabelle 11.6.33 zusammengefasst. Informationen sind zu 4 von 12 toxikologisch relevanten Teilbereichen erhältlich.

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 17 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund dieser Datenlage vorläufig bewertbar (Gruppe II).

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-Wirkungs-Beziehung

Der Bewertung wird der NOEC von 1,0 g/l aus dem Langzeit-OECD-Test mit *Daphnia magna* mit dem Endpunkt chronische Reproduktionstoxizität zugrunde gelegt (zitiert in **Steger-Hartmann, Lange et al. 1999**), da chronische Daten zur Fischtoxizität nicht vorliegen. Dieser Wert entspricht jedoch einem abgeschätzten NOEC aus der LD_{50} von 10 g/kg für Fische. Aus den Versuchsergebnissen zur Aquatoxizität von Iopromid wird ein Eingangswert (EW_{AQU}) von 1,88 errechnet.

Feld 3: Berechnung der Dosiszahl

Da keine chronischen Daten zur Fischtoxizität vorliegen wird ein Korrekturfaktur +2 erforderlich. Die Dosiszahl (DZ_{AQU}) liegt damit bei 3,88*.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

4 von 6 sonstige aquatoxikologische Endpunkte sind mit positivem Ergebnis ausreichend getestet bzw. als negatives Testergebnis bewertet. Es ergibt sich eine Aquatox-Zahl (AquZ) von 402. Die modifizierte Aquatox-Zahl (MAquZ) lautet 4.

Aquatoxikologische Bewertungszahl und Stoffcharakteristik SC_{AQU}:

Aus der ermittelten Dosiszahl DZ_{AQU} 3,88* aus Feld 3 und der modifizierten Aquatox-Zahl MAquZ 4 aus Feld 4 errechnet sich die Bewertungszahl für die Aquatoxizität BZ_{AQU}

$0 \leq BZ_{AQU}$ = (Dosiszahl · mod. Aquatox-Zahl) = 3,88* · 4 ≤ 100

BZ_{AQU} = 15,52* und **SC_{AQU-X} = 1,16**

Tabelle 11.6.33 Bewertungsraster SC_{AQU} von Iopromid

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{AQU})

	Wichtungspunkte
1 Akute Fischtoxizität:	
- LC_{50}	5 (x)
- LC_5	1 ( )
- LC_{100}	1 ( )
- LC_{100}	1 ( )
2 (semi-)chronische Fischoxizität:	
- LOEC	8 ( )
- NOEC	10 ( )
3 Strukturanalyse (SAB):	4 ( )
4 Sonstige Ergebnisse:	
- Kleinkrebse	4 (x)
- Bakterien	5 (x)
- Protozoen	1 ( )
- Algen	2 ( )
- Bioakkumulationsfaktor	3 (x)

Gruppeneinstufung

I	0 - 5 Punkt
II	6 - 20 Punkte
III	21 - 45 Punkte

Summe: 17 **Gruppe:** II

Feld 2: Eingangswert zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{AQU})

	L_0-Werte	Spezies	(Quelle)
akute Toxizität:			
- LC_{50}	>10 g/l	*Danio rerio* 96 h	(Steger-Hartmann 1999)
- LC_5	>10 g/l	*Leuciscus idus* 96 h	( )
- LC_{10}			( )
- LC_{100}			( )
(semi-)chronische Toxizität:			
- LOEC			( )
- NOEC	>1.0 g/l	*Daphnia m.*	(OECD 1984)

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller NOEC : 1000 mg/l	neg.^{e}ln · 1,9 +14 =	0,88 (a)
b) niedrigster abgeschätzter Wert : .... (mg/l)	neg.^{e}ln · 1,9 +14 =	..... (b)
c) SF = 10 zur Abschätzung NOEC aus LOEC	^{10}log =	..... (c)
d) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Spezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt	^{10}log =	1 (d)
e) SF = 10 zur Abschätzung LOEC aus LC_{50}	^{10}log =	..... (e)
f) SF = 10 für das Fehlen standard. Bedingungen	^{10}log =	..... (f)
g) SF = 3 Umrechnung aus SAB in NOEC	^{10}log =	..... (g)

Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = 1,88

Feld 3: Berechnung der Dosiszahl (DZ_{AQU})

Übertrag Eingangswert:
2.1.1 (a+c+d+e+f+g) oder 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = 1,88

3.1 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis
(korrigierte Dosiszahl wird mit * gekennzeichnet)

niedrigster experimenteller oder abgeschätzter NOEC stammt aus

SAB	akutem Bereich	(semi-)chron. Bereich
für das Fehlen des (semi-)chronischen Bereichs + 2	für das Fehlen des (semi-)chronischen Bereichs + 2	für das Fehlen des akuten Bereichs + 1
für das Fehlen des akuten Bereichs + 1		

Korrektur = +2

3.2 Beurteilung der Substanz im Feld 2 EW_{AQU}:

3.2.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = 3,88*

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) = Dosiszahl = ...

3.2.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d+e+f+g) + Korrektur* = Dosiszahl = ...

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d+e+f+g) + Korrektur* = Dosiszahl = ...

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
	Quelle	Quelle	Quelle
4.1 Kleinkrebse (EC_{50})			
- Daphnia magna	( )	( )	(x)
4.2 Bakterien (Test, Spezies:)			
- Spezies:	( )	( )	(x)
4.3 Protozoen (Test:)			
- Ciliaten, Amöben, Glockentierchen	(x)	( )	( )
4.4 Algen (Hemmungstest IC_{50})			
- planktische Grünalgen	(x)	( )	( )
- Blaualgen	(x)	( )	( )
4.5 Bioakkumulationsfaktor (c_{Fisch} / c_{H2O})	(x)	( )	( )

Summe = Aqatoxizitätszahl (AquZ) = 4 | 0 | 2

modifizierte Aquatoxizitätszahl (**MAquZ**) = 4
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Beurteilungsprofil:	VK_{AQU}:	EW_{AQU}:	DZ_{AQU}:	AquZ:	BZ_{AQU}:	SC_{AQU-X}:
(Daphnia m.)	II	1,88	3,88*	402	15,52*	1,16

Iopromid wird vorläufig als „schwach toxisch“ für Wasserorganismen in die Aquatox-Gruppe IV eingestuft.

- **Toxizität - SC_{TOX}**

Die Toxizität der RKM wird nicht durch Bindung an spezifische Rezeptoren, sondern vor allem unspezifisch durch Erzeugung osmotischer Druckunterschiede von Viskositätsunterschieden und durch Unterschiede der ionischen Ladung und Lipophilie der injizierten Lösung im Vergleich zum Blut verursacht **(Turnheim 1986** zitiert in **Hofmeister 1989)**.

Die ionischen RKM sind Jodsalze, die aus zwei osmotisch wirksamen Teilchen pro kontrastgebendem Jodatom bestehen. Um einen ausreichend kontrastgebenden Effekt zu erzielen, müssen hohe Jodkonzentrationen erreicht werden. Es ergibt sich ein hoher Osmolaritätsunterschied zwischen injizierter Lösung und der extrazellulären Flüssigkeit. Die ionischen Kontrastmittel (1.580-1790 mosm/l) sind im Vergleich zum Blutplasma 5-8 mal so hyperton. Dies führt vor allem zu folgenden Wirkungen **(Turnheim 1986)** zitiert in **(Hofmeister 1989)**:

- Verdünnung des RKM durch Zunahme des Plasmavolumens um 10-20%, bedingt durch die hohe intravasale Osmolarität[64] des ionischen RKM **(Fischer 1968; Huet, Wirquin et al. 1982** zitiert in **Hofmeister 1989)**
- die Erythrozyten schrumpfen, wodurch ihre Verformbarkeit vermindert wird. Dies führt zur Erschwerung des kapillaren Blutstroms mit erhöhtem pulmonarem Blutdruck **(Aspelin, Teitel et al. 1980)**
- Schädigung des Gefäßendothels mit Aktivierung des Kallikreinsystems, des Komplementsystems, des Gerinnungssystems und der Fibrinolyse. Hierbei wird Histamin und vor allem das potentere Bradykinin freigesetzt mit der Folge einer Vasodilatation, eines Blutdruckabfalls und der Ödembildung **(Cogen, Norman et al. 1979; Hofmeister 1989)**
- Die Nierentubuli können geschädigt werden. Es kann eine Proteinurie auftreten **(Hofmeister 1989)**
- Erhöhte Inzidenz für Herzrhythmusstörungen **(Wolf, Kraft et al. 1978; Dawson 1984)**
- Durch obige Effekte können Schmerz, Hitzegefühl und Schock auftreten

Diese Wirkungen können in abgemilderter Form auch bei Verwendung nicht-ionischer RKM auftreten, da auch sie leicht hypertone Lösungen sind[65]. Pro osmotisch wirksamem Molekül liegen hier jedoch drei kontrastgebende Jodatome vor. Auch die osmotische Diurese ist bei nicht-ionischen RKM deutlich schwächer ausgeprägt als bei ionischen RKM. Deshalb ist bei ihnen auch die Jodkonzentration im Blut erhöht. Beide Stoffgruppen verursachen Proteinurie **(Krakenes, Eslayed et al. 1980; Almen 1982; Speck, Muetzel et al. 1983)**. Außerdem entsteht durch die geringere Osmolarität der nicht-ionischen Kontrastmittel eine wesentlich geringere intravasale Kontrastmittelverdünnung und dadurch ein höherer Röntgenkontrast. Die Verformung der Erythrozyten ist weniger ausgeprägt, weshalb die rheologischen Fließeigenschaften weniger beeinträchtigt sind **(Mützel und Speck 1983)**. Weiterhin kommt es

[64] Die Summe der molaren Konzentrationen der in einer Flüssigkeit gelösten Teilchen, bezogen auf das Volumen des Lösungsmittels, nennt man Osmolarität (mmol/l) und, bezogen auf dessen Gewicht, Osmolarität (mmol/kg oder osmol/kg). Meistens beziehen sich die Konzentrationsangaben auf 1 kg Wasser = osmol/kg H_2O)

[65] z.B. hat Iopromid bei 37 °C eine Osmolarität von 430 mosm/l im Gegensatz zu einer Blutplasmaosmolarität von 290 mosm/l. Durch die Abweichung der Osmolarität erfolgt nach einer intravasalen Applikation ein Einstrom physiologischer Gewebsflüssigkeit in das Gefäßsystem (Osmotoxizität).

zu einer ca. 5 mal geringeren Vasodilatation und einem viel geringeren Blutdruckabfall als mit den ionischen Kontrastmitteln und damit auch zu geringeren Schmerzen **(Grainger 1980; Almen 1982; Speck, Muetzel et al. 1983; Dawson 1984; Grainger 1984)**. Dies zeigt sich auch beim Vergleich der Letaldosen ionischer und nicht-ionischer RKM: So ist die LD_{50} nach intravenöser Verabreichung ionischer Kontrastmittel an Mäusen und Ratten mindestens doppelt so hoch wie bei Verabreichung nicht-ionischer RKM **(Tirone und Boldrini 1981; Almen 1982; Speck und Mützel 1982; Mützel und Speck 1983)**.

Die toxikologischen Verträglichkeit des nichtionischen monomeren Röntgenkontrastmittels Iopromid wurde an Ratten, Kaninchen, Meerschweinchen und Hunden untersucht. Der Umfang der Studien schloss die akute Verträglichkeit, die systemische Toxizität nach wiederholter Verabreichung, die Reproduktionstoxikologie, Studien zur Genotoxizität, das kontrastsensibilisierende Potential und die lokale Verträglichkeit mit ein.

Bei der Betrachtung nicht-ionischer RKM zeigt sich, dass die Toleranz um so besser ist, je wasserlöslicher und niedermolekularer ein RKM ist **(Knoefel und Huang 1956)**. Deswegen ist Iopromid relativ gut bzw. besser verträglich als z.B. Metrizamid **(Mützel und Speck 1983)**. Aus Tierversuchen liegen Daten zur akuten und subakuten Toxizität vor. Im akuten Bereich liegen die LD_{50}-Werte (intravenös, iv) von Iopromid auf vergleichbarem Niveau wie Iohexol, Iopamidol, Iopentol und Ioversol: Maus (iv) > 18,5 g Jod/kg KG/d; Ratte (iv) 14,5 bis > 15,8 g Jod/kg KG/d; Hund (iv) > 10 g Jod/kg KG/d (entspricht ca. 31 bis 40 g Substanz)[66] **(Krause, Schobel et al. 1994)**.

In verschiedenen Studien wurde über die nierenschädigende Wirkung von RKM berichtet. Wasserlösliche RKM werden zu über 90% durch die Nieren ausgeschieden. Die Niere stellt somit den Ort der größten Kontrastmittelwirkung dar. Grundsätzlich kommen drei Wege, die zu einer Nierenschädigung führen, in Frage:

- renale Durchblutungsstörungen mit der Folge hypoxischer Nierenschädigungen **(Golman und Holtas 1980)**;
- glomeruläre Schädigung: RKM erhöhen die glomeruläre Permeabilität und führen zu einer kurzzeitigen Proteinurie (s.o.). Je nach Ausmaß der Proteinurie kann es zur Störung des Harnflusses bis hin zur Anurie kommen **(Roth 1990)**;
- tubuläre Schädigung: Sowohl ionische als auch die nicht-ionischen Kontrastmittel können tubuläre Schädigungen induzieren **(Roth 1990)**.

Die Untersuchungen von **Roth 1990** an Ratten zeigen nach einmaliger intravenöser Dosierung von 5.0 bis 12.5 g Iod/kg an nicht vorgeschädigten Ratten für die nicht-ionischen RKM Iosimid und Iopamidol keine morphologischen Veränderungen auf, jedoch konnte 18 Stunden nach Applikation eine geringfügige Erhöhung der Ausscheidung von N-Acetyl-ß-D-Glukosamidase-(NAG) im Harn bei 12,5 g Iod/kg KG bei den behandelten Tieren nachgewiesen werden. Pathomorphologische Befunde traten bei Iohexol-behandelten Tieren 48 Stunden nach Applikation in Form einer dosisabhängigen „Osmotischen Nephrose“ auf, die mit einer entsprechenden Steigerung der NAG-Ausscheidung im Harn bereits 18 Stunden nach Behandlung einherging. Nach weiteren 24 Stunden lagen die NAG-Werte wieder im

[66] Die LD_{50} von Iopromid ist bei Mäusen bei intravenöser Applikation niedriger, als die LD_{50} von Metrizamid. Bei Ratten ist die LD_{50} beinahe identisch mit der LD_{50} von Metrizamid und Iopamidol (Mützel und Speck 1983b).

Normalbereich, wogegen die „osmotische Nephrose[67]“ noch 7 Tage nach Behandlung mit der höchsten Dosierung (12,5 g Iod/ kg) nachgewiesen werden konnte. Bei Iopromid-behandelten Tieren trat dosisabhängig eine akute nekrotisierende Nephrose der proximalen Tubulusepithelialzellen ab 10,0 g Iod/kg auf, die mit einer massiven Beeinflussung aller klinisch-chemischen Parameter 18 Stunden nach Verabreichung einherging. Die Aktivitäten der cytosolischen Laktat-Dehydrogenase, der im Bürstensaum lokalisierten alkalischen Phosphatase bzw. Gamma-Glutamyl-Transpeptidase und der lysosomalen NAG waren im Urin signifikant erhöht. Ein Anstieg der Serum-Harnstoff-Stickstoff- und Serum-Kreatinin-Werte war erst ab einer Dosis von 12,5 g Iod/kg zu verzeichnen. Nach weiteren 24 Stunden hatten sich die Werte der klinisch-chemischen Parameter wieder dem Normalbereich angenähert. Die akute nekrotisierende Nephrose nach einmaliger Iopromid-Gabe war also reversibel. Diese Ergebnisse zeigten, dass Ratten sehr unempfindlich auf nichtinonische RKM reagierten **(Roth 1990)**.

Nach verschiedenen Studien von **Ansell, Tweedie et al. 1980; Shehadi und Toniolo 1980 und Lasser 1987** zeigten Allergiker, vor allem wenn sie Asthmatiker sind, eine bis zu 5 mal höhere Neigung zu RKM-Nebenwirkungen (erhöhte Freisetzung von Histamin, Bradykinin und anderen Anaphylaktoide). Bisher konnte jedoch keine sensibilisierende Wirkung nachgewiesen werden. Die Inzidenz von abnormen Reaktionen war auch bei Patienten, die Injektionen von identischen Kontrastmitteln in der Vorgeschichte erhalten hatten, nicht höher als bei Patienten, die noch nie Kontrastmittel bekommen hatten **(Hofmeister 1989)**. Zudem reagieren nur 16% der Patienten, die schon einmal eine RKM-Nebenwirkung gezeigt haben, mit einer wiederholten abnormen Reaktion **(Shehadi 1975)**. Da Jod fast nicht freigesetzt wird, spielt auch die Jod-Allergie bei den RKM kaum eine Rolle **(Lasser 1968)**. Iopromid hatte kein kontaktsensibilisierendes Potenzial in Mehrschweinchen **(Krause, Schobel et al. 1994)**.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.34):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Informationen sind zu 5 von 12 toxikologisch relevanten Teilbereichen erhältlich.

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 6 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe II).

Feld 2: Angaben zur Dosis-Wirkungs-Beziehung

In den gängigen Literaturdatenbanken gibt es relativ wenig Fundstellen zur toxischen Wirkung von RKM[68]. In der vorliegenden Literatur wird kein spezifischer toxischer Schwellenwert beim Menschen oder im Tierversuch als LOAEL oder NOAEL beschrieben. Schädliche Effekte sind allerdings bei therapeutischen Dosen aufgetreten.

In Studien an Ratten und Hunden zur systemischen Toleranz von Iopromid mit intravenösen Applikationen von täglich 0,37; 1,11 und 3,7 g Iod/kg über 4 Wochen konnte auch im Hochdosisbereich kein eindeutiger organtoxischer Schaden gezeigt werden. Bei Ratten konnte (prädominant bei weiblichen Tieren) eine geringfügige hämatologische Veränderung bereits im Niedrigdosisbereich festgestellt werden (Verminderung der Eosinophilenzahl bei 0,37; Verminderung der Erythrozyten, nukleotierte Knochenmarkzellen bei 1,11 und 3,7; Verminderung der Knochenmark-Lymphozyten nach 3,7 g Iod/kg). Diese Verminderungen lagen allerdings im Bereich der Referenzwerte und zeigten keine Dosisabhängigkeit. Weiterhin

[67] Der Begriff „osmotische Nephrose“ entstand in den fünfziger Jahren, als man in tierexperimentellen Untersuchungen hyperosmolare Zuckerlösungen intravenös an Versuchstiere verabreichte und im histologischen Bild eine Vakuolisierung überwiegend in den proximalen Tubulusepithelien nachweisen konnte (Allen 1951). Der Entstehungsmechanismus der sog. osmotischen Nephrose bei ionischen und nicht-ionischen RKM ist bis heute noch ungeklärt (Hofmeister 1989).

[68] TOXLINE spezial: 16 Fundstellen zu Iopromid (Stand 12/2002)

war eine Zunahme von Cholesterin, des Relativ- und Absolutgewichts der Nieren sowie Vakuolisation von Hepatocyten nach der hohen Dosis von 3,7 g Iod/kg/d zu verzeichnen. Bei Hunden gab es einige Fälle von Erbrechen, von vermehrtem Trinkwasserkonsum und einer Zunahme des spezifischen Gewichts des Urins ab 1,1 g Iod/kg/d sowie Vakuolisation der proximalen tubulären Epithelialzellen der Niere ab 3,7 g Iod/kg KG („osmotische Nephrose") **(Krause, Schobel et al. 1994)**.

Iopromid wurde in Fertilitätsstudien mit Ratten in Dosen von 0,37; 1,11 und 3,7 g Iod/kg KG/d getestet. Dabei wurde kein substanzbezogener Effekt bei der niedrigen oder bei der mittleren Dosis beobachtet. Keine Dosis zeigte einen Hinweis auf Fruchtbarkeitsbeeinträchtigung. Bei 3,7 g Jod/kg/d wurde eine leichte Unterdrückung der Körpergewichtszunahme bei männlichen Tieren (tägliche Dosis über 12 Wochen) beobachtet. Diese zusätzliche beobachtete verringerte Zunahme des Fötusgewichts bei der hohen Dosis ist ungewöhnlich. Embryotoxische Studien mit Iopromid in gleichen Dosisbereichen wurden an Ratten und Kaninchen durchgeführt. Maternale Toxizität wurde in beiden Spezies nur bei der hohen Dosis durch Reduktion des KG angezeigt. Eine leicht verspätete Ossifikation der Schädelknochen in allen Dosisbereichen wurde als eine Substanz bezogene Wirkung gewertet. In der Rattenstudie wurden weder teratogene noch embryolethale Effekte beobachtet. Eine Serie von Embryotoxizitätsstudien wurde unter gleichen Versuchsbedingungen an Kaninchen durchgeführt, um die teilweise zweideutigen Befunde von Anfangsstudien zu klären. Obwohl nicht einheitlich in allen Studien, wurde maternale Toxizität und/oder Sterblichkeit bei der hohen Dosis von 3,7 g Iod/kg/d beobachtet. Ein leicht gesteigertes Auftreten von Föten mit anormalen Gliederhaltungen wurde ab 1,11 g Iod/kg/d festgestellt. Außerdem waren eine leicht gestörte Ossifikation ab 1,11 g Iod/kg/d und verschiedene Anzeichen einer leichten Entwicklungsstörung im hohen Dosisbereich in einer dieser Studien offensichtlich. In einer anderen Studie wurde Embryoletalität und maternale Toxizität mit erhöhter Sterblichkeit bei der hohen Dosierung beobachtet **(Krause, Schobel et al. 1994)**.

Feld 3: Karzinogenität

Aus der Literatur liegen keine Daten bzw. Studien zu möglichen karzinogenen Wirkung von RKM beim Menschen bzw. im Tierversuch vor.

Iopromid induzierte keine gentoxischen bzw. mutagenen Effekte in *vitro*- (Ames-Test) bzw. *in vivo*-Tests mit somatischen Zellen (Mikronukleus-Test, Maus) und Keimzellen (Dominant-Letal-Test, Maus) **(Krause, Schobel et al. 1994)**. Zu anderen Ergebnissen kommt **Parvez 1987**, der zeigte, dass, unabhängig von ionischen und osmotischen Unterschieden, RKM fähig sind, Chromosomenschäden an menschlichen peripheralen Lymphozyten hervorzurufen **(Parvez, Kormano et al. 1987)**. Weitere Studien sind erforderlich, um die beobachteten cytogenetischen Effekte von RKM in Zellkulturen abzusichern.

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Die Toxikokinetik wurde an Ratten, Hunden und beim Menschen studiert, wobei die kinetischen Parameter mit denen anderer urographischen Kontrastmittel praktisch identisch sind. Iopromid passiert die Zellmembranen wegen seiner hohen Wasserlöslichkeit fast nicht. Deshalb tritt es auch kaum mit Proteinen und Membranen in Wechselwirkung. Bei oraler Gabe wird es fast nicht resorbiert, nach intravenöser Injektion verteilt es sich rasch vorwiegend im Extrazellularraum gefolgt von der Ausscheidung über die Nieren. Bei intravenöser Injektion von Dosen bis zu 500 mg Jod/kg KG ergibt sich beim Menschen für die Verteilungsphase eine Halbwertszeit $t_{1/2}$ von etwa 3 Minuten und für die Ausscheidung eine $t_{1/2}$ von etwa 2 Stunden **(Shehadi und Toniolo 1980; Fuchs 1987)**. Nach 24 Stunden sind 92 ± 6% renal ausgeschieden **(Mützel und Speck 1983)**. Dabei zeigt sich keine Dosisabhängigkeit bezüglich Halbwertszeit bzw. Eliminationsraten. Im Vergleich zu ionischen werden die nicht-ionischen RKM ca. doppelt so schnell ausgeschieden **(Bouma und Griffin 1978)**.

Tabelle 11.6.34 Bewertungsraster SC_{TOX} von Iopromid

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VK_{TOX})

	Wichtungspunkte	
subchronische Toxizität:	1 (X)	
chronische Toxizität:	3 ( )	
Reproduktionstoxizität:	2 (X)	
subchronische Immuntoxizität:	1 ( )	Gruppeneinstufung
chronische Immuntoxizität:	2 ( )	
Toxikokinetik:	1 (X)	I 1 - 3 Punkte
Biochemie:	1 (X)	II 4 - 8 Punkte
Mutagenität:	1 (X)	III 9 - 12 Punkte

Summe: 6 **Gruppe:** II

Feld 3: Karzinogenität (canc)

(Kennzeichnung für nichtorale Studien: i = inhalativ, d = dermal)

canc A = eindeutig humankarzinogen ($RZ = BZ_{TOX} = 100$)
canc B_1 = eindeutig karzinogen im Tierversuch als Initiator oder Anfangsverdacht aus Humandaten bei wahrscheinlicher Initiatorwirkung ($RZ = BZ_{TOX} = 100$)
canc B_2 = Initiatorwirkung im Tierversuch zweifelhaft, aber begründeter Anfangsverdacht aus Tier- oder Strukturdaten (RZ = 33)
canc B_3 = oral wie Gruppe C; andere Pfade aber wie B_2/B_1/A (RZ = 22)
canc C = nicht karzinogen bei adäquater Testung
canc D = nicht adäquat getestet, aber kein Verdacht aus Strukturdaten (RZ = 11)

Einstufung der Karzinogenität der Substanz: Gruppe D **=> RZ =** +11

Feld 2: Angaben zur Dosis-/Wirkungsbeziehung (EW_{TOX})

	NOAEL / LOAEL	(Quelle)
subchronische Toxizität:		( )
chronische Toxizität:		( )
Reproduktionstoxizität:	LOAEL 370 mg Iod/kg/d	(Krause 1994)
subchronische Immuntoxizität:		( )
chronische Immuntoxizität:		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (EW)

a) niedrigster experimenteller NOAEL : ..... (g/kg/d) neg.^{10}log = ... (a)
b) niedrigster abgeschätzter NOAEL : 0,037 (g/kg/d) neg.^{10}log = 1,43 (b)
c) SF = 10 für das Fehlen von Untersuchungen an einer zweiten Laborspezies in demjenigen Tox-Bereich, aus dem der niedrigere der beiden Werte a) oder b) stammt ^{10}log = ... (c)
d) SF = 10 für voraussichtlich starke Kumulation der Substanz im Säuger (Halbwertszeit der Elimination >1 a) ^{10}log = ... (d)

Eingangswert: 2.1.1 (a+c+d) oder 2.1.2 (b+c+d) = 1,43

2.2 Dosiszahl DZ_{TOX} (Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis)

niedrigster experimenteller oder abgeschätzter NOAEL stammt aus

subchron. Bereich	chronischer Bereich	Reprotox. Bereich
für das Fehlen des chronischen Bereichs + 2	für das Fehlen des subchron. Bereichs + 1	für das Fehlen des chron. Bereichs + 2
für das Fehlen des Reprotox. Bereichs + 1	für das Fehlen des Reprotox. Bereichs + 1	für das Fehlen des subchron. Bereichs + 1

Korrektur = +2

2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2 DWB:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Tox.-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) = Dosiszahl = ...

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) = Dosiszahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1.1 (a+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = 3,43*

oder Eingangswert 2.1.2 (b+c+d) + Korrektur * = Dosiszahl = ...

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
Toxikokinetik:	Quelle	Quelle	Quelle
Kumulationstendenz in Säugern (> = 24 h)	( )	( )	(X)
Reaktive Metabolite	( )	( )	(X)
Plazentagängigkeit	(X)	( )	( )
Biochemie:			
Blutbild, Serum, Immunzellenstatus: Veränderungen	(X)	( )	( )
Enzym, Hormon, Transmitter: Veränderungen	( )	( )	(X)
Metallhomöostase: Veränderungen	(X)	( )	( )
Mutagenität:			
DNA-Schäden	( )	( )	(X)
Punktmutationen	(X)	( )	( )
Chromosomenmutationen	(X)	( )	( )

Summe = Toxizitätszahl (ToxZ) = 5 0 4

modifizierte Toxizitätszahl (**MToxZ**) = 5
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

Feld 5: Humantoxikologie

a) Erfahrungen am Menschen (Freitext):

b) vorhandene Werte:

Beurteilungsprofil:	VK_{TOX}:	EW_{TOX}:	DZ_{TOX}:	canc:	ToxZ:	BZ_{TOX}:		SC_{TOX-X}:
oral	II	1,43	3,43*	D	504	28,15*		1,84

Eine Metabolisierung im Körper konnte nicht festgestellt werden; es wird auf eine ausschließlich glomeruläre Filtration ohne tubuläre Reabsorption geschlossen **(Hofmeister 1989)**.

Iopromid kann die Blut-Hirn-Schranke bei normaler Dosierung nicht überwinden und die Plazentaschranke nur in sehr geringem Ausmaß. Die Blut-Hirn-Schranke kann nur durch hohe Kontrastmitteldosen und nach Entzündung des Gehirns durchlässig werden, wodurch das Krampfrisiko steigt **(Berlex 2003).** Die neuronale Toleranz bei intrazisternaler oder intrazerebraler Verabreichung des Iopromids bei Ratten ist gleich oder besser als bei Metrizamid, aber schlechter als bei Iopamidol. Bei Verabreichung von Iopromid in die *Arteria carotis* wurden bei 50% der untersuchten Ratten, die mit einer Dosis von 3 g Jod/kg KG behandelt worden waren, nur Verhaltensstörungen, aber keine Krämpfe beobachtet **(Mützel und Speck 1983; Mützel und Speck 1983)**. Die restlichen 50% zeigten keine zerebralen Nebenwirkungen. Das Krampfpotential der nicht-ionischen RKM ist auch niedriger als das der ionischen RKM. Es können aber trotzdem Übelkeit, Kopfschmerzen und psychotische Reaktionen auftreten **(Drayer und Rosenbaum 1977; Hammer und W. 1980)**.

Toxikologische Bewertungszahl und toxikologische Stoffcharakteristik SC_{TOX}:

$0 \leq BZ_{TOX}$ = Dosiszahl · modifizierte Toxizitätszahl + RZ = 3,43* · 5 + 11 ≤ 100

BZ_{TOX} = 28,15* und **SC_{TOX-X} = 1,85**

Die Substanz erhält aufgrund der vorliegenden Daten und der Datenlücken die toxikologische Bewertungszahl 28,15*. Der Wert der toxikologischen Substanzcharakteristik SC_{TOX-X} ist 1,85.

Iopromid ist schwach toxisch, auf Karzinogenität nicht adäquat getestet, es besteht aber kein Verdacht aus Strukturdaten.

- **Biochemischer Abbau - SC_{BIO}**

- Aerober Abbau:

Der OECD-Test ergibt keinen signifikanten Abbau über 28 Testtage. Entsprechend der OECD-Leitlinie 301 wird Iopromid als „biologisch nicht leicht abbaubar" eingestuft **(Steger-Hartmann, Lange et al. 1999)**.

Die bewertbaren biochemischen Basisdaten sind in der Tabelle 11.6.35 zusammengefasst.

Bewertung (vgl. Tabelle 11.6.35):

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien

Hinsichtlich der Vollständigkeit der getesteten Kriterien werden 40 Wichtungspunkte erreicht. Die Substanz ist aufgrund der Datenlage bewertbar (Gruppe II).

Feld 2: Angaben zum Abbauverhalten

Bewertet werden die Daten des OECD-Tests von **(Steger-Hartmann, Lange et al. 1999)** zum biochemischen Abbau der Substanz im Vergleich zu Anilin (reproduzierbare Studie über 28 Tage). Es erfolgte kein biochemischer Abbau von Iopromid bei parallel vollständigem Abbau von Anilin.

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation

Aufgrund von Strukturdaten werden Hydrolyse und rasche Photolyse ausgeschlossen. Es erfolgt die Einstufung in die Gruppe mod D.

Tabelle 11.6.35 Bewertungsraster SC_{BIO} von Iopromid

Kommentar:

Feld 1: Vollständigkeit der getesteten Kriterien (VL_{BIO})

Bio-Bereiche	Wichtungspunkte (WP) Serie / Wert	mehrere Serien / Werte
1 Aerober Abbau		
1.1 Standardisierte Prüfmethode:		
1.1.1 Testung nach Adaption (z.B. Warburg)	30 ( )	40 ( )
1.1.2 Testung inkl. Adaption (z.B. *screening*)	25 (x)	35 ( )
1.2 Andere Laborprüfungen		
1.2.1 Labor BB	25 ( )	35 ( )
1.2.2 Batch-Test	8 ( )	12 ( )
1.2.3 Standardverdünnungsverfahren (z.B. BSB_5)	6 ( )	8 ( )
1.3 Industrielle bzw. kommunale biologische Reinigungsanlage		
1.3.1 dominanter Inhaltsstoff	20 ( )	25 ( )
1.3.2 nicht dominanter Inhaltsstoff	12 ( )	15 ( )
1.4 Feldversuche		
1.4.1 Oberflächenwasser	10 ( )	15 ( )
1.4.2 Grundwasser	8 ( )	12 ( )
1.4.3 Brakwasser	6 ( )	10 ( )
1.4.4 Boden	6 ( )	10 ( )
1.5 Strukturanalyse (SAB)		
1.5.1 Basis homologie Reihe	25 ( )	
1.5.2 Basis Strukturformel	20 ( )	
2 Anaeber Abbau		
2.1 Labor-/Feldversuche	4 ( )	
3 Chemischer Abbau		
3.1 Fotolyse	3 (x)	
3.2 Hydrolyse	2 ( )	
3.3 TOC, DOC, CSB-Cr	1 ( )	
3.4 CSB-Mn	0 ( )	
4 Wasserlöslichkeit		
4.1 standard. Methode	4 (x)	
4.2 berechnet	2 ( )	
5 Inhibitärwirkung		
5.1 experimentell	4 (x)	
5.2 Strukturanalyse	2 ( )	
6 Bioakkumulation		
6.1 experimentell	4 (x)	
6.2 berechnet	2 ( )	

Summe: 40

I	0 - 20 Punkte	nicht bewertbar
II	21 - 40 Punkte	vorläufig bewertbar
III	41 - 60 Punkte	bewertbar

Gruppe: II

Feld 2a: Eingangswert zum Abbauverhalten (EW_{BIO})

	(%)	(Quelle)
Standardisierte Prüfmethode:	0	(Bridge 1979)
		( )
Praktische Prüfmethode:		( )
		( )
Strukturanalyse (SAB):		( )
		( )

2.1 Ermittlung des Eingangswertes (SF = Sicherheitsfaktor)

a) niedrigster experimenteller Abbau : 0 % (neg./10 + 11)·1,5 = 16,5 (a)

b) niedrigster abgeschätzter Abbau : ..... % (neg./10 + 11)·1,5 = ... (b)

c) SF = 10; bei Anwendnung von SAB ^{10}log = ... (c)

d) SF = 10; bei sehr langsamem biochemischem Umsatz ^{10}log = 1 (d)

Übertrag 2a = 17,5

Feld 2b: Berechnung der Abbauzahl (AZ_{BIO})

Übertrag aus 2a = 17,5

2.2 Korrektur des Eingangswertes bei unvollständiger Datenbasis
(korrigierte Abbauzahl wird mit * gekennzeichnet)

niedrigster experimenteller oder abgeschätzter Abbauwert stammt aus

standard. Prüfmeth.	praktische Prüfmeth.	SAB
für das Fehlen mehrerer Serien + 1	für das Fehlen der standard. PM + 2	für das Fehlen der standard. und praktischen PM + 3
	für das Fehlen mehrerer Serien + 1	für das Fehlen mehrerer Serien + 1

Korrektur* = +1*

2.3 Beurteilung der Substanz im Feld 2:

2.3.1 Adäquate Daten sind für alle Bio-Bereiche verfügbar:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) = Abbauzahl = ...

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) = Abbauzahl = ...

2.3.2 Bei unvollständiger Datenbasis wurde wie aufgezeigt korrigiert:

Eingangswert 2.1 (a+c+d) + 2.2 Korrektur * = Abbauzahl = 18,5*

oder Eingangswert 2.1 (b+c+d) + 2.2 Korrektur * = Abbauzahl = ...

Feld 3: Physiko-chemische Modifikation (mod)

mod C = keine Hydrolyse und keine Photolyse bei adäquater Testung (AA = 0)

mod D = nicht adäquat getestet, aber keine Hydrolyse oder Photolyse aufgrund von Strukturdaten (AA=0)

mod B_2 = strukturelle Voraussetzungen für Hydrolyse oder Photolyse (AA =-5)

mod B_1 = langsame Hydrolyse oder Photolyse (AA = -10)

mod A = rasche Hydrolyse oder Photolyse experimentell gesichert (AA = -20)

Einstufung phys./chem. Modifikation: **Gruppe** D **=> AA =** .....

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

	positiv oder nicht ausreichend getestet	ausreichend getestet, aber Bewertung strittig	ausreichend getestet, Ergebnis negativ
4.1 aerober Abbau:	Quelle	Quelle	Quelle
- Inhibitorwirkung < 10 mg/l	(x)	( )	( )
< 1 mg/l	(x)	( )	( )
- $t_{1/2}$ (Feldversuch) > 1 Jahr	(x)	( )	( )
> 10 Jahre	(x)	( )	( )
- Adaptionszeit > 25 Tage	(x)	( )	( )
4.2 anaerober Abbau:			
- toxikol. relevante stabile Metabolite	( )	( )	(x)
4.3 sonstige Parameter:			
- Wasserlöslichkeit < 10 mg/l	( )	( )	(x)
< 1 mg/l	( )	( )	(x)
- Bioakkumulation	( )	( )	(x)

Summe = Biozahl (BioZ) = 5 | 0 | 4

modifizierte Biozahl (**MBioZ**) = 5
(Ziffer 1 + 0,5 · Ziffer 2)

VL_{BIO}:	EW_{BIO}:	AZ_{BIO}:	BioZ:	BZ_{BIO}	SC_{BIO-X}
III	17,5	18,5*	504	92,5*	1,93

Feld 4: Sonstige Ergebnisse

Aufgrund der sonstigen Ergebnisse, die eine Inhibitorwirkung bereits bei c < 10 mg/l und hohe Halbwertszeiten im Feldversuch, hohe Adaptionszeiten sowie eine hohe Wasserlöslichkeit anzeigen, wird eine Biozahl von 504 gebildet. Beim Abbau bilden sich keine stabilen toxikologisch relevanten Metabolite.

Biochemische Bewertungszahl und SC_{BIO}:

$0 \leqslant BZ_{BIO}$ = Abbauzahl · mod. Biozahl + mod = 18,5* · 5 $\leqslant 100$

BZ_{BIO} = 92,5* und **SC_{BIO-X} = 1,93**

Iopromid wird aufgrund der vorliegenden Daten in SC_{BIO} = 1,93 (BIO-Gruppe C „schwer abbaubar") eingestuft. Es findet nur ein geringer biochemischer Umsatz statt. Auch bei wesentlich verlängerten Reaktionszeiten erfolgt nur eine geringe Zunahme der Abbaurate.

- **Umwelttoxikologische Relevanz - SC_{TOR}**

Iopromid erweist sich als in der Umwelt biochemisch beständig und schwach toxisch. Das Schadstoffrisiko und eine entsprechende Kontrollerfordernis ist wegen der sehr schnellen Anreicherung der Substanz in der - insbesondere aquatischen - Umwelt gegeben.

SC_{TOR} = 3,77 bei $6 \geq SC_{TOR} = SC_{TOX} + SC_{BIO-Z} \geq 2$

Schadstoffrisiko bzw. Kontrollerfordernis sind „mittel" bzw. „wahrscheinlich".

11.6.2 Feststellung von Risiken bzw. Gefahren für die aquatische Umwelt

Berechnet werden die höchstzulässigen Konzentrationen (HZK) für natürliche Gewässer. Gewässer mit sensiblen Nutzungsbereichen, die z.B. der Fischzucht dienen und in denen überproportional Rogen bzw. Jungtiere vorhanden sind, sind mit dem zusätzlichen Extrapolationsfaktor EF_4 = 10 zu berücksichtigen.

- **Nitrofen**

Der Berechnung der höchstzulässigen Konzentration (HZK) von Nitrofen in Gewässern wird der LC_{50}-Wert 2,1 mg/l (Glanzfisch) mit dem Endpunkt Mortalität aus der Fisch-Tox-Studie von **Kramer 1986** zugrunde gelegt. Da keine vergleichbaren LC_{10}-Werte, NOEC-Werte oder EC-Werte vorliegen, wird cos α = 0,3 als Maximalwert eingesetzt. Mit LOEC ≈ 0,1 LC_{50} ergibt sich:

$$HZK = \frac{0{,}21 \cdot 0{,}3}{10 \cdot 1{,}88}\ [mg/l] = 0{,}0035\ mg/l.$$

Unter Zugrundelegung folgender Extrapolationsfaktoren (EF):

cos α = 0,3 Maximalwert bei unbekannter Steilheit der Dosis-Wirkungs-Geraden
EF_1 = 10 zur Schätzung der aquatoxikologisch (noch) sicheren NOEC aus der tiefsten, bereits unsicheren LOEC
EF_2 = 1,88 in Abhängigkeit vom biochemischen Abbau der Substanz (SC_{BIO})
EF_3 = 1 zur Bewertung der Qualität als sichere Testung
EF_4 = 1 für natürliche Gewässer

Die HZK von Nitrofen liegt ca. mit dem Faktor 6 oberhalb des gesundheitlichen Leitwertes (LW) für einen Erwachsen bei lebenslanger Exposition und ist damit humantoxikologisch unsicher. Die HZK liegt aber noch unterhalb des LW_{KE}. Das Sanierungsziel ist aus

humantoxikologischen Gründen entsprechend des LW für lebenslange Exposition anzusetzen (vgl. Kapitel 11.6.3).

- **Dodecylbenzolsulfonat**

Zur Berechnung der höchstzulässigen Konzentration von Dodecylbenzolsulfonat in Gewässern wird der NOEC = 1,0 mg/l der Studie von **Kimerle 1989** herangezogen.

$$HZK = \frac{1,0 \cdot 0,3}{1,0} \text{ [mg/l]} = 0,3 \text{ mg/l}$$

Dabei sind:

cos α = 0,3 Maximalwert bei unbekannter Steilheit der Dosis-Wirkungs-Geraden
EF_1 = 1,0 für das Vorliegen einer gemessenen NOEC
EF_2 = 1,0 in Abhängigkeit vom biochemischen Abbau der Substanz (SC_{BIO})
EF_3 = 1,0 zur Bewertung der Qualität als sichere Testung
EF_4 = 1 für natürliche Gewässer

Die HZK von DBS liegt ca. mit dem Faktor 3,5 unterhalb des berechneten gesundheitlichen LW für einen Erwachsenen bei lebenslanger Exposition (vgl. Kapitel 11.6.3) und ist damit auch humantoxikologisch sicher. Das Sanierungsziel ist aus aquatoxikologischen Gründen entsprechend der HZK anzusetzen.

- **Toxaphen**

Der Berechnung der HZK für Toxaphen wird der niedrigste in der Literatur gefundene LC_{50}-Wert von 0,0011 mg/l (Edelsteinkärpfling) mit dem Endpunkt Mortalität zugrunde gelegt. Außer LC_{50}-Werten liegen keine Daten wie EC, NOEC bzw. LOEC aus der Fisch-Toxizität vor. cos α wird daher vorläufig gleich dem Maximalwert von 0,3 gesetzt. Mit der Schätzung $LC_{50} \approx$ 0,1 LOAEC ergibt sich

$$HZK = \frac{0,00011 \cdot 0,3}{10 \cdot 2,0 \cdot 3} \text{ [mg/l]} = 5,5 \cdot 10^{-7} \text{ mg/l} = 0,00055 \text{ µg/l} = 0,55 \text{ ng/l}$$

Dabei sind:

cos α = 0,3 Maximalwert bei unbekannter Steilheit der Dosis-Wirkungs-Geraden
EF_1 = 10 zur Schätzung des aquatoxikologisch (noch) sicheren NOEC aus der tiefsten, bereits unsicheren LOEC
EF_2 = 2,00 in Abhängigkeit vom biochemischen Abbau der Substanz (SC_{BIO})
EF_3 = 3 bei nur einer Datenquelle
EF_4 = 1 für natürliche Gewässer

Die HZK für Toxaphen liegt mit einem Faktor von 55 unterhalb des in Kapitel 8.3.2 für den Menschen berechneten gesundheitlichen LW_c von 0,03 µg/l und ist darum auch humantoxikologisch und gegenüber einer karzinogenen Wirkung sicher.

- **Ethylenglykol**

Der Berechnung der HZK für Ethylenglykol wird die NOEC von 3,3 g/l aus der Fisch-Tox-Studie von **Pillard 1995** (Wachstumshemmung bei *Pimephales promelas*) zugrunde gelegt.

$$HZK = \frac{3.300 \cdot 0,3}{1} \text{ [mg/l]} = 1.100 \text{ mg/l}$$

Dabei sind:

cos α = 0,3 Maximalwert bei unbekannter Steilheit der Dosis-Wirkungs-Geraden
EF_1 = 1,0 für das Vorliegen einer gemessenen NOEC
EF_2 = 1,0 in Abhängigkeit vom biochemischen Abbau der Substanz (SC_{BIO})
EF_3 = 1,0 zur Bewertung der Qualität als sichere Testung
EF_4 = 1 für natürliche Gewässer

Die HZK für Ethylenglykol liegt ca. mit dem Faktor 780 oberhalb des in Kapitel 8.3.5 für den Menschen berechneten gesundheitlichen LW bei lebenslanger Exposition und ist damit auch humantoxikologisch sicher. Die HZK liegt zudem ca. 80-fach oberhalb der Leitwerte für kurzfristige Expositionen LW_{KE}. Das Sanierungsziel für Ethylenglykol wird sich daher am gesundheitlichen Leitwert orientieren.

- **Iopromid**

Da zu Iopromid keine Daten zur Fischtoxizität vorliegen, wird der Berechnung der HZK für Iopromid der NOEC von 1,0 g/l für *Daphnia magna* (sowie ein geschätzter LC_{50}-Wert von 10g/l für Fische) zugrunde gelegt.

$$HZK = \frac{1000 \cdot 0,3}{1,93 \cdot 3,0} \text{ [mg/l]} = 51,81 \text{ mg/l}$$

Dabei sind:

cos α = 0,3 Maximalwert bei unbekannter Steilheit der Dosis-Wirkungs-Geraden
EF_1 = 1,0 für das Vorliegen einer gemessenen NOEC
EF_2 = 1,93 in Abhängigkeit von der biochemischen Abbau der Substanz (SC_{BIO})
EF_3 = 3,0 dafür, dass keine Daten zur Fischtoxizität vorliegen, sondern nur eine Datenquelle für *Daphnia magna*
EF_4 = 1 für natürliche Gewässer

Die vorläufige HZK für Iopromid liegt ca. mit dem Faktor 125 oberhalb des in Kapitel 11.6.3 für den Menschen berechneten gesundheitlichen LW bei lebenslanger Exposition und ist damit auch humantoxikologisch sicher. Die HZK liegt zudem ca. 12-fach oberhalb der Leitwerte für kurzfristige Expositionen LW_{KE}. Das Sanierungsziel für Iopromid wird sich daher vorläufig am gesundheitlichen Leitwert orientieren.

11.6.3 Feststellung von Risiken bzw. Gefahren für den Menschen

- **Nitrofen**

Die WHO lehnt unter Bezugnahme auf die mangelhafte Qualität der zitierten Untersuchungen zur Kanzerogenität und Teratogenität die Ableitung einer duldbaren Körperdosis ab **(FAO/WHO 1983)**, obwohl in einer Langzeitstudie an Ratten ein NOEL von 10 ppm (ca. 0,5 mg/kg/d) gemessen wurde.

Zur Berechnung des gesundheitlichen Leitwertes für Nitrofen im Trinkwasser werden die Ergebnisse der oralen Entwicklungstoxizitätsstudie von **(Unger, Van Goethem et al. 1983)** sowie die Langzeitstudie zur Karzinogenität der **(NCI 1979)** herangezogen.

Bezug wird zudem auf die Berechnungen von **Burke Hurt, Smith et al. 1983** genommen, die

trotz aller Bedenken einen Versuch unternahmen, die neoplastischen Befunde[69] aus einer Karzinogenitätsstudie an Ratten (Pankreastumoren) in den Niedrigdosisbereich zu extrapolieren und daraus das Krebsrisiko für den Menschen zu quantifizieren. Im Vergleich zu den Lebertumoren bei Mäusen wurden die Adenokarzinome bei geringeren Dosierungen beobachtet.

Falls Nitrofen eine Wirkschwelle hat (was aufgrund der positiven Gentox-Ergebnisse nicht sicher ist), könnten die Ergebnisse der Studie von **Unger 1983** zur Ableitung eines TDI genutzt werden, um - auch unter Bezugnahme auf das US-amerikanische „*Safe Drinking Water Committee*" **(Thomas 1986)** - aus der niedrigsten Dosis mit noch schädlicher Wirkung (LOAEL 0,15 mg/kg/d mit Endpunkt Zwerchfellhernien) eine vorläufige gesundheitlich duldbare Köperdosis und daraus einen gesundheitlichen Leitwert für Trinkwasser abzuleiten.

Für die Ableitung eines entsprechenden TDI für den Menschen werden folgende Extrapolationsfaktoren (EF) angesetzt:

$EF_b = 10$ zur Abschätzung des $NOAEL_{TV}$ aus dem $LOAEL_{TV}$ von 0,15 mg/kg/d (**Unger 1982**),

$EF_c = 10$ zur Überbrückung der zwischenartlichen Varianz zwischen Mensch und Versuchstier,

$EF_d = 10$ zur Überbrückung der innerartlichen Varianz beim Menschen, da der LOAEL nicht an einer besonders empfindlichen Teilpopulation gemessen wurde.

Aus der Multiplikation dieser Extrapolationsfaktoren ergibt sich der Gesamtextrapolationsfaktor $EF_g = 1.000$.

$$TDI_{Nitrofen} = \frac{0{,}15\ mg}{kg \cdot d \cdot 1.000} = 1{,}5 \cdot 10^{-4}\ mg/kg/d.$$

Der gesundheitliche Leitwert LW liegt, unter der Annahme, dass Nitrofen eine Wirkschwelle hat, für einen Erwachsenen mit einem Körpergewicht von 70 kg, der lebenslang 2 Liter Trinkwasser pro Tag zu sich nimmt, bei

$$\mathbf{LW_{Nitrofen} = \frac{0{,}1 \cdot 0{,}15\ mg \cdot 70\ kg \cdot d}{kg \cdot d \cdot 1.000 \cdot 2\ l} = 5{,}25 \cdot 10^{-4}\ mg/l = 0{,}525\ \mu g/l}$$

Der gefahrverknüpfte Interpolationsfaktor IF für die Herleitung eines Gefahrenbezuges aus dem TDI ist eine Funktion der EF_c und EF_d und wurde entsprechend Tabelle 6.2 für nicht kumulierende Stoffe (Gruppe AI) berechnet

$$IF_{AI3}\ (\leqslant 10) = EF_c \cdot EF_d = 10$$

$$IF_{AI10,70}\ (\leqslant 10) = \sqrt{EF_c \cdot EF_d} = 10$$

Die gefahrverknüpfte Dosis von Nitrofen für den Menschen ist $GD_{Nitrofen} = 0{,}0015$ mg/kg/d.

Die Leitwerte für humantoxische Wirkungen bei kurzfristigen Expositionen LW_{KE} werden für die definierten Expositionszeiten (3, 10, 70 Jahre) zu

$$\mathbf{LW_{KE} = \underline{\underline{LW_{AI3,\ 10,\ 70}}} = 5{,}25\ \mu g/l = 5{,}25 \cdot 10^{-3}\ mg/l = \underline{\underline{5{,}25\ \mu g/l}}.}$$

Unter der Annahme, das Nitrofen keine Wirkschwelle hat, erfolgt die Berechnung von kurzfristigen und mittelfristigen Leitwerten für Trinkwasser als Stoffgruppe C (gentoxische

[69] Neoplasie: Neubildung von Gewebe: i.e.S.: autonomes Überschusswachstum. Neoplasma: Neubildung, irreversibel u. selbständig wachsende Neubildung körpereigenes Gewebe, die auch nach Wegfall auslösender Urs. ihr Wachstum nicht einstellt.

Stoffe ohne wirkungsfreien Dosisbereich). Bezüglich einer 3 und 10 Jahre dauernden Überschreitung des LW und der Interpolationsfaktoren IF_{C3} = 17 und IF_{C10} = 6 werden die kurzfristigen Leitwerte LW_{C3} = 8,9 µg/l und **LW_{C10} = 3,15 µg/l** errechnet.

Der LW_{C3} liegt oberhalb des LW_{AII3} und der LW_{C10} unterhalb des LW_{AII10}, so dass vorläufig immer jeweils der niedrigere der beiden Werte gilt. Die entwicklungstoxischen Wirkungen von Nitrofen sind demnach nur bei kurzfristigen Expositionen der ausschlaggebende empfindlichere Endpunkt.

- **Dodecylbenzolsulfonat**

Der Berechnung des gesundheitlichen Leitwertes für Dodecylbenzolsulfonat im Trinkwasser wird der NOAEL von 30 mg/kg/d aus der Studie von **Greim 1994** zugrunde gelegt (zitiert in **(HSDB 2002b)**.

Für die Ableitung eines TDI für den Menschen werden folgende Extrapolationsfaktoren (EF) angesetzt:

> EF_c = 10 zur Überbrückung der zwischenartlichen Varianz zwischen Mensch und Versuchstier,
>
> EF_d = 10 zur Überbrückung der innerartlichen Varianz beim Menschen, da der NOAEL nicht an einer besonders empfindlichen Teilpopulation gemessen wurde,

Aus der Multiplikation dieser Extrapolationsfaktoren ergibt sich der Gesamtextrapolationsfaktor EF_g = 100.

$$TDI_{DBS} = \frac{30\ mg}{kg \cdot d \cdot 100} = 0{,}3\ mg/kg/d.$$

Der gesundheitliche Leitwert LW liegt unter der Annahme, dass DBS eine Wirkschwelle hat, für einen Erwachsenen mit einem Körpergewicht von 70 kg, der lebenslang 2 Liter Trinkwasser pro Tag zu sich nimmt, bei

$$\mathbf{LW_{Hexogen}} = \frac{0{,}1 \cdot 30\ mg \cdot 70\ kg \cdot d}{kg \cdot d \cdot 100 \cdot 2\ l} = \mathbf{1{,}05\ mg/l}.$$

Für die Berechnung eines kurzfristigen Leitwertes für Trinkwasser wird DBS der Kumulationsgruppe AI (nicht kumulierend) zugeordnet. Für die Bildung des LW_{KE} bei 3 bzw. 10 Jahre Überschreitung des LW werden die Interpolationsfaktoren

$$IF_{AI3,10} (\leqslant 10) = EF_{gh} = 10$$

$$IF_{AI70} (\leqslant 10) = \sqrt{EF_c \cdot EF_d} = 10$$

benutzt. Die gefahrverknüpfte Dosis von DBS für den Menschen ist GD_{DBS} = 3 mg/kg/d. Hieraus errechnen sich die LW_{KE}

$$\mathbf{LW_{KE} = LW_{A3,10}} = \frac{3\ mg/kg\ KG/d \cdot 70\ kg}{2\ l/d \cdot 10} = \mathbf{10{,}5\ mg/l}$$

$$\mathbf{LW_{KE} = LW_{AI70}} = \frac{3\ mg/kg\ KG/d \cdot 70\ kg}{2\ l/d \cdot 10} = \mathbf{10{,}5\ mg/l}$$

- **Toxaphen**

Der Berechnung des gesundheitlichen Leitwertes für Toxaphen im Trinkwasser werden die Ergebnisse der oralen Langzeitkarzinogenitätsstudien an Mäusen zugrunde gelegt **(Litton Bionetics 1978; NCI 1978** zitiert in **Goodman, Brusick et al. 2000).** Die EPA berechnet in IRIS mit einer abgestuften Extrapolation einen *slope-factor* von 1,1 pro mg/kg/d und hieraus abgeleitet einen Risikowert für Trinkwasser (*risk-unit*) von $3{,}2 \cdot 10^{-5}$ pro µg/l Toxaphen.

Für ein akzeptiertes Risiko von 10^{-6} berechnet sich hieraus der gesundheitliche Leitwert

$$\mathbf{LW_C = 0{,}03\ \mu g/l.}$$

Für die Kalkulation von kurzfristigen und mittelfristigen Leitwerten für Trinkwasser (3 und 10 Jahre Überschreitung des LW) wird vorgeschlagen, die Interpolationsfaktoren IF_{3C} = 17 und IF_{10C} = 6 zu benutzen, da Toxaphen möglicherweise keine Wirkungsschwelle hat:

$$\mathbf{LW_{3C} = 0{,}5\ \mu g/l}$$

$$\mathbf{LW_{10C} = 0{,}2\ \mu g/l}$$

Falls Nitrofen eine Wirkschwelle hat (was aufgrund der Gentox-Ergebnisse nicht sicher ist), könnten auch die Ergebnisse von der Studie von **Tryphonas 2001** zur Ableitung eines TDI genutzt werden, um aus der höchsten Dosis ohne schädliche Wirkung (NOAEL 0,1 mg/kg/d mit Endpunkt Immuntoxizität) einen vorläufigen gesundheitlichen Leitwert für Trinkwasser abzuleiten.

Für die Ableitung eines TDI für den Menschen werden folgende Extrapolationsfaktoren (EF) angesetzt: EF_b = 10, EF_c = 10, EF_d = 10 => EF_g = 1.000

$$TDI_{Toxaphen} = \frac{0{,}1\,mg}{kg \cdot d \cdot 1.000} = 1 \cdot 10^{-4}\ mg/kg/d.$$

Der gesundheitliche Leitwert würde sich in diesem Ansatz für einen Erwachsenen mit einem Körpergewicht von 70 kg, der 2 Liter Trinkwasser pro Tag zu sich nimmt, zu

$$LW_{Toxaphen} = \frac{0{,}1 \cdot 0{,}1\,mg \cdot 70\,kg \cdot d}{kg \cdot d \cdot 2\,l \cdot 1.000} = 0{,}00035\ mg/l = 0{,}35\ \mu g/l.$$

berechnen lassen. Dieser Wert liegt oberhalb des soeben errechneten LW_C. Das karzinogene Risiko ist der empfindlichere Endpunkt. Der LW_c schützt deshalb auch vor der reinen humantoxischen Wirkung.

- **Ethylenglykol**

Der Berechnung des gesundheitlichen Leitwertes für Ethylenglykol im Trinkwasser werden die Ergebnisse der oralen Langzeitstudie von **DePass et al. 1986** mit Ratten und dem NOAEL von 40 mg/kg/d mit dem Endpunkt Nephrotoxizität zugrunde gelegt.

Zur Ableitung des TDI für den Menschen werden folgende Extrapolationsfaktoren (EF) angesetzt:

> EF_c = 10 zur Überbrückung der zwischenartlichen Varianz zwischen Mensch und Versuchstier,
>
> EF_d = 10 zur Überbrückung der innerartlichen Varianz beim Menschen, da der NOAEL nicht an einer besonders empfindlichen Teilpopulation gemessen wurde,

Aus der Multiplikation dieser Extrapolationsfaktoren ergibt sich der Gesamtextrapolationsfaktor EF_g = 100.

$$TDI_{Ethylenglykol} = \frac{40\ mg}{kg \cdot d \cdot 100} = 0{,}4\ mg/kg/d.$$

Da Ethylenglykol eine Wirkschwelle besitzt, berechnet sich der gesundheitliche Leitwert für einen Erwachsenen mit einem Körpergewicht von 70 kg, der lebenslang 2 Liter Trinkwasser pro Tag zu sich nimmt, mit

$$\mathbf{LW_{Ethylenglykol} = \frac{0{,}1 \cdot 40\ mg \cdot 70\ kg \cdot d}{kg \cdot d \cdot 2\ l \cdot 100} = 1{,}4\ mg/l.}$$

Für die Berechnung der kurzfristigen Leitwerte LW_{KE} für Trinkwasser wird Ethylenglykol der Stoffgruppe AI (nicht kumulierende Stoffe) zugeordnet. Für die Bildung des LW_{KE} bei 3 bzw. 10 Jahre Überschreitung des LW werden die Interpolationsfaktoren wie folgt berechnet:

$$IF_{A3,10}\ (\leqslant 10) = EF_{gh} = 10$$

sowie

$$IF_{A70}\ (\leqslant 10) = \sqrt{EF_{gh}} = 10$$

Die gefahrverknüpfte Dosis von Ethylenglykol für den Menschen ist $GD_{Ethylenglykol}$ = 4 mg/kg/d.

Die Leitwerte für kurzfristige Expositionen LW_{KE} liegen für alle Expositionszeiten (3, 10, 70 Jahre) für einen Erwachsenen bei

$$\mathbf{LW_{KE} = LW_{AI3,10,70} = LW \cdot IF = 1{,}4 \cdot 10\ [mg/l] = 14\ mg/l.}$$

- **Iopromid**

Der Berechnung des gesundheitlichen Leitwertes von Iopromid im Trinkwasser werden die Ergebnisse der subchronischen oralen Studie von **Krause 1994** mit Ratten und Kaninchen mit einem LOAEL von 370 mg Iod/kg/d (Endpunkt verspätete Ossifikation der Schädelknochen) zugrunde gelegt. Die Datenlage ist als schlecht zu beurteilen. Die Berechnung des gesundheitlichen Leitwertes kann daher nur vorläufig sein, bis bessere Daten zur Verfügung stehen.

Für die Ableitung eines TDI für den Menschen werden folgende Extrapolationsfaktoren (EF) eingesetzt:

EF_a = 10 Hochrechnung von subchronischer auf chronische Expositionsdauer,

EF_b = 3 zur Abschätzung des $NOAEL_{TV}$ aus dem $LOAEL_{TV}$ von 370 mg/kg/d (**Krause 1994**),

EF_c = 10 zur Überbrückung der zwischenartlichen Varianz zwischen Mensch und Versuchstier,

EF_d = 10 zur Überbrückung der innerartlichen Varianz beim Menschen, da der LOAEL nicht an einer besonders empfindlichen Teilpopulation gemessen wurde.

Aus der Multiplikation dieser Extrapolationsfaktoren wird der Gesamtextrapolationsfaktor EF_g = 3.000 errechnet.

$$TDI_{Iopromid} = \frac{370\ mg}{kg \cdot d \cdot 3.000} = 0{,}123\ mg\ Iod/kg/d.$$

Da Iopromid eine Wirkschwelle besitzt, wird der gesundheitliche Leitwert für einen Erwachsenen mit einem Körpergewicht von 70 kg und einem täglichen Trinkwasserkonsum von 2 Litern zu

$$LW_{Iopromid} = \frac{0{,}1 \cdot 370\ mg \cdot 70\ kg \cdot d}{kg \cdot d \cdot 2\ l \cdot 3.000} = 0{,}431\ mg/l$$

berechnet.

Für die Kalkulation der kurzfristigen Leitwerte LW_{KE} für Trinkwasser wird Iopromid der Stoffgruppe AI (nicht kumulierende Stoffe) zugeordnet. Für die Bildung des LW_{KE} bei 3 bzw. 10 Jahre Überschreitung des LW werden die Interpolationsfaktoren wie folgt berechnet:

$$IF_{A3,10}\ (\leqslant 10) = EF_{gh} = 10$$

sowie

$$IF_{A70}\ (\leqslant 10) = \sqrt{EF_{gh}} = 10$$

Die gefahrverknüpfte Dosis von Iopromid für den Menschen ist $GD_{Iopromid}$ = 1,23 mg/kg/d.

Die Leitwerte für kurzfristige Expositionen LW_{KE} liegen für alle Expositionszeiten (3, 10, 70 Jahre) für einen Erwachsenen bei

$$\mathbf{LW_{KE} = LW_{AI3,10,70} = LW \cdot IF = 0{,}431 \cdot 10\ [mg/l] = 4{,}31\ mg/l.}$$

12 LITERATURVERZEICHNIS

Acher, A. J. und B. Yaron (1977). "Behaviour of anionic surfactants in a soil-sewage effluent system." J Environ Qual **6**(4): 418-420.

AHO e.V. (1996). Untersuchungen für ein Leistungsbild und zur Honorierung für den Planungsbereich "Altlasten". Bundesanzeiger. Bonn, Ausschuss der Ingenieurverbände und Ingenieurkammern für die Honorarordnung e.V.**:** 56 Seiten.

Aizawa, H. (1982). Metabolic maps of pesticides. New York, Academic Press**:** 33.

Alabaster, J. S. (1962). J. Am. Oil chem. Soc. **55**: 181.

Albert, L.A. (1999). Reviews of Environmental Contamination and Toxicology. New York, Heidelberg, Springer.

Alexander, M. (1981). Science **211**: 132-138.

Alfonso, L. F., A. Arnaiz, F. J. Alvarez, B. Qi, J. A. Diez-Pardo, A. Vallis-I-Soler und J. A. Tovar (1996). "Lung hypoplasia and surfactant system immaturity induced in the fetal rat by prenatal exposure to nitrofen." Biology of the Neonate **69**(2): 94-100.

Allen, A. C. (1951). The kidney - medical and surgical diseases. New York, Verlag Grune and Stratton.

Almen, T. (1982). The development of new molecule with lower incidence of secondary effects. Non-ionic contrast media. A. Wackenheim und U. Salvolini. Luxemburg, Interimages**:** 16-24.

Ambrose, A. M., P. S. Larson, J. F. Borzelleca, J. R. Smith, Rb und J. R. Hennigar Gr (1971). "Toxicologic Studies on 2,4-Dichlorophenyl-P-Nitrophenyl Ether." Toxicol Appl Pharmacol **19**: 263-275.

American Society for Testing & Materials (1997). Environmental Assessment, Hazardous Substances & Oil Spill Responses, Waste Management, Environmental Risk Management.

Anonymous (1996). "Toxicological Profile for Toxaphene (Update)." Agency for Toxic Substances and Disease Registry, U.S. Department of Health and Human Services **223**(408).

Anonymus (1995). Schadstoffinformationen für die Anwendung baufachlicher "Richtlinien für die Planung und Ausführung der Sicherung und Sanierung belasteter Böden" des BMBau für Liegenschaften des Bundes. Hannover, OFD Hannover, Umweltbüro Möschwitzer GmbH.

Ansell, G., M. C. K. Tweedie und C. R. West (1980). "The current status of reactions to intravenous contrast media." Invest. Radiol. **15**: 32-39.

Arbeitsgruppe Altlasten-Handbuch (1987). Altlasten-Handbuch: Teil I, Altlasten-Bewertung. Stuttgart, Ministerium für Ernährung, Landwirtschaft, Umwelt und Forsten Baden-Württemberg**:** 111.

ARGE Fresenius-focon (1997). UMS-System zur Altlastenbearbeitung. Erlangen / Aachen. Im Auftrag des Umweltbundesamtes. F&E-Vorhaben 10901215**:** 123.

Arnold, D. L., F. Bryce, C. Baccanale, S. Hayward, J. R. Tanner, E. MacLellan, T. Dearden und S. Fernie (2001). "Toxicological consequences of toxaphene ingestion by cynomolgus (Macaca fascicularis) monkeys. Part 1: pre-mating phase." Food Chem Toxicol **39**(5): 467-76.

Ashby, J. und Tennant, R. W., (1990). "Definitive relationships among chemical structure, carcinogenicity and mutagenicity for 301 chemicals tested by the U.S. NTP." Mutation Research **257**: 229-306.

Aspelin, P., P. Teitel und T. Almen (1980). "Effect of iohexol on red cell deformability in vitro." Acta Radiol Suppl **362**: 127-30.

ATSDR (1995). "Toxicological profile for RDX." TA: Agency for Toxic Substances and Desease Registry U.S. Public Health Service PG **114**.

Bachmann, G. Oltmanns, J., Konietzka, R. Schneider, K. (1999). Berechnung von Prüfwerten zur Bewertung von Altlasten. Ergänzbares Handbuch. Umweltbundesamt Berlin. Berlin, Erich Schmidt Verlag.

BAGS (1995). Standards zur Expositionsabschätzung. Bericht des Ausschusses für Umwelthygiene der Arbeitsgemeinschaft der Leitenden Medizinalbeamtinnen und -beamten der Länder. Gesundheit und Soziales Behörde für Arbeit, Hamburg (Hrsg). Hamburg, BAGS.

Balazs, T., B. Jackson und M. Hite (1982). "Nephrotoxicity of ethylene glycols, cephalosporins and diuretics." Monogr. Appl. Toxicol. **I (Nephrotoxicity)**(1): 487-497.

Ballantyne, B. (1985). A summery of studies conducted on the long-term toxicology of ethylene glycol. BRRC Project Reports. **48**.

Balzereit, F. (1999). Umweltstandards für den Bodenschutz - Rechtliche, toxikologische und Expositionskriterien für die Bewertung von Bodenschadstoffen unter besonderer Berücksichtigung der landwirtschaftlichen Nutztierhaltung. Berlin, Freie Universität Berlin**:** 227.

Barratt, M.D. (2000). "Prediction of toxicity from chemical structure." Cell Biology and Toxicology **16**: 1-13.

Bauer, D., R. Hämpfling und N. Simmleit (1991). Ökochemische Eigenschaften und umweltchemisches Verhalten von Explosivstoffen in Rüstungsaltlasten. Hannover, Fresenius Consult GmbH Taunusstein an das Niedersächsische Landesamt für Wasser und Abfall.

Bazzicalupo, C. und A. Portella (1952). "Attivita in vitro di alcuni glicoli sul C. diphteriae." Riv. ist. Sieroterap. ital. **27**: 130-133.

BBodSchG (1998). "Gesetz zum Schutz vor schädlichen Bodenveränderungen und zur Sanierung von Altlasten (Bundesbodenschutzgesetz - BBodSchG) vom 17.03.1998." BGBl. **I**(Sr. 16): 502.

BBodSchV (1999). "Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV)." BGBl. **I Sr. 36, 16.07.1999**: 1554-1582.

Berlex (2003). NDA 21-425 Ultravist (brand of iopromide) Injection Pharmacy Bulk Package, Berlex Laboratories, Inc. **2002**.

Berth, P. und P. Gerike (1988). "Zur ökologischen Bewertung technisch wichtiger Tenside." Tenside Surfactants Detergents **25**: 108-115.

Bertollini, R., Dora, C., Krzyzanowiski, M. und Stanners, D. (1996). Environment and Health 1 - Overview and Main European Issues, WHO.

BGVV (2002a). "Zur gesundheitlichen Bewertung von Nitrofen." Stellungnahme des BgVV vom 28. Mai 2002

BGVV (2002b). Zusammenfassende gesundheitliche Bewertung von Nitrofen. Pressemitteilung vom 6. Juni 2002, Bundesinstitut für gesundheitlichen Verbraucherschutz und Veterinärmedizin, Berlin.

Blood, F. R. (1965). "Chronic toxicity of ethylene glycol in the rat." Food Cosmet. Toxicol. **3**: 229-234.

Blood, F. R., G. A. Elliott und M. S. Wright (1962). "Chronic toxicity of ethylene glycol in the monkey." Toxicol. Appl. Pharmacol. **4**: 489-491.

BMBau, Bundesbauministerium (1995). Schadstoffinformationen für die Anwendung baufachlicher "Richtlinien für die Planung und Ausführung der Sicherung und Sanierung belasteter Böden" des BMBau für Liegenschaften des Bundes. Hannover, Oberfinanzdirektion Hannover.

BMG (2002). Bilanzbericht zum "Nitrofen-Geschehen" im Mai / Juni 2002 in Deutschland. Bonn, Bundesministerium für Gesundheit**:** 15 (+Anlage).

BMU (1999). Bekanntmachung über Methoden und Maßstäbe für die Ableitung der Prüf- und Maßnahmenwerte nach der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV). BAnz. S. 15041 und Beilage, Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit.

BMU, IABG (1995). Ermittlung von Altlast-Verdachtsflächen auf den Liegenschaften der Westgruppe der Truppen (WGT) - Abschlussdokumentation - Band 1: Zusammenfassung.

Ottobrunn, Industrieanlagen-Betriebsgesellschaft mbH im Auftrag des BMU / Umweltbundesamt**:** 73.

Bouma, B.N. und J. H. Griffin (1978). Initiation mechanism: The contract activation system in plasma. Blood Coagulation. New comprehensive biochemistry. R. F. A. Zwaal und H. C. Hemker. Amsterdam, New York, Oxford, Elsevier Science Publishers B. V. **13:** 103-129.

Boyd, E. M. und F. I. Taylor (1971). "Toxaphene toxicity in protein-deficient rats." Toxicol Appl Pharmacol **18**(1): 158-67.

Braun, D. (1975). The acute and chronic biochemical and behavioural effects of cyclotrimethylenetriamine. Baltimore, MD, Maryland University School of Pharmacy.

Bridié, A. L., C. J. M. Wolf und M. Winter (1979). "The acute toxicity of some petrochemicals to goldfish." Water Res. **13**: 623-626.

Bringmann, G. (1978). "Bestimmung der biologischen Schadwirkung wassergefährdender Stoffe gegen Protozoen. I. Bakterienfressende Flagellaten (Modellorganismus: Entosiphon sulcatum Stein)." Z. Wasser Abwasser Forsch. **11**: 210-215.

Bringmann, G. und R. Kühn (1980). "Ergebnisse der Schadwirkung wassergefährdender Stoffe gegen Daphnia magna in einem weiterentwickelten standardisiertem Testverfahren." Z. Wasser Abwasser Forsch. **15**: 1-6.

Brown, A. M., C. Bruch und J. Dempsey (1980). "In vitro detection of gaseous mutagens by L5178Y mouse cells." Proc. Am. Assoc. Cancer Res. **21**: 74.

Brüschweiler, H. et al. (1988). "Seife-Waschverhalten, Wascheffekte und Abbaubarkeit." Seifen-Öle-Fette-Wachse **114**: 301-307.

Bryce, F., F. Iverson, P. Andrews, M. Barker, W. Cherry, R. Mueller, O. Pulido, S. Hayward, S. Fernie und D. L. Arnold (2001). "Effects elicited by toxaphene in the cynomolgus monkey (Macaca fascicularis): a pilot study." Food Chem Toxicol **39**(12): 1243-51.

BUA (1991). Ethylenglykol. Weinheim, New York, Basel, Cambridge, Beratergremium für umweltrelevante Altstoffe (BUA) der Gesellschaft Deutscher Chemiker**:** 146.

Büchel, K.H. (1977). Pflanzenschutz und Schädlingsbekämpfung. Stuttgart, Thieme Verlag.

Burke Hurt, S. S., J. M. Smith und A. W. Hayes (1983). "Nitrofen a Review and Perspective." Toxicology **29**(1-2): 1-38.

Burton, D. T., S. D. Turley und G. T. Peters (1994). "The acute and chronic toxicity of Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine (RDX) to the Fahead Monnow (Pimephales promelas)." Chemosphere **29**: 567-579.

Callahan, M. A. et al. (1979). "Water related environmental fate of 129 priority pollutants." U.S. EPA- 440/4-79-029a zitiert in HSDB 8001-35-2.

Calow, P. (1997). Handbook of Environmental Risk Assessment & Management, Blackwell Science Ltd.

Casida, J. E., R. L. Holmstead, S. Khalifa, J. R. Knox, T. Osawa, K. J. Palmer und R. Y. Wong (1974). "Toxaphene insecticide: a complex biodegradable mixture." Science **183**(124): 520-1.

Center for Chemical Process Safety Staff (1997). Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis. Harvard (US), Harvard University Press.

Chang (1995). Toxicology Risk Assessment. Dekker (Marcel) Inc. (US).

Chase-Deesing, C., R. J. Kavlock und F. J. Zeman (1986). "Kidney Morphology and Function in the Young of Rats Malnourished and Exposed to Nitrofen During Pregnancy." J Toxicol Environ Health **19**(1): 1-22.

Chernoff, N. und B. D. Carver (1976). "Fetal toxicity of toxaphene in rats and mice." Bull Environ Contam Toxicol **15**(6): 660-4.

Chernoff, N., R. W. Setzer, D. B. Miller, M. B. Rosen und J. M. Rogers (1990). "Effects of chemically induced maternal toxicity on prenatal development in the rat." Teratology **42**(6): 651-658.

Chu, I., V. Secours, D. C. Villeneuve, V. E. Valli, A. Nakamura, D. Colin, D. J. Clegg und E. P. Arnold (1988). "Reproduction Study of Toxaphene in the Rat." Journal of Environmental Science and Health. Part B: Pesticides, Food Contaminants, and Agricultural Wastes **23**(2): 101-126.

Chu, I., D. C. Villeneuve, C. W. Sun, V. Secours, B. Procter, E. Arnold, D. Clegg, L. Reynolds und V. E. Valli (1986). "Toxicity of Toxaphene in the Rat and Beagle Dog." Fundamental and Applied Toxicology **7**(3): 406-418.

CITI (1992). Chemical Inspection and Testing Institute. ISBN 4-89074-101-1.

Clark, C. R., T. C. Marshall, B. S. Merickel, A. Sanchez, D. G. Brownstein und C. H. Hobbs (1979). "Toxicological assessment of heat transfer fluids proposed for use in solar energy applications." Toxicol. Appl. Pharmacal. **51**: 529-535.

Cogen, F. C., M.E. Norman, E. Dunsky, J. Hirschfeld und B. Zweiman (1979). "Histamine release and complement changes following injection of contrast media in humans." J. Allergy Clin. Immunol. **64**: 299-305.

Combes, R.D. (2000). "The use of structure-activity relationship and markers of cell toxicity to detect non-genotoxic carcinogens." Toxicology in Vitro **14**: 387-399.

Conan, L., B. Foucault, G. Siou, M. Cahigneau und G. Le Moan (1979). "Contribution à la recherche d'une action mutagène des résidus d'xyde d'éthylène glycol et de Chloro-2-éthanol dans le matériel plastique stérilisé par l'oxyde d'éthylène." Ann. Fals. Exp. Chim. **72**: 141-151.

Conway, R. A., G.T. Waggy, M. H. Spiegel und R. L. Berlund (1983). "Environmental fate and effects of ethylene oxide." Environ. Sci. Technol. **17**: 107-112.

Costlow, R. D., J. M. Hirsekorn, R. G. Stiratelli, G. P. O'Hara, D. L. Black, W. W. Kane, S. S. Burke, J. M. Smith und A. W. Hayes (1983). "The effects on rat pups when nitrofen was applied dermally to the dam during organogenesis." Toxicology **28**(1): 37-50.

Costlow, R. D. und J. M. Manson (1981). "The heart and diaphragm: target organs in the neonatal death induced by nitrofen (2,4-dichlorophenyl-p-nitrophenyl ether)." Toxicology **20**(2-3): 209-227.

Costlow, R. D. und J. M. Manson (1983). "Distribution and metabolism of the teratogen nitrofen (2,4-dichloro-4'- nitro diphenyl ether) in pregnant rats." Toxicology **26**(1): 11-23.

Crawford-Brown, D.J. (1997). Theoretical & Mathematical Foundations of Human Health Risk Analysis: Biophysical Theory of Environmental Health Science., Kluwer Academic Publishers.

Crowder, L. A., G. C. Lanzaro und R. S. Whitson (1980). "Behavioural effects of methyl parathion and toxaphene exposure in rats." J. Environ. Sci. Health B **15**(4): 365-378.

David, H. und I. Uerlings (1964). "Die Wirkung der Äthlenglykolvergiftung auf das submikroskopische Bild der Rattenniere." Acta biol. med. german. **12**: 203-218.

Dawson, P. (1984). Adverse reactions to contrast media. The importance of low osmolar media to clinical radiology. R.G. Grainger. London, Franklin Scientific Publications**:** 37-39.

Deleu, R. und A. Copin (1979). "Extraction and gas-liquid chromatographic determination of the herbicides Nitrofen and Nevuron: Application to natural waters." J Chromatogr **171**(1): 263-268.

DePass, L. R., R. H. Garman, M. D. Woodside, W. E. Giddens, R. R. Maronpot und C. S. Weil (1986). "Chronic toxicity and oncogenicity studies of ethylene glycol in rats and mice." Fundam Appl Toxicol **7**(4): 547-65.

DePass, L. R., M. D. Woodside, R. R. Maronpot und C. S. Weil (1986). "Three-generation reproduction and dominant lethal mutagenesis studies of ethylene glycol in the rat." Fundam Appl Toxicol **7**(4): 566-72.

Deutscher Bundestag (1992). Drucksache 12/3929.

Deutscher Juristentag, Ed. (1994). Vorschläge zur Regelung der Altlasten im Rahmen des Bodenschutzes. Verhandlungen des 60. Deutschen Juristentages in Münster 1994 - Sitzungsberichte, Referate und Beschlüsse. München, Beck' sche Verlagsgesellschaft.

Dieter (1994). Kriterien und Konzentrationsvorschläge zur gesundheitlichen Bewertung von 35 Sprengstoff-typischen Verbindungen und Abbauprodukten in Böden und Trinkwasser. Berlin, Institut für Wasser-, Boden- und Lufthygiene.

Dieter, H.H. (1995). "Risikoquantifizierung: Abschätzungen, Unsicherheiten, Gefahrenbezug." Bundesgesundhbl. **7/95**: 250-257.

Dieter, H.H., A. Grohmann und W. Winter (1996). Trinkwasserversorgung bei Überschreitung von Grenzwerten der Trinkwasserverordnung. Transparenz und Akzeptanz von Grenzwerten am Beispiel des Trinkwassers. Hermann H. Dieter, Andreas Grohmann, Gesine Reinicke. Berlin, Erich Schmidt Verlag. **6/96:** 216.

Dieter, H.H. (1999). Ableitung von Grenzwerten (Umweltstandards) - Wasser. Handbuch Umweltmedizin. Wichmann-Schlipköter-Fülgraff. Landsberg/L, ecomed. **16. Erg.Lfg. 8/99**.

Dieter, H.H. "Zusammenstellung humantoxikologischer Bewertungen von Stoffen, die im Trinkwasser vorkommen." (in Vorbereitung).

Dieter, H.H.. "Substanzspezifische Interpolationsfaktoren zur Ableitung von Leitwerten für kurzfristige Exposition (gesundheitliche Maßnahmewerte) bei Feststellung einer Gefährdung der Trinkwasserversorgung." (in Vorbereitung) .

Dieter, H.H. und M. Henseling (2003). "Kommentar zur Empfehlung: Maßnahmewerte (MW) für Stoffe im Trinkwasser während befristeter Grenzwert-Überschreitungen gem. § 9 Abs. 6-8 TrinkwV 2001." Bundesgesundheitsbl - Gesundheitsforsch - Gesundheitsschutz 2003 **46**: 701-706.

Dieter, Hermann H., U. Kaiser und Helmut Kerndorff (1990). "Proposal on a standardized toxicological evaluation of chemicals from contaminated sites." Chemosphere **20**: 75-90.

DIMDI (2003). 1,2-Ethandiol Dok. Nr. 0003163, CIVS. BfR. **2000**.

DIN 2000 (2000). "Zentrale Trinkwasserversorgung - Leitsätze für Anforderungen an Trinkwasser, Planung, Bau, Betrieb und Instandhaltung der Versorgungsanlagen." Technische Regeln des DVGW.

Dörhofer, G. (1998). "Bewertung von Altlasten - Ansätze zur abgestuften Beurteilung von Grundwasserkontaminationen durch Altlasten." Altlasten Spektrum **1/98**: 20-26.

Dourson, M.L. und J.F. Stara (1983). "Regulatory history and experimental support of uncertainty (safety) factors." Reg. Toxicol. Pharmacol. **3**: 224-238.

Drayer, B. P. und A. E. Rosenbaum (1977). "Metrizamide brain penetration." Acta Radiol. **355**: 280-293.

Drosdowiski, G. et al. (1963). Etymologie. Mannheim / Wien / Zürich.

Dunkel, V., Zeiger, E., Brusick, D. McCoy, E., McGregor, D. Mortelmans, K., Rosenkranz, H., and Sommon,V. (1984). "Reproducibility of microbial mutagenicity assays. I. Test with Salmonella typhimurium and E. coli using a standardized protocol." Environ. Mutagen. **6 (Suppl. 2)**: 1-251.

Dunkelberg, H. (1987). "Kanzerogene Aktivität von Ethylenoxid und seinen Reaktionsprodukten 2-Chlorethanol, 2-Bromethanol, Ethylenglycol und Diethylenglycol. III. Untersuchung von Ethylenglycol und Diethylenglycol auf kanzerogene Wirkung." Zbl. Bakt. Hyg. **B 183**: 358-365.

Dupert, K. (1987). "Embryotoxic Effects of Environmental Chemicals: Test with the South African Claved Toad (Xenopus laevis)." Ecotox. Environ. Safety **13**: 324-338.

DVGW (1991). Technische Mitteilung Merkblatt W106 / Wasserversorgung, Wassergewinnung, Grundwasser : Militärische Übungen und Liegenschaften der Streitkräfte in Wasserschutzgebieten. Eschborn/Ts., Deutscher Verein des Gas- und Wasserfachs e.V.

ECETOC (1995). Assessment Factors in Human Health Risk Assessment. Technical Report Nr. 68. Brussels, European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals**:** 57.

EEC (1967). "Council Directive 67/548/EEC." Off. J. of the European Communities.

EEC (1992). "Concil Directive 92/32/EEC of the 30 April 1992 amending for the 7th time concil Directive 67/548/EEC on the approximation of laws, regulations and administrative provisions relating to the classification, packaging and labelling of substances ("7th Amendment")." Off.J. of the European Communities **L 154/1**.

EEC (1993a). "The Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for new notified Substances." .

EEC (1993b). "Concil Regulation (EEC) No. 793/93/EEC of 23 March 1993 on the evaluation and control of risks of existing substances." Off. J. of the European Communities **L 84/1**.

EEC (1994). "Commission Regulation (EC) No 1488/94 laying down the principles for assessment of risks to man and the environment of existing substances in accordance with Council Regulation (EEC) No 793/94." Off. J. of the European Communities **L 161/3**.

Eisler, R. und J. Jacknow (1985). "Toxaphene hazards to fish, wildlife and invertebrates: a Synoptic Review." Bio. Rep. **85**: 1.4.

Epstein, S. S., E. Arnold, J. Andrea, W. Bass und Y. Bishop (1972). "Detection of Chemical Mutagens By the Dominant Lethal Assay in the Mouse." Toxicol Appl Pharmacol **23**: 288-325.

Etnier, E. L. (1989). "Water Quality Criteria For Hexahydro-1 3 5-Trinitro-1 3 5-Triazine Rdx." Regul Toxicol Pharmacol **9**(2): 147-157.

Evans, W. H. und E. J. David (1974). Water Res **8**: 97-100.

FAO/WHO (1983). Pesticide residues in food., Geneva, 5-14 December 1983. FAO plant production and protection paper 61, Rome, 1985, Joint meeting of the FAO panel of experts on pesticide residues in food and the environment and the WHO expert group on pesticides residues.

Filatova, V. S., E. S. Smirnova, E. Sh Gronsberg, A. A. Russkikh, E. I. Klimova, I. M. Kashtanova, L. A. Goryacheva und I. V. Zhadnova (1982). "Derivation of the Maximum Allowable Concentration of Ethylene Glycol in the Air of Work Areas." Gig Tr Prof Zabol **0**(6): 28-30.

Fischer, H. (1968). "Haemodynamic reactions to angiographic media. A survey and commentary." Radiology **91**: 66-73.

FKST (1994). Trinkwasser - Mögliche Auswirkungen militärischer Altlasten auf die Trinkwasserversorgung in den neuen Bundesländern - Erfassung militärischer Standorte. Zwischenbericht der Arbeitsgemeinschaft Militärische Altlasten / Trinkwasserversorgung der Fachkommission Soforthilfe Trinkwasser (FKST). Berlin, Bundesministerium für Gesundheit und Landesfachgruppen Trinkwasser.

FKST (1996). 20/1/2 "Trinkwasserschutz im Umfeld militärischer Liegenschaften". Plenum der FKST, Berlin.

Forsthofer (1995). Inventarisierung von Bodenkontaminationen auf Liegenschaften der Westgruppe der ehemaligen sowjetischen Truppen. Berlin, Umweltbundesamt.

Francis, B. M. (1989). "Relative Developmental Toxicities of Nine Diphenyl Ethers Related to Nitrofen." Environ Toxicol Chem **8**(8): 681-688.

Fuchs, W. (1987). Pharmakokinetik von Röntgenkontrastmitteln. Digitale Radiographie, Referate und Vorträge. H. E. Reimann, J. Lollath und O. Rienhoff. Konstanz, Schnetztor Verlag**:** 266-271.

Funk, S. B., D. J. Roberts, D. L. Crawford und R. L. Crawford (1993). "Initial-Phase Optimization for Bioremediation of Munition Compound-Contaminated Soils." Appl. Environ. Microbiol. **59**(2171-2177).

Garg, R. , D. Grasso und G. Hoag (1991). "Treatment of explosives contaminated sludge." Haz. Waste Haz. Mat. **8**: 319-340.

Gaultier, M., F. Conso, M. Rudler, J. P. Leclerc und F. Mellerio (1976). "Ethylene glycol acute poisoning." Eur J Toxicol Environ Hyg **9**(6): 373-379.

Gaunt, I. F., J. Hardy, S. D. Gangolli, K. R. Butterworth und A. G. Lloyd (1974). Short-term toxicity of monoethylene glycol in the rat. Research Report No. 4/1974, Hoechst AG.

Gee, D. (1997). Approaches to scientific uncertainty. Health at the Drossroads: Transport Policy and Urban Health. T. Fletcher and A. McMichael. Chichester, John Wiley & Sons.

Gerike, P. (1979). "A Correlation Study of Biodegradability. Determinations with Various chemicals in Various Tests." Ecotox. Environ. Safety **3**: 159-173.

Gersich, F. M., F. A. Blanchard, S. L. Applegath und C. N. Park (1986). "The precision of Daphnia (Daphnia magna Straus, 1820) static acute toxicity tests." Arch. Environ. Contam. Toxicol. **15**: 741-749.

Gessner, P. K., D. V. Parke und R. T. Williams (1960). "Studies in Detoxication 80. The Metabolism of Glycols." Biochemical Journal **74**: 1-5.

GESTIS (2003). Natriumdodecylbenzolsulfonat, Isomere. BIA - Gefahrstoffinformationssystem der gewerblichen Berufsgenossenschaften, online Datenbank im Internet www.cdromverlag.de/CGI-sd4

Giger, W. et al. (1989). "Behaviour of LAS in Sewage and Sludge Treatment and in Sludge-Treated Soil." Tenside Surf. Det. **26**: 95-100.

Gilbert, P. A. (1984). Risk Evaluation in Notifications under the 6th Amendment. Case Study: Linear Alkylbenzenesulfonate. ECETOC Seminar.

Gillett, J. (1996). Hazard Study & Risk Assessment: A Complete Guide, Interpharm Press, Incorporated.

Golman, K. und S. Holtas (1980). "Proteinurea produced by urografic contrast media." Invest. Radiol. **15**: 61-66.

Goodman, J. I., D. J. Brusick, W. M. Busey, S. M. Cohen, J. C. Lamb und T. B. Starr (2000). "Reevaluation of the cancer potency factor of toxaphene: recommendations from a peer review panel." Toxicol Sci **55**(1): 3-16.

Goßler, K. und R. Miess (1987). Verhalten von linearen Alkylbenzolsulfonaten aus Haushaltswaschmitteln bei der Abwasserbehandlung - Literaturstudie. Nürnberg, Materialprüfungsamt. Landesgewerbeanstalt Bayern.

Grainger, R. G. (1980). "Osmolarity of intravascular radiological contrast media." Brit. J. Radiol. **53**: 739-746.

Grainger, R. G. (1984). A comparison of conventional ionic, non-ionic and monoacid dimer contrast media. The importance of low osmolar media to clinical radiology. R. G. Grainger. London, Franklin Scientific Publications**:** 4-7.

Grauer, G. F., M. A. Thrall, B. A. Henre, R. M. Grauer und D. W. Hamar (1984). "Early Clinicopathologic Findings In Dogs Ingesting Ethylene Glycol." American Journal of Veterinary Research **45**(11): 2299-2303.

Gray, L. E. Jr und R. J. Kavlock (1983). "The effects of the herbicide 2,4-dichlorophenyl-p-nitrophenyl ether on serum thyroid hormones in adult female mice." Toxicol Lett **15**(2-3): 231-236.

Gray, L. E. Jr, R. J. Kavlock, N. Chernoff, J. Ferrell, J. McLamb und J. Ostby (1982). "Prenatal exposure to the herbicide 2,4-dichlorophenyl-p-nitrophenyl ether destroys the rodent Harderian gland." Science **215**(4530): 293-294.

Greim, H. et al. (1994). "Toxicity and ecotoxicity of Sulfonic Acids: Structure Activity Relationship." Chemosphere **28**: 2203-2236.

Griffin, D. E., III und W. E. Hill (1978). "In vitro Breakage of Plasmid DNA by Mutagens and Pesticides." Mutat Res **52**: 161-169.

Guilbert, T. W., S. A. Gebb und J. M. Shannon (2000). "Lung hypoplasia in the nitrofen model of congenital diaphragmatic hernia occurs early in development." Am J Physiol Lung Cell Mol Physiol **279**(6): L1159-71.

Hammer, B. und Lackner. W. (1980). "Iopamidol, a nonionic hydrosoluble contrast medium for neuroradiology." Neuroradiology **19**: 199.

Hansch, C., Telzer, B. R., Zhang, L., (1995). "Comparative QSAR in Toxicology: Examples from Teratology and Cancer Chemotherapy of Aniline Mustards." Critical Reviews in Toxicology **25**(1): 67-89.

Hart, E. R. (1977). Two-year feeding study in rats. Kensington, MD, Litton Bionetics, Inc. Office of Naval Research, zitiert in IRIS.

Harvey, S. D., R. J. Fellows, D. A. Cataldo und R. M. Bean (1991). "Fate of the Explosive Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-trazine (RDX) in Soil and Bioaccumulation in Bush Bean Hydroponic Plants." Environ. Toxicol. Chem. **10**: 845-855.

Henschler, D. (1994). Toxikologie chlororganischer Verbindungen - Der Einfluss von Chlorsubstituenten auf die Toxizität organischer Moleküle. Weinheim, VCH.

Herbert Wulf und Michael Brzoska (2000). Global disarmament, demilitarization and demobilization. Baden-Baden, Nomos Verlagsgesellschaft Baden-Baden**:** 180.

Hofmeister, R. (1989). "Investigations of Nephrotoxicity Caused by Ionic and Non-Ionic Contrast Media in Rats with Previously Damaged and Not Previously Damaged Kidneys and Special View to Urinary Enzyme Determinations." Govt Reports Announcements & Index **11**.

Höll, K.: Wasser. Nutzung im Kreislauf, Hygiene, Analyse und Bewertung. Hrsg. Andreas Grohmann, 8. völlig neu bearb. Auflage - Berlin, New York, Walter de Gruyter, 2002.

Hong, H. L., J. Canipe, C. W. Jameson und G. A. Boorman (1988). "Comparative effects of ethylene glycol and ethylene glycol monomethyl ether exposure on hematopoesis and histopathology in B6C3F1 mice." J Environ Pathol Toxicol Oncol **8**(7): 27-38.

Hooper, N. K., B. N. Ames, M. A. Saleh und J. E. Casida (1979). "Toxaphene, a complex mixture of polychloroterpenes and a major insecticide, is mutagenic." Science **205**(4406): 591-3.

HSDB (2002a). Nitrofen HSN 1578, Hazardous Substances Databank (HSDB). **2002**.

HSDB (2002b). Sodium Dodecylbenzenesulfonate, http://toxnet.nlm.nih.gov. **12.11.2002**.

HSDB (2003a). Cyclonite, http://toxnet.nlm.nih.gov. **22.06.2003**.

HSDB (2003b). Ethylene glycole [107-21-1], Hazardous Substances Databank. **2002**.

HSDB (2003c). Toxaphene 8001-35-2, http://toxnet.nlm.nih.gov.

Huet, Y., E. Wirquin, H. Geschwind und J. Loiret (1982). Effects of contrast media in blood volume. Contrast media in radiology. M. Amiel. Berlin, Heidelberg, New York, Springer Verlag**:** 233-236.

Hüls AG (1988). "Lineares Alkylbenzolsulfonat." Firmenschrift **5**.

IARC (1983). IARC monographs on the evaluation of the carcinogenic risk of chemicals to humans. Lyon / Geneva, International Agency for Research on Cancer, World Health Organization.**:** Vol. 30, pp. 271-282.

INC 5 (10.12.2000). Völkerrechtlich bindendes Instrument zur Implementierung internationaler Maßnahmen hinsichtlich bestimmter persistenter organischer Stoffe - geächtete und mit einem Anwendungsverbot belegte Substanzen. POP-Konvention, Johannesburg.

IPCS: International Programme on Chemical Health (1994). Assessing Human Health Risks of Chemicals: Derivation of Guidance Values for Health-based Exposure Limits. Geneva (CH), WHO: World Health Organisation**:** 76.

IRIS (2002). Ethylene glycol (CASN 107-21-1). http://toxnet.nlm.nih.gov, U.S. EPA. **2002**.

Jacobson, D. und K. E. McMartin (1986). "Methanol and ethylene glycol poisonings. Mechanism of toxicity, clinical course, diagnosis and treatment." Med. Toxicol. **1**: 309-334.

Jones, A. (1997). Site Specific Risk Assessment, Lewis Publishers.

Kalberlah, Fritz (1997). UMS-Modell-Erweiterung/Optimierung, Umsetzung in Fallstudien. Toxikologische Basisdaten. Freiburg, FoBiG GmbH. **4**.

Kang, Y. J., L. Zolna und J. M. Manson (1986). "Strain Differences in Response of Sprague-Dawley and Long Evans Hooded Rats to the Teratogen Nitrofen." Teratology **34**(2): 213-224.

Kästner, W. (1990). "Sicherheit von Tensiden in Konsumentenprodukten." Seifen-Öle-Fette-Wachse **116**: 3-9.

Kavlock, R. J. und J. A. Gray (1983a). "Morphometric, Biochemical, and Physiological Assessment of Perinatally Induced Renal Dysfunction." J Toxicol Environ Health **11**: 1-13.

Kavlock, R. J. und L. E. Gray, Jr. (1983b). "Postnatal Evaluation Of Morphological And Functional Effects Of Prenatal Exposure To Nitrofen In The Long-Evans Rat." Journal of Toxicology and Environmental Health **11**(5): 679-690.

Kay, J.H. et al. (1965). Toxicol appl pharmacol **7**(6): 812-818.

Kearney, P.C. and D. D. Kaufman eds. (1975). Herbizides: Chemistry, Degredation and Mode of Action. New York, Marcel Decker, Inc.

Kerndorff, H., R Schleyer und H.H. Dieter (1993). Bewertung der Grundwassergefährdung von Altablagerungen - Standardisierte Methoden und Maßstäbe. Berlin, Institut für Wasser-, Boden- und Lufthygiene des Bundesgesundheitsamtes, WaBoLu Heft 1/1993.

Khalifa, S., T. R. Mon, J. L. Engel und J. E. Casida (1974). "Isolation of 2,2,5-endo,6-exo,8,9,10-heptachlorobornane and an octachloro toxicant from technical toxaphene." J Agric Food Chem **22**(4): 653-7.

Kimbrough, R. D., T. B. Gaines und R. E. Linder (1974). "2, 4-dichlorophenyl-p-nitrophenyl ether (Tok)." Arch Environ Health **28**(6): 316-320.

Kimerle, R. A. (1989). "Aquatic and Terrestrial Ecotoxicology of Linear Alkylbenzene Sulfonate." Surf. Det. **26**: 169-176.

Kitano, Y., A. Korimilli, A. Flake und S. Guttentag (2000a). "Effects of fetal rat tracheal occlusion (TO) on lung growth and maturation in nitrofen-induced congenital diaphragmatic hernia (CDH)." Pediatr Res **47**(4 pt 2).

Kitano, Y., A. Korimilli, A. Flake und S. Guttentag (2000b). "Tracheal occlusion (TO) decreases surfactant protein mRNA in nitrofen-induced congenital diaphragmatic hernia (CDH) in rats." J Investig Med **48**(2).

Kjellsson, G., Simonsen, V. und Amman, K., (1997). Methods for Risk Assessment of Transgenic Plants, Birkhauser Verlag AG.

Klopman, G. (1992a). "Multicase 1. A hierarchialcomputer automated structure evaluation program." Quantit. Struct. **11**: 176-184.

Klopman, G., H.S. Rosenkranz, (1992b). "Testing by artificial intelligence: computational alternative to the determination of mutagenicity." Mutation Res. **272**: 59-71.

Knoefel, P. K. und K. C. Huang (1956). "The biochemorphology of renal tubular transport: iodinated benzoic acids." J. Pharm. Exp. Ther. **117**: 307-316.

Koleva, M. (1976). "A proposal for temporary threshold value of ethyleneglycol." Khig Zdraveopaz **19**(4): 334-339.

Koller, L. D., J. H. Exon und K. C. Norbury (1983). "Induction Of Humoral Immunity To Protein Antigen Without Adjuvant In Rats Exposed To Immunosuppressive Chemicals." Journal of Toxicology and Environmental Health **12**: 2-3.

Konfliktforschung, Heidelberger Institut für (2000). Kosimo. **2000**.

Konietzka, R, und Dieter, H.H., Ed. (1998). Ermittlung gefahrenbezogener chronischer Schadstoffdosen zur Gefahrenabwehr beim Wirkungspfad Boden-Mensch. Bodenschutzhandbuch. Berlin.

Kopecz, Petra und Jürgen Thieme (1996). "Bestandsaufnahme von Rüstungsaltlastverdachtsstandorten in der Bundesrepublik Deutschland." TEXTE **27/96**: 301.

Korte, F., I. Scheunert und H. Parlar (1979). "Toxaphene (Camphechlor)." Pure Appl. Chem. **51**(7): 1561-1583.

Krakenes, J., S. Eslayed, J. Göthlin und M. Farstad (1980). "Proteinuria after selective nephroangiography in man." Acta Radiol. Diagn. **21**: 401-406.

Kramer, W., R. Bech, K.-A. Schaper, W. Wildgrube (1986). Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmittel. Mittel zur Steuerung biologischer Prozesse. Halle, Berlin.

Krause, W., C. Schobel und W. R. Press (1994). "Preclinical testing of iopromide. 2nd communication: toxicological evaluation." Arzneimittelforschung **44**(11): 1275-9.

Lahl, U., Zeschmar, B. (1986). "Umweltschonende Waschmittel." Tenside Detergents **23**: 141-144.

Lamb, J. C. Th., R. R. Maronpot, D. K. Gulati, V. S. Russell, L. Hommel-Barnes und P. S. Sabharwal (1985). "Reproductive and developmental toxicity of ethylene glycol in the mouse." Toxicol Appl Pharmacol **81**(1): 100-12.

Larson, R. J. (1983). "Comparison of Biodegradation Rates in Laboratory Screening Studies with Rates in Natural Waters." Res. Rev. **85**: 159-171.

Lasser, E. C. (1968). "Basic mechanisms of contrast media reactions. Theoretical and experimental considerations." Radiology **9171**: 63-65.

Lasser, E. C. (1987). "A coherent biochemical basis for increased reactivity to contrast material in allergic patients. A novel concept." Amer. J. Roentgenol. **149**: 1281-1285.

Layton, D., B. Mallon, W. Mitchel, L. Hall, R. Fish, L. Perry, G. Snyder, K. Bogen, W. Malloch, C. Ham und P. Dowd (1987). Conventional Weapons Demilitarization: A Health and Environmental Effects Data Base Assessment. Explosives and their Co-Contaminants. Frederick, MD. USA, U.S. Army Biomedial Research & Development Laboratory.

Lebkowska, M. (1978). "Badania nad wplywem glikolu ethylenowego na organizmy i procesy biochemichne w wodzie." Gas, Wada tech. Sanit. **52**: 194-195 (polnisch).

Leeuwen, van Hermens (1995). Risk Assessment of Chemicals: An Introduction. Dordrecht, Kluwer Acad. Publ.

Lehmann, A.J. und O.G. Fitzhugh (1954). "100-fold margin of safety." Assoc. Food Drug Off. US. Bull **18**: 33-35.

Levine, B. S., E.K Furedi, V.S. Rac, D. E. Gordon und P. M. Lish (1983). Determination of the chronic mamalian toxicological effects of RDX: Twenty- four month chronic toxicity/carcinogenicity study of hexahydro-21,3,5-trinitro-1,3,5-triazine (RDX) in the Fischer 344 rat. Chicago, IL, LIT Research Institute, U.S. Army Medical and Development Command zitiert nach McLellan et al., 1988.

Liebmann, H. (1960). Handbuch der Frisch- und Abwasserbiologie. Jena, Gustav Fischer Verlag.

Linthurst, R.A., Bourdeau, P. und Tardiff, R.G., (1995). Methods to Assess the Effects of Chemicals on Ecosystems, SCOPE, IPCS und SGOMSEC.

Lish, P. M., B. S. Levine, E. K. Furedi, E. M. Sagartz und Rac. V. S. (1984). Determination of the chronic mammalian toxicological effects of RDX: Twenty-four month chronic toxicity/carcinogenicity study of hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine (RDX) in the B6C3F1 hybride mouse. Chicago, IL, Research Institute, U.S. Army Medical and Development Command.

Litton Bionetics (1978). Carcinogenic evaluation in mice: Toxaphene. Final report. Wilmington, D.E., Litton Bionics, Inc.

Litz, N. und H.P. Blume (1989). "Verhalten organischer Chemikalien in Böden und dessen Abschätzung nach einer Kontamination." Z. f. Kulturtechnik und Landesentwickl. **30**: 355-364.

Lu, F.C. (1979). Assessment of an international level of health hazards to man of chemicals shown to be cancerogenic in laboratory animals. Regulatory aspects of carcinogenesis. F. Coulston. New York (US), Academic Press**:** 315.

Lyman, W.J. et al. (1982). Handbook of Chemical Property Estimation Methods. McGraw-Hill. New York**:** 5-1 bis 5-30.

Malacarne, D., Pesenti, R., Paolucci, M. und Parodi, S. (1993). "Relationship between molecular connectivity and carcinogenic activity: A confirmation with a new software program based on graph theory." Environmental Health Perspectives **101**(4): 332-342.

Manson, J. M., T. Brown und D. M. Baldwin (1984). "Teratogenicity Of Nitrofen (2,4-Dichloro-4'-Nitrodiphenyl Ether) And Its Effects On Thyroid Function In The Rat." Toxicology and Applied Pharmacology **73**(2): 323-335.

Maronpot, R. R., J. P. Zelenak, E. V. Weaver und N. J. Smith (1983). "Teratogenicity study of ethylene glycol in rats." Drug Chem. Toxicol. **6**: 579-594.

Martin, D. P. und E. R. Hart (1974). Subacute toxicity of RDX and TNT in monkeys. Kensington, MD, Litton Bionetics, Inc. zitiert nach McLellan et al. 1988.

Martinetz, D. (1990). Chemie, Toxikologie, Ökotoxikologie und Beseitigung von Explosivstoffen. Handbuch Umweltchemikalien. Stoffdaten - Prüfverfahren - Vorschriften. G. Rippen. Landsberg, ecomed. **24. Erg.-Lfg. 5/94:** II-2.6, Rüstungsaltlasten, Kap. 4.

Mason, M. M., C. C. Cate und J. Baker (1971). "Toxicology and carcinogenesis of various chemicals used in the preparation of vaccines." Clin. Toxicol. **4**: 185-204.

Mattheis, T. (1979). Datensammlung für Grenzkonzentrationen von Schadstoffen für die Fischproduktion. Berlin, Inst. f. Binnenfischerei.

McGahey, C. und E. J. Bouwer (1992). Wat Sci Tech **26**: 41-49.

McLellan, W. L., W. R. Hartley und M.E. Brower (1988). Health Advisory for Hexahydro-1,3,5-Trinitro-1,3,5-Triazine (RDX). Washington, EPA, Environmental Protection Agency.

Meinck, F, Stooff, H., Kohlschütter, H., (1968). Industrieabwässer. Stuttgart, Gustav Fischer Verlag.

Melnick, R. L. (1984). "Toxicities of ethylene glycol and ethylene glycol monoethyl ether in Fischer 344/N rats and B6C3F1 mice." Environ Health Perspect **57**: 147-55.

Mersch-Sundermann, V., G. Klopman, S. Rosenkranz, (1993). "Chemische Struktur und biologische Aktivität - zur prädiktiven Bewertung chemischer Stoffe in der Umwelt." Forum Städte-Hygiene **44**: 10-16.

Milman, H. A., J. M. Ward und K. C. Chu (1978). "Pancreatic carcinogenesis and naturally occurring pancreatic neoplasms of rats and mice in the NCI carcinogenesis testing program." J. Environ. Pathol. Toxicol. **1**(6): 829-840.

Ministerium für Ernährung, Landwirtschaft, Umwelt und Forsten (1997). Altlasten-Handbuch. Stuttgart, Ministerium für Ernährung, Landwirtschaft, Umwelt und Forsten.

Mitchell, C.S., G. Klopman, H.S. Rosenkranz, (1986). Computer automated evaluation of mutagenicity and carcinogenicity of selected polycyclic aromatic hydrocarbons. Ninth International Symposium: Polynuclear Aromatic Hydrocarbons, Columbus, Ohio, Battelle Press.

Mortelmans, K., S. Haworth, T. Lawlor, W. Speck, B. Tainer und E. Zeiger (1986). "Salmonella Mutagenicity Tests. 2. Results From the Testing of 270 Chemicals." Environ Mutagen **8**(SUPPL 7): 1-119.

Mulisch, H.-M., H. Schörling, Ed. (1997). Trinkwasserressourcen im Umfeld militärischer Liegenschaften. WaBoLu-Hefte. Berlin, Institut für Wasser-, Boden- und Lufthygiene.

Mulisch, H.-M., W. Winter (2000a). Erarbeitung von Basis- und Gefahrenwerten für prioritäre Schadstoffe in Roh- und Trinkwasser im Einzugsgebiet militärischer Altlasten. Potsdam, Ressortforschungs des BMG**:** 352.

Mulisch, H.-M., W. Winter, H.H. Dieter, H. Kerndorff (2000b). Kriterienkatalog zur Beurteilung von Gefahren in Einzugsgebieten von Trinkwassergewinnungsanlagen am Beispiel militärischen Altlasten. Berlin, WaBoLu-Hefte 6/99, Umweltbundesamt.

Mulisch, H.-M., W. Winter, H.H. Dieter (2001). "Verfahren zur Bestimmung der Trinkwasserrelevanz von chemischen Stoffen und zur Ableitung von Zielwerten für Trinkwasser bei der Sanierung von Altlasten." altlasten spektrum **2 April 2001**: 77-82.

Mulisch, H.-M., W. Winter, H.H. Dieter (2003). "Modulares System zur Gesamtbewertung von Umweltkontaminanten in Boden, Gewässer und Trinkwasser." Bundesgesundheitsblatt - Gesundheitsforsch - Gesundheitsschutz **8**: 668-676.

Mulisch, H.-M. (1998). Trinkwasserschutz im Umfeld von Liegenschaften der ehemaligen Nationalen Volksarmee im Freistaat Sachsen. Berlin, Umweltbundesamt Berlin**:** 130.

Mulisch, H.-M., W. Winter, S. de Lima (1999). Trinkwasserschutz im Umfeld von Liegenschaften aus der militärische Nutzung durch die Westgruppe der Truppen der Sowjetarmee (WGT). Texte. Berlin, Umweltbundesamt Berlin. **77/99:** 303.

Mulisch, H.-M., H.H. Dieter und G. Möschwitzer (1999). Militärchemische Altlasten. Umweltmedizin. Volker Mersch-Sundermann. Stuttgart, New-York, Georg Thieme Verlag**:** 740.

Mulisch, H.-M., W. Winter und A. Grohmann (1996). "Assessment of the hazards to drinking water from former military sites." J. Water SRT - Aqua **45**(2): 72-75.

Murphy, T. J., M. D. Mullin und J. A. Meyer (1987). "Equilibration of Polychlorinated Biphenyls and Toxaphene With Air and Water." Environmental Science and Technology **21**(2): 155-162.

Murty, A. S., J. R. Miles und C. M. Tu (1982). "Persistence and mobility of nitrofen in mineral and organic soils." J Environ Sci Health B **17**(2): 143-52.

Mützel, W., M. Langer und R. Kesser (1989). Renal excretion of iopromide and iopamidol after intravenous administration in digital subtraction angiography. Recent Developments in Nonionic Contrast Media. S. Wende V. Taenzer, Eds. Stuttgart New York, G. Thieme Verlag**:** 101-104.

Mützel, W. und U. Speck (1983a). "Pharmacochemical Profile of Iopromide." Amer. J. N. R. **4**: 350-352.

Mützel, W. und U. Speck (1983b). "Tolerance and biochemical pharmacology of iopromide." Fortschr Geb Röntgenstrahlen Nuklearmed Ergänzungsbd **118**: 11-7.

Mützel, W. und U. Speck (1983c). Tolerance and biochemical pharmacology of iopromide. Contrast media in urography, Angiography and Computerized Tomography. V. Täenzer und E. Zeitler. Stuttgart , New York, Georg Thieme Verlag**:** 11-17.

Nagano, K., E. Nakayama, H. Oobayashi, T. Nishizawa, H. Okuda und K. Yamyzaki (1984). "Experimental studies on toxicity of ethylene glycol alkyl ethers in Japan." Environ. Health Perspect. **57**: 75-84.

NCI (1977). Bioassay of toxaphene for possible carcinogenicity. Bethesda, M.D., National Cancer Institute, Division of Cancer Cause and Prevention. Carcinogenesis Testing Program**:** 105.

NCI (1978). Bioassay of nitrofen for possible carcinogenesis. Bethesda, MD, National Cancer Institute**:** DHEW (NIH) Publication No. 78-828. 45 pp.

NCI (1979). Bioassay of nitrofen for possible carcinogenesis. Bethesda, MD, National Cancer Institute**:** DHEW (NIH) Publication No. 79-1740. 44 pp.

Nordic chemicals group und E. Söderlund (1993). "Health effects of selected chemicals 2. Sodium dodecylbenzenesulfonate." TA:Nord PG: 29.

NTP (1993). "NTP Toxicology and Carcinogenesis Studies of Ethylene Glycol (CAS No. 107-21-1) in B6C3F1 Mice (Feed Studies)." Natl Toxicol Program Tech Rep Ser **413**: 1-177.

NTP (2003a). Dodecylbenzolsulfonate, National Toxicological Program US EPA. **2003**.

NTP (2003b). Toxaphene, National Toxicological Program US EPA. **2003**.

OECD - Environmental Directorate (1996). Food Safety Evaluation, OECD.

O'Hara, G. P., P. K. Chan, J. C. Harris, S. S. Burke, J. M. Smith und A. W. Hayes (1983). "The effect of nitrofen [4-(2,4-dichlorophenoxy)nitrobenzene] on the reproductive performance of male rats." Toxicology **28**(4): 323-33.

Olson, K. L., F. Matsumura und G. M. Boush (1980). "Behavioural effects on juvenile rats from perinatal exposure to low levels of toxaphene, and its toxic components, toxicant A, and toxicant B." Arch Environ Contam Toxicol **9**(2): 247-57.

PAN (2003). Pesticides Database - Chemical Toxicity Studies on Aquatic Organisms, Pesticide Action Network - North America.

Parvez, Z., M. Kormano, K. Satokari, R. Moncada und R. Eklund (1987). "Induction of Mitotic Micronuclei By X-Ray Contrast Media in Human Peripheral Lymphocytes." Mutat Res **188**: 233-239.

Paynter, o. E. (1960). Toxicol. Appl. Pharmacol. **2**: 641.

Peters, G. T., D.T. Vurton, R. L. Paulson und Turley. S. D. (1991). "The acute and chronic toxicity of Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine (RDX) to three freshwater invertebrates." Environ. Toxcol. Chem. **10**: 1073-1081.

Pfeiffer, E. H. und H. Dunkelberg (1980). "Mutagenicity of ethylene oxide and propylene oxide and of the glycols and haloydrins formed them during the fumigation of foodstuffs." Fd. Cosmet. Toxicol. **18**(155-118).

Phipps, G. L., M.J. Harden, E. N. Leonard, T. H. Roush, D. L. Spehar, C. E. Stephan und Q. H. Buikema Pichering, Jr. A. L. (1984). "Effects of Pollution on Freshwater Organisms." J. Water Pollut. Control. Fed. **56**: 725.

Pillard, D. A. (1995). "Comparative Toxicity of Formulated Glycol Deicers and Pure Ethylene and Propylene Glycol to Ceroidaphnia dubia and Pimephales promelas." Environ. Toxicol. Chem. **14**((2)): 311-315.

Pirages, Suellen W. (1999). Risk Assessment Methodology. Rockville, International Center for Toxicology and Medicine.

Pitter, P. et al. (1964). "Sbornikvysoke skoly chemicko-technologioke Praze." Technologie vody **8**: 167.

Price, C. J., J. D. George, M. C. Marr, C. A. Kimmel, B. A. Schwetz und R. E. Morrissey (1988). "Developmental toxicity of ethylene glycol (CAS-No. 107-21-1) in CDrats. National Toxicology Program, USA, Research Triangle Park, NTP-88-079, 491 S." Toxicol. Appl. Pharmacol. **81**: 113-127.

Price, C. J., C. A. Kimmel, R. W. Tyl und M. C. Marr (1985). "The developmental toxicity of ethylene glycol in rats and mice." Toxicol Appl Pharmacol **81**(1): 113-27.

Rapaport, R. A. et al. (1990). "Monitoring Linear Alkyl Benzene Sulfonate in the Environment: 1973-1986." Environ. Toxicol. Chem. **9**: 1245-1257.

Raub, J. A., R. R. Mercer, R. J. Kavlock und C. J. Setzer (1983). "Effects of Prenatal Nitrofen Exposure On Postnatal Lung Function in the Rat, in: Abnormal Functional Development of the Heart, Lungs, and Kidneys: Approaches to Functional Teratology." Prog Clin Biol Res **140**: 119-134.

Reppe, Silvia, Ed. (1995). Erfassung und Bewertung von Militärischen und Rüstungsaltlasten (ALADIN, MEMURA, MAGMA). TEXTE. Berlin, Umweltbundesamt.

Rice, C. P., P. J. Samson und G. Noguchi (1985). "Atmospheric Transport of Toxaphene to Lake Michigan." Govt Reports Announcements & Index **04**.

Richardson, K. E. (1973). "The effect of partial hepatectomy on the toxicity of ethylene glycol, glycolic acid, glycolic acid and glycine." Toxicol. Appl. Pharmacol. **24**: 530-538.

Ridings J.E., Barratt M.D., Cary R., et al., (1996). "Computer prediction of possible toxic action from chemical structure; an update on the DEREK system." Toxicology **106**: 267-279.

Rippen, Ed. (1997). Handbuch Umweltchemikalien.

Robinson, M., C. L. Pond, R. D. Laurie, J. P. Bercz, G. Henningsen und L. W. Condie (1990). "Subacute and subchronic toxicity of ethylene glycol administered in drinking water to sprangue-dawley rats." Drug Chem. Toxicol. **13**: 43-70.

Rosenkranz, H.S., G. Klopman (1989). "Mechanistic insights gained from an analysis of carcinogenic polycyclic aromatic hydrocarbons with the computer automated structure Evaluation system." J. Amer, Call. Toxicol. **8**: 1091-1101.

Rosenkranz, H.S. (1999). Computergestützte Expertensysteme in der prädiktiven Toxikologie. Umweltmedizin. Mersch-Sundermann. Stuttgart , New York, Georg Thieme Verlag**:** 740.

Roth, A.H. (1990). Auswirkungen des nicht-ionischen Angiographie-Kontrastmittels Iopromid auf das Kellikrein-Kininsystem und das Gerinnungssystem. Tübingen, Eberhard-Karls-Universität Tübingen.

Roy, D. (1988). "Toxicity of an Anionic Detergent Dodecylbenzene Sodium Sulfonate to a Freshwater Fish Rita-Rita Determination of Lc-50 Values By Different Methods." Ecotoxicol Environ Saf **15**(2): 186-194.

S. Biedlingmaier, Schmidt, A. (1983). "Alkylsulfonic Acids and some S-containing detergents as sulfur sources for growth of Chroella Fusca." Arch. Microbiol. **136**: 124.

Sabbioni, G. (1994). "Hemoglobin binding of arylamines and nitroarenes: Molecular dosimetry and quantitative structure-activity relationship." Environ Health Perspect **102** (Suppl 6): 61-67.

Saleh, M. A. (1991). "Toxaphene: chemistry, biochemistry, toxicity and environmental fate." Rev Environ Contam Toxicol **118**: 1-85.

Saleh, M. A., W. V. Turner und J. E. Casida (1977). "Polychlorobornane components of toxaphene: structure-toxicity relations and metabolic reductive dechlorination." Science **198**(4323): 1256-8.

Samosh, L. V. (1974). "Chromosome aberrations and the character of satellite associations following accidental exposure of the human body to polychlorocamphene." Tsitol. Genet. **8**: 24-27.

Sanchez, L. et al. (1989). "Accumulation of Anionics in Sludges." Tenside Surf. Det. **26**: 27-29.

Sanderson D.M. und Earnshaw, C.G. (1991). "Computer prediction of possible toxic action from chemical structure; the DEREK system." Hum Exp Toxicol. **10**: 261-273.

Schäfer, J. (1995). Presentation of MEMURA, MAGMA, KOSAL and Applications on Hermannswerder Military Hospital, Münchenbernsdorf Fuel Depot, Oberlungwitz Tank Repair Shop. Minutes form the Garmisch Meeting: NATO CCMS Pilot Study "Environmental Aspects of Reusing Former Military Lands, Garmisch Partenkirchen.

Schäfer, K.W. et al., Ed. (1997). Internationale Erfahrungen der Herangehensweise an die Erfassung, Erkundung, Bewertung und Sanierung Militärischer Altlasten. TEXTE. Berlin, Umweltbundesamt.

Scheringer, M., K. Mathes, G. Weidemeann und G. Winter (1998). "Für einen Paradigmenwechsel bei der Bewertung ökologischer Risiken durch Chemikalien im Rahmen der staatlichen Chemikalienregulierung." Zeitschrift für angewandte Umweltforschung **Jg. 11**(H. 2): 227-233.

Schimmel, S. C. und J. M. Patrick (1977). "Uptake of 36Cl-toxaphene in mosquito fish (Gambusia affinis)." Bull. Environ. Contam. Toxicol. **15**: 581-587.

Schneider, K. (2001). Zur Frage von Unterschieden in der Empfindlichkeit von Kindern gegenüber krebserzeugenden Stoffen im Vergleich zu Erwachsenen. Gefährdungsabschätzung von Umweltschadstoffen. Ergänzbares Handbuch toxikologischer Basiswerte und ihre Bedeutung. T. Eikmann, Heinrich, U., Heinzow, B. Konietzka, R. Berlin, Bielefeld, München, Erich Schmidt. 5. Erg.-Lfg. 10/01, Kennz. B 100.

Schneider, K, J. Oltmanns, M. Hassauer und U. Schuhmacher (1999). Ermittlung von Prüfwerten für ausgewählte rüstungsaltlastenrelevante Schadstoffe. Berlin, FobiG.

Schneply, M.B. (1997). Health-Dangers, Risks & Assessments: Index of Modern Authors & Subjects with Guide for Rapid Research. Washington, D.C. (US), Publishers Association of Washington, D.C.

Schöberl, P., Bock, K.J., Huber, L. (1988). "Ökologisch relevante Daten von Tensiden in Wasch- und Reinigungsmitteln." Tenside Surf. Det. **26**: 282-287.

Schöberl, P. (1989). "Basic Principles of LAS Biodegradation." Tenside Surf. Det. **26**: 86-94.

Schuler, R. L., B. D. Hardin, R. W. Niemeier, G. Booth, K. Hazelden, V. Piccirillo und K. Smith (1984). "Results of testing fifteen glycol ethers in a short-term in vivo reproductive toxicity assay." Environ. Health Perspect. **57**: 141-146.

Schultz, T.W., Seward, J.R. (2000). "Health-effects related structure - toxicity relationships: a paradigm for the first decade of the new millennium." The Science of the Total Environment **249**: 73-84.

Schulz-Terfloth, G., H.-P. Lühr (1994). "Bewertungsmodell zur Gefährdungsabschätzung von Rüstungsaltlastverdachtsflächen." Altlasten-Spektrum **1/94**: 16-25.

SfU, Ed. (1995). Sondergutachten Altlasten II. Bonn, Sachverständigenrat für Umweltfragen.

Shardina, R. A. (1972). "Hygienic and toxicological assessment of nitrofen in water reservoirs." Med. Zh. Uzb. **5**: 26-28.

Shehadi, W. H. (1975). "Adverse reactions to intravascularly administered contrast media." Am. J. Rentgenol. **124**: 145.

Shehadi, W. H. und G. Toniolo (1980). "Adverse reactions to contrast media." Radiology **137**: 299-302.

Slesinski, R. S., P. J. Guzzie, W. C. Hengler und B. Ballantyne (1986). "Evaluation of the cytotoxicity and potential genotoxicity of ethylene glycol and diethylene glycol using a battery of in vitro tests." Toxicologist **6**: 228.

Smithing, M.P., F. Darvas (1991). Hazard Expert: an expert system for prediciting chemical toxicity. Food safety assessment. J.W. Finlay, Robinson, S.F., Armstrong, D.J.,. Washington, DC., American Chemical Society**:** 191-200.

Smyth, H. F., Jr., J. Seaton und L. Fischer (1941). "The Single Dose Toxicity of Some Glycols and Derivatives." Journal of Industrial Hygiene and Toxicology **23** (6): 259-268.

Sobti, R. C., A. Krishan und J. Davies (1983). "Cytokinetic And Cytogenetic Effect Of Agricultural Chemicals On Human Lymphoid Cells In Vitro. II. Organochlorine Pesticides." Archives of Toxicology **52**(3): 221-231.

Speck, U., W. Muetzel und H. J. Weinmann (1983). Chemistry, physicochemistry and pharmacology of known and new contrast media for angiography, urography and CT enhancement. Contrast media in urography, angiography and computerized tomography. V. Tänzer und E. Zeitler. Stuttgart, New York, G. Thieme Verlag**:** 2-10.

Speck, U. und W. Mützel (1982). Two new classes of low-osmolar contrast agents: triiodinated cations and nonionic dimers. Contrast media in radiology. M. Miel. Berlin, Heidelberg, New York, Springer**:** 336-339.

Spranggord, R.J., W.R. Mabey, T.W. Chou, Lee. S., P.L. Alferness, D.S. Tee und T. Mill (1983). Environmental fate studies of HMX. Phase II, detailed studies. Final Report. Menlo Park, CA, SRI International.

SRC (2003). SRC PHYSPROP Databases, Syracuse Research Corporation. **2003**.

Steger-Hartmann, T., R. Lange und H. Schweinfurth (1999). "Environmental risk assessment for the widely used iodinated X-ray contrast agent iopromide (Ultravist)." Ecotoxicol Environ Saf **42**(3): 274-81.

Stephenson, M.E. (1977). "An Approach to the Identification on Organic Compounds Hazardous to the Environment and Human Health." Ecotox. Environ. Safety **1**: 39.

Stone, L. C. und J. M. Manson (1981). "Effects of the herbicide 2,4-dichlorophenyl-p-nitrophenyl ether (nitrofen) on fetal lung development in rats." Toxicology **20**(2-3): 195-207.

Sublette, K. L., E. V. Ganapathy und S. Schwartz (1992). "Degradation of munition wastes by Phanerochaete chrysosporium." Appl. Biochem. Biotechnol. **34/35**: 709-723.

Thomas, R.D. (1986). Drinking Water and Health. Washington, D.C., The National Academy of Sciences.

Tirone, P. und E. Boldrini (1981). "Systemic and local tolerability of iopamidol. An experimental study." Rays (Roma) **6**(2): 19-32.

Trapp, Matthies (1998). Chemodynamics and Environmental Modelling - An Introduction. Heidelberg, Springer.

TrinkwV (2001). "Verordnung zur Novellierung der Trinkwasserverordnung vom 21. Mai 2001 (Trinkwasserverordnung - TrinkwV 2001)." BGBl. I, 2001: S. 959-980.

Tryphonas, H., D. L. Arnold, F. Bryce, J. Huang, M. Hodgen, D. T. Ladouceur, S. Fernie, M. Lepage-Parenteau und S. Hayward (2001). "Effects of toxaphene on the immune system of cynomolgus (Macaca fascicularis) monkeys." Food Chem Toxicol **39**(9): 947-58.

Tscheu-Schlüter, M., W. Winter (1985). "Zur Aquatoxizität ausgewählter Harnstoff-Herbizide und zu ihrer Kategorisierung als Wasserschadstoff." Acta hydrochem. hydrobiol. **13 (**1985) 4: 489-497.

Turnbull, H., J. G. DeMann und R. F. Weston (1954). "Toxicity of Various Refinery Materials to Fresh Water Fish." 46(324-333).

Turnheim, K. (1986). "Pharmakologie nichtionischer Röntgenkontrastmittel." Wiener klinische Wochenschrift **11**: 333-338.

Tyl, R. W., C. J. Price, M. C. Marr, C. B. Myers, J. C. Seely, J. J. Heindel und B. A. Schwetz (1993). "Developmental toxicity evaluation of ethylene glycol by gavage in New Zealand white rabbits." Fundam Appl Toxicol **20**(4): 402-12.

U.S. DOD (1984). [RDX incidence of tumors in B6C3F1 mice] Available from U.S. Army Medical Research and Development Command. DAMD17-79-C-9161. Ft. Detrick, Frederick, MD 20701, Department of Defence.

U.S. EPA (1980). Ambient water quality criteria for toxaphene, U.S. Environ. Prot. Agency**:** Report 440/5-80-076.

UBA (1982). Collection of Minimum Pre-Marketing Sets of Data Including Environmental Residue Data on Existing chemicals. Prepared by Umweltbundesamt, revised by Battelle-Institut, Frankfurt am Main. Berlin, Umweltbundesamt.

UBA (1995). Ermittlung von Altlastverdachtsflächen auf den Liegenschaften der Westgruppe der sowjetischen Truppen (WGT). Projektberichte. Ottobrunn, IABG / Umweltbundesamt (UBA).

Unger, T.M., D. Van Goethem, T.E. Shellenberger, J. Carter, J. Rollheiser und G. Kuhn (1983). Perinsatal Toxicity of Nitrofen in Rats. Cansas City, U.S. Environmental Protection Agency, Midwest Research Institute**:** 106.

Urano, K. (1985). "Biodegradability of Surfactants and Inhibition of Surfactants to Biodegradation of Other Pollutants." chemosphere **14**(1333-1342).

Van Straalen, N.M. (1997). Ecological Risk Assessment of Contaminants in Soil, Chapman & Hall Ltd.

Verschueren, K. (1996). Handbook of Environmental Data on organic chemicals. New York, Van Nostrand Reinhold.

VonRumker, R., E. W. Lawleww und A. F. Meiners (1974). "Production, distribution, use and environmental impact potential of selected pesticides." Natl. Tech. Inform. Serv., PB **238**(795).

Waggy G. T. (1994). Toxicol Chem. **13**: 1277-1280.

WHG (1986). "Gesetz zur Ordnung des Wasserhaushalts (Wasserhaushaltsgesetz - WHG) vom 23.9.1986 mit späteren Änderungen." BGBl. **I**: 1529, Ber. S. 1654).

WHO (1994). International Chemical Safety Cards (ICSC), DIMDI : CIVS. 29.12.2000.

WHO (1999). Principles for the Assessment of Risks to Human Health from Exposure to Chemicals. Geneva, World Health Organisation**:** 110.

WHO, Word Health Organisation (1993). Guidelines for Drinking-Water Quality. Geneva.

Wills, J. H. , F. Cluston, E. S. Harris, E. W. McChesney, J. C. Russell und D. M. Serrone (1974). "Inhalation of aerosolized ethylene glycol by man." Clin. Toxicol. **7**: 463-476.

Winek, C. L., D. P. Shingleton und S. P. Shanor (1979). "Ethylene and Diethylene Glycol Toxicity." Toxicology Annual **3**: 297-324.

Winter, W. (1964). "Abhängigkeit des biochemischen Abbaus von der chemischen Konstitution." Wasserwirtschaft - Wassertechnik (WWT) **2**(14. Jahrgang): 52-56.

Wolf, G. L., L. Kraft und K. Kilzer (1978). "Contrast agents lower ventricular fibrillation threshold." Radiology **129**: 215-217.

Woltering, D. M. et al. (1987). "The Environmental Fate and Effects of Detergents." Tenside Surf. Det. **24**: 286-296.

Woo Y.-T., Lai D., Argus M., Arcos J. (1995). "Development of structure-activity relationship rules for predicting carcinogenic potential of chemicals." Toxicol Lett. **79**: 219-228.

Wotzka, J., Bäge, N., Bähr, I., Giest, B., Pfitzner, S., Pippig, B., Reißaus, K., Starke, W., Tscheu-Schlüter, M., Winter, W., Rummel, W., Ed. (1984). Wasserschadstoffkatalog. Berlin, Verlag für Bauwesen Berlin.

Xu, Li (1994). Quantifizierung von Toxaphenrückständen mit Hilfe eines neuen Standards und umweltrelevanten Toxaphenkomponenten in Fisch und Fischprodukten. Göttingen, Universität Göttingen**:** 140.

Yamada, T. (1981). Decomposition of Toxic and nontoxic organic compounds in soil. M.R. ed Ann Arbor Overcash, Ann Arbor Sci Publ**:** 137-149.

Yin, L., Z. Liu, L. Shi und K. Bo (1986). "Teratogenic effects of ethylene glycol (EG) in rats." Zhonghua Yufangyixue Zazhi **20**: 289-290.

DANKSAGUNG

Die vorliegende Dissertation entstand aus meiner Arbeit als wissenschaftlicher Angestellter am Umweltbundesamt und sich anschließenden Auftragsforschungsvorhaben des Bundesministeriums für Gesundheit (BMG) und des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU).

Herrn Prof. Dr.-Ing. Martin Jekel danke ich für die freundliche Förderung der Ausarbeitung der Dissertation. Bei Herrn Prof. Dr. Wolfgang Rothard bedanke ich mich für die Leitung des Promotionsausschusses als Vorsitzender. Herrn Prof. Dr. Peter Werner danke ich für seine freundliche Unterstützung als Berichter.

Besonders bedanke mich bei Herrn PD Dr. Hermann H. Dieter für die wertvollen fachlichen Hinweise und Anregungen und Herrn Dr. Werner Winter, der mir als Freund auch nach den Jahren der gemeinsamen Zusammenarbeit im Umweltbundesamt immer ermunternd zur Seite stand.

Selbstverständlich danke ich auch allen ehemaligen Kollegen, Praktikanten, meinen Mitarbeitern und meiner Familie, die mich in meiner Arbeit befürwortet und weitergebracht haben. Dem BMU und dem BMG danke ich für die finanzielle Unterstützung der Forschungsvorhaben „Trinkwasserschutz im Umfeld von Liegenschaften aus der militärischen Nutzung durch die Westgruppe der Truppen der Sowjetarmee (WGT)“ und „Erarbeitung von Basis- und Gefahrenwerten für prioritäre Schadstoffe in Roh- und Trinkwasser im Einzugsgebiet militärischer Altlasten“ .

CURRICULUM VITAE

Name:	Mulisch
Vorname:	Hans-Martin
Anschrift:	An der Parforceheide 68, 14480 Potsdam
Geburtstag:	16. Januar 1955
Geburtsort:	Braunschweig
Staatsangehörigkeit:	Deutsch
Schulausbildung:	04/61 - 07/68 Grundschule Querum in Braunschweig 08/68 - 07/72 Neue Oberschule in Braunschweig 08/72 - 07/75 Fachoberschule Braunschweig
Studium:	08/76 - 07/79 Betriebswirtschaftslehre an der Fachhochschule für Wirtschaft in Berlin 08/79 - 07/84 Medizin und Chirurgie an der Università degli Studi di Genova 08/84 - 07/91 Umwelttechnik an der Technischen Universität Berlin
Beruflicher Werdegang:	1991 - 1992 Projektingenieur bei der Fa. Energie- und Umwelttechnik Mitarbeit an industriellen Altlastenerkundungen 1992 – 1996 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Bundesgesundheitsamt / Umweltbundesamt, Institut für Wasser-, Boden- und Lufthygiene, Fachgebiet Trinkwasserhygiene, Mitarbeit in der Fachkommission Soforthilfe Trinkwasser des BMG seit 1997 Beratender Ingenieur Durchführung verschiedener Forschungsvorhaben im Bereich der Erfassung und Bewertung von militärischen Altlasten seit 2000 Geschäftsführender Gesellschafter der Umweltbüro Dipl.-Ing. Mulisch GmbH

ERKLÄRUNG

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Dissertation selbständig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt und andere als die in der Dissertation angegebenen Hilfsmittel nicht benutzt habe. Alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten oder unveröffentlichten Schriften entnommen sind, habe ich als solche kenntlich gemacht. Kein Teil dieser Arbeit ist in einem anderen Promotions- oder Habilitationsverfahren verwendet worden.