LAND
BRANDENBURG

Ministerium für Umwelt, Gesundheit
und Verbraucherschutz

Fachinformation des Landesamtes für Umwelt, Gesundheit und Verbraucherschutz

(Internetpräsentation)

Altlastenbearbeitung im Land Brandenburg

Nr. 19

Carbochemische Altstandorte der Kohleveredlung und Produktverarbeitung im Land Brandenburg

Auswertung und Empfehlungen hinsichtlich der Stoffgruppe der NSO-Heterozyklen (NSO-HET) und Metabolite

**Landesamt für
Umwelt,
Gesundheit und
Verbraucherschutz**

Fachinformation des Landesamtes für Umwelt, Gesundheit und Verbraucherschutz (Internetpräsentation) - Nr. 19

Herausgeber:
Landesamtes für Umwelt, Gesundheit und Verbraucherschutz (LUGV)
Abt. Technischer Umweltschutz, Ref. Altlasten, Bodenschutz (T 6)
Seeburger Chaussee 2
OT Groß Glienicke
14476 Potsdam

Download: http://www.mluv.brandenburg.de/info/lua-publikationen
Potsdam, im Juli 2011

Diese Informationsschrift basiert in weiten Teilen auf dem Abschlussbericht:

„Erstellung eines Gutachtens über die Relevanz von NSO-Heterozyklen in Altlasten carbochemischer Standorte im Land Brandenburg“

Auftragnehmer: Büro Dr. Beerbalk
Gustav-Meyer-Allee 25
13355 Berlin

Projektleiter: Dr. rer nat. Hans-Dieter Beerbalk
Projektbearbeiter: Dr. rer nat. Hans-Dieter Beerbalk
Dipl.-Ing Daniel Hummelt

Auftraggeber: Landesamtes für Umwelt, Gesundheit und Verbraucherschutz Brandenburg

Fachliche Begleitung: LUGV, Ref. Altlasten, Bodenschutz
Dipl.-Ing. Matthias Feskorn (Federführung)
Dr. Sabine Hahn
Dipl.-Ing. Heiko Dittmann
Dipl. Dipl.-Ing. André Wünsch
Dipl.-Ing. Ullrich Zimmermann

Endredaktion: LUGV, Ref. Altlasten, Bodenschutz
Dipl. Dipl.-Ing. André Wünsch (Federführung)
Dipl.-Ing. Matthias Feskorn
Dipl.-Ing. Ullrich Zimmermann

Diese Internetpräsentation erfolgt im Rahmen der Öffentlichkeitsarbeit des Ministeriums für Umwelt, Gesundheit und Verbraucherschutz des Landes Brandenburg. Sie darf weder von Parteien noch von Wahlwerbern zum Zwecke der Wahlwerbung verwendet werden. Der Bericht einschließlich aller Abbildungen ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung des Herausgebers unzulässig und strafbar. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Bearbeitung in elektronischen Systemen.

Der Herausgeber übernimmt keine Gewähr für die Richtigkeit, Genauigkeit und Vollständigkeit der Angaben sowie für die Beachtung privater Rechte Dritter. Die in der Veröffentlichung geäußerten Ansichten und Meinungen müssen nicht mit den Meinungen des Herausgebers übereinstimmen.

Abkürzungsverzeichnis **5**

1 Veranlassung **7**

2 Grundlagen und derzeitiger Kenntnisstand **8**

2.1 Kohle - Lagerstättenentstehung (Quelle: [67], [68], [69], [70] und [71]) 8

2.2 Heterozyklen 10

2.3 Vorkommen heterozyklischer Verbindungen 10

2.4 Carbochemische Standorte 12

2.5 Nationale Stoffdatenrecherche (NSO-HET) 15

2.6 Internationale Stoffdatenrecherche (NSO-HET) 16

2.6.1 Umwelteigenschaften der NSO-HET 16

3 Carbochemische Standorte im Land Brandenburg **20**

3.1 Standortkategorisierung 20

3.2 Standortrecherche 20

3.3 Auswertung vorliegender Standortuntersuchungen (Grundwasser) 21

4 Ermittlung prioritärer NSO-Heterozyklen **23**

4.1 Nationaler Sachstand – Priorisierungsansätze 23

4.2 Ableitung prioritärer NSO-Heterozyklen für die carbochemischen Standorte im Land Brandenburg 26

4.3 Auswertung der Untersuchungsergebnisse carbochemischer Standorte im Land Brandenburg 28

4.3.1 Kriterium – Konzentrationen (Maximalkonzentration) 28

4.3.2 Kriterium - Umweltrelevanz 32

4.3.3 Kriterium - Arbeitsschutzrelevanz 34

4.3.4 Zusammenfassung - Ableitung weiterer prioritärer NSO-HET (Brandenburg) 35

5 Hinweise zu Probennahme und Analytik von NSO-Heterozyklen **37**

5.1 Anforderungen an die Probennahme 37

5.2 Analytik in der Praxis 38

5.2.1 Kurzbeschreibung Headspace-GC-MS 39

5.2.2 Kurzbeschreibung HPLC-DAD / HPLC-MS 39

6 Ableitung ökotoxikologischer Merkmale **40**

6.1 Mikrobiologische Verfahren 41

6.1.1 MPN-Verfahren (Most Probable Number) 41

6.1.2 DAPI-Färbung 42

6.1.3 DMSO-Reduktion 42

6.1.4 Fluoreszenz in situ Hybridisierung (FISH) ... 42
6.2 Testverfahren mit Wasserorganismen ... 43
6.2.1 Algenwachstumstest [56] ... 44
6.2.2 Daphnientest [57] ... 44
6.2.3 Leuchtbakterientest [58] ... 44
6.2.4 Bestimmung der koloniebildenden Einheiten (KBE) [59] ... 44
7 Zusammenfassung und Ausblick 44
8 Literaturverzeichnis 46
9 Anlagenverzeichnis 50

Abbildungen:

- Alle verwendeten chemischen Formeln und Molekülstrukturen wurden mit dem Programm ACD/ChemSketch erstellt. Die Namen der chemischen Verbindungen orientieren sich an der IUPAC - Nomenklatur. Die dargestellten Reaktionsgleichungen wurden in Anlehnung an die jeweils angegebene Literatur entwickelt.
- Quellen der Abbildung auf S. 19: http://cfpub.epa.gov/ecotox/; http://www.natural-attenuation.de/ und http://ecb.jrc.ec.europa.eu/esis/

Abkürzungsverzeichnis

BG…….	Bestimmungsgrenze
BMBF…….	Bundesministerium für Bildung und Forschung
BTEX…….	aromatische Kohlenwasserstoffe - Benzol, Toluol, Ethylbenzol und Xylol
DAPI…….	4‘,6-Diamidino-2‘-phenylindol
DMSO……..	Dimethylsulfidoxid
DIN…….	Deutsches Institut für Normung e.V.
DNA	Desoxyribonukleinsäure (-acid)
DOC……..	Dissolved Organic Carbon - gelöster organischer Kohlenstoff
DVGW……..	Deutscher Verein des Gas- und Wasserfaches e. V.
DVWK……..	Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau e.V.
EC50…….	Effective Concentration (Konzentration bei der 50 % der Testorganismen/Versuchstiere den geprüften Effekt zeigen)
EMNA……...	Enhanced and Monitored Natural Attenuation (Stimulierung und Beobachtung natürlicher Selbstreinigungs-/ Abbauprozesse)
EPA……..	Environmental Protection Agency (US-amerikanische Umweltbehörde)
FISH…….	Fluoreszenz in situ Hybridisierung
GFS-Werte……..	Geringfügigkeitsschwellenwerte
GOK……..	Geländeoberkante
GW.....	Grundwasser
GWA.....	Grundwasseranschnitt
GWL…….	Grundwasserleiter
GWMS.....	Grundwassermessstelle
GWRA…….	Grundwasserreinigungsanlage
HET……	Heterozyklische aromatische Kohlenwasserstoffe
HPLC-DAD……..	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie mit Dioden-Array-Detektor
HPLC-MS-MS…….	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie mit tandemmassenspektrometrischer Detektion
HS-GC-MS……..	Headspace-Gaschromatographie mit massenspektrometrischer Detektion
IUPAC……..	International Union of Pure and Applied Chemistry
KOC…….	Sorptionskonstante
KORA……...	Förderschwerpunkt des Bundesministeriums für Bildung und Forschung *„Kontrollierter natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Grundwässer und Böden“*
KOW…….	Verteilungskoeffizient n-Octanol/Wasser
KW…….	Kohlenwasserstoffe, auch Kohlenwasserstoff-Index
LC50…….	Lethal Concentration (Konzentration, bei der 50% der Testorganismen/Versuchstiere sterben)
LD50…….	Lethal Dose (Dosis, bei der 50% der Testorganismen/Versuchstiere sterben)

MKW…….	Mineralöl-Kohlenwasserstoffe
MPN-Verfahren……..	most probable number, statistisches Verfahren zur Abschätzung der Anzahl von Mikroorganismen
NSO-HET…….	Stickstoff-, Sauerstoff-, Schwefel-(haltige) Heterozyklen
PAK……..	polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe
Propidium-Iodid (PI)	rot fluoreszierender Farbstoff
RNA.....	Ribonukleinsäure
SYTO 9.....	grün fluoreszierender Farbstoff
US EPA.....	United States Environmental Protection Agency
WGK…….	Wassergefährdungsklasse

1 Veranlassung

Im Bereich der Standorte der Braunkohleveredelung und der Gasgewinnung aus Braunkohle (z.B. Kokereien, Schwelereien und Gaswerke) sowie an Standorten der Verarbeitung von Braunkohlenteeren sind Böden und Grundwässer mit braunkohlenspezifischen Schadstoffen kontaminiert. Neben den bekannten Schadstoffgruppen der aliphatischen Kohlenwasserstoffe (MKW, KW) und der mono- und polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (BTEX, PAK) wurden an solchen Standorten mit der Stoffgruppe der heterozyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffe (HET)[1] Schadstoffe gefunden, für die hinsichtlich der Untersuchung und Bewertung noch wenig Erfahrungen vorliegen. Auch im Zusammenhang mit der Beurteilung mikrobieller Reinigungsverfahren sowie der Nutzung und Unterstützung natürlicher Schadstoffminderungsprozesse ergeben sich zunehmend Fragen zur Bedeutung von Heterozyklen im Grundwasser und Boden carbochemischer Altstandorte.

Im Rahmen des Themenverbundes 2 des Förderschwerpunktes KORA („Kontrollierter natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Grundwässer und Böden“) des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) wurde 2008 anhand der Daten ausgewählter Referenzstandorte der Steinkohlenverarbeitung eine Prioritätenliste für die Stoffgruppe der NSO-Heterozyklen[1] und deren Metabolite erstellt. Weiterhin wurde das Verhalten von diesen Einzelverbindungen im Hinblick auf die natürlichen Selbstreinigungsprozesse untersucht und bewertet. Im Gegensatz zu diesen Forschungsergebnissen wurden bei Untersuchungen von Altlastenstandorten der carbochemischen Industrie im Land Brandenburg festgestellt, dass sich das Schadstoffspektrum bezüglich der heterozyklischen Einzelverbindungen z.T. deutlich unterscheidet.

Mit dem vorliegenden Bericht werden in einem ersten Bearbeitungsschritt die Relevanz der im Land Brandenburg nachgewiesenen NSO-Heterozyklen beurteilt und erste Hinweise zum Untersuchungsspektrum, den Beurteilungskriterien, Probennahmevorgaben und analytischen Nachweismethoden gegeben.

Als Informationsgrundlage dienten Erkenntnisse (Grundwasseranalysen) aus laufenden bzw. abgeschlossenen Untersuchungsmaßnahmen zu Standorten der Braunkohleveredelung und der Gasgewinnung (Kokereien, Schwelereien und Gaswerke) sowie von Standorten der Verarbeitung von Teeren und Teerölen im Land Brandenburg (Redaktionsstand: 2010). Die verfügbaren Untersuchungsergebnisse wurden bezüglich der ermittelten NSO-HET-Einzelverbindungen und deren Konzentrationsbereiche sowie ihrer Relevanz für den Umwelt- und Arbeitsschutz ausgewertet und diskutiert. Im Ergebnis der vorliegenden Datenanalyse und Literaturrecherche sowie einem weiteren noch ausstehenden Bearbeitungschritt (2011/2012) sollen dann abschließend:

- Bewertungsgrundsätze für die zuständigen Behörden und Fachgutachter unter Berücksichtigung der Umwelt- und Arbeitsschutzrelevanz der relevanten NSO-HET Einzelverbindungen abgeleitet,
- eine Liste prioritär in Brandenburg zu untersuchender Heterozyklen vorgeschlagen,
- Methoden zur Ableitung ökotoxischer Merkmale vorgestellt und
- ergänzende Hinweise zur Schadstoffanalytik für das Land Brandenburg gegeben werden.

An dieser Stelle möchten wir uns bei den Fachkollegen der unteren Bodenschutzbehörden der Kreise und kreisfreien Städte, für ihre Unterstützung und geleistete Arbeit bedanken.

[1] zyklische organische Verbindungen die neben Kohlenstoff noch weitere Atome, sogenannte Heteroatome wie z. B. Stickstoff (N), Schwefel (S) oder Sauerstoff (O) im Ringsystem enthalten

2 Grundlagen und derzeitiger Kenntnisstand

Die im ersten Bearbeitungsschritt durchgeführte Literaturrecherche umfasste nationale und internationale Literatur und diverse Datenbanken (z.B. ECOTOXicology database US EPA und European chemical Substances Information System - Joint Research Centre). Weiterhin wurden die von den Unteren Bodenschutzbehörden zur Verfügung gestellten Daten für die Auswertung herangezogen. Die Recherche-ergebnisse sind in der Anlage IV (Literatursammlung) aufgeführt.

Dabei bezog sich die nationale und internationale Literaturrecherche vor allem auf folgende Themenschwerpunkte:

- Allgemeine Grundlagenermittlung (z.B. Lagerstättenentstehung, biologisch, chemische und physikalische Prozesse, historische Entwicklung der Carbochemie, etc.)
- Relevanz von NSO-Heterozyklen an Standorten der carbochemischen Industrie
- chemische und physikalische Eigenschaften
- mikrobiologische Abbaubarkeit
- Toxizität von NSO-Heterozyklen
- analytische Verfahren

Es zeigte sich, dass nur wenige Informationen zu NSO-Heterozyklen vorliegen. Speziell hinsichtlich der Wirkung auf Schutzgüter und das Umweltverhalten der NSO-Heterozyklen an kontaminierten Standorten der carbochemischen Industrie, wurden nur sehr wenige Quellen gefunden. Deshalb wurden insbesondere Literaturquellen recherchiert und ausgewertet, welche sich mit den Stoffeigenschaften einzelner für die Aufgabenstellung relevanter NSO-Heterozyklen beschäftigen.

2.1 Kohle - Lagerstättenentstehung (Quelle: [67], [68], [69], [70] und [71])

Als Kohle bezeichnet man allgemein die brennbaren Überreste von Pflanzen und anderen organischen Substanzen, die über das Stadium des Torfs in langen geologischen Zeiträumen durch den Vorgang der Inkohlung[2] in braune bis schwarze Sedimentgesteine umgewandelt wurden.

Das im Wasser unter weitgehendem Sauerstoffabschluss angesammelte Pflanzenmaterial vertorft zunächst. Bei diesem chemisch-biologischen Umwandlungsprozess werden die Pflanzenbestandteile Zellulose, Lignin und Proteine vorwiegend mikrobiell zu Humusstoffen (Huminsäuren) unter Verlust von CO_2 und H_2O, aber unter Anreicherung von Kohlenstoff abgebaut. Im späteren Verlauf der sog. Inkohlung, welche von physikalisch-chemischen Reaktionen bestimmt wird, erhöht sich durch Verlust von Wasser, Hydroxylgruppen (OH) und Methan (CH_4) der relative Anteil des Kohlenstoffs weiter, während der Gehalt an flüchtigen Bestandteilen sinkt.

Die entstehenden *Braunkohlen* werden i.d.R. mit steigendem Inkohlungsgrad wie folgt unterschieden:

- Erdbraunkohle,
- Weichbraunkohle und
- Hartbraunkohle, zu denen auch die Matt- und Glanzkohlen gehören.

Beim Übergang vom *Braunkohlenstadium* in das *Steinkohlenstadium*, werden die Huminsäuren zerstört und Methan wird abgegeben. Die Inkohlung geht dann von den gasreichen Steinkohlen zu immer gasärmeren Steinkohlenformen über:

Flamm-/Gasflammkohle ⇨ Gas-, Fett-, und Eßkohle ⇨ Magerkohle ⇨ Anthrazit

[2] diagenetische Umbildung von pflanzlichen Substanzen (v.a. Cellulose und Lignin) zu Torf (s. [69])

In chemischer Hinsicht unterscheiden sich Braun- und Steinkohlen wie im Folgenden beschrieben.

Die organischen Bestandteile der *Braunkohlen* bestehen aus dem Bitumenanteil (insbesondere Harze und Wachse) sowie aus Huminstoffen.

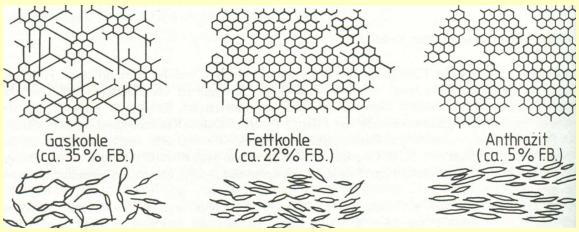


Abb. 1: Zunehmende Aromatisierung von Steinkohlen (Quelle: [70])

Die weitere Entwicklung der Huminstoffe in den *Steinkohlen* ist durch zunehmende Aromatisierung gekennzeichnet. Dabei entstehen durch Ab- und Umbau der aromatischen Ringe, Brücken und Seitengruppen immer größere Anteile geordneter Elemente (Kristallite), welche insgesamt dem Graphitgitter immer ähnlicher werden (s. Abbildung 1). Bei der Steinkohle liegen nur ca. 10 % des Kohlenstoffs frei vor, der Rest ist in einem Verbindungsgemisch enthalten, das vor allem aus aliphatischen und aromatischen Kohlenwasserstoffen besteht in denen außer *Sauerstoff* auch *Schwefel* und *Stickstoff* chemisch gebunden sind.

Daneben enthält jede Kohle auch anorganische Ballaststoffe (z.B. Tonminerale sowie Carbonat- und Pyritkristalle), wobei z.B. der Schwefelgehalt teilweise aus dem Eiweiß der Pflanzen aber auch aus Schwefelbakterien stammen kann.

Kohleart	Wassergehalt (frisch gefördert) [%]	Flüchtige Bestandtteile [%]	Kohlenstoff * [%]	Wasserstoff * [%]	Sauerstoff * [%]
Weichbraunkohle	45 - 60	70 - 50	65 - 70	5 - 9	18 - 30
Hartbraunkohle	10 - 30	64 - 45	70 - 75	5 - 6	12 - 18
Flammkohle	4 - 7	45 - 40	75 - 82	5,8 - 6,0	> 9,8
Gasflammkohle	3 - 6	35 - 40	82 - 85	5,6 - 5,8	9,8 - 7,3
Gaskohle	3 - 5	28 - 35	85 - 87	5,0 - 5,6	7,3 - 4,5
Fettkohle	2 - 4	19 - 28	87 - 89	4,5 - 5,0	4,5 - 3,2
Eßkohle	2 - 4	14 - 19	89 - 90	4,0 - 4,5	3,2 - 2,8
Magerkohle	1 - 3	10 - 14	90 - 91,5	3,75 - 4,0	2,8 - 2,5
Anthrazit	< 2	6 - 10	> 91,5	< 3,75	< 2,5
*) - in wasser- und aschefreier Substanz					

Abb. 2: Zusammensetzung von Kohle, deutsche Einteilung (Quelle: in Anlehnung an [69])

Aus Abbildung 2 ist weiterhin ersichtlich, dass mit zunehmenden Inkohlungsgrad das C:H– Verhältnis ansteigt. Bezüglich des Aromaten-Gehaltes ist entsprechend [67] ebenfalls ein Anstieg von der Flammkohle[3] (83%) über Gaskohle (85 %) zum Anthrazit (96-100%) hin zu beobachten, wobei die angegebenen Werte für die Vitrinite (bzgl. Steinkohle: inkohlte Reste von Holz, Rinde und Wurzeln) gelten.

Hinsichtlich der verschiedenen Kohlenarten ist aus Abbildung 2 z.B. auch die sprunghafte Verringerung des Wasseranteils und des Anteils der flüchtigen Bestandteile beim Übergang von der Braunkohle zur Steinkohle zu erkennen sowie die stetige Zunahme des Kohlenstoffanteils mit zunehmendem Inkohlungsgrad.

Außer Kohlenstoff und Wasserstoff enthalten die Kohlen wie oben schon angeführt auch Sauerstoff, Stickstoff und Schwefel. Der Stickstoff kommt fast ausschließlich in zyklischen Strukturen vor. Schwefel bildet, besonders in jüngeren Kohlen, neben Thiophenstrukturen auch Thioäther. Der Sauerstoff liegt in Steinkohlen etwa zur Hälfte in Form von phenolischen Hydroxylgruppen vor, den Rest bilden Carbonyl- und Äthergruppen. Braunkohlen enthalten Carboxylgruppen, weshalb sie im Gegensatz zu Steinkohlen teilweise alkalilöslich sind.

	Steinkohlenteere		Braunkohlenteer	Torfteer	Holzteer
	Koksofenteer	Niedertemperaturteer			
Dichte bei 20°C [g/cm³]	1,14-1,25	0,96-1,05	0,95-1,05	0,94-0,98	1,08-1,20
Kohlenstoff [%]	90-93	83-85	81-85	78-82	60-65
Wasserstoff [%]	5-6	8-9,5	9-11	8-10	6-8
Naphthalin [%]	5-15	0-2	0-1	0-1	0-0,5
Phenole [%]	0,5-5	10-45	5-30	5-25	20-40
Feste Paraffine [%]	0-Spuren	3-15	8-20	10-30	Spuren
Verkokungsrückstand (ISO 6615:1983) [%]	10-40	5-15	4-9	4-10	10-18
Wasser [%]	<5	<5	5	1-10	3-0
Destillationsanalyse (DIN 1995)					
Leichtöl[1] (bis 180°C) [%]	0,2-2	0-4	0-2	0-3	0-10
Mittelöl[2] (180 bis 230°C) [%]	3-10	5-25	0-4	3-25	10-14
Schweröl[3] (230 bis 270°C) [%]	7-15	10-20	2-18	5-20	7-12
Anthracenöl[4] (270 bis 300°C) [%]	3-7	8-12	5-20	10-20	5-10
300°C bis Pech[5] [%]	12-30	15-40	20-50	20-40	25-40
Pech [%]	45-65	25-40	20-60	20-35	20-30

1 Wichtige Inhaltsstoffe sind Benzol, Toluol, Inden, Benzolhomologe, Pyridin, Chinolin und Isochinolin, die zu Teerfarben, Motorenbenzol, Harzen, Lacken, Lösemitteln, Textilhilfsmitteln verarbeitet werden.
2 Wichtige Inhaltsstoffe sind Naphthalin, Phenol, Kresol, Rückstandsöl, die zu Teerfarben, Ruß, Kunstharzen, Desinfektionsmitteln, Imprägniermitteln, Heizöl verarbeitet werden.
3 Wichtige Inhaltsstoffe sind Indol, Carbazol, Acridin, Dibenzofuran und diverse PAK, aus denen Duftstoffe oder auch Imprägniermittel hergestellt werden.
4 Wichtige Inhaltsstoffe sind als Feststoffe Anthracen und Phenanthren sowie einige Öle. Aus Anthracenöl werden Carbolineum, Teerfarben und Ruß hergestellt.
5 Pech besteht aus hochmolekularen Anteilen und wird für die Herstellung von Dachpappen und Dichtungsmassen verwendet.

Abb. 3: Eigenschaften und Zusammensetzung verschiedener Teere (Quelle: [61aA])

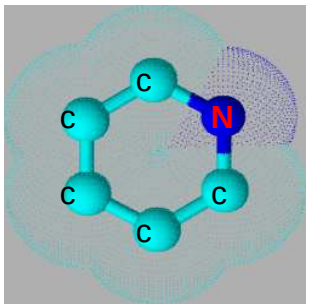
[3] Steinkohlenart

Unter Berücksichtigung der o.g. Aspekte unterscheiden sich demnach die Kohlenarten sowohl in makro-/mikroskopischer Hinsicht als auch in ihrer chemischen-physikalischen Zusammensetzung und Eigenschaften. Abbildung 3 verdeutlicht dies auch nochmals anschaulich am Beispiel von Untersuchungsergebnissen hinsichtlich verschiedener Teere, welche auf der Basis unterschiedlicher Ausgangsprodukte (Holz, Torf, Braunkohle und Steinkohle) erzeugt wurden.

Auf Grund der o.g. Informationen, weiterer wissenschaftlicher Veröffentlichungen und den Erkenntnissen aus bereits vorliegenden altlastenspezifischen Untersuchungsarbeiten an Standorten der carbochemischen Industrie im Land Brandenburg, soll im weiteren speziell die Fragestellung der Variabilität des Vorkommens von heterozyklischen Verbindungen (Schadstoffspektrum) in Abhängigkeit vom verarbeitenden Ausgangsrohstoffe (Braun-/Steinkohle) beleuchtet werden. Dieses soll im Folgenden weiter vertieft betrachtet und anhand von standörtlichen Untersuchungsergebnissen und dem derzeitigen wissenschaftlichen Kenntnisstand diskutiert werden.

2.2 Heterozyklen

Der Sammelbegriff „Heterozyklen“ bezeichnet zyklische organische Verbindungen, bei denen mindestens ein Kohlenstoffatom durch ein anderes Element, dem Heteroatom, ersetzt ist. Die häufigsten Heteroatome sind Stickstoff (N) Sauerstoff (O) und Schwefel (S). Seltene Heteroatome sind Arsen (As), Bor (B), Phosphor (P), Selen (Se) oder Zinn (Sn). Neben den gesättigten Heterozyklen (Heterozykloalkane) sind die Heteroaromaten die größte und wichtigste Gruppe dieser Substanzklasse. Heteroaromaten besitzen monoaromatische oder kondensierte Ringsysteme. Durch diese Veränderung der aromatischen Ringstruktur erhöht sich die Polarität und die Reaktionsfähigkeit der Verbindung. Daraus folgt auch eine bessere Wasserlöslichkeit und eine bessere Verfügbarkeit im mikrobiellen Stoffwechsel. Deshalb werden die Heteroaromaten als Stoffe mit biologischer Umweltrelevanz eingestuft.



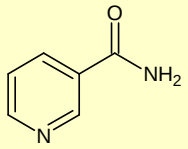
Pyridin

Die im Bereich von altlastverdächtigen Flächen und Altlasten der carbochemischen Industrie Brandenburgs nachgewiesenen Heterozyklen sind ausschließlich Heteroaromaten mit mono- und polyaromatischen Strukturen, in denen mindestens ein Kohlenstoff-Ringatom durch ein Stickstoff-, Schwefel- oder Sauerstoffatom ersetzt ist. In der ausgewerteten Literatur werden diese Verbindungen als NSO-Heterozyklen (NSO-HET) zusammengefasst.

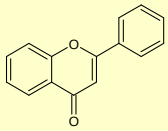
Die Nomenklatur von Heterozyklen ist recht kompliziert und beruht z. T. auf historischen Trivialnamen. In den weiteren Ausführungen werden die Namen der heterozyklischen Verbindungen in Anlehnung an die in der organischen Chemie verwendete IUPAC Nomenklatur gebildet. Sofern Heterozyklen unter Trivial- oder Handelsnamen bzw. Wirkstoffbezeichnungen allgemein bekannt sind, werden diese parallel verwendet.

2.3 Vorkommen heterozyklischer Verbindungen

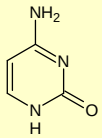
Heterozyklen sind in der Natur weit verbreitet und bilden z. T. eigene Naturstoffklassen, wie z.B. Alkaloide und Nukleinsäuren. Beispiele hierfür zeigt Abbildung 4.



3-Carboxylamido-pyridin (Vitamin B_3)



2-Phenyl-4H-chromen-4-on
Flavon (Pflanzenfarbstoff)



4-Aminopyrimidin-2(1H)-on
Cytosine (Nukleinsäure)

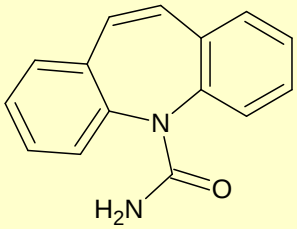
Abb. 4: heterozyklische Naturstoffe

Entscheidend für die Bedeutung der NSO-Heterozyklen in der Umwelt ist ihre Mobilität. Diese wird im Wesentlichen von den Heteroatomen oder durch die Anwesenheit von Lösevermittlern (z.B. BTEX oder Phenole) im komplexen Schadstoffgemisch, bestimmt. Durch die im Ringsystem integrierten Stickstoff-, Schwefel- oder Sauerstoffatome sind NSO-Heterozyklen deutlich polarer als die homologen Aromaten. Sie können bis zu 40% der wasserlöslichen Fraktion einer Teerölkontamination ausmachen [08]. Selbst Einzelverbindungen, welche unter normalen Bedingungen wasserunlöslich sind, können durch Lösevermittler, in Lösung gebracht werden. Da Schadstoffkontaminationen an carbochemischen Standorten i.d.R. als Schadstoffgemische, bestehend aus PAK, BTEX, Phenolen und NSO-Heterozyklen, vorliegen, kann es zu einer Lösung und Verfrachtung auch sonst wasserunlöslicher Schadstoffe kommen.

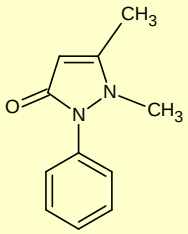
Prinzipiell unterliegen alle an teerölkontaminierten Standorten vorkommenden Schadstoffe einem mikrobiellen Abbau. Das Abbaugeschehen im Boden und Grundwasser wird von den physikalisch-chemischen und mikrobiellen Milieubedingungen bestimmt [10]. Im Gegensatz zu den PAK, bei denen die Abbaubarkeit mit steigender Ringanzahl abnimmt, zeigte sich bei den NSO-Heterozyklen, dass die Abbaubarkeit neben der Ringanzahl auch von der Art des eingebauten Heteroatoms abhängt [11]. Unter aeroben Bedingungen können die stickstoff- und sauerstoffhaltigen Heterozyklen schneller biologisch abgebaut werden als die schwefelhaltigen [12]. Für N-und O-Heterozyklen wurden eine Vielzahl von Mikroorganismen nachgewiesen, welche diese Stoffe als alleinige Energie- und Kohlenstoffquelle nutzen können [05]. Im Gegensatz dazu wurde für die S-Heterozyklen Thiophen und Benzothiophen ein cometabolischer Abbau bei Vorhandensein geeigneter Co-Substrate beschrieben [13] / [14].

Aufgrund der strukturellen Ähnlichkeit mit Naturstoffen bzw. körpereigenen Molekülen werden synthetische Heterozyklen oft als Pharmazeutika sowie Pestizide verwendet und gelangen z.B. über Abwässer und landwirtschaftliche Verwendung in die Umwelt.

Spezielle NSO-Heterozyklen, die als Wirkstoffe in Pharmaka Anwendung finden (s. Abbildung 5), wurden bereits im Grund- und Oberflächenwasser in Berlin und Brandenburg nachgewiesen und sind auf bekannte lokale Quellen zurückzuführen[4].



5H-Dibenzo[b,f]azepine-5-carboxamid
Carbamazepin



1,5-Dimethyl-2-phenyl-1,2-dihydro-3H-pyrazol-3-on
Phenazon (Antipyrin®)

Abb. 5: heterozyklische Wirkstoffe

[4] (s. http://opus.kobv.de/tuberlin/volltexte/2010/2641/)

Im Land Brandenburg wurden an Standorten der Kohleveredlung bzw. der Produktverarbeitung NSO-Heterozyklen zusammen mit mono- oder polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (BTEX, PAK) als Bestandteil der Boden- und Grundwasserkontaminationen detektiert. Die nachgewiesenen Heterozyklen stehen i.d.R. in Zusammenhang mit den produktionsspezifischen Wert- und Abfallstoffen wie Teer, Teeröl sowie den Prozess- und Abwässern.

2.4 Carbochemische Standorte

Steinkohle

Mit der Entwicklung von Techniken zur Leuchtgasproduktion begann die Errichtung von Gaswerken. Um 1811 wurde in Freiberg/Sachsen erstmals Steinkohlenteergas zur Straßenbeleuchtung erprobt und ab 1826 in Berlin eingesetzt. Von 1871 bis 1910 hatte sich der Gasverbrauch der Berliner Bevölkerung pro Kopf verzehnfacht, während die Einwohnerzahl um das Fünffache anstieg.

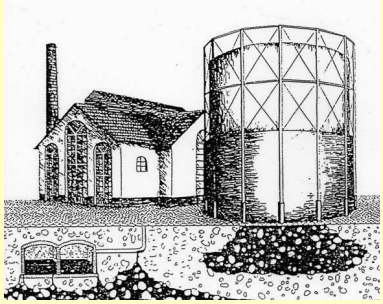


Abb. 6: Typische Verunreinigungssituation bei einem Gaswerk (Quelle: [72])

Mit der erheblichen Gasproduktion fielen große Mengen Steinkohlenteer an. Steinkohlenteerfraktionen wurden in geringem Umfang zur Holzimprägnierung und Dachpappenproduktion genutzt. Mit der Weiterentwicklung der chemischen Industrie wurden Steinkohlenteerdestillate zur Gewinnung von zahlreichen Grundstoffen und Lösemitteln, wie z. B. Kresolen, Xylenolen, Naphthalin und Anthracen u.a. interessant. So konnte die damals größte Teerverarbeitungsfabrik, die *Rütgers Teerproductenfabrik* in Erkner, (Gründung 1861/62)[5] zunächst den Teer aus den Berliner Gaswerken verarbeiten.

Der Transport der Nebenprodukte aus der Leuchtgasgewinnung aus den entfernter gelegenen Gaswerken auf dem Gebiet des heutigen Landes Brandenburg erwies sich jedoch als zu teuer und technisch nicht realisierbar, so dass der anfallende Teer häufig auf den Grundstücken der Gaswerke vergraben wurde. In historischen Quellen wird die Zusammensetzung von Steinkohlenteer der Berliner Gasanstalten wie in Tabelle 1 angegeben.

Tabelle 1: Zusammensetzung Steinkohlenteer Berliner Gasanstalten [01]

Bestandteil	Anteil [Ma.%]
Benzol und Toluol	0,8
sonstige wasserhelle Öle	0,6
kristallisierte Karbolsäure	0,2
Kresol etc.	0,3
Naphthalin	3,7
Anthracen	0,2
schwere Öle	24,0
Steinkohlenpech	55,0
Wasser und Verlust	15,2

Braunkohle

Die im Lausitzer Revier entstandenen Braunkohlelagerstätten werden seit ca. 200 Jahren zur Gewinnung von Heizmaterial und ab 1871 zur Brikettierung genutzt. Neben der Verwendung als Heizmaterial zur Wärme- und Energiegewinnung wurde Braunkohle auch als Ausgangsstoff für die chemische Industrie verwendet und durch verschiedene Verarbeitungsprozesse veredelt.

[5] http://www.erkner.de/geschichtliches.html

Die sog. thermische Kohleveredlung erfolgte durch *Verschwelung*, *Vergasung* oder *Verkokung* wie in Abbildung 7 dargestellt. Nach [67] versteht man z.B. unter dem sog. *Schwel*verfahren die trockene Destillation (Tieftemperaturverkokung) von natürlichen Brennstoffen (überwiegend Braunkohle) unter Luftabschluss, bei der flüchtige Bestandteile aus dem Ausgangsprodukt entweichen.

Aus dem bei der *Verkokung* freiwerdenden Gasstrom wurden neben dem Stadtgas durch Kondensation, Extraktion und Destillation verschiedene Veredlungsprodukte erzeugt. Hochtemperaturteer, wie er z.B. in der Großkokerei Lauchhammer, gewonnen wurde, zeichnet sich gegenüber Schwelteer durch eine größere Dichte sowie höherer Anteile an Asphalt, Kreosot und Naphthalin aus. Grund hierfür sind die bei höherer Temperatur beginnenden Crackreaktionen[6] (s. [71]). Hochtemperaturteer weist gewisse Analogien zum Braunkohlen-Generatorteer auf, der bei der Kohlevergasung anfällt.

Die *Vergasung* liefert in der Hauptsache Kohlendioxid und Wasserstoff, welche durch geeignete Katalyse zu Methan umgesetzt werden können [71]. Wird die Kohlevergasung unter Druck ausgeführt, so entstehen neben Kohlendioxid und Wasserstoff ca. 10% Methan sowie höhere Kohlenwasserstoffe (z.B. Naphtha und Benzol) [71].

Im Gegensatz zur Mittel- und Hochtemperaturverkokung (Pyrolyse) stellt man bei der *Schwelung* die Temperatur so ein, dass möglichst viel Schwelteer und Schweröle entstehen. Diese können dann als Ausgangsprodukt für die Gewinnung flüssiger Kohlenwasserstoffe dienen. Die bei diesem Veredlungsprozess entstehenden Teerölfraktionen enthalten i.d.R. auch NSO-Heterozyklen. So betrug z. B. der Pyridinanteil in sog. Leichtölen bis zu 1 %.

Nach [71] unterscheiden sich weiterhin Braunkohlenteere von Steinkohlenteeren vor allem durch einen höheren Paraffingehalt und einem geringen Anteil an aromatischen Kohlenwasserstoffen.

(Ver-)Schwelung :

Braunkohle + O_2 ⟶ Teeröle / Gas (bis 700 C°)

Verkokung:

Braunkohle + O_2 ⟶ Teeröle / Koks / Gas (bis 1.200 C°)

Lauchhammer-Verfahren (Weiterentwicklung des Lurgi-Spülgas-Verfahrens)

Brikett + O_2 ⟶ Teeröle / BHT-Koks[7] / Gas (ca. 800 C°)

Abb. 7: thermische Veredlungsverfahren im Land Brandenburg

Charakterisierung typischer Stoffe und Stoffgemische an Kohleveredlungsstandorten

Durch Handhabungs- und Transportverluste sowie Havarien im Bereich der ehemaligen Kohleveredlungsstandorte der Carbochemie gelangten vor allem Teeröle in den Boden und das Grundwasser. In Tabelle 2 erfolgt eine grobe Zuordnung ausgewählter standortspezifischer Schadstoffe zu ihrer produktionsspezifischen Herkunft (Gaswerke, Kokereien und Generatorgasanlagen).

[6] Cracken – Aufspaltung von Kohlenwasserstoffmolekülen in kleinere Bruchstücke, kann allein durch hohe Temperatur (thermisches Cracken) oder durch zusätzliche Anwendung von Katalysatoren (katalytisches Cracken) erreicht werden (s. [71]).

[7] Braunkohlenhochtemperaturkoks

Tabelle 2: Schadstoffe und ihre Anteile in typischen Stoffen und Stoffgemischen von Gaswerken/Kokereien/ Generatorgasanlagen (Quelle[8])

Stoffe/Stoffgemische	Anteil [%][9]	Schadstoffe
Steinkohlenteer	50-80	- PAK: Naphthalin, Anthracen, Phenanthren, Fluoranthen, Pyren, Benz(a)pyren
		- BTEX
	2-20	- Phenole und heterozyklische Kohlenwasserstoffe:
	0,5-5	Phenol, Kresole, Pyridin
Braunkohlenteer	20-40	- aliphatische Kohlenwasserstoffe: Paraffine bis C32, Alkene, Alkine
	10-20	- Cycloalkane, -alkene
	8-30	- Phenole
	<10	- PAK
	0,05-5	- BTEX
Ammoniakwasser[10] (Phenolwasser, Gaswasser)	k. A.	- anorganische Verbindungen: Ammoniak, Sulfat, Sulfid, Cyanid, Thiocyanat, Thiosulfat, Chlorid - organische Verbindungen: Phenole, Pyridin, Aldehyde, Ketone
verbrauchte Gasreinigermasse	25-65	- Schwefel, Sulfide
	12-65	- Eisenoxid/-hydroxid
	2-15	- komplexe Eisencyanide
Waschflüssigkeiten	k. A.	- aromatische Kohlenwasserstoffe
Löschwasser	k. A.	- Kokspartikel, Sulfid, Sulfat, Cyanid
Metalle	Spuren	- Arsen, Blei, Cadmium, Kupfer, Nickel, Quecksilber, Zink

Bezogen auf die Schadstoffgruppe der NSO-Heterozyklen, welche i.d.R. mit den durch Teer, Teeröl und Teeröldestillaten kontaminierten Betriebsflächen der Kohle- und Kohleproduktverarbeitung in Verbindung stehen, wird als Oberbegriff für diese Standorte im Weiteren der Begriff „**carbochemische Standorte**“ verwandt (s. Abbildung 8). Brikettfabriken konnten anhand der Datenlage als Branchentyp der Kohleveredlung nicht berücksichtigt werden.

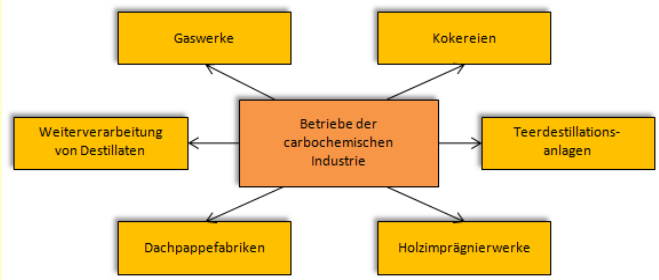


Abb. 8: ehemalige Betriebe der Carbochemie im Land Brandenburg

Rohstoffbasis in der ehemaligen DDR

Nach dem 2. Weltkrieg wurde im Zuge der Teilung Deutschlands im Gebiet der ehemaligen DDR die Braunkohle zum wichtigsten Energie- und Rohstofflieferanten. Bis Mitte der 50er Jahre des 20. Jahrhunderts wurde auch in der Gasproduktion Steinkohle durch Braunkohle ersetzt. In den 70er Jahren wurden die meisten Stadtgaswerke geschlossen. Mit der umfassenden Umstellung auf Erdgas, die 1992 abgeschlossen war, stellten die letzten Anlagen ihre Produktion ein.

Der ausschließliche Einsatz von Steinkohle betrifft im Land Brandenburg nur einzelne Gaswerke. Die ausschließliche Verarbeitung von Braunkohle beschränkt sich auf die ehemaligen Veredlungsbetriebe der Lausitz. Für die Mehrzahl der carbochemischen Betriebe im Land Brandenburg ist die wahlweise

[8] http://www.umwelt.sachsen.de/de/wu/umwelt/lfug/lfug-internet/SalfaWeb/salfaweb-nt/berichte/brabl2/brabl2-1.4.html
[9] Die angegebenen Werte zeigen die Größenordnung der angefallenen Stoffe an.
[10] Als Ammoniakwasser wird vordergründig das Abwasser aus Gaswerken und Kokereien auf Steinkohlenbasis bezeichnet.

oder aufeinander folgende Verarbeitung von Steinkohle und Braunkohle bzw. deren Produkten charakteristisch. An diesen Standorten ist vor allem durch die Intensivierung der Braunkohlennutzung in den 80er Jahren in Brandenburg mit typischen NSO-Heteroaromaten zu rechnen. In der Anlage III sind ehemalige Standorte der carbochemischen Industrie im Land Brandenburg aufgeführt.

2.5 Nationale Stoffdatenrecherche (NSO-HET)

Das Hauptaugenmerk bei der nationalen Literaturrecherche wurde auf die Ergebnisse des BMBF-Förderschwerpunkts KORA mit seinen acht Themenverbünden gelegt. Für die Aufgabenstellung waren insbesondere die umfangreichen Ergebnisse aus dem Themenverbund 2 „Gaswerke, Kokereien, Teerverarbeitung, (Holz-)Imprägnierung“ von Bedeutung. An den in diesem Zusammenhang hier detailliert untersuchten vier Referenzstandorten Wülknitz (Imprägnierwerk), Castrop-Rauxel (Kokerei), Düsseldorf-Flingern (Gaswerk) und dem „Testfeld-Süd“ in Stuttgart (Gaswerk) wurden umfangreiche Erkenntnisse zu schadstoffreduzierenden Prozessen bei Teerölaltlasten und Teerölgrundwasserschäden gewonnen. Weiterhin wurde das eigentliche Verbundprojekt noch um ein standortunabhängiges Projekt, welches sich mit der Bewertung von NSO-Heterozyklen und der Erstellung einer Prioritätenliste für diese Stoffgruppe befasste, ergänzt [04].

Diese Prioritätenliste bezog sich im Wesentlichen auf die Erkenntnisse aus den hier betrachteten Standorten der Steinkohleverarbeitung. In Tabelle 3 ist die entsprechende „KORA“ – Prioritätenliste u.a. mit Informationen zur Wasserlöslichkeit und Toxizität einzelner Verbindungen dargestellt.

Tabelle 3: KORA-Prioritätenliste NSO-Heterozyklen / -metabolite [04]

Lfd Nr.	Verbindung	Wasserlöslichkeit [mg/l]	Gehalt in Teeröl [%]	Toxizität
1	Acridinon	1,40	Metabolit	M, G
2	Benzofuran	224,00	0,1	C, M, G
3	Benzothiophen	130,00	0,3	(G), Ö
4	Carbazol	1,800	1,5	(C), (M), (G)
5	Chinolin	6.100,00	0,3	C, M, G
6	Chiloninon (Chilonin-2-on)	1.050,00	Metabolit	M, G
7	Dibenzofuran	3,10	1,3	M, G
8	Dimethylbenzofuran (2,3-Dimethylbenzofuran)	62,00	k.A.	(G), Ö
9	Dimethylchinolin (2,4-Dimethylchinolin)	1.800,00	k.A.	k.A.
10	Hydroxybiphenyl (2-Hydroxybiphenyl)	700,00	Metabolit	(C), M, G
11	Isochinolin	3.600,00	0,2	M, G
12	Isochinolinon (Isochinolin-1-on)	480,00	Metabolit	k.A.
13	Methylbenzofuran (2-Methylbenzofuran)	160,00	k.A.	k.A.
14	Methylbenzothiophen (3-Methylbenzothiophen)	49,00	k.A.	Ö
15	Methylchinolin (2-Methylchinolin)	250,00	>0,5	C, M, G, Ö
16	Methylchinolinon (4-Methylchinolin-2-on)	1.760,00	Metabolit	G
17	Methyldibenzofuran (1-,2-, 4-Methyldibenzofuran)	3,20	k.A.	Ö
18	Methylisochinolinon (1-Methylisochinolin)	410,00	k.A.	M, G
19	Phenanthridinon	280,00	Metabolit	M, G

Lfd Nr.	Verbindung	Wasserlöslichkeit [mg/l]	Gehalt in Teeröl [%]	Toxizität
20	Xanthenon	4,52	Metabolit	k.A.

Erläuterungen:

k.A. keine Angaben verfügbar, C = cancerogen, G = genotoxisch, M = mutagen, Ö = hohe Ökotoxizität (LC50<1 mg/l), Angaben in Klammern geben potentielle aber nicht zweifelsfrei nachgewiesene Toxizität an

2.6 Internationale Stoffdatenrecherche (NSO-HET)

Folgende Datenbanken wurden insbesondere hinsichtlich der Ermittlung relevanter Stoffdaten genutzt:

- **ECOTOX:** Ecotoxicology, US EPA (http://www.epa.gov/ecotox)
- **ETOX:** Informationssystem Ökotoxikologie und Umweltqualitätsziele, Umweltbundesamt (http://webetox.uba.de/webETOX/index.do)
- **ESIS:** European chemical Substances Information System, European Commision – Joint Research Centre (http://ecb.jrc.ec.europa.eu/esis/)
- **HSDB:** Hazardous Substances Data Bank, United States National Library of Medicin (NLM) (http://www.nlm.nih.gov/)
- **TOXNET:** Toxicology Data Network (http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB)
- **GSBL:** Gemeinsamer Stoffdatenpool Bund/Länder (http://www.gsbl.de)
- **GESTIS:** Stoffdatenbank, Gefahrstoffinformationssystem der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung (www.dguv.de/ifa/stoffdatenbank)
- **PubChem:** Datenbank chemischer Verbindungen, wird unterhalten vom nationalen Zentrum für Biotechnologische Information der USA (National Center for Biotechnology Information, NCBI), Teil der nationalen medizinischen Bibliothek der USA (United States National Library of Medicine, NLM), Teil des nationalen Instituts für Gesundheit der USA (National Institutes of Health, NIH). (http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez)
- **ECHA:** Europäische Chemikalienagentur (http://echa.europa.eu/home_de.asp)
- **Bureau Veritas HSE:** Skandinaviens leitendes Beratungsunternehmen für Chemie, Gefahrgut und Sicherheit. (http://www.chemtox.com/Empfehlungen-906.aspx)
- **Chemical Book:** Chemical search engine (http://www.chemicalbook.com/)

Während der Auswertung der genannten Datenbanken stellte sich heraus, dass die für die NSO-Heterozyklen verfügbaren Daten mit unterschiedlichem Umfang und in unterschiedlicher Qualität vorliegen. Für einzelne Heterozyklen konnten weder humantoxikologische noch ökotoxikologische Angaben ermittelt werden. Auch physikalisch-chemische Parameter sind nicht für alle NSO-Heterozyklen verfügbar. Die ermittelten Stoffdaten sind in der Anlage I zusammengefasst.

2.6.1 Umwelteigenschaften der NSO-HET

Die Ausführungen in diesem Kapitel dienen der Beurteilung des Gefährdungspotentials der Stoffgruppe NSO-HET, insbesondere auch hinsichtlich des Schutzgutes Grundwasser.

Weiterhin sind aber für eine abschließende Standortbeurteilung auch die in der Tabelle 4 zusätzlich aufgeführten Parameter relevant (Aufzählung nicht abschließend):

Tabelle 4: Standortparameter (in Anlehnung an [04])

Allgemeine Parameter	Aquifer-Parameter	Stoff-Parameter
Stoffmenge Quellstärke Alter des Schadens	Durchlässigkeit Fließgeschwindigkeit Vertikalströmungen Dispersion Verdünnung GW-Chemie Sorptionseigenschaften Mikroorganismen	**Wasserlöslichkeit (Mobilität)** **Sorption (Mobilität)** **mikrobiologische Abbaubarkeit** Ausgasung **Toxizität**

Mobilität

Die Mobilität der NSO-Heterozyklen wird wesentlich von der chemischen Struktur bestimmt. Durch die Stickstoff-, Schwefel- oder Sauerstoffatome im Ringsystem sind NSO-Heterozyklen deutlich polarer und damit wasserlöslicher als die homologen Aromaten [04]. Beispielsweise ist die Löslichkeit von Chinolin in Wasser (6.000 µg/l) durch das eingebaute Stickstoff-Atom um Größenordnungen höher als von Naphthalin (30 µg/l) [05]. NSO-Heterozyklen können einen Anteil von bis zu 40% der wasserlöslichen Teerölfraktionen erreichen [08]. Mit der höheren *Wasserlöslichkeit* respektive Mobilität werden für NSO-Heterozyklen entsprechend längere Schadstofffahnen als für polyzyklische Aromaten erwartet.

Mit steigender Anzahl der aromatischen Ringe und zunehmender Anzahl der Methylsubstituenten sinkt die Wasserlöslichkeit. Im Gegensatz dazu nehmen die *Sorption*skonstante (K_{OC}) und der Verteilungskoeffizient n-Octanol / Wasser (K_{OW}) zu. Dies führt zu einer höheren Mobilität der niedermolekularen Verbindungen gegenüber Verbindungen mit mehreren aromatischen Ringen [08].

Die erhöhte Polarität führt außerdem zu einem verminderten Rückhalt entlang des Fließweges, so dass mehrfach eine zunehmende Dominanz bestimmter NSO-Heterozyklen im Abstrom von Schadstoffquellen diskutiert wurde [09].

Neben den physikalisch-chemischen Eigenschaften haben die natürlicherweise im Aquifer ablaufenden biologischen Abbauvorgänge einen Einfluss auf die Fahnenlänge [04].

Differenziertere Aussagen zum Mobilitätsverhalten der NSO-HET können nicht getroffen werden, da hierzu z. Zt. keine ausreichenden stoffspezifischen Daten vorliegen.

Mikrobiologische Abbaubarkeit

Prinzipiell sind alle an teerölkontaminierten Standorten vorkommenden organischen Schadstoffe mikrobiologisch abbaubar. Das Abbaugeschehen im Boden und Grundwasser wird hierbei i.d.R. von den physikalisch-chemischen und mikrobiellen Milieubedingungen bestimmt [10].

Im Gegensatz zu den PAK, bei denen die Abbaubarkeit mit steigender Ringanzahl abnimmt, zeigte sich bei den NSO-Heterozyklen, dass die Abbaubarkeit neben der Ringanzahl auch von der Art des eingebauten Heteroatoms abhängt [11].

In [4] wird für verschiedene NSO-HET ein mikrobieller Abbau unter **aeroben** und/oder **anaeroben** Bedingungen postuliert.

Einen entscheidenden Einfluss auf natürliche biologische Abbauvorgänge im Grundwasser bzw. Boden hat dabei das Redoxpotential bzw. die Anwesenheit von Elektronenakzeptoren wie Sauerstoff, Nitrat, Mangan(IV), Eisen(III) und Sulfat. Zudem existiert eine Vielzahl von Mikroorganismen, die in der Lage sind, N- und O-Heterozyklen als alleinige Energie- und Kohlenstoffquelle nutzen zu können [5]. Auch stellte sich heraus, dass S-Heterozyklen wesentlich schlechter abgebaut werden als N- und O-Heterozyklen [11].

Im Gegensatz dazu wurde für die S-Heterozyklen Thiophen und Benzothiophen ein **cometabolischer Abbau** bei Vorhandensein geeigneter Co-Substrate beschrieben [13] / [14].

Unter den an teerölkontaminierten Standorten vorherrschenden **anaeroben Bedingungen** ist die biologische Abbaubarkeit jedoch deutlich eingeschränkt. So konnten im Grundwasser-Abstrombereich teerölkontaminierter Standorte verschiedene persistente Verbindungen wie z.B. Dimethylbenzofuran [16] beobachtet werden [17]. An den Spitzen der abströmenden Schadstofffahnen herrschen meist aerobe Verhältnisse vor, wodurch eine Mineralisierung der NSO-Heterozyklen unter anthropogen nicht beeinflussten Bedingungen begünstigt wird.

Ebenso konnte festgestellt werden, dass unter **aeroben** Bedingungen NSO-Heterozyklen inhibierend auf den Abbau von PAK wirken [19].

Der umgekehrte Effekt, also eine Einschränkung des NSO-Heterozyklenabbaus bei der Anwesenheit von PAK, wurde nur bei wenigen NSO-Heterozyklen festgestellt.

Diese Unterschiede in den Wechselwirkungen konnten auf eine Abhängigkeit in Bezug auf die Polarität der Verbindungen zurückgeführt werden. Der Einfluss des Vorhandenseins weiterer Polyzyklen auf den Abbau nahm mit steigender Polarität der Substanzen ab [11]. So erhöhen unpolare Alkylsubstituenten in der Regel die Persistenz, während polare funktionale Gruppen wie Carboxylsubstituenten die biologische Abbaubarkeit fördern.

In den folgenden Abbildungen werden einige bekannte Abbauwege für ausgewählte NSO-Heterozyklen dargestellt.

N-Heterozyklen

Die Abbildung 9 zeigt zwei mögliche Abbauwege von Pyridin. Die Destabilisierung des Aromatenrings erfolgt in beiden Fällen über eine Reduktionsreaktion. Im weiteren Verlauf wird entweder Formamid, das weiter zu Ammoniak und Ameisensäure abgebaut wird, oder Ammoniak direkt abgespalten.

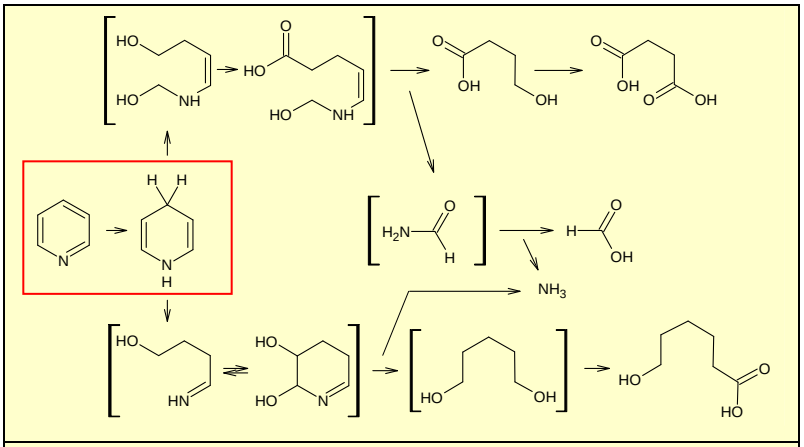


Abb. 9: Mikrobieller Abbau des Pyridin, nach [20]

Die Abbildung 10 zeigt zwei mögliche mikrobielle Abbauwege von Methylpyridin. Die Destabilisierung des Ringsystems wird analog zum Pyridinabbau durch eine Reduktion eingeleitet. Anschließend erfolgt die Ringspaltung. Nach geöffnetem Ring, wird ebenso wie beim Pyridinabbau Formamid abgespalten, das weiter zu Ammoniak und Ameisensäure abgebaut wird.

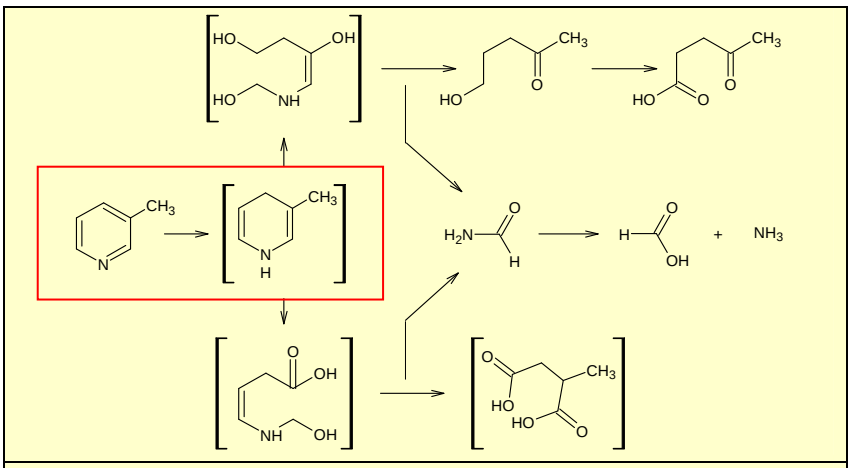


Abb. 10: Mikrobieller Abbau des Methylpyridin, nach [24]

O- und S-Heterozyklen

In der Abbildung 11 sind zwei mögliche Abbauwege von Dibenzothiophen dargestellt. Die Destabilisierung und Spaltung des aromatischen Ringsystems wird enzymatisch durch eine Monooxygenase bzw. Dioxygenase katalysiert.

Abbildung 12 zeigt zwei mögliche Abbauwege von Dibenzofuran. Die Destabilisierung und Spaltung des aromatischen Ringsystems wird enzymatisch durch eine Dioxygenase katalysiert. Für alle Abbauwege wird nach weiteren Reaktionen der Abbau von entstehendem Benzoat über den Oxoadipat-Weg postuliert [26].

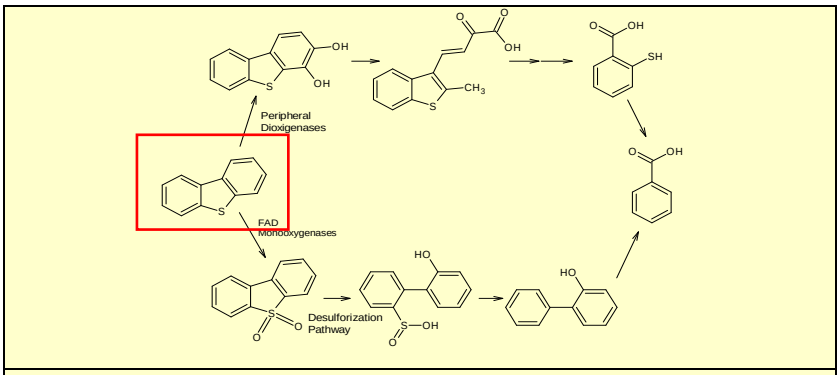


Abb. 11: Mikrobieller Abbau des Dibenzothiophen, nach [25]

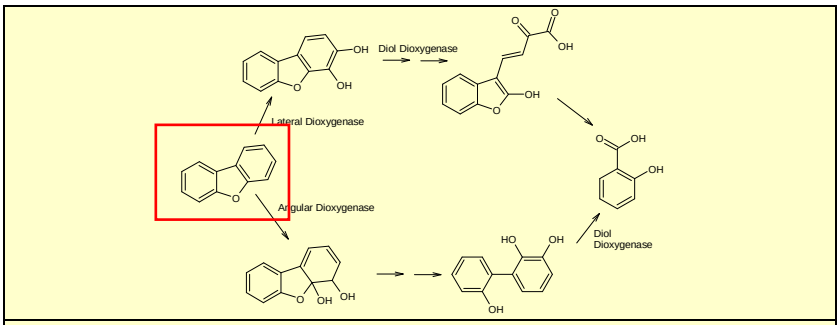


Abb. 12: Mikrobieller Abbau des Dibenzofuran, nach [25]

Toxizität

Im Rahmen der Prüfung der Umweltrelevanz wird hinsichtlich der Toxizität eines Stoffes i.d.R. zwischen Humantoxizität und Ökotoxizität unterschieden.

Ökotoxizität Wird auch Umwelttoxizität oder ökologische Toxizität genannt und bezieht sich auf die Schadwirkungen von Stoffen oder Stoffgemischen auf die belebte Umwelt.

Humantoxizität Beschreibt toxische Effekte von Stoffen oder Stoffgemischen auf den menschlichen Organismus.

Die Ökotoxizität zeigt eine deutliche Zunahme mit steigendem Molekulargewicht und / oder zunehmendem Alkylierungsgrad. So zeigen hochmolekulare Verbindungen wie Benzacridin, Dibenzacridin und Benzonaphthothiophen die höchsten Ökotoxizitäten, d.h. die geringsten EC50- bzw. LC50-Konzentrationen (Konzentration bei der 50 % der Testorganismen/Versuchstiere den geprüften Effekt zeigen bzw. die für 50 % der Testorganismen/Versuchstiere tödliche Konzentration). Daneben existieren aber auch Verbindungen mit geringerem Molekulargewicht wie beispielsweise Benzothiophen mit einer hohen Ökotoxizität [17]. Generell sind die N- und O-Heterozyklen als weniger toxisch als die S-Heterozyklen einzustufen [18].

3 Carbochemische Standorte im Land Brandenburg

3.1 Standortkategorisierung

Die standortspezifische Zusammensetzung der Kontamination ist von den Inhaltsstoffen der verwendeten Ausgangsprodukte (Kohlenart), sowie von der Art und Weise der Verarbeitung von Kohlen- / Kohlenprodukten und Teerölen abhängig [05].

Für die weitere Bearbeitung wurde eine generelle Kategorisierung der Standorte in Betriebe der *Kohleveredlung* und der *Produktverarbeitung* (teerölverarbeitenden Betriebe) vorgenommen. Nach [73] wird unter Kohleveredlung ein Teilgebiet der Carbochemie verstanden, bei dem Kohlen oder Kohlenwertstoffe einer stofflichen Nutzung zugeführt werden. Aus den Kohleveredlungsprozessen, wie Vergasung, Verschwelung und Extraktion, können gasförmige Verbindungen, wie Kohlenmonoxid, Wasserstoff und Methan, flüssige Verbindungen, wie Leichtöl. Mittelöl, Phenole und Pyridinbasen sowie Koks als Feststoff gewonnen werden (s. [73]).

In der Abbildung 23 ist das Zuordnungsschema dargestellt.

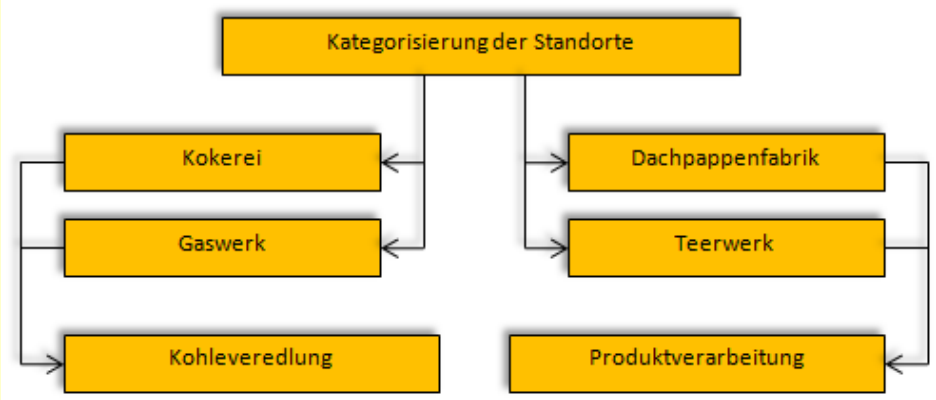


Abb. 13: Zuordnungsschema

3.2 Standortrecherche

Im Rahmen einer Abfrage wurden im Zeitraum von April bis Juni 2010 die unteren Bodenschutzbehörden des Landes Brandenburg aufgefordert, zur Thematik „Relevanz von Heterozyklen" an carbochemischen Standorten in Brandenburg" Standorte im Bereich von altlastverdächtigen Flächen und Altlasten zu benennen, an denen bisher Untersuchungen auf Heterozyklen durchgeführt wurden.

Von den zuständigen Behörden konnten im Ergebnis der Abfrage insgesamt 8 Standorte benannt und insgesamt 97 Datensätze entsprechender Grundwasseruntersuchungen zur Verfügung gestellt werden. Abbildung 14 zeigt beispielhaft die Lage der im Altlastenkataster des Landes Brandenburg (ALKAT) erfassten 43 ehemaligen Gaswerksstandorte im Land Brandenburg, als Vertreter der Kategorie Kohleveredlung.

Der Tabelle 5 können die Anzahl der zur Auswertung zur Verfügung gestellten Datensätze bezogen auf die Branchenart und -bezeichnung entnommen werden.

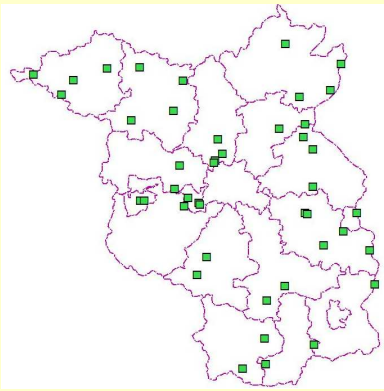


Abb. 14: Ehemalige Gaswerksstandorte im Land Brandenburg

Tabelle 5: Übersicht der Datensätze

Lfd. Nr.	Branchenart	Branchenbezeichnung	Anzahl Datensätze
1	Kohleveredlung	Kokerei	3
2	Kohleveredlung	Kokerei	1
3	Kohleveredlung	Gaswerk	2
4	Kohleveredlung	Gaswerk	5
5	Kohleveredlung	Gaswerk	11
6	Kohleveredlung	Gaswerk	6
7	Produktverarbeitung	Teerwerk	7
8	Produktverarbeitung	Dachpappenfabrik	62

3.3 Auswertung vorliegender Standortuntersuchungen (Grundwasser)

Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass an den untersuchten Standorten im Land Brandenburg in historisch jüngerer Zeit vorrangig Braunkohle bzw. Braunkohleprodukte verarbeitet wurden (s. Kap. 2.4) und anhand vorliegender Untersuchungsergebnisse (s. Kap. 3.3), konnte festgestellt werden, dass sich die Zusammensetzung der NSO-Heterozyklen von denen der sog. KORA-Prioritätenliste (siehe Tabelle 3) deutlich unterscheiden. Denn von den insgesamt 20 in Tabelle 3 aufgeführten NSO-Heterozyklen sind nur 10 Stoffverbindungen in relevanter Konzentration an den Brandenburger Standorten nachgewiesen worden.

Einschränkend ist anzumerken, dass das an den 8 Brandenburger Standorten untersuchte Schadstoffspektrum bzgl. der NSO-Heterozyklen nicht einheitlich ist. Deshalb kann ein direkter Vergleich der Untersuchungsergebnisse z.B. innerhalb der einzelnen Standortkategorien nicht vorgenommen werden.

Als Grundlage für die Standortuntersuchungen hinsichtlich des zu analysierenden Schadstoffspektrums (Grundwasser) diente im Bereich der ehemaligen vier *Gaswerke*, eines *Teerwerks* und einer *Dachpappenfabrik* (s. Anl. II, Standort 3 - 8) grundsätzliche die KORA-Prioritätenliste. An den zwei *Kokerei-Standorten* (s. Anl. II, Standort 1 und 2) wurden dagegen in den Jahren 2004 und 2005 Grundwasser-Screenings mit dem Ziel durchgeführt, einen Überblick über das Schadstoffspektrum zu bekommen. Dabei wurden in messbaren Konzentrationen lediglich die Verbindungen:

- Thiophen (nicht in KORA-Prioritätenliste aufgeführt),
- Pyridin (nicht in KORA-Prioritätenliste aufgeführt),
- 2-Methylpyridin (nicht in KORA-Prioritätenliste aufgeführt),
- 3-Methylpyridin (nicht in KORA-Prioritätenliste aufgeführt),
- Benzofuran und
- 2-Methylbenzofuran nachgewiesen.

Die weiteren Untersuchungen an diesen Standorten im Zeitraum 2007 und 2008 orientierten sich hinsichtlich des Schadstoffspektrums dann ebenfalls an der o.g. KORA-Prioritätenliste. Im Ergebnis der durchgeführten Grundwasseruntersuchungen wurden keine weiteren NSO-Heterozyklen zu den o. g. 6 Verbindungen analytisch nachgewiesen.

Eine differenziertere altlastenspezifische Auswertung der 8 Standorte war auf Grund des großen Aufwandes (notwendige projektspezifischen Einarbeitung) nicht realisierbar. Ohne die schadensfallspezifischen Kenntnisse der hier betrachteten Standorte (z.B. geologische, hydrogeologische Standortbedingungen, Messstellenlage und -ausbau, etc.) sind detaillierte Aussagen hinsichtlich schadstoffspezifischer Transportprozesse (z.B. Beziehung Quelle – Fahne) in der gesättigten Bodenzone nicht sinnvoll ableitbar.

Trotz der o.g. Einschränkungen soll zur Veranschaulichung, in der Tabelle 6 beispielhaft für einen ehemaligen Kokereistandort[11], eine Gegenüberstellung von Konzentrationswerten aus der Schadstoffquelle und dem Fahnenbereich vorgenommen werden.

Tabelle 6: Konzentrationen im Quell- und Abstrombereich einer ehemaligen Kokerei

Parameter	**Schadstoffquelle [µg/l]**	**Grundwasser-Abstrom [µg/l]**
Benzofuran	< BG	<BG
2-Methylbenzofuran	< BG	< BG
Pyridin	7.600	12,40
2-Methylpyridin	6.000	12,30
Thiophen	< BG	< BG
Summe NSO-HET	**13.600**	**24,70**
Benzol	22.000	8,47
Summe BTEX	**47.900**	**10,90**
Summe PAK nach EPA	**17.128**	**50,70**

Tabelle 6 stellt die an einem Kokereistandort ermittelten Höchstkonzentrationen an NSO-Heterozyklen im Quell- und dazugehörigen Grundwasser-Abstrombereich dar. Darüber hinaus sind die Konzentrationsniveaus für Benzol, Summe BTEX und Summe PAK nach EPA angegeben. Die Bestimmungsgrenze (BG) für die Proben aus dem Quellbereich lag bei 10 µg/l, somit wurden alle unter dieser Konzentration vorliegenden Heterozyklen nicht erfasst. Die BG der Proben aus dem Grundwasser-Abstrom lag dagegen bei 0,5 µg/l.

Die Hauptursache für das deutliche Konzentrationsgefälle zwischen Quelle und Grundwasser-Abstrom wird in der Abreicherung von Lösevermittlern, wie z.B. BTEX gesehen. Offensichtlich sind Lösevermittler an dieser Standortkategorie der wesentliche Faktor für den Transport. Die Lösung erhöht neben der Mobilität der Verbindungen auch die Bioverfügbarkeit, was zur Steigerung der mikrobiologischen Abbaubarkeit führt. Dies gilt immer unter der Voraussetzung, dass die mikrobiologischen Prozesse nicht durch toxische Verbindungen oder andere ungünstige Rahmenbedingungen entscheidend limitiert werden.

In der Anlage II sind die von den unteren Bodenschutzbehörden übergebenen Datensätze (Grundwasseruntersuchungen) den entsprechenden Branchentypen zugeordnet worden und für die untersuchten Parameter die jeweiligen Maximal- bzw. Minimalkonzentrationen im Grundwasser angegeben.

[11] Lagezuordnung der Grundwassermessstellen (GWMS): Quelle / Fahne war möglich; eine niveaubezogene Zuordnung der analytischen Ergebnisse im Grundwasserleiter war nicht möglich

4 Ermittlung prioritärer NSO-Heterozyklen

4.1 Nationaler Sachstand – Priorisierungsansätze

Unter dem Begriff NSO-Heterozyklen wird eine Vielzahl von Einzelverbindungen zusammengefasst. Um Untersuchungen in einem verhältnismäßigen Rahmen zu halten, ist analog zu den 16 PAK nach US EPA eine Beschränkung auf charakteristische standortspezifische NSO-HET, so genannte prioritäre Substanzen, erforderlich.

Es wurden in den letzten Jahren hierzu verschiedene Ansätze zur Bewertung der Heterozyklen und damit zur Festlegung prioritärer Einzelverbindungen entwickelt. Seit der Veröffentlichung der KORA-Prioritätenliste wurde diese als Grundlage für die meisten der hier ausgewerteten brandenburgischen Standortuntersuchungen verwendet.

Im Rahmen des KORA-Themenverbund 2 wurden für 256 Substanzen Stoffdaten recherchiert und Untersuchungen an teerölkontaminierten Standorten der Steinkohlenverarbeitung durchgeführt [27]. Aus den für 160 NSO-Heterozyklen gesammelten Daten wurden 20 Einzelverbindungen für die Grundwasser-Schadstofffahne, aufgrund ihrer Stoffeigenschaften und ihres Vorkommens an den untersuchten Referenzstandorten, als prioritär eingestuft (plus 31 Stoffisomere) und für einige davon Geringfügigkeitsschwellenwerte (GFS-Werte) vorgeschlagen [28]. Basierend auf den Erkenntnissen des KORA-Themenverbundes 2 wurden weiterhin vom einem Arbeitskreis des Altlastenforums Baden-Württemberg e.V. [29] für die Untersuchung von teeröl- und mineralölstämmigen Schadstoffquellen 63 NSO-Heterozyklen als prioritär benannt. Aus diesen beiden Arbeiten ergibt sich eine Gesamtzahl von 71 NSO-Heterozyklen (einschließlich Isomere) [27] (s. Abbildung 15).

Nach Ansicht des Unterausschuss (UA) *„Geringfügigkeitsschwellenwerte für NSO-Heterozyklen“* des ständigen Ausschusses *„Grundwasser und Wasserversorgung“* der Bund/Länder-Arbeits-gemeinschaft Wasser (LAWA) sind nur für die NSO-Heterozyklen GFS-Werte abzuleiten, deren physikalisch-chemische Eigenschaften die Ausbreitung im Grundwasser wahrscheinlich machen und für die relevante human- und ökotoxische Wirkungen belegt sind [27]. Dies führte zur Überarbeitung des in [28] entwickelten Ableitungsschema. Das ursprüngliche KORA-Auswahlkriterienschema wurde dahingehend angepasst, dass der Kriterienblock „Standortbewertung/Vorkommen im Grundwasser“ gestrichen und die Zuordnung und Wichtung der verbleibenden Kriterienblöcke geändert wurde (s. Tabelle 7).

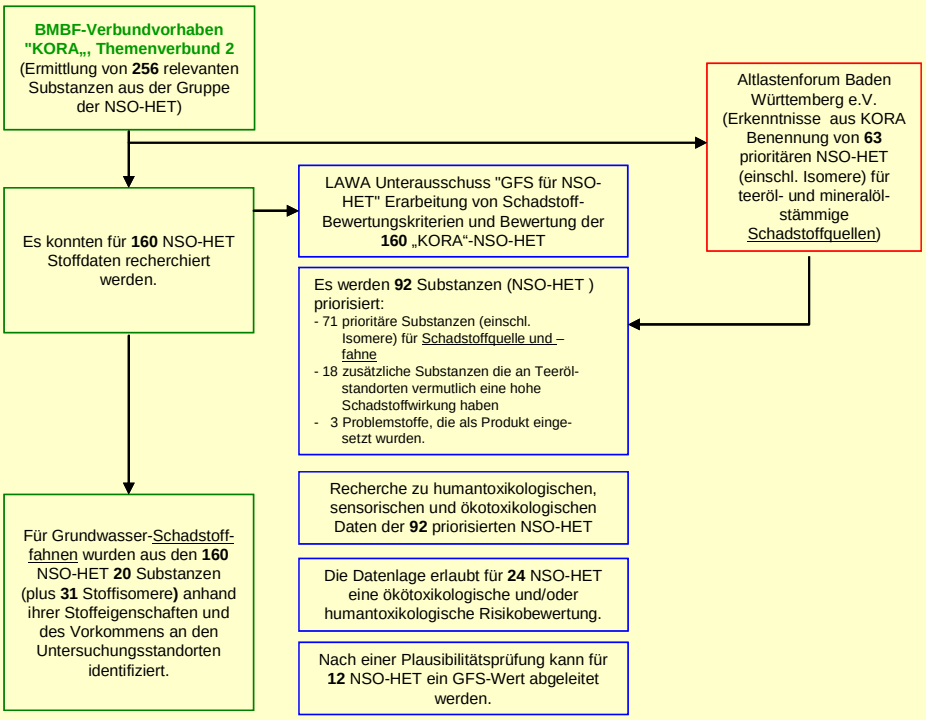


Abb. 15: Ableitung von prioritärer NSO-HET und LAWA GFS-Werten

Die Priorisierung erfolgte nun durch die Bewertung folgender Kriterien:

- chemisch-physikalische Parameter
- Persistenz / mikrobieller Abbau

- humantoxikologische Parameter
- ökotoxikologische Parameter

Alle den Einzelkriterien (K) innerhalb eines Kriterienblocks (KB) zugeordneten Punkte werden addiert. Anschließend werden die ermittelten Summen der Kriterienblöcke multipliziert. Die so errechneten Gesamtpunkte bilden die Grundlage der Priorisierung von NSO-Heterozyklen. Aufgrund der multiplikativen Verknüpfung der einzelnen Kriterienblöcke werden Einzelverbindungen, welche in allen Kriterienklassen punkten, höher gewichtet [27].

Tabelle 7: Auswahlkriterien für NSO-HET zur Ableitung von GFS (Priorisierung) (Quelle: [27])

Kriterien-block (KB)	Kriterium (K)	Wichtung		Einheit	Punktzahl				
		K	KB		5	4	3	2	1
chemisch-physikalische Parameter / Mobilität	Geruchs-schwellen-wert	0	5	µg/m³	<1	1 - < 10	10 -< 100	100 - <1.000	≥1.000
	Wasserlös-lichkeit	2		mg/l	> 10.000	1.000 - <10.000	100 - <1.000	10 - <100	<10
	Henry-Koeffizient	1			$> 4 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-3}$ - < $4*10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-4}$ - < $4*10^{-3}$	$4 \cdot 10^{-6}$ - < $4*10^{-4}$	$> 4 \cdot 10^{-6}$
	Koc	2			< 10	10 - <100	100 - <1.000	1.000 - <10.000	≥10.000
Mikrobieller Abbau / Persistenz	Abbau aerob	0,2	1		Persistenz nachge-wiesen		Abbau nicht untersucht	Abbau und Persistenz beobachtet	Abbau nachge-wiesen
	Abbau denitri-fi-zierend	0,1			Persistenz nachge-wiesen		Abbau nicht untersucht	Abbau und Persistenz beobachtet	Abbau nachge-wiesen
	Abbau eisen-reduzierend	0,3			Persistenz nachge-wiesen		Abbau nicht untersucht	Abbau und Persistenz beobachtet	Abbau nachge-wiesen
	Abbau sul-fatredu-zierend	0,3			Persistenz nachge-wiesen		Abbau nicht untersucht	Abbau und Persistenz beobachtet	Abbau nachge-wiesen
	Abbau me-thanredu-zierend	0,1			Persistenz nachge-wiesen		Abbau nicht untersucht	Abbau und Persistenz beobachtet	Abbau nachge-wiesen
Human-toxizität	Human-karzino-genität	3	6		Nachweis positiv		keine bzw. unzu-reichende Daten		Nachweis negativ
	Gentoxizität, es wird nur der höhere der beiden in [28] genann-ten Werte aus Mutagenität und Gentoxizi-tät herange-zogen	3			(5 Punkte werden nicht verge-ben)	Nachweis positiv (auch wenn nur in einem Testsys-tem)	sowohl ne-gativer als auch positi-ver Nach-weis im glei-chen Test-system	keine Daten	Nachweis negativ
Ökotoxizität	Fischtoxizität	1	5	mg/l	< 1	1 -< 10	10 < 100	100 -<1.000	≥ 1.000
	Grünalgen-toxizität	1		mg/l	< 1	1 -< 10	10 < 100	100 -<1.000	≥ 1.000
	Bakterien-toxizität	1		mg/l	< 1	1 -< 10	10 < 100	100 -<1.000	≥ 1.000
	Daphnien-toxizität	2		mg/l	< 1	1 -< 10	10 < 100	100 -<1.000	≥ 1.000

Nach der Anwendung des o. g. Ableitungsschemas (s. Tabelle 7) der LAWA (s. [27]) auf die 160 Stoffe umfassende Liste aus [28] und unter Berücksichtigung der weiteren Erkenntnisse aus [28] und [29] wurden insgesamt 92 Stoffe (einschließlich Isomere) als prioritär identifiziert. Von den 92 als prioritär erkannten Stoffen erlaubt die Datenlage lediglich für 24 Stoffe eine ökotoxikologische (24 Stoffe) und/oder eine humantoxikologische (7 Stoffe) Risikobewertung (siehe Tabelle 8). Nach [27] handelt es

sich bei den insgesamt 92 Stoffe (einschließlich Isomere), welche bei der GFS-Ableitung betrachtet wurden, um 71 Stoffe die für die Altlastenuntersuchung am Schadensherd oder in der Schadstofffahne prioritär zu untersuchen sind und um 18 Stoffe, die zusätzlich an Teerölstandorten wahrscheinlich eine hohe Schadwirkung haben sowie um 3 Stoffe, die als Produkt eingesetzt werden..

Tabelle 8: Vorschläge für GFS für einzelne NSO-HET [27]

Lfd. Nr.	Name (CAS Nr.)	GFS [µg/l]	Basis [µg/l]		
			Humantox.	Sensorik	Ökotox.
1	Acridin (260-94-6)	**0,08**	(GOW: 0,1 – 0,3)	--	0,08
2	Benzo(b)thiophen (95-15-8)	**0,30**	(GOW: 0,1)	--	0,3
3	Benzofuran (271-89-6)	**1,80**	2,7	--	1,8
4	Benzotriazol (95-14-7) und Methylbenzoltriazole (29385-43-1)	**40,00**	-- --	-- --	40 75
5	Carbazol (86-74-8)	**0,20**	10	--	0,2
6	Chinolin (91-22-5)	**0,01**	0,002	16	0,4
7	Cumarin (91-64-5)	**4,70**	4,7	50	8
8	Dibenzofuran (132-64-9)	**0,40**	(GOW: 0,3)	120	0,4
9	Dibenzothiophen (132-65-0)	**--**	(GOW: 0,1)	--	0,6
10	2,6-Dimethylchinolin (877-43-0)	**--**	(GOW: 0,1 – 0,3)	--	1,9
11	Furan (110-00-9)	**0,35**	0,35	50 000	--
12	2-Hydroxybiphenyl (90-43-7)	**0,70**	100	400	0,7
13	Indol (120-72-9)	**--**	(GOW: 0,1)	300	0,9
14	Isochinolin (119-65-3)	**--**	(GOW: 0,1 – 0,3)	--	4
15	Methylchinoline (91-63-4, 612-58-8, 491-35-0, 7661-55-4, 91-62-3, 612-60-2, 611-32-5), nur 6-Methylchinolin (91-62-3)	**--**	(GOW: 0,1)	--	2,2
16	Piperazin (110-85-0)	**--**	(14)	--	1250
17	Pyridin (110-86-1)	**0,50**	3,5	0,5	1,1
18	Pyrrol (109-97-7)	**--**	-	10 000	-
19	Thiophen (110-02-1)	**--**	(GOW: 0,3)	--	13
20	Xanthen (92-83-1)	**--**	(GOW: 0,1)	--	0,4
21	2,3-Dimethylbenzofuran (3782-00-1)	**0,30**	(GOW: 0,1)	--	0,3
22	2-Methylbenzofuran (4265-25-2)	**--**	(GOW: 0,1)	--	3,2
23a	3-Methylbenzothiophen (1455-18-1)	**--**	(GOW: 0,1)	--	2,6
23b	5-Methylbenzothiophen (14325-14-1)	**--**	(GOW: 0,1)	--	14
24	Benzo(b)thiophen-1,1-dioxid (825-44-5)	**--**	(GOW: 0,1)	--	14

Für die NSO-Heterozyklen für die keine humantoxikologischen aber ökotoxikologische Ergebnisse vorliegen, wurden anhand des Konzepts der gesundheitlichen Orientierungswerte (GOW) des Umweltbundesamtes [33], Werte hinsichtlich eines ausreichenden Schutz des Grundwassers als Trinkwasser-Ressource abgeleitet. Die Festlegung eines GOW bei unvollständigen bis fehlenden toxikologischen Daten nach dem Grundsatz „so hoch wie möglich und so niedrig wie notwendig“, dient dem Schutz des Grundwassers als Trinkwasser-Ressource.

Insgesamt konnten danach für 12 NSO-HET entsprechende GFS-Werte abgeleitet und vorgeschlagen werden (s. a. http://www.lawa.de/documents/Bericht_NSO_Hetrozyklen_e56.pdf).

4.2 Ableitung prioritärer NSO-Heterozyklen für die carbochemischen Standorte im Land Brandenburg

Nach dem jetzigen Kenntnisstand unterscheiden sich braunkohle- bzw. steinkohlebürtige Teeröle hinsichtlich der enthaltenen NSO-heterozyklischen Einzelstoffe (s. Kapitel 2). Aufgrund der unzureichenden Datenbasis für diese Einzelstoffe/-verbindungen, der bisher sehr theoretischen Herangehensweise und der fehlenden Anwendbarkeit vorhandener NSO-Heterozyklen-Prioritätenlisten auf die spezifischen Verhältnisse im Land Brandenburg, wurde das in Abbildung 16 abgebildete Bewertungsschema zur Ermittlung von prioritären NSO-Heterozyklen erarbeitet. Neben den Kriterien „Umweltrelevanz“ und „Arbeitsschutz“ wurde das Kriterium „Konzentration“, also die an den jeweiligen Standorten gemessene Maximalkonzentrationen (Grundwasser), zur Beurteilung der Priorität von NSO-Heterozyklen im Land Brandenburg herangezogen.

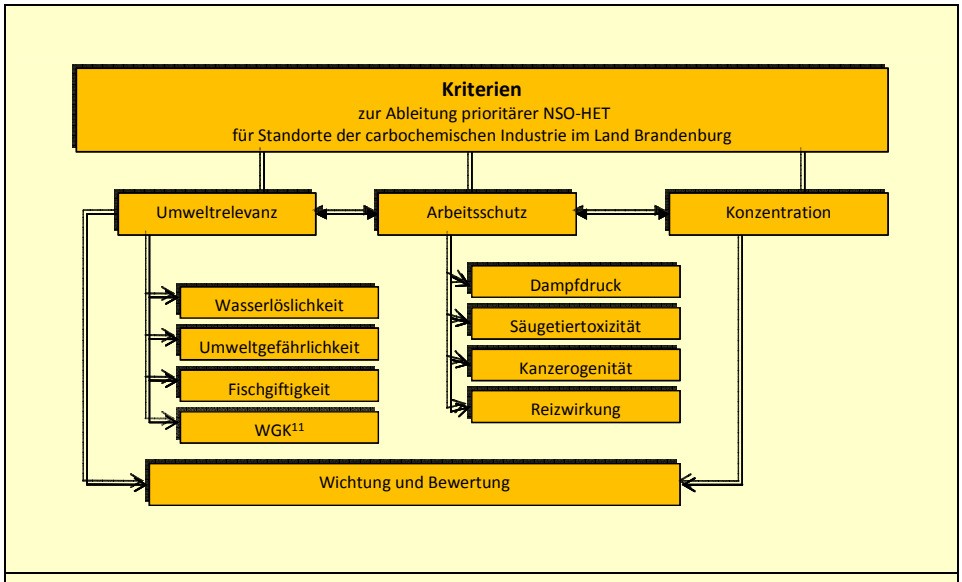


Abbildung 16: Ableitung prioritärer NSO-HET für das Land Brandenburg

Im Folgenden werden kurz die einzelnen in Abbildung 16 aufgeführten Kriterien, welche zur Ableitung der für das Land Brandenburg als prioritär einzustufenden NSO-HET erläutert.

<u>Konzentrationen</u>

Dieses Kriterium wurde gewählt, um anhand des Konzentrationsniveaus (Maximalwert für eine NSO-HET-Verbindung in der jeweiligen Standortkategorie), der an den 8 auszuwertenden Standorten untersuchten heterozyklischen Verbindungen, eine gewisse Wichtung hinsichtlich der für Brandenburg besonders relevanten NSO-HET vorzunehmen zu können (Leitparameter).

Einschränkend muss angeführt werden, dass i.d.R. keine ausreichenden Informationen zur Identifizierung der Probennahmestellen z.B. hinsichtlich ihrer Lage zur Schadstoffquellen oder Schadstofffahnen vorlagen.

In der Tabelle 5 sind die Anzahl der zur Verfügung gestellten Datensätze der einzelnen Standorte dargestellt.

<u>Umweltrelevanz</u>

Die in der Abbildung 16 aufgeführten Kriterien dienen der Abschätzung einer eventuellen Umweltrelevanz der betrachteten Einzelverbindung. Die *„Wasserlöslichkeit“* und die *„Fischgiftigkeit“* wurden schon in früheren Arbeiten, [28] und [35], zur Priorisierung von NSO-Heterozyklen herangezogen.

Auf die Diskussion der in verschiedenen Veröffentlichungen zur Beschreibung des Umweltverhaltens von NSO-Heterozyklen gewählten Parameter K_{OC} und K_{OW} wird hier verzichtet, da sie direkt mit der

Wasserlöslichkeit in Verbindung stehen. Im Folgenden werden die in Abbildung 16 aufgeführten Kriterien „Umweltrelevanz“ definiert.

Umweltgefährlichkeit

Im Sinne des § 3a Gesetz zum Schutz vor gefährlichen Stoffen (ChemG, [34]) wird *„Umweltgefährlich wie folgt definiert „Stoffe oder Zubereitungen, die selbst oder deren Umwandlungsprodukte geeignet sind, die Beschaffenheit des Naturhaushaltes, von Wasser, Boden oder Luft, Klima, Tieren, Pflanzen oder Mikroorganismen derart zu verändern, dass dadurch sofort oder später Gefahren für die Umwelt herbeigeführt werden können.“*. Im Weiteren wird die Einstufung der „*Umweltgefährlichkeit*“, entsprechend der Definition *„Gefährlicher Stoffe“* wie sie in der Richtlinie 67/548/EWG für die Einstufung, Verpackung und Kennzeichnung gefährlicher Stoffe festgelegt wurde vorgenommen. Die Vorgaben werden durch die europäische Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 über die Einstufung, Kennzeichnung und Verpackung von Stoffen und Gemischen festgelegt. Sicherheitsdatenblätter müssen, entsprechend der Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 zur Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung chemischer Stoffe (REACH) vom 18. Dezember 2006 Angaben zur Umweltgefährlichkeit enthalten.

Wasserlöslichkeit

Die Wasserlöslichkeit gibt an, welche Menge von einem Stoff bei definierten Randbedingungen (Druck und Temperatur) in Wasser gelöst werden können.

Fischgiftigkeit LC50 Fisch (96h)

Der Parameter Fischgiftigkeit oder auch Fischtoxizität - LC50 Fisch (96h) - wurde zur Beurteilung einer eventuellen Gefährdung von Gewässern durch Stoffe oder Stoffgemischen herangezogen.

Wassergefährdungsklasse

Einstufung aufgrund der Verwaltungsvorschrift wassergefährdender Stoffe (VwVwS)[12]

Arbeitsschutz

Die Betrachtung der für den Arbeitsschutz relevanten Parameter dient der Abschätzung von Gefährdungspotentialen durch NSO-Heterozyklen z.B. bei der Durchführung von Sanierungsmaßnahmen.

Kanzerogenität

Kanzerogenität bezeichnet die Eigenschaft von Stoffen, eine unkontrollierte und ungeordnete Neubildung von Gewebe hervorzurufen. Vom Beginn der Einwirkungen bis zum Auftreten der Erkrankungen können längere Zeiträume (Jahre bis Jahrzehnte) vergehen. In diesem Zusammenhang wird mit diesem Kriterium das Gesundheitsgefährdungspotential der Einzelverbindungen hervorgehoben. Die Einstufung als kanzerogen ist durch die GefStoffV vorgegeben. Nach § 4.2.1 GefStoffV Anhang 1 werden chemische Karzinogene in drei Gefahrenkategorien eingeteilt. Diese Einstufung entspricht der Richtlinie 67/548/EWG und ist damit eine europäische Festlegung. Die Kategorien bedeuten:

Kategorie 1:

Stoffe, die auf den Menschen bekanntermaßen krebserzeugend wirken. Der Kausalzusammenhang zwischen der Exposition eines Menschen gegenüber dem Stoff und der Entstehung von Krebs ist ausreichend nachgewiesen [36].

Kategorie 2:

Stoffe, die für den Menschen als krebserzeugend angesehen werden. Es müssen also hinreichende Anhaltspunkte für die begründete Annahme bestehen, dass die Exposition eines Menschen gegenüber dem Stoff Krebs erzeugen kann. Diese Annahme beruht im Allgemeinen auf Folgendem:

- geeignete Langzeit-Tierversuche,

[12] Einstufung aufgrund der Verwaltungsvorschrift wassergefährdender Stoffe (VwVwS) in der Fassung vom 27. Juli 2005, veröffentlicht am 30. Juli 2005 im Bundesanzeiger 142a und am 01. August 2005 in Kraft getreten

- sonstige relevante Informationen. [36]

Kategorie 3:

Stoffe, die wegen möglicher krebserzeugender Wirkung beim Menschen Anlass zu Besorgnis geben, über die jedoch ungenügend Informationen für eine befriedigende Beurteilung vorliegen. Aus geeigneten Tierversuchen liegen einige Anhaltspunkte vor, die jedoch nicht ausreichen, um einen Stoff in Kategorie 2 einzustufen [36].

Säugetiertoxizität LD50 Ratte (oral)

Der Parameter Säugetiertoxizität - LD50 Ratte (oral) - wurde zur Beurteilung bzw. Abschätzung des Gefährdungspotentials der vorliegenden Schadstoffe bei Eingriffen in den Bodenkörper herangezogen.

Dampfdruck

Der Dampfdruck ist ein stoff- und temperaturabhängiger Gasdruck und bezeichnet den Umgebungsdruck, unterhalb dessen eine Flüssigkeit - bei konstanter Temperatur - beginnt, in den gasförmigen Zustand überzugehen. Da die an den Standorten vorhandenen Kontaminationen schon länger vorliegen, kann davon ausgegangen werden, dass die Schadstoffverbindungen mit einem hohen Gasdruck bereits aus dem Oberboden ausgegast sind, und sich ein Konzentrationsgleichgewicht eingestellt hat. Unter normalen Umständen wird es zu keiner weiteren Freisetzung kommen. Im Falle eines Eingriffs in den Boden, beispielsweise im Zuge einer Sanierungsmaßnahme, wird dieses Gleichgewicht gestört und es kommt mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit wieder zu Ausgasungen.

Reizwirkung

Stoffe werden als reizend eingestuft, wenn sie, ohne ätzend zu sein bei kurzzeitigem, länger andauerndem oder wiederholtem Kontakt mit Haut oder Schleimhaut eine Entzündung hervorrufen können [37].

Ebenso wie die Kanzerogenität wird mit diesem Kriterium das Gesundheitsgefährdungspotential der Einzelverbindungen hervorgehoben.

4.3 Auswertung der Untersuchungsergebnisse carbochemischer Standorte im Land Brandenburg

4.3.1 Kriterium – Konzentrationen (Maximalkonzentration)

Innerhalb dieses Auswertungsschrittes wurden die Erkenntnisse aus den Grundwasseruntersuchungen der Kategorien *„Kohleveredlung“* und *„Produktverarbeitung“* miteinander verglichen. In der Tabelle 9 sind die an den 8 brandenburgischen Standorten (s. Anlage II) nachgewiesenen Verbindungen, hier nur die maximalen Schadstoffkonzentrationen der NSO-HET, der jeweiligen Kategorie *„Kohleveredlung“* / *„Produktverarbeitung“* vergleichend aufgelistet und in den Abbildungen 17 bis 19 grafisch dargestellt.

Tabelle 9: Vergleich der Maximalkonzentrationen an Standorten der Kohleveredlung / Produktverarbeitung

NSO-HET	Kohleveredlung [µg/l]	Produktverarbeitung [µg/l]
Benzofuran	1.390,00	8.472,69
2-Methylbenzofuran	517,00	3.801,48
Benzothiophen	159,00	2.804,65
Hydroxybiphenyl	0,17	k.U.
2-Hydroxybiphenyl	149,00	1.082,64
Chinolin	134,00	3.668,41
2,3-Dimethylbenzofuran	101,00	246,56
Dibenzofuran	39,00	21.302,86
Chinolin-2-on	19,00	2.537,99
3-Methylbenzothiophen	8,40	436,66
Indol	k.U.	300,00

NSO-HET	Kohleveredlung [µg/l]	Produktverarbeitung [µg/l]
Isochinolin-1-on	k.U.	789,50
Isochinolin-2-on	1,40	k.U.
Isochinolin	1,70	689,30
1-,2-,4-Methyldibenzofuran	1,20	10.021,08
Xanthenon	0,82	248,42
Xanthen	k.U.	4,70
1-Methylisochinolin	0,50	k.U.
2-Methylisochinolin	k.U.	99,22
Acridin	k.U.	14,00
Acridinon	0,35	120,91
Phenanthridinon	0,14	997,70
2-Methylpyridin	9.750,00	k.U.
3-Methylpyridin	9.800,00	k.U.
Pyridin	9.310,00	k.U.
Thiophen	1.130,00	k.U.
6-Methylchinolin	6,50	k.U.
4-Methyl-2-chinolinon	2,20	76,46
Dibenzothiophen	0,80	65,00
Carbazol	k.U.	3.090,26
2-Methylchinolin	k.U.	1.239,24
2,4-Dimethylchinolin	k.U.	691,81

(k.U. – keine Untersuchung)

< 100 µg/l ≥ 100 – 1.000 µg/l > 1.000 µg/l

Wie aus der Tabelle 9 und Abbildung 17 zu entnehmen ist, wurden an den Standorten der *„Kohleveredlung“* die Verbindungen:

- 2-Methylpyridin,
- 3-Methylpyridin,
- Pyridin,
- Thiophen und
- Benzofuran

mit Konzentrationen oberhalb von 1.000 µg/l nachgewiesen.

Eine zweite Gruppe mit Konzentrationen zwischen 100 und 1.000 µg/l bilden die Stoffe:

- 2-Methylbenzofuran,
- Benzothiophen,
- 2-Hydroxybiphenyl,
- Chinolin und
- 2,3-Dimethylbenzofuran.

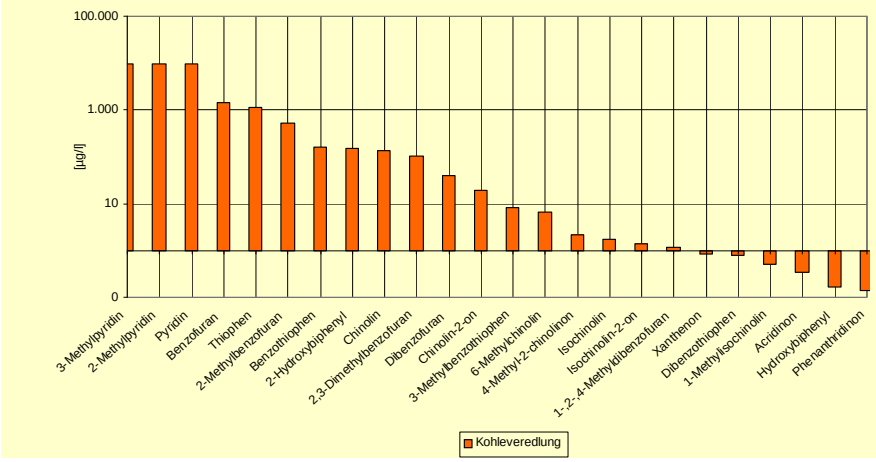


Abb. 17: NSO-HET Maximalkonzentrationen an Standorten der *„Kohleveredlung“ (Brandenburg)*

Alle anderen NSO-Heterozyklen-Konzentrationen lagen deutlich unter 100 µg/l.

An Standorten der *„Produktverarbeitung“* wurden die Wasserproben nicht auf die in der Kategorie *„Kohleveredelung“* mit Konzentrationen oberhalb von 1.000 µg/l nachgewiesenen Verbindungen (s. Tabelle 9):

- 2-Methylpyridin,
- 3-Methylpyridin
- Pyridin und
- Thiophen

untersucht.

Mit Konzentrationen größer 1.000 µg/l waren folgende Verbindungen in der Kategorie „Produktverarbeitung“ vertreten (s. Abbildung 18):

- Dibenzofuran,
- 1-,2-,4-Methyldibenzofuran,
- Benzofuran,
- 2-Methylbenzofuran,
- Chinolin,
- Carbazol,
- Benzothiophen,
- Chinolin-2-on,
- 2-Methylchinolin und
- 2-Hydroxybiphenyl.

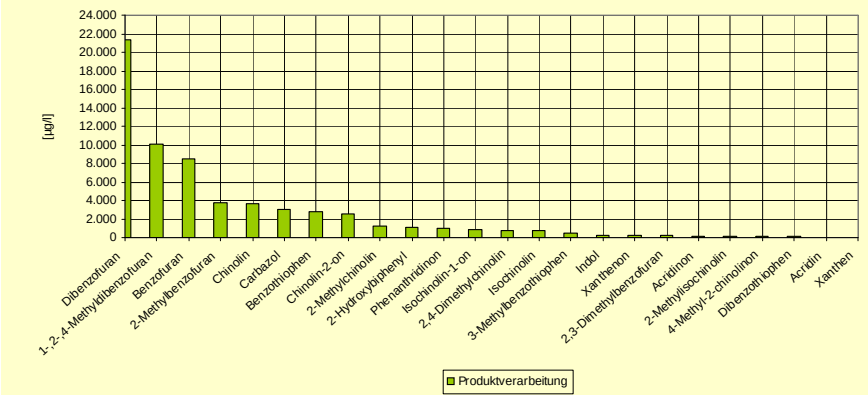


Abb. 18: NSO-HET Maximalkonzentrationen an Standorten der *„Produktverarbeitung“*

Eine zweite Gruppe mit Konzentrationen zwischen 100 und 1.000 µg/l bilden die Stoffe:

- Phenanthridinon,
- Isochinolin-1-on,
- 2,4-Dimethylchinolin,
- 3-Methylbenzothiophen,
- Indol,
- Isochinolin,
- Xanthenon,
- 2,3-Dimethylbenzofuran und
- Acridinon.

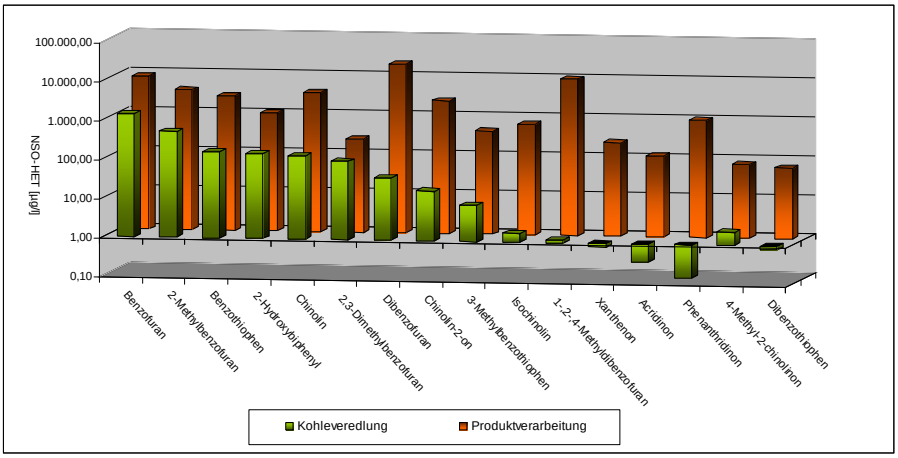


Abb. 19: Vergleich der Konzentrationsverteilung zwischen Standorten der *„Kohleveredlung / Produktverarbeitung“*

Für alle weiteren NSO-Heterozyklen wurden Konzentrationen unter 100 µg/l gemessen (s. Tabelle 9 und Abbildung 18).

Zusammenfassend ist festzustellen, dass anhand der derzeitigen Datenlage folgende erste Schlussfolgerungen hinsichtlich des Kriteriums „Maximalkonzentration“ gezogen werden können. Auffällig sind die Maximalkonzentrationen für (s.a. Tabelle 9):

- Dibenzofuran: 21.302,86 µg/l
- 1-,2-,4-Methyldibenzofuran: 10.021,08 µg/l
- Benzofuran: 8.472,69 µg/l

in der Kategorie *„Produktverarbeitung“.*

Im Hinblick auf ihr Konzentrationsniveau stellen diese auch gleichzeitig diejenigen Stoffverbindungen mit den höchsten Absolutwerten für die Stoffverbindungen dar, für die gleichzeitig in beiden Kategorien *„Kohleveredlung / Produktverarbeitung“* Messwerte vorliegen.

Aus Abbildung 19[13] ist unter Berücksichtigung der derzeitigen Daten- und Kenntnislage ersichtlich, dass sich die Schadstoffssignaturen der hier gegenübergestellten Kategorien *„Kohleveredlung / Produktverarbeitung“,* deutlich voneinander unterscheiden. Entsprechend Kapitel 2.1 wurde bereits anhand der Ergebnisse aus der Literaturrecherche herausgearbeitet, das sich auch die Ausgangsprodukte *„Steinkohle“* und *„Braunkohle“* in ihrem natürlichen chemischen Stoffspektrum erheblich voneinander unterscheiden. Wie zu vermuten war, trifft dies entsprechend auch für die sich aus den unterschiedlichen Produktionsprozessen ergebenden Produkte (Wert- und Abfallstoffes, z.B. s.a. Tabelle 2) zu.

Welchen quantitativen und qualitativen Einfluss die genannten Randbedingungen auf das nachgewiesene Schadstoffspektrum an den ausgewählten 8 Brandenburger Fallstandorten haben, kann anhand der derzeitigen Daten- und Kenntnislage z. Zt. nicht weiter diskutiert werden. Diese Fragestellungen sollen in einem weiteren Bearbeitungsschritt durch weitere Recherchen (Literatur- und Standortrecherchen) und Standortuntersuchungen (z.B. einheitliches Untersuchungsspektrum für beide Standortkategorien) weiter vertieft werden.

Um eine erste grobe Auswahl der für die spezifischen Brandenburger Verhältnisse relevanten heterozyklischen Stoffverbindungen bzw. ggf. zusätzlich aufzunehmender relevanter NSO-HET, welche bisher nicht in der KORA-Prioritätenliste enthaltener waren zu treffen, wurde eine Wichtung der in Tabelle 9 aufgeführten und durch Messwerte belegte Stoffverbindungen anhand des Konzentrationsniveaus (Maximalwerte) vorgenommen. *Als Auswahlmerkmal wurde aus pragmatischen Gründen festgelegt, dass nur NSO-Heterozyklen als zusätzlich zur KORA-Prioritätenliste relevant für das Land Brandenburg einzustufen sind, wenn für die Stoffverbindungen ein Konzentrationsniveau >5% des in Tabelle 9 ermittelten Maximalwertes (hier Dibenzofuran: 21.302,86 µg/l) nachgewiesen wurde.*

Als Ergebnis dieser konzentrationsgewichteten Auswertung, welche unabhängig von der jeweiligen Standortkategorie erfolgte, wurden insgesamt 14 NSO-HET herausgefiltert und in der Tabelle 10 mit Angabe ihrer jeweiligen prozentualen Wichtungsanteile aufgeführt.

Im Vergleich zur KORA-Prioritätenliste sind hierbei 4 zusätzliche NSO-HET-Verbindungen (kursiv fett gedruckt) aufgeführt.

Tabelle 10: Konzentrationswichtung (Max-Werte) der NSO-Heterozyklen (Brandenburg)

Lfd. Nr.	Stoffverbindung	Konzentrationswichtung [%]
1	Dibenzofuran	100,0
2	1-,2-,4-Methyldibenzofuran	47,0
3	***3-Methylpyridin***	**46,0**
4	***2-Methylpyridin***	**45,8**
5	***Pyridin***	**43,7**
6	Benzofuran	39,8
7	2-Methylbenzofuran	17,8

[13] In der Abb. 19 wurden nur die Stoffparameter visualisiert, welchen auch an den beiden Standortkategorien untersucht wurden.

8	Chinolin	17,2
9	Carbazol	14,5
10	Benzothiophen	13,2
11	Chinolin-2-on	11,9
12	2-Methylchinolin	5,8
13	***Thiophen***	**5,3**
14	2-Hydroxybiphenyl	5,1

Einschränkend ist zur Auswahl der in Tabelle 10 aufgeführten Stoffverbindungen folgendes zu berücksichtigen:

- eine Unterscheidung der vorliegenden Messergebnisse hinsichtlich ihrer Lage zur Quelle / Fahne war nicht möglich und
- nicht für alle in der Tabelle 9 aufgeführten NSO-HET lagen Untersuchungsergebnisse in jeweils beiden Standortkategorien vor.

Diese angeführten Defizite sollen u.a. in einem nachfolgenden Bearbeitungsschritt (vorgesehen 2011/2012) überprüft und die Aussagen verifiziert werden.

4.3.2 Kriterium - Umweltrelevanz

Die im Rahmen der Recherche gesichtete Literatur, zeigte Defizite bezüglich stoffspezifischer Angaben. Es waren nicht für alle NSO-Heterozyklen physikalisch-chemische Parameter zu ermitteln. Eine Zusammenstellung der zur Verfügung stehenden Stoffdaten ist in der Tabelle 11 dokumentiert.

Für die Charakterisierung der Umweltrelevanz wurden die Wasserlöslichkeit, Fischgiftigkeit (LC50 Fisch 96h), Umweltgefährlichkeit[14] und die Wassergefährdungsklasse[12] als Parameter herangezogen (s.a. Kapitel 4.2 und Abbildung 16). Tabelle 11 zeigt die im Ergebnis der Literaturrecherche (s.a. Kapitel 2.6) gewonnenen Stoffverbindungsinformationen.

Tabelle 11: Stoffdaten Umweltrelevanz

Stoffverbindung	Wasserlöslichkeit	LC50 Fisch (96 Stunden)	Umweltgefährlichkeit[14]	WGK[12]
Pyridin	vollständig mischbar	1,1 - 106 mg/l [38]		2
Chinolin	6 g/l (20℃)	0,44 - 77,8 mg/l [39]	+	2
Dibenzothiophen	0.0015 g/l (25 ℃)	0,7 mg/l [39]	+	-
2-Hydroxybiphenyl	0,7 g/l (20℃) schwer löslich	2,74 - 29,5 mg/l [40]	+	-
Indol	3,65 g/l (25℃)	k.A.	+	-
2-Methylchinolin	2,5 g/l (20℃)	k.A.		-
Isochinolin	5 g/l (20℃)	14 mg/l [39]		-
Benzothiophen	0,13 g/l (schwer löslich)	13,6 mg/l [39]	+	-
2-Methylpyridin	vollständig mischbar	897 mg/l [39]		1
3-Methylpyridin	löslich (20℃)	144 mg/l[15]]		1
Xanthenon	schwer löslich	k.A.		-
Carbazol	unlöslich	0,93 mg/l [41]	+	-
Dibenzofuran	unlöslich	1,05 - 18 mg/l [42]		-
Benzofuran	unlöslich (20℃)	14 mg/l [43]		-

[14] Einstufung beruht auf der Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 in Verbindung mit den Sicherheitsdatenblättern bzw. den Herstellerangaben

[15] Quelle: GESTIS – Stoffdatenbank, http://biade.itrust.de/biade/lpext.dll?f=templates&fn=main-hit-h.htm&2.0

Stoffverbindung	Wasserlöslichkeit	LC50 Fisch (96 Stunden)	Umweltgefährlichkeit[14]	WGK[12]
Thiophen	unlöslich (20℃)	k.A.		3
2-Methylbenzofuran	k.A.	k.A.		-
2,3-Dimethylbenzofuran	k.A.	k.A.		-
1-,2-,4-Methyldibenzofuran	k.A.	k.A.		-
3-Methylbenzothiophen	k.A.	k.A.		-
2,4-Dimethylchinolin	k.A.	k.A.		-
Chinolin-2-on	k.A.	k.A.		-
Isochinolin-1-on	k.A.	k.A.		-
Phenanthridinon	k.A.	k.A.		-

(k.A. – keine Angabe)

Wie der Tabelle 11 zu entnehmen ist, sind hinsichtlich der „*Wasserlöslichkeit*“ einige der aufgeführten Verbindungen laut Literaturangaben [78] unlöslich. Aus den Analyseergebnissen zweier Altlastenstandorte im Land Brandenburg ist aber bekannt, dass diese Heterozyklen (z.B. Thiophen und Benzofuran) trotzdem in erheblichen Konzentrationen im Grundwasser vorliegen können. Untersuchungen von ehemaligen Industriestandorten der Kohle- oder Kohleproduktverarbeitung ergaben oft eine hohe BTEX bzw. Phenolbelastung. Diese Verbindungen besitzen die Eigenschaft als Lösevermittler zu wirken. Damit können die laut Literatur wasserunlöslichen NSO-Heterozyklen im Grundwasser gelöst werden.

Die Angaben zur „*Umweltgefährlichkeit*“ beruhen auf der in Kapitel 4.2 beschrieben Definition „Gefährlicher Stoffe“ wie sie in der Richtlinie 67/548/EWG festgelegt wurde. Die Vorgaben werden durch die europäische Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 über die Einstufung, Kennzeichnung und Verpackung von Stoffen und Gemischen festgelegt. Sicherheitsdatenblätter müssen, entsprechend der Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 zur Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung chemischer Stoffe (REACH) vom 18. Dezember 2006 Angaben zur Umweltgefährlichkeit enthalten.

In Tabelle 12 werden die nach ihrer *“Umweltrelevanz”* gewichteten Soffverbindungen abschließend aufgeführt. Als wesentliche Wichtungskriterien wurden die Rubriken Wassergefährdungsklasse, Umweltgefährlichkeit und Fischtoxizität herangezogen. Für Stoffverbindungen zu denen keine entsprechenden Informationen vorlagen wurde die Wasserlöslichkeit als Kriterium genutzt. Im Vergleich zur KORA-Prioritätenliste sind hierbei 6 zusätzliche NSO-HET-Verbindungen (kursiv fett gedruckt) aufgeführt.

Tabelle 12: Umweltrelevanzwichtung der NSO-Heterozyklen (Brandenburg)

Lfd. Nr.	Stoffverbindung
1	***Thiophen***
2	Chinolin
3	***Pyridin***
4	***3-Methylpyridin***
5	***2-Methylpyridin***
6	***Dibenzothiophen***
7	Carbazol
8	2-Hydroxybiphenyl
9	Benzothiophen
10	***Indol***
11	Dibenzofuran
12	Isochinolin
13	Benzofuran
14	2-Methylchinolin
15	Xanthenon

Einschränkend ist zur Auswahl der in Tabelle 12 aufgeführten Stoffverbindungen zu berücksichtigen, dass nicht für alle Stoffverbindungen umweltrelevante Parameter ermittelt werden konnten.

Problematisch bei der Aus- bzw. Bewertung der recherchierten Daten sind weiterhin die auf den ersten Blick nicht nachzuvollziehenden Angaben bezüglich der Fischtoxizität in Verbindung mit der Wasserlöslichkeit. Beispielsweise ist Benzofuran bei 20℃ wasserunlöslich. Trotzdem ist in der Literatur ein LC50 Fisch-Wert von 14 mg/l angegeben.

Diese angeführten Defizite sollen u.a. in einem nachfolgenden Bearbeitungsschritt (vorgesehen 2011/2012) überprüft und die Aussagen verifiziert werden.

4.3.3 Kriterium - Arbeitsschutzrelevanz

Unter Berücksichtigung bodenschutzrechtlicher Wirkungspfade können beim direkten Umgang mit kontaminiertem Grundwasser oder Boden z.B. bei der Umsetzung von Sanierungsmaßnahmen NSO-Heterozyklen für die menschliche Gesundheit relevant werden. Um die Auswirkungen auf Inhalt und Umfang von Arbeitsschutzmaßnahmen durch NSO-Heterozyklen zu beurteilen, wurden die Parameter Dampfdruck, Säugetiertoxizität (LD50 Ratte oral), Kanzerogenität und Reizwirkung hierfür herangezogen (s.a. Kap. 5.2.1).

Die Tabelle 13 zeigt die mittels Literaturrecherche gewonnenen arbeitsschutzrelevanten Daten.

Tabelle 13: Übersicht Arbeitsschutzkriterien

NSO-HET	Dampfdruck	LD50 Ratte (oral)	kanze-rogen	reizend	toxisch
Chinolin	0,08 hPa (20℃)	331 mg/kg [44]	+	+	+
Isochinolin	0,50 hPa (20℃)	360 mg/kg [45]			+
Thiophen	80,00 hPa (20℃)	1.400 mg/kg [46]		+	
Pyridin	20,50 hPa (20℃)	891 mg/kg [47]			
2-Methylpyridin	10,00 hPa (20℃)	790 mg/kg [45]		+	
3-Methylpyridin	6,00 hPa (20℃)	400 mg/kg[14]		+	
Benzofuran	0,58 hPa (25℃)	k.A.	+		
Benzothiophen	1,33 hPa (20℃)	k.A.			
2-Hydroxybiphenyl	0,40 hPa (20℃)	2.000 mg/kg [48]		+	
Carbazol	k.A.	k.A.	+	+	
2-Methylchinolin	<0,10 hPa (20℃)	1.230 mg/kg [45]			
Indol	0,016 hPa (25℃)	1.000 mg/kg [38]		+	
2,4-Dimethylchinolin	k.A.	k.A.		+	
Dibenzofuran	k.A.	k.A.			
2-Methylbenzofuran	k.A.	k.A.			
2,3-Dimethylbenzofuran	k.A.	k.A.			
1-,2-,4-Methyldibenzofuran	k.A.	k.A.			
3-Methylbenzothiophen	k.A.	k.A.			
Chinolin-2-on	k.A.	k.A.			
Isochinolin-1-on	k.A.	k.A.			
Dibenzothiophen	k.A.	k.A.			
Phenanthridinon	k.A.	k.A.			
Xanthenon	k.A.	k.A.			

(k.A. – keine Angabe)

Im Ergebnis der Wichtung (Wichtungskriterien: kanzerogen > toxisch > LD50 Ratte > reizend) ergeben sich nach dem derzeitigen Kenntnisstand für das Auswertungskriterium *„Arbeitsschutzrelevanz“* entsprechend Tabelle 14 insgesamt 13 relevante Stoffverbindungen. Im Vergleich zur KORA-Prioritätenliste sind hierbei 5 zusätzliche NSO-HET-Verbindungen (kursiv fett gedruckt) aufgeführt.

Tabelle 14: Arbeitsschutzrelevanzwichtung der NSO-Heterozyklen (Brandenburg)

Lfd. Nr.	Stoffverbindung
1	Chinolin
2	Benzofuran
3	Carbazol
4	Isochinolin
5	***3-Methylpyridin***
6	***2-Methylpyridin***
7	***Pyridin***
8	***Indol***
9	2-Methylchinolin
10	***Thiophen***
11	2-Hydroxybiphenyl
12	Benzothiophen
13	2,4-Dimethylchinolin

Einschränkend ist zur Auswahl der in Tabelle 14 aufgeführten Stoffverbindungen zu berücksichtigen, dass nicht für alle Stoffverbindungen umweltrelevante Parameter ermittelt werden konnten.

4.3.4 Zusammenfassung - Ableitung weiterer prioritärer NSO-HET (Brandenburg)

Tabelle 15 zeigt nochmals in einer Zusammenschau das Ergebnis des Ableitungsverfahrens für die einzelnen in Ansatz gebrachten Kriterien *„Maximalkonzentration“*, „Umweltrelevanz“ und *„Arbeitsschutzrelevanz“* zur Bestimmung weiterer für das Land Brandenburg spezifischer prioritärer NSO-HET.

Tabelle 15: Ergebnis der Ableitung weiterer prioritärer NSO-HET (Land Brandenburg)

Kriterium	Relevante Verbindungen im Ergebnis der Auswertung des Kriteriums ... (s.a. Kap. 5.3.1 - 5.3.3)			Maximal-konzentration	Umweltrelevanz				Abeitsschutzrelevanz				
lfd. Nr.	Maximal-konzentration	Umweltrelevanz	Abeitsschutz-relevanz	Konzentrations-wichtung [%]	Wasser-löslichkeit[g/l]	LC50 Fisch (96 h) [mg/l]	Umweltge-fährlichkeit	WGK	Dampf-druck [hPa]	LD50 Ratte (oral) [mg/kg]	kanze-rogen	reizend	toxisch
1	Benzofuran	Benzofuran	Benzofuran	39,8	unlöslich (20°C)	14	k.A.		0,58 (25°C)	k.A.	+	k.A.	k.A.
2	Benzothiophen	Benzothiophen	Benzothiophen	13,2	0,13 (schwer löslich)	13,6	+	-	1,33 (20°C)	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
3	Carbazol	Carbazol	Carbazol	14,5	unlöslich	0,93	+	-	k.A.	k.A.	+	+	k.A.
4	Chinolin	Chinolin	Chinolin	17,2	6 (20°C)	0,44 - 77,8	+	2	0,08 (20°C)	331	+	+	+
5	Chinolin-2-on	-	-	11,9	k.A.	k.A.	k.A.	-	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
6	Dibenzofuran	Dibenzofuran	-	100,0	unlöslich	1,05 - 18	k.A.	-	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
7	-	**Dibenzothiophen**	-	0,3	0.0015 (25 °C)	0,7	+	-	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
8	-	-	2,4-Dimethylchinolin	3,2	1.800	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
9	2-Hydroxybiphenyl	2-Hydroxybiphenyl	2-Hydroxybiphenyl	5,1	0,7 (20°C) schwer löslich	2,74 - 29,5	+	-	0,40 (20°C)	2.000	k.A.	+	k.A.
10	-	**Indol**	**Indol**	1,4	3,65 (25°C)	k.A.	+	-	0,016 (25°C)	1.000	k.A.	+	k.A.
11	-	Isochinolin	Isochinolin	3,2	5,0 (20°C)	14	k.A.	-	0,50 (20°C)	360	k.A.	k.A.	+
12	2-Methylbenzofuran	-	-	17,8	k.A.	k.A.	k.A.	-	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
13	1-,2-,4-Methyldi-benzofuran	-	-	47,0	k.A.	k.A.	k.A.	-	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
14	2-Methylchinolin	2-Methylchinolin	2-Methylchinolin	5,8	2,5 (20°C)	k.A.	k.A.	-	<0,10 (20°C)	1.230	k.A.	k.A.	k.A.
15	**2-Methylpyridin**	**2-Methylpyridin**	**2-Methylpyridin**	45,8	vollständig mischbar	897	k.A.	1	10,00 (20°C)	790	k.A.	+	k.A.
16	**3-Methylpyridin**	**3-Methylpyridin**	**3-Methylpyridin**	46,0	löslich ((20°C)	144	k.A.	1	k.A.	400	k.A.	k.A.	k.A.
17	**Pyridin**	**Pyridin**	**Pyridin**	43,7	vollständig mischbar	1,1 - 106,0	k.A.	2	20,50 (20°C)	891	k.A.	k.A.	k.A.
18	**Thiophen**	**Thiophen**	**Thiophen**	5,3	unlöslich (20°C)	k.A.	k.A.	3	80,00 20°C)	1.400	k.A.	+	k.A.
19	-	Xanthenon	-	1,2	schwer löslich	k.A.	k.A.	-	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.

k.A. – keine Angabe - KORA- Prioritätenliste - nicht in der KORA- Prioritätenliste enthalten

Die folgende Aufzählung von Stoffverbindungen beinhaltet diejenigen NSO-HET, welche nicht in der KORA- Prioritätenliste enthalten sind aber in wenigsten einer der Auswertekriterien als prioritär ausgewiesen wurden:

- Dibenzothiophen
- Indol
- 2-Methylpyridin
- 3-Methylpyridin
- Pyridin
- Thiophen.

Anhand des Konzentrationsniveaus werden von den o.g sechs NSO-HET-Verbindungen das Dibenzothiophen und Indol z. Z.t nicht weiter betrachtet, da sie das festgelegte Konzentrationskriterium (s. Kapitel 4.3.1 ff.) von >5% deutlich mit 0,3 % bzw. 1,4 % unterschreiten.

Im Ergebnis des Auswertungsverfahrens ergeben sich somit vorläufig die in Abbildung 20 aufgeführten vier weiteren NSO-HET, welche zusätzlich zu den in der KORA-Prioritätenliste erfassten Verbindungen bei entsprechenden Standortuntersuchungen im Land Brandenburg berücksichtigt werden sollten.

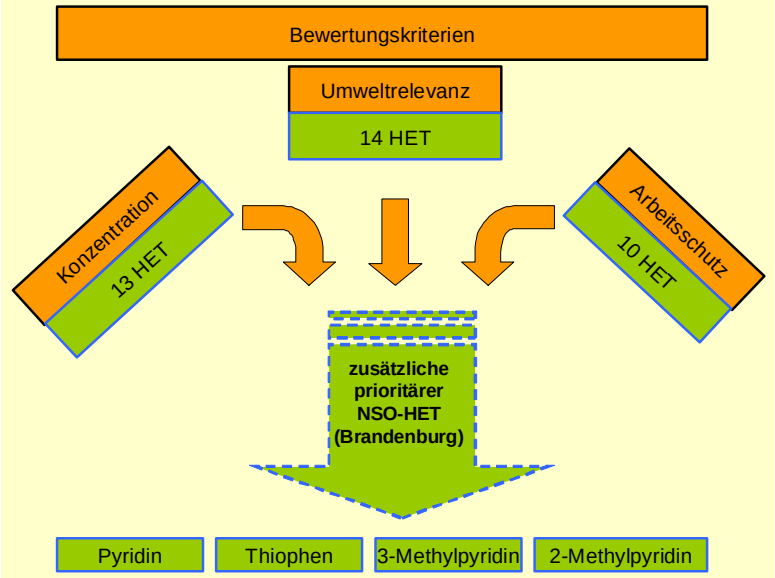


Abb. 20: Ableitung zusätzlicher prioritärer NSO-HET (Brandenburg)

Eine endgültige brandenburgspezifische Prioritätenliste kann anhand der derzeitigen Datenlage noch nicht formuliert werden. In einem weiteren Bearbeitungsschritt sind aber entsprechende weitere Recherchen und Nachuntersuchungen (Grundwasserbeprobungen) zur Verbesserung der Datenbasis vorgesehen, um eine landesspezifische NSO-HET-Prioritätenliste ableiten zu können.

Abschließend werden noch einmal kurz stoffspezifische Eigenschaften für die o.g. zusätzlichen prioritären NSO-HET (Brandenburg) aufgeführt:

Pyridin besitzt mit der Einstufung Wassergefährdungsklasse 2 (WGK) in Verbindung mit der vollständigen Mischbarkeit mit Wasser ein Grundwasser-(GW)-Gefährdungspotential. Hinzu kommt die nachgewiesene toxische Wirkung auf Fische. Aus arbeitsschutzrelevanter Sicht ist die leichte Entzündlichkeit in Verbindung mit dem im Vergleich hohem Dampfdruck problematisch (unangenehme Geruchsbelästigung). Und nicht zuletzt die an Standorten früherer „Braunkohleveredelung“ gemessenen hohen Konzentrationen führen dazu, diese Verbindung als prioritär einzustufen. Da die Proben an den Altlastenstandorten der Kategorie „Produktverarbeitung“ nicht auf Pyridin untersucht wurden, können z. Zt. keine Aussage zum Vorkommen oder den zu erwartenden Kon-

zentrationen an diesen Standorten getroffen werden. Es ist aber anzunehmen, dass diese Verbindung dort ebenfalls nachzuweisen ist.

Der vorgeschlagene LAWA GFS-Wert liegt bei 0,50 µg/l (s. [55]).

2-Methylpyridin ist zwar nur mit WGK 1 eingestuft, besitzt aber eine nachgewiesene Fischtoxizität. Es ist beim Einatmen (Dampfdruck: 12 hPa bei 20°C), Verschlucken und Berühren mit der Haut gesundheitsschädlich. Die Untersuchungen beschränken sich ebenso wie bei Pyridin auf Standorte der ehemaligen Kohleveredelung. Die Annahme, dass die Verbindung auch an den anderen Standorten vorzufinden ist, trifft hier ebenfalls zu. Hervorzuheben sind die gemessenen Konzentrationen die im Vergleich zu anderen Verbindungen um Größenordnungen höher waren.

3-Methylpyridin ist zwar nur mit WGK 1 eingestuft, besitzt aber eine nachgewiesene Fischtoxizität. Es ist beim Einatmen (Dampfdruck: 6 hPa bei 20°C), Verschlucken und Berühren mit der Haut gesundheitsschädlich. Die Untersuchungen beschränken sich ebenso wie bei Pyridin auf Standorte der ehemaligen Kohleveredelung. Die Annahme, dass die Verbindung auch an den anderen Standorten vorzufinden ist, trifft hier ebenfalls zu. Hervorzuheben sind die gemessenen Konzentrationen die im Vergleich zu anderen Verbindungen um Größenordnungen höher waren.

Thiophen ist in die WGK 3 eingestuft und besitzt somit ein noch größeres GW-Gefährdungspotential als Pyridin. Die leichte Entzündlichkeit bei einem Dampfdruck von 80 hPa (20°C) und die reizende Wirkung machen es aus Sicht des Arbeitsschutzes problematisch. Es wurde ebenso wie Pyridin mit hohen Konzentrationen an Standorten früherer Braunkohleveredelung nachgewiesen. Da an den Standorten der Kategorie „Produktverarbeitung“ die Grundwasserproben nicht auf Thiophen untersucht worden sind, können z.Zt. diesbezügliche Aussagen nicht getroffen werden. Es ist aber anzunehmen, dass Thiophen ebenso wie Pyridin und 2-Methylpyridin auch in dieser Standortkategorie nachweisbar sind.

Mit dem LAWA-Bericht *„Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerte für das Grundwasser - NSO-Heterozyklen“* [27] wurden für 12 von insgesamt 92 NSO-HET (s.a. Kapitel 4.1) *Geringfügigkeitsschwellenwerte* (GFS) vorgeschlagen. Dies verdeutlicht auch nochmals die Schwierigkeit einer Bewertung der Einzelverbindungen auf Grundlage von chemisch-pysikalischen sowie human- bzw. ökotoxikologischen Stoffeigenschaften.

5 Hinweise zu Probennahme und Analytik von NSO-Heterozyklen

5.1 Anforderungen an die Probennahme

Die sich im Boden bzw. Grundwasser befindlichen und unter normalen Bedingungen teilweise wasserunlöslichen NSO-Heterozyklen, wie beispielsweise Dibenzofuran, können durch das Vorhandensein von Lösevermittler in Lösung gebracht werden. Deshalb ist bei der Probennahme bzw. Lagerung darauf zu achten, eventuell vorhandene Lösevermittler mit zu konservieren, um später bei der Analytik keinen Unterbefund durch z.B. Ausfallen gelöster NSO-Heterozyklen zu erhalten.

Aus der Laborpraxis ist die besonders ausgeprägte Neigung von Pyridin und seinen Homologen zur Sorption an Oberflächen bekannt. Solchen Effekten muss mit einer entsprechenden Lösemittelspülung bzw. thermischen Desorption der Probeninhaltsstoffe aus den Probennahmegefäßen entgegengewirkt werden, um Verluste bzw. Überbefunde zu vermeiden.

Einzelne Heterozyklen sind photolytisch zersetzbar. Die photochemischen Reaktionen sowie der Einfluss von Temperatur oder Metallen als Katalysatoren sind noch nicht ausreichend untersucht. Um Veränderungen in der Probenzusammensetzung zu vermeiden, sollten Braunglasflaschen als Probennahmegefäße genutzt werden. Des Weiteren muss darauf geachtet werden, dass die Probennahmegefäße während des Transports nicht erwärmt bzw. keinen Temperaturschwankungen ausgesetzt werden. Dazu hat sich ein Transport in einer Kühltasche/-box bewährt.

Nach DIN ISO 22155 Bodenbeschaffenheit - Gaschromatographische quantitative Bestimmung flüchtiger aromatischer Kohlenwasserstoffe, Halogenkohlenwasserstoffe und ausgewählter Ether - Statisches Dampfraum-Verfahren (ISO/DIS 22155:2009) können Proben bei 4°C bis zu 4 Tage aufbewahrt werden. Zur verlustfreien Bestimmung wird die Erstellung eines Extraktes bei Anlieferung der Proben empfohlen.

Die Extrakte sind bezüglich des Aromatengehalts wesentlich haltbarer als die Originalproben.

5.2 Analytik in der Praxis

In der Praxis haben sich zum analytischen Nachweis von NSO-Heterozyklen zwei Verfahren etabliert. Dies ist einmal die Headspace-Gaschromatographie mit massenspektrometrischer Detektion (HS-GC-MS) und die Hochleistungsflüssigkeitschromatographie mit Dioden-Array-Detektor (HPLC-DAD). Beide Verfahren eignen sich grundsätzlich zur Analyse von Proben auf NSO-Heterozyklen.

Mit der *HS-GC-MS* lassen sich leichtflüchtige NSO-heterozyklische aromatische Kohlenwasserstoffverbindungen (1-2-Ringsysteme) vor allem N-Heterozyklen, BTEX und andere Lösemittel sowie leichtflüchtigere PAK`s erfassen [49]. Bei der Anwendung geeigneter Temperaturbereiche wird die Mehrheit der NSO-Heterozyklen erfasst. Nur Verbindungen mit Siedetemperaturen von über 300°C werden nicht erfasst.

Mit der *HPLC-DAD* lassen sich Teerölbegleitstoffe wie NSO-Heterozyklen (2-3-Ringsysteme), PAKs, Homozyklen und Metabolite effizienter trennen [50].

Um die Vorteile der Hochdruckflüssigkeitschromatographie besser nutzen zu können, wird häufig die leistungsfähige Kopplung mit Massenspektrometern als Detektoren, z. B mit Tandemmassenspektrometrie (*HPLC-MS-MS*) eingesetzt. Solche Kopplungen liefern hoch aufgelöste, selektive Trennungen mit guten Nachweisgrenzen.

Voraussetzung für einen reproduzierbaren Nachweis der Einzelverbindungen ist die Verwendung geeigneter Referenzsubstanzen.

Bei den ausgewerteten Brandenburger Standortuntersuchungen wurden die NSO-Heterozyklen mittels Headspace-GC-MS und HPLC-DAD bestimmt.

Ein genormtes Bestimmungsverfahren z. B. nach DIN existiert noch nicht, deshalb werden die NSO-Heterozyklen in Anlehnung an Verfahren der Aromaten- oder Polyzyklen-Bestimmung analysiert.

- BTEX-Aromaten, gesamt [51] — DIN 38407 F9
- PAK, gesamt inkl. Naphthalin [52] — DIN EN ISO 17993 F18 / EPA 610
- Phenol / Alkylphenole [53] — DIN EN ISO 18857-1 / EPA 604
- Lösemittel [54] — DIN ISO 22155 (Dampfraum-Verfahren)

In einem weiterführenden Bearbeitungsschritt zur Thematik (voraussichtlich 2011/2012) sollen an verschiedenen Altstandorten in Brandenburg Grundwasserbeprobungen durchgeführt und zu Vergleichszwecken mit unterschiedlichen Analysenverfahren (Headspace-HS-GC-MS, HPLC-DAD und HPLC-MS) untersucht werden, um im Ergebnis entsprechende Anwendungsempfehlungen zu erarbeiten.

Aus der Tabelle 16 sind die derzeitig recherchierten Preise für die hier angeführten Analyseverfahren zur Bestimmung von NSO-HET zur Orientierung aufgeführt.

Tabelle 16: Kostenübersicht NSO-HET - Analytik

Verfahren	Kosten / Probe [€]		
	minimal	maximal	Mittelwert
Headspace-GC-MS	66,00 [16]	214,00 [16]	125,00 [16]
HPLC-DAD	125,00	250,00	188,00
HPLC-MS	125,00	250,00	188,00

Dabei ist zu beachten, dass die Kosten stark vom Parameterumfang abhängig sind. Je mehr Parameter untersucht werden sollen, desto mehr Standards benötigen die Labore, welches entsprechende Mehrkosten verursacht.

5.2.1 Kurzbeschreibung Headspace-GC-MS

Vom zu untersuchenden Grundwasser werden vor Ort jeweils 10 ml in Headspace-Vials abgefüllt, in denen 12 g Kaliumcarbonat vorgelegt wurden, und gut verschlossen.

Im Labor werden unter Eiskühlung deuterierte interne Standards zugegeben. Durch anschliessendes Schütteln wird das Kaliumcarbonat in Suspension gebracht. Die so vorbereiteten Proben können mittels HS-GC-MS analysiert werden (s. Abbildung 21).

Ist eine Lagerung der Proben notwendig, sollte diese nur tiefgekühlt vorgenommen werden [61].

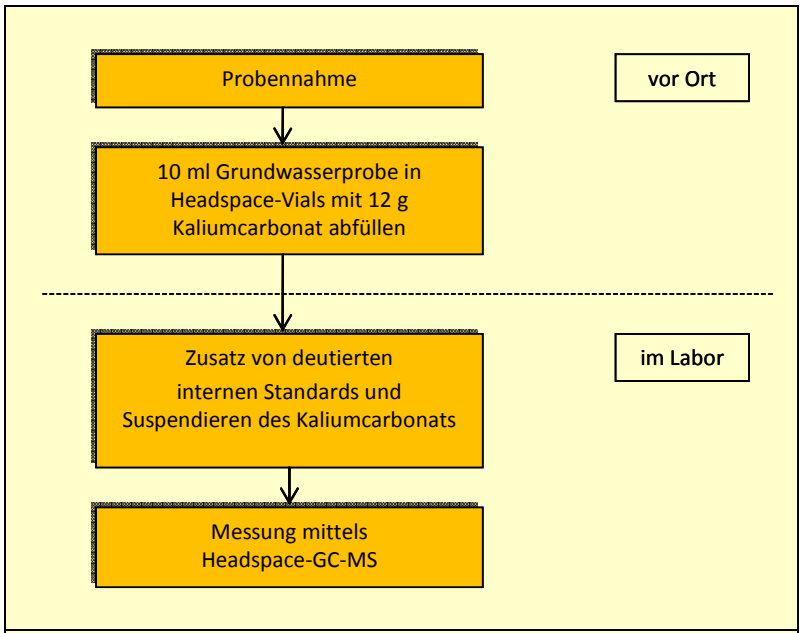


Abb. 21: Ablaufschema HS-GC-MS

5.2.2 Kurzbeschreibung HPLC-DAD / HPLC-MS

Die zu untersuchenden Grundwasserproben werden vor dem Transport mittels Säurezusatz (pH 1 - 2) oder Natriumazid (2 g/l) konserviert. Im Labor werden die Proben auf pH 4 eingestellt und per Festphasenextraktion gereinigt, anschließend eluiert und nach Zusatz von internen Standards über HPLC-DAD oder HPLC-MS quantifiziert. (s. Abbildung 22).

Eine Lagerung der Proben sollte nur nach Säure- oder Azidzugabe in Glasflaschen mit teflonkaschiertem Deckel erfolgen. So vorbereitete Proben sind bei 4 - 6℃ je nach Schadstoffkonzentration zwischen einigen Tagen und mehreren Wochen haltbar [61].

[16] Quelle s. [75]

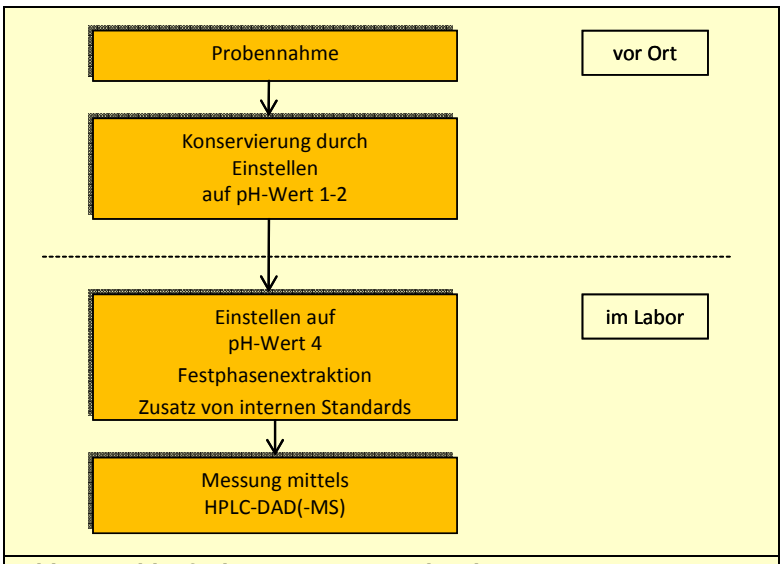


Abb. 22: Ablaufschema HPLC-DAD (-MS)

6 Ableitung ökotoxikologischer Merkmale

Sofern an einem Standort NSO-Heterozyklen, für die keine Angaben einer ökotoxikologischen Wirkung vorhanden sind, in hohen Konzentrationen nachgewiesen werden und eine Abschätzung bezüglich einer Ökotoxizität notwendig ist, bieten sich die folgende:

– *mikrobiologische Verfahren an:*
  - Most Probable Number (MPN)-Verfahren
  - DAPI-Färbung
  - DMSO-Reduktion
  - Fluoreszenz in situ Hybridisierung (FISH)

– *Testverfahren mit Wasserorganismen an:*
  - Algenwachstumstest [56]
  - Daphnientest [57]
  - Leuchtbakterientest [58].

Chemisch-physikalische Verfahren wie z.B. die mit einer gaschromatographischen Analyse und anschließender Auswertung der mittels Massenspektrometrie erstellten Chromatogramme (GC-MS-Fingerprinting), können zwar indirekte Hinweise auf die mikrobielle Aktivität geben, sind aber zur einzelstoffspezifischen Abschätzung der Ökotoxizität nicht zielführend und werden hier nicht weiter betrachtet.

Aus der folgenden Tabelle 17 sind die derzeitig recherchierten Preise für die hier angeführten Verfahren zur Orientierung aufgeführt.

Tabelle 17: Kostenübersicht mikrobiologische und Testverfahren mit Wasserorganismen

Verfahren	Kosten / Probe [€]		
	minimal	maximal	Mittelwert
MPN-Verfahren	40,00	180,00	88,00
DAPI-Färbung	auf Anfrage [17]	-	-
DMSO-Reduktion	80,00	120,00	100,00

[17] keine Kosten ermittelbar

Verfahren	Kosten / Probe [€]		
	minimal	maximal	Mittelwert
FISH	120,00	150,00	130,00
Algenwachstumstest	auf Anfrage [17]	-	-
Daphnientest	25,00	80,00	46,00
Leuchtbakterientest	25,00	82,00	48,00

In den folgenden Kapiteln werden die o.g. *mikrobiologischen Verfahren* und *Testverfahren mit Wasserorganismen* ausführlicher betrachtet.

Wie in [55] postuliert hat Schäfers et.al. (2001) wissenschaftlich begründete Hinweise dafür geliefert, dass die intrinsische Toxizität für Grundwasserorganismen durch Standardtestorganismen gut abgebildet wird. Der LAWA-Unterausschuss "Geringfügigkeitsschwellenwerte für NSO-Heterozyklen postuliert in [55], dass bei der Priorisierung der NSO-Het die Krebstiere als eine der wichtigsten Klassen der Grundwasser-Lebensgemeinschaft (Hahn und Friedrich, 1999; Hahn, 2002; Rumm und Schminke, 2000 u.v.a.m.), vertreten durch den Standardtestorganismus *Daphnia magna*, besonders gewichtet werden.

6.1 Mikrobiologische Verfahren

6.1.1 MPN-Verfahren (Most Probable Number)

Mit diesem Verfahren wird über die Auswertung einer Verdünnungsreihe im 3-fach-Ansatz mittels statistisch erhobener Daten die wahrscheinlichste Keimzahl in einer Probe ermittelt. Die Proben sollten feldfrisch analysiert werden. Eine Lagerung der Proben hat gekühlt und unter Erhalt der Redoxbedingungen zu erfolgen. Die Abbildung 23 zeigt die einzelnen durchzuführenden Arbeitsschritte.

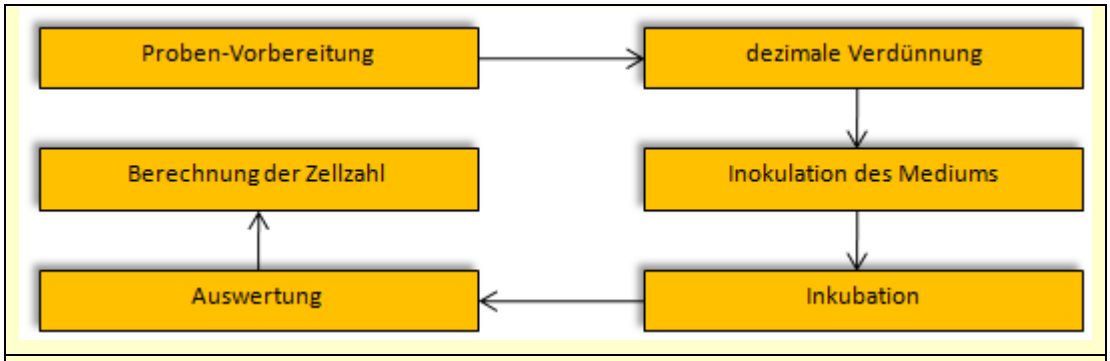


Abb. 23: Durchzuführende Arbeitsschritte - MPN-Verfahren

Ein Nachteil dieser Methode ist, dass in gemischten Mikroorganismengesellschaften, bestehend aus verschiedenen physiologischen Typen, über das verwendete Medium, der Temperatur und des Sauerstoffgehalts, eine Selektion des Wachstums vorgenommen wird. So können nicht alle Mikroorganismenarten erfasst werden. (DIN ISO 9308-3 Escheriakoli, 7899 Enterokokken, 6888 Staphyokoken-Lebensmittel).

Trotzdem kann durch einen Vergleich der ermittelten Keimzahlen mit statistisch erhobenen Daten von natürlicherweise in Böden oder Grundwässern lebenden Mikroorganismen, Rückschlüsse auf eine eventuelle toxische Wirkung der vorhandenen Schadstoffe geschlossen werden.

6.1.2 DAPI-Färbung

Mit einer Färbung von Zellen mit dem Farbstoff DAPI (4‘,6-Diamidino-2‘-phenyindol) kann die Anzahl der im Grundwasser und Boden vorhandenen Bakterien quantifiziert werden, und zur Erkennung aktiver Abbauzonen (= Zonen mit hoher Bakteriendichte) sowie gegebenenfalls zur Erkennung toxischer Effekte genutzt werden [61].

Da kein genereller Hintergrundwert für die Anzahl von Bakterien im Grundwasser existiert, sollte eine lokale Vergleichsuntersuchung durchgeführt werden. Mit einem Vergleich der so gewonnenen Daten kann auf eine erhöhte bzw. durch toxische Noxen limitierte mikrobiologische Aktivität geschlossen werden [63].

6.1.3 DMSO-Reduktion

Die DMSO[18]-Reduktion beruht auf der durch Mikroorganismen verursachten Reduktion einer vorgelegten DMSO-Lösung zu DMS[19].

Mit dieser Methode kann die mikrobielle Aktivität der jeweiligen Horizonte eines Tiefenprofils ermittelt werden. Sie eignet sich zur Untersuchung von Böden, Kompost und Wässern.

Da ca. 95% aller untersuchten Kulturen in der Lage sind, DMSO zu DMS zu reduzieren, gilt dieser Parameter als geeignet, um die mikrobielle Aktivität zu bestimmen. Das gebildete DMS kann nach Abschluss des Versuchs mittels Gaschromatographie gemessen werden.

Die Proben sollten frisch eingesetzt werden und können tiefgefroren bis zu 3 Monate gelagert werden [61]. Die Abbildung 24 zeigt die einzelnen Arbeitsschritte.

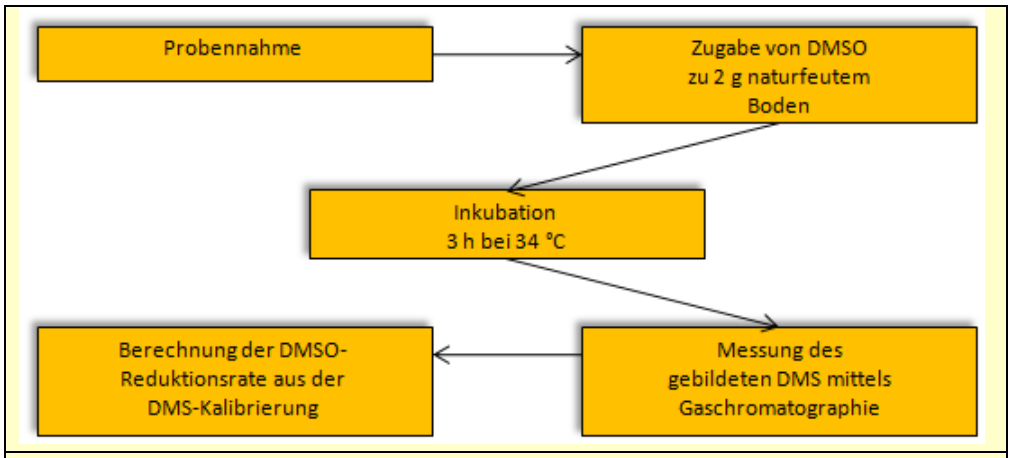


Abb. 24: Durchzuführende Arbeitsschritte - DMSO-Reduktion

6.1.4 Fluoreszenz in situ Hybridisierung (FISH)

Diese Methode eignet sich sowohl zur Bestimmung der mikrobiellen Aktivität, als auch zur Quantifizierung schadstoffabbauender Bakterien. Theoretisch können beide Parameter parallel untersucht werden. Dazu müssen nur die für die jeweilige Fragestellung entwickelten Oligonukleotid[20]-Sonden eingesetzt werden.

Vom Prinzip her binden die mit einem Fluoreszenzfarbstoff markierten Sonden an spezifische Zielsequenzen an der ribosomalen RNA. Nach einer entsprechenden Gesamtfärbung (DAPI, SYTO 9, Propi-

[18] DMSO – Dimethylsulfoxid

[19] DMS -Dimethylsulfid

[20] kurze DNA-Stücke von bis zu 1.000 Nukleotiden (= „Buchstaben“, aus denen sich die DNA zusammensetzt), diese Ketten können synthetisch hergestellt werden - Oligonukleotide dienen z.B. als Sonde zur Hybridisierung oder bei speziellen molekularbiologischen Verfahren (z.B. PCR) - http://www.enzyklo.de

diumjodid), können die mit den Oligonukleotid-Sonden markierten Zellen mittels Epifluoreszenzmikroskopie untersucht und ausgewertet werden.
Die Abbildungen 25 und 26 zeigen mit entsprechenden Sonden hybridisierte Zellen.

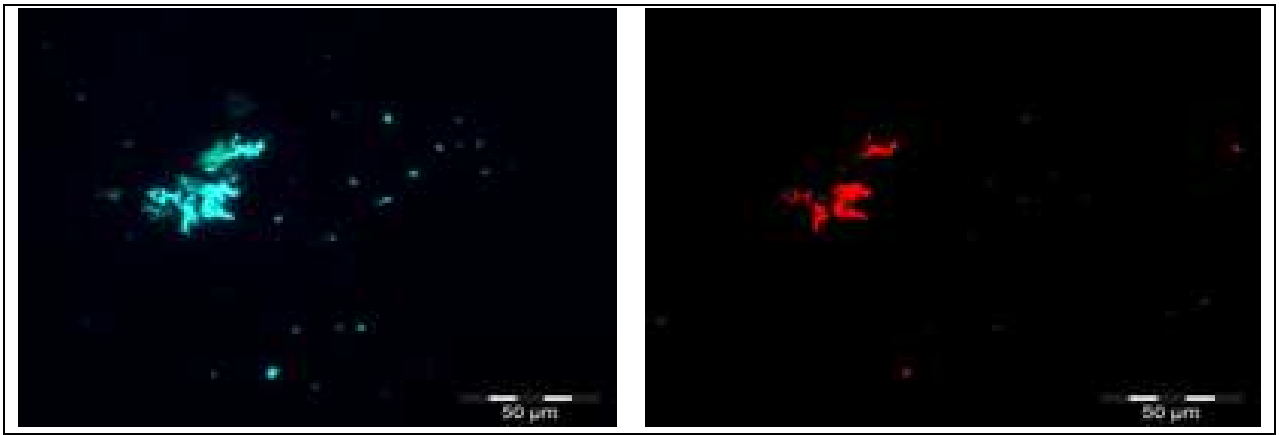


Abbildung 25: FISH mit spezifischer Oligonukleotid-Sonde (Quelle: [77])

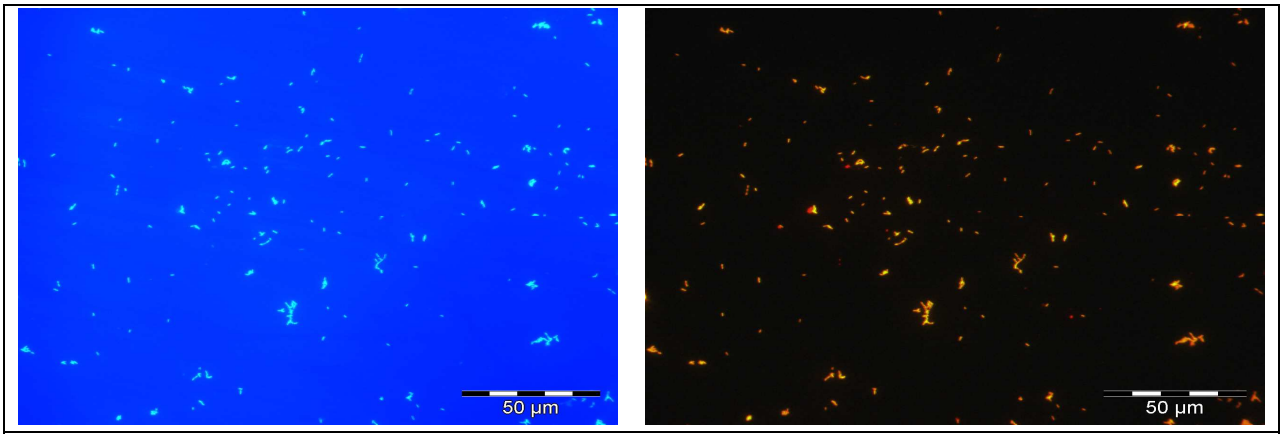


Abbildung 26: FISH mit der Oligonukleotid-Sonde EUB 338 für Bakterien (Quelle: [77])

Da die Anzahl der in den Zellen befindlichen Ribosomen direkt von der Stoffwechselaktivität abhängt, können durch die Auswertung der Hybridisierungsergebnisse Rückschlüsse auf die Aktivität gezogen werden.

Die Proben sollten direkt nach den Probennahmen fixiert werden und können bei -20℃ einige Wochen lagern.

Eine Weiterentwicklung der FISH ist die Catalyzed Reporter Deposition - Fluoreszenz in situ Hybridisierung (CARD-FISH). Mit ihr lassen sich auch Mikroorganismen mit einer relativ schwachen Stoffwechselaktivität erfassen. Somit kann man einen Überblick über die Biodiversität am Standort erlangen.

Der Vorteil dieser beiden Methoden besteht darin, dass sie komplett unabhängig von Kultivierungen durchführbar sind und somit die Einschränkungen von selektiven Kulturmedien entfallen [64] / [65].

6.2 Testverfahren mit Wasserorganismen

Wenn bei den im Folgenden kurz beschriebenen biologischen Testverfahren Wirkungen beobachtet werden, kann davon ausgegangen werden, dass die Verbindungen wasserlöslich und bioverfügbar sind und damit über den Wasserpfad transportierbar sind. Im umgekehrten Fall, wenn keine Wirkungen beobachtet werden können, kann der Transport aber nicht ausgeschlossen werden.

Biologische Testsysteme eignen sich daher nur unter Beachtung dieser Einschränkung für die toxikologische Bewertung von NSO-Heterozyklen.

6.2.1 Algenwachstumstest [56]

Durch das Vereinen von definierten Volumina eines Bodeneluates oder einer Verdünnung mit einer Algensuspension (*Desmodesmus subspicatus*), kann von der Algenbiomassebildung auf eine ökotoxische Wirkung der im Boden befindlichen Verbindungen geschlossen werden. Die Auswertung erfolgt über Fluoreszenzmessungen des Chlorophylls.

Bei der Auswertung der Untersuchungsergebnisse ist zu beachten, dass die im Boden befindlichen Nährstoffe (z.B. Phosphat, Nitrat) die Toxizität von wachstumshemmenden Stoffen beeinflussen können.

6.2.2 Daphnientest [57]

Nach [74] können Grund- und Sickerwasserproben sowie Bodenproben (Eluate oder Aufschlämmungen) einem Daphnientest unterzogen werden. Die zu untersuchende Wasserprobe wird mit einem speziell hergestellten Verdünnungswasser bzw. mit Daphnienzuchtwasser verdünnt. In jeweils 20 ml Probenflüssigkeit werden fünf 2 - 26 Stunden alte Daphnien eingesetzt. Nach 24 h werden die schwimmunfähigen Tiere gezählt. Der Verlust der Schwimmfähigkeit beruht auf einer Schädigung durch die Wasserinhaltsstoffe. Zur Kontrolle wird eine Referenzsubstanz (Kaliumdichromat) sowie eine Nullprobe (100% Verdünnungswasser) getestet (s. [74]).

6.2.3 Leuchtbakterientest [58]

Mit diesem Batch-Test kann über die Erfassung der Leuchtintensitätshemmung des Versuchsorganismus *Vibrio fischii* (NRRLB-11177) über eine Verdünnungsreihe eine eventuelle ökotoxikologische Wirkung abgeleitet werden.

6.2.4 Bestimmung der koloniebildenden Einheiten (KBE) [59]

Diese Methode dient zur quantitativen Koloniezahlbestimmung heterotropher Bakterien, also Bakterien, die als Kohlenstoffquelle zum Aufbau von Biomasse organische Verbindungen verwendet werden.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Bei der Untersuchung und Sanierung von altlastverdächtigen Flächen und Altlasten der carbochemischen Industrie sind zur Beurteilung der Gefahrenlage die Kenntnisse über die standortrelevanten Kontaminanten, deren mobile bzw. mobilisierbaren Anteile, die Schadstoffkonzentrationen und -verteilung sowie die ökotoxischen bzw. humantoxischen Eigenschaften der relevanten Schadstoffe eine notwendige Grundvoraussetzung.

Das Schadstoffspektrum an Standorten der carbochemischen Industrie besteht i.d.R. aus Kohlenwasserstoffgemischen homologer Verbindungen, die teilweise summarisch erfasst (KW-Index) oder von denen charakteristische Einzelstoffe analysiert und bewertet werden. Das zu untersuchende Schadstoffspektrum ist historisch etabliert und umfasst so z.B. die Monoaromaten (BTEX) und die PAK (16 PAK nach US EPA). Die Untersuchung und Bewertung von Heterozyklen ist dagegen noch nicht gängige Praxis.

Zur Thematik liegen derzeit als fachliche Grundlagen u.a. im Ergebnis der Untersuchungen des BMBF-Förderschwerpunktes KORA (*Themenverbund 2*) eine Liste prioritärer NSO-Heterozyklen vor und vom Unterausschuss *„Geringfügigkeitsschwellenwerte für NSO-Heterozyklen“* der LAWA wurden für insge-

samt 12 NSO-Heterozyklen entsprechende Geringfügigkeitsschwellenwerte (GFS) abgeleitet und vorgeschlagen.

Für die bisher untersuchten Standorte der Carbochemie im Land Brandenburg können im Ergebnis der Recherchearbeit und der Auswertung von Standortuntersuchungen die folgenden ersten Aussagen getroffen werden.

Das Schadstoffspektrum an den Brandenburger Standorten der carbochemischen Industrie ist i.d.R. durch die Verarbeitung von Braunkohle bzw. Braunkohleprodukten insbesondere nach 1945 geprägt. Nach einer Auswertung von Grundwasseranalysen hinsichtlich des Schadstoffspektrums an 8 Altstandorten der carbochemischem Industrie und einem Vergleich mit den in der KORA-Prioritätsliste enthaltenen Stoffverbindungen wurde deutlich, dass sich die Zusammensetzung der nachgewiesenen NSO-Heterozyklen unterscheidet. Als mögliche Ursachen hierfür können sowohl die unterschiedliche stofflichen Zusammensetzung der eingesetzten Primärstoffe (Braunkohle ⇔ Steinkohle) als auch die unterschiedlichen produktionsspezifischen Randbedingungen (Temperaturbereiche) in Frage kommen. Anhand der pragmatisch in Ansatz gebrachten Beurteilungskriterien „Konzentration (Grundwasser)“, „Umweltrelevanz“ und „Arbeitsschutz“ zur Beurteilung der Relevanz von NSO-Heterozyklen im Land Brandenburg können derzeit folgende NSO-Heterozyklen zusätzlich zur KORA-Prioritätsliste benannt werden:

- 2-Methylpyridin
- 3-Methylpyridin
- Pyridin und
- Thiophen.

Eine abschließende für Brandenburg typische Prioritätenliste kann allerdings anhand der derzeitigen Datenlage nicht formuliert werden, da z.B. an den 8 ausgewerteten Altstandorten unterschiedliche Analysenspektren untersucht wurden.

In einem weiterführenden Bearbeitungsschritt (voraussichtlich 2011/2012) sollen die bestehenden Defizite durch eine differenziertere Recherche und Nachuntersuchungen reduziert werden, wie z.B. durch:

- Standortrecherchen hinsichtlich der Schadstoffverteilung im Bereich der Schadstoffquellen und -fahnen,
- Grundwasserbeprobungen mit einheitlichem Analysenspektrum insbesondere an den Standorten der Kohleproduktverarbeitung, da dort z.B. bisher keine Untersuchungen auf Pyridin, 2-Methylpyridin und Thiophen durchgeführt wurden,
- Beprobung von Messstellen im Quell – und Schadstofffahnenbereich,
- vergleichende Grundwasseruntersuchungen mit unterschiedlichen Analysenverfahren (Headspace-HS-GC-MS, HPLC-DAD und HPLC-MS) und
- Untersuchungen zur Ökotoxizität (Daphnientest) für NSO-Heterozyklen mit entsprechenden Informationsdefiziten.

8 Literaturverzeichnis

[01] Brockhaus´ Konversationslexikon, 1902-1910

[02] www.chemieforum-erkner.de/chemie-geschichte/firmen/gaswerke.htm

[03] Michels, J. und Wachinger, G. und V. Franzius: BMBF-Förderschwerpunkt Natural attenuation KORA – Kontrollierter Natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Grundwässer und Böden

[04] Werner, P. und Börke, P. und N. Hüsers: Leitfaden – Natürliche Schadstominderung bei Teerölalltlasten, Themenverbund 2, Gaswerke, Kokereien, Teerverarbeitung, (Holz-) Imprägnierung im BMBF-Förderschwerpunkt KORA, Techn. Universität Dresden, Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten, 2008

[05] Hüsers, N. und M.J. Gehring: Verhalten und Abbau von Polyzyklischen Aromatischen Kohlenwasserstoffen im Untergrund, Schriftenreihe für Abfallwirtschaft und Altlasten, Bd. 61, 4. Dresdner Symposium „Endokrin Aktive Stoffe in Abwasser, Klärschlamm und Abfällen“, 2009

[06] Stupp, H.D. und Dr. L. Paus (1999): Migrationsverhalten organischer Grundwasser-Inhaltsstoffe und daraus resultierende Ansätze zur Beurteilung von Monitored Natural Attenuation (MNA), Terra Tech 5

[07] Praxispapier Niedersächsischer Arbeitskreis Sickerwasserprognose: Die Sickerwasserprognose in der Praxis, Ergebnisbericht und Anwendungsempfehlungen einer interdisziplinären niedersächsischen Arbeitsgruppe

[08] Licht, D. und Ahring, B. K.und Erik Arvin: Effects of Electron Acceptors, reducing Agents, and toxic Metabolites on aromatic Degradation of heterocyclic Compounds, Biodegradation, 1996

[09] Johansen, S.S. und Hansen, A.B. und Mosbaek, H. und E. Arvin: Identification of heteroaromatic and other compounds in groundwater at creosote-contaminated sites in Denmark, Ground Water Monitoring and Remediation, 1997

[10] P. Börke : Untersuchungen zum Ausbreitungsverhalten von PAK an teerkontaminierten Standorten, Dissertation, Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten der TU-Dresden, 2007

[11] S. Meyer: Mikrobieller Abbau typischer Teeröl-PAK und Hetero-PAK (N,S,O) in einem Modellbodenhorizont, Wechselwirkungen, Metabolitenbildung und Ansätze zur ökotoxikologischen Metabolitenbewertung, Dissertation, Universität Hamburg, Institut für Biochemie und Lebensmittelchemie, 1999

[12] I.M. Rivas: Cometabolic transformation of thiophene with benzene as primary substrate, Dissertation, Environmental & Resources DTU, Technical University of Denmark, 2001

[13] Annweiler, E. und Michaelis, W. und R.U. Meckenstock: Anaerobic Cometabolic Conversion of Benzothiophen by a Sulfate-Reducing Enrichment Culture and in a Tar-Oil-Contaminated Aquifer, Applied and Environmental Microbiology,2001

[14] Jonathan D. Van Hamme, J. D. und Singh, A und O. P. Ward: Recent Advances in Petroleum Microbiology, Microbiology and Molecular Biology Reviews, 2003

[15] Pereira, W.E. und Rostad, C.E. und Leiker, T.J. und Updegraf, D.M. und J.L. Bennet: Microbial hydroxylation of quinoline in contaminated groundwater - evidence for incorporation of the oxygen atom of water, Applied and Environmental Microbiology, 1988

[16] D. Zamfirescu: Release and Fate of Specific Organic Contaminants at a Former Gasworks Site, Tübinger Geowissenschaftliche Arbeiten (TGA): Reihe C; 53, Bereich 16 Geowissenschaftliche Fakultät, http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:21-opus-20183, 2000

[17] Blotevogel,J. und Reineke, A.-K. und Hollender, J. und T. Held: NSO-Heterozyklen und ihre Bedeutung für die Altlastenbearbeitung, KORA-Workshop Themenverbund 2: Gaswerke, Kokereien, Teerverarbeitung, Holzimprägnierung, 2006

[18] Sagner, A. und Brinkmann, C. und Eisenträger, A. und Hilger, G. und Hollert, H. und A. Tiehm, Vorkommen und Ökotoxizität von heterozyklischen Kohlenwasserstoffen (NSO-HET), KORA-Workshop Themenverbund 2: Gaswerke, Kokereien, Teerverarbeitung, Holzimprägnierung, 2006

[19] Arvin,E. und Jensen, B. K. und A. T. Gundersen: Substrate Interactions during Aerobic Biodegradation of Benzene, Applied and Environmental Microbiology, 1989

[20] Kaiser, J.-P. und Feng, Y und J.-M. Bollag: Microbial Metabolism of Pyridine, Quinoline, Acridine, and Their Derivatives under Aerobic and Anaerobic Conditions, Applied and Environmental Microbiology, 1996

[21] Rhee, S.-K. und Lee, G. M. und Yoon, J.-H. und Park, Y.-H. und Bae, H.-S und S.-T. Lee: Anaerobic and Aerobic Degradation of Pyridine by a Newly Isolated Denitrifying Bacterium, Applied and Environmental Microbiology, 1997

[22] S. Fetzner: Bacterial Degradation of Pyridine, Indole, Quinoline, and their Derivatives under different Redox Conditions, Appl. Microbiol. Biotechnol., 1997

[23] Gai, Z. und Yu, B. und Wang, Y. und Ma, C. und Feng, J. und Deng Z. und P. Xu: Comethabolic Degradation of Dibenzofuran and Dibenzothiophen by a Nexly Isolated Carbacol-Degrading Sphingomonas sp. Strain, Applied and Environmental Microbiology, 2007

[24] Lee, J. J. und Rhee, S.-K. und S.-T. Lee: Degradation of 3-Methylpyridine and 3-Ethylpyridine by Gordonia nitida LE31, Applied and Environmental Microbiology, 2001

[25] Seo, J.-S. und Keum, Y.-S. und Q.X. Li: Bacterial Degradation of Aromatic Compounds, International Journal of Environmental Research and Public Health, 2009

[26] Schlegel, H.G. und Ch. Zaborosch: Allgemeine Mikrobiologie, Thieme Verlag, 7.überarbeitete Auflage, 1992

[27] Hermann, D.H. und Frank, D. und Hermann, H. und Konietzka, R. und Moll, B und Six, E. und Stockerl, R und T.K. Trenck: Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerte für das Grundwasser - NSO-Heterozyklen, Unterausschuss „Geringfügigkeitsschwellenwerte für NSO-Heterozyklen“ des ständigen Ausschusses „Grundwasser und Wasserversorgung“ der LAWA, 2009/2010

[28] ARCADIS: Heterozyklische Aromaten und andere teeröltypische Schadstoffe im Grundwasser – Bewertung der Stoffeigenschaften und des Vorkommens im Hinblick auf das Potenzial an natürlichem Rückhalt und Abbau. Bearbeiter: J. Blotevogel, T. Held, G. Rippen, P. Wiesert, ARCADIS Consult GmbH, Darmstadt. Abschlussbericht im Förderschwerpunkt KORA, Themenverbund 2, 1.Projekt, Teil A im Auftrag des BMBF, Bonn, 31. 3. 2007

[29] Altlastenforum: NSO-Heterozyklen: Vorkommen, Analytik, Beurteilung – Hinweise für die Praxis – Bearbeiter: Kern, F.; Möhser, H.; Reinhard, M.; Sagner, A.; Sorg, K.-P.; Tiehm, A.; Altlastenforum Baden-Württemberg e.V., Schriftenreihe Heft 12, 2008

[30] LAWA: Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser. Hrsg.: Bund/Länder-Arbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA), Kulturbuch-Verlag GmbH, Berlin, 2004

[31] Brauer, L.: Gefahrstoffsensorik – Farbe, Geruch, Geschmack, Reizwirkung gefährlicher Stoffe, Geruchsschwellenwerte. Loseblattwerk, 46. Erg.-Lfg. 2/2002, ecomed Verlag, Landsberg (Das Werk wurde mit der 46. Erg.-Lfg. eingestellt.), 2002

[32] Rippen, G.2010: Handbuch Umweltchemikalien – Stoffdaten, Prüfverfahren, Vorschriften. Loseblattwerk, 90. Erg.-Lfg. 2/2010, ecomed Verlag, Landsberg, 2010

[33] Dieter, H.H.: Kommentar zur Bewertung der Anwesenheit nicht oder nur teilbewertbarer Stoffe im Trinkwasser aus gesundheitlicher Sicht. Bundesgesundheitsblatt – Gesundheitsforschung – Gesundheitsschutz 2003 – 46:245-248; Umweltbundesamt, Berlin

[34] Gesetz zum Schutz vor gefährlichen Stoffen (Chemikaliengesetz - (ChemG) in der Fassung der Bekanntmachung vom 2. Juli 2008 (BGBl. I S. 1146), das durch Artikel 4 des Gesetzes vom 11. August 2010 (BGBl. I S. 1163) geändert worden ist

[35] Blotevogel, J und Reineke, A.-K. und Hollender, J und T. Held: Identifikation NSO-heterocyclischer Prioritärsubstanzen zur Erkundung und Überwachung Teerölkontaminierter

Standorte, Grundwasser – Zeitschrift der Fachsektion Hydrogeologie, 2008

[36] 67/548/EWG Anhang 6: Allgemeine Anforderungen für die Einstufung und Kennzeichnung gefährlicher Stoffe und Zubereitungen

[37] Verordnung zum Schutz vor Gefahrstoffen (Gefahrstoffverordnung – GefStoffV) vom 26. November 2010 (BGBl. I Nr. 59 vom 30.11.2010 S. 1643 (1644)

[38] American Industrial Hygiene Association Journal. Vol. 23, Pg. 95, 1962

[39] Maas, J.L.: Toxicity Research with Thiourea. Laboratory for Ecotoxicology, Institute for Inland Water Management and Waste Water Treatment, Report No.AOCE :4 p. (DUT), 1990

[40] Broderius, S.J. und Kahl, M:D: und M.D. Hoglund: Use of Joint Toxic Response to Define the Primary Mode of Toxic Action for Diverse Industrial Organic Chemicals. Environ.Toxicol.Chem. 14(9):1591-1605, 1982

[41] Brooke, L.T.: Results of Freshwater Exposures with the Chemicals Atrazine, Biphenyl, Butachlor, Carbaryl, Carbazole, Dibenzofuran, 3,3'-Dichlorobenzidine, Dichlorvos, 1,2-Epoxyethylbenzene (Styrene Oxide), Isophorone, Isopropalin, Oxy. Ctr.for Lake Superior Environ. Stud., Univ. of Wisconsin-Superior, Superior, WI :110 p., 1991

[42] Heitmuller, P.T.und Hollister, T.A. und P.R. Parrish: 1. Acute Toxicity of 54 Industrial Chemicals to Sheepshead Minnows (Cyprinodon variegatus). Bull. Environ. Contam. Toxicol. 27(5):596-604 (OECDG Data File), 1981

[43] Geiger, D.L.und Call, D.J. und L.T. Brooke: Acute Toxicities of Organic Chemicals to Fathead Minnows (Pimephales promelas) Volume IV. Ctr.for Lake Superior Environ.Stud., Volume 4, Univ.of Wisconsin-Superior, Superior, WI :355, 1988

[44] Prehled Prumyslove Toxikologie; Organicke Latky, Marhold, J.Prague, Czechoslovakia, Avicenum, 1986 Vol. -, Pg. 848, 1986

[45] AMA Archives of Industrial Hygiene and Occupational Medicine. Vol. 4, Pg. 119, 1951

[46] Gigiena Truda i Professional'nye Zabolevaniya. Labor Hygiene and Occupational Diseases. Vol. 10(2), Pg. 57, 1966

[47] BIOFAX Industrial Bio-Test Laboratories, Inc., Data Sheets. Vol. 14-4/1970

[48] Nippon Noyaku Gakkaishi. Journal of the Pesticide Science Society of Japan. Vol. 3, Pg. 365,1978

[49] M. Pasler: Methodenentwicklung zur Identifizierung und Quantifizierung von leichtflüchtigen Heterozyklen und Homozyklen in teerölkontaminierten Grundwässern mittels Headspace-GC-MS. Diplomarbeit im Rahmen des KORA-Projektes an der FH Aachen und RWTH Aachen, 2006

[50] Mundt, M und J. Hollender: Simultaneous determination of NSO-heterocycles, homocycles and their metabilites in groundwaterof a tar oil contaminated sites using HPLC with UV-diode array and fluorescence detection, J. Chromatogr. A. , 1065 211-218, 2005

[51] DIN 38407 (F9) - Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung; Gemeinsam erfaßbare Stoffgruppen (Gruppe F); Bestimmung von Benzol und einigen Derivaten mittels Gaschromatographie (F 9), Ausgabedatum: 1991-05

[52] DIN EN ISO 17993 (F18) - Wasserbeschaffenheit - Bestimmung von 15 polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK) in Wasser durch HPLC mit Fluoreszenzdetektion nach Flüssig-Flüssig-Extraktion (ISO 17993:2002); Deutsche Fassung EN ISO 17993:2003

[53] DIN EN ISO 18857-1 – Wasserbeschaffenheit - Bestimmung ausgewählter Alkylphenole - Teil 1: Verfahren für nichtfiltrierte Proben mittels Flüssig-Flüssig-Extraktion und Gaschromatographie mit massenselektiver Detektion (EN ISO 18857-1:2006)

[54] DIN ISO 22155: 2005 - Bodenbeschaffenheit- Gaschromatographische quantitative Bestimmung flüchtiger aromatischer Kohlenwasserstoffe, Halogenkohlenwasserstoffe und ausgewählter Ether - Statisches Dampfraum-Verfahren

[55] LAWA: Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser, NSO - Heterozyklen. Hrsg.: Bund/Länder-Arbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA), 16.08.2010

[56] DIN 38412 (L33) - Testverfahren mit Wasserorganismen(GruppeL); Bestimmung der nicht giftigen Wirkung von Abwasser gegenüber Grünalgen (Scenedesmus-Chlorophyll-Fluoreszenztest) über Verdünnungsstufen

[57] DIN 38412 (L30) - Testverfahren mit Wasserorganismen (GruppeL); Bestimmung der nicht akut giftigen Wirkung von Abwasser gegenüber Daphnien über Verdünnungsstufen

[58] DIN EN ISO 11348-1,-2,-3 - Wasserbeschaffenheit- Bestimmung der Hemmwirkung von Wasserproben auf die Lichtemission von Vibrio fischeri (Leuchtbakterientest)

[59] DIN EN ISO 6222 (K5):1999-07 - Wasserbeschaffenheit- Quantitative Bestimmung der kultivierbaren Mikroorganismen- Bestimmung der Koloniezahl durch Einimpfen in ein Nähragarmedium

[60] Bestimmung des Gehaltes an Kohlenwasserstoffen in Abfällen – Untersuchungs- und Analysestrategie (KW04), Mitteilung der Länderarbeitsgemeinschaft Abfall (LAGA) 35, 2004

[61] Michels, J. und Stuhrmann, M. und Frey, C. und H.P. Koschitzky: DECHEMA e.V., Handlungsempfehlung mit Methodensammlung, Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten, Bewertung und Anwendung, Rechtliche Aspekte, Wirtschaftlichkeit und Akzeptanz, KORA, 2008

[62a] Prof. Dr. Werner et. al, Leitfaden „Natürliche Schadstoffminderung bei Teerölaltlasten“, Themenverbund 2 „Gaswerke, Kokereien, Teerverarbeitung, (Holz-)Imprägnierung“, KORA, 2008

[63] Struppe, T. und Kühn, S. und C. Charle: Nachweis aktiver mikrobieller Abbauzonen im GW von Abfallablagerungen, Struppe & Dr. Kühn Umweltberatung GbR Protektum Umweltinstitut GmbH

[64] Amann, R. und Ludwig, W. und K.-H. Schleife: Phylogenetic Identification and In Situ Detection of Individual Microbial Cells without Cultivation, Microbial Reviews, 1995

[65] Pernthaler, A. und Pernthaler, J. und R. Amann: Fluorescence In Situ Hybridization and Catalyzed Reporter Deposition for the Identification of Marine Bacteria, Applied and Environmental Microbiology, 2002

[66] TRGS 524 - Technische Regeln Schutzmaßnahmen für Tätigkeiten in Gefahrstoffe kontaminierten Bereichen, Technische Regeln für Gefahrstoffe (TRGS), Ausgabe Februar 2010, (GMBl. Nr. 21 vom 01.04.2010 S. 419; 17.05.2010 S. 746 10; 04.08. 2010 S. 902 10a)

[67] Römpp – Chemie Lexikon, 9. erweiterte und neu bearbeitete Auflage, Georg Thieme Verlag Stuttgart New York ,1989-1993

[68] Altermann, et. al. Die Entwicklungsgeschichte der Erde, Brockhaus Nachschlagewerk Geologie, 5. Überarbeitete Auflage, VEB F.A. Brockhausverlag Leipzig, 1981

[69] Brockhaus-Enzyklopädie in 24 Bänden: Band 10 Herr bis Is. (1989) und Band 12 - Kir bis Lag (1990); 19. völlig überarbeitet Auflage, Mannheim

[70] Pohl, W. W. E. Petrascheck`s Lagerstättenlehre - Einführung in die Wissenschaft von mineralischen Bodenschätzen, 4. Auflage, E. Schweizerbat`sche Verlagsbuchhandlung (Nägele u. Obermiller), Stuttgart, 1992

[71] Ullmanns Encyklopädie der technischen Chemie; Band 5, 19. völlig neubearbeitete Auflage, 1988; Band 14, 4. neubearbeitete und erweiterte Auflage, 1977; Verlag Chemie GmbH, Weinheim, New York

[72] Langhammer, Stadt Essen, Umweltamt; Sanierung eines ehemaligen Gaswerk Standortes in Essen-Werden
http://www.lanuv.nrw.de/veroeffentlichungen/malbo/malborev/malborev04s090.pdf

[73] Fachlexikon ABC Chemie, Band 1 A-K, 3. überarbeitete Auflage, Hrsg. Prof. Dr. sc. nat. H.-D. Jakube u. Dr. rer. nat. habil. H. Jeschkeit, Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt/Main, 1987

[74] http://www.umwelt.sachsen.de/de/wu/umwelt/lfug/lfug-internet/Salfaweb/salfaweb-nt/berichte/mza7_95/mza7_95-4.2.7.html

[75] Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen (LUA NRW); Materialien zur Altlastensanierung und zum Bodenschutz Band 20 - Leistungsbuch Altlasten und Flächenentwicklung 2004/2005, Essen 2005

[76] Schäfers, C.; Wenzel, A.; Lukow, T.; Sehr, I.; Egert, E. (2001): Ökotoxikologische Prüfung von Pflanzenschutzmitteln hinsichtlich ihres Potentials zur Grundwassergefährdung. UFOPLAN Forschungsbericht 298 28 415, UBA-Texte 76/01

[77] D. Hummelt, Evaluierung von Oligonukleotid-Sonden zur Detektion von eisenpräzipitierenden Bakterien in nativen Biofilmen, Diplomarbeit, Institut für Technischen Umweltschutz am Fachgebiet Umweltmikrobiologie der Fakultät III für Prozesswissenschaften der Technischen Universität Berlin, 2009

[78] Römpp, „Römpp USB-Stick, Gesichertes Chemiewissen - immer griffbereit“, EAN: 978 313 149 2319, Hersteller: Thieme, Stuttgart, Juni 2008

9 Anlagenverzeichnis

Seite

Anlage I **Stoffdaten (Vorläufige Datenblätter zu NSO-Heterozyklen)** 51

Anlage II **Auswertung von Standortuntersuchungen (Land Brandenburg)** 67
Minimale und maximale Schadstoffkonzentrationen (Grundwasser)

Anlage III **Standorte der ehemaligen Carbochemie im Land Brandenburg** 71

Anlage IV **Literatursammlung, Informationssysteme und Datenbanken** 74

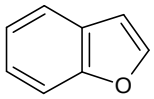
Anlage I

- Stoffdaten -

Vorläufige Datenblätter zu NSO-Heterozyklen

Benzofuran

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C_8H_6O
Strukturformel	
Synonym	Cumaron, Benzo(b)furan, 2,3-Benzofuran
Löslichkeit in Wasser	(20 °C) unlöslich
Molare Masse	118,13 g/mol
Dichte	1,10 g/cm^3 (20 °C)
Siedepunkt	173 - 175 °C (1013 hPa)
Dampfdruck	0,58 hPa (25 °C)
Flammpunkt	50 °C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	14 mg/l

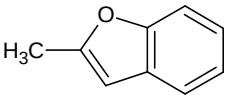
(k.A. – keine Angabe)

Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H226: Flüssigkeit und Dampf entzündbar H351: Kann vermutlich Krebs erzeugen
R-Satz	R 10-40
S-Satz	S 36/37
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 (wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	entzündlich, krebserzeugend
Gefahrensymbole	Xn

2-Methylbenzofuran

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C_9H_8O
Strukturformel	
Synonym	Methylbenzofuran, 2-Methylcumaron
Molare Masse	132,16 g/mol
Dichte	1,057 g/cm^3 (25 °C)
Siedepunkt	187 - 189 °C
Flammpunkt	67 °C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

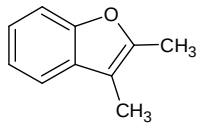
(k.A. – keine Angabe)

Sicherheitshinweise

Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
S-Satz	S 23-24/25

2,3-Dimethylbenzofuran

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_{10}H_{10}O$
Strukturformel	
Synonym	2,3-Dimethylcumaron
Molare Masse	146,19 g/mol
Dichte	1,034 g/cm^3 (25 °C)
Siedepunkt	101 - 102 °C
Flammpunkt	86 °C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

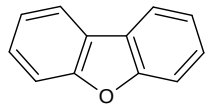
(k.A. – keine Angabe)

Sicherheitshinweise

Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
S-Satz	S 24/25

Dibenzofuran

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_{12}H_{8}O$
Strukturformel	
Synonym	Diphenylenoxid
Schmelzpunkt	79 - 82 °C
Molare Masse	168,19 g/mol
Dichte	1,3 g/cm^3 (20 °C)
Siedepunkt	287 - 289 °C (1013 hPa)
Flammpunkt	148 °C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	1,05 - 18 mg/l

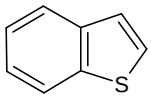
(k.A. – keine Angabe)

Sicherheitshinweise

Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)

Benzothiophen

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C_8H_6S
Strukturformel	
Synonym	1-Benzothiophen
Zündtemperatur	510 °C
Löslichkeit in Wasser	0,13 g/l (25 °C)
Schmelzpunkt	28 - 32 °C
Molare Masse	134,19 g/mol
Dichte	1,15 g/cm^3 (20 °C)
Siedepunkt	222 °C (1013 hPa)
Dampfdruck	1,33 hPa (20 °C)
Flammpunkt	91 °C
LD50 Ratte (oral)	1.700 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	13,6 mg/l

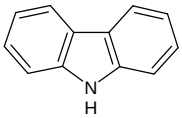
(k.A. – keine Angabe)

Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H302: Gesundheitsschädlich bei Verschlucken H411: Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
R-Satz	R 22-51/53
S-Satz	S 61
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 (wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	gesundheitsschädlich, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	Xn, N

Carbazol

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_{12}H_9N$
Strukturformel	
Synonym	Diphenylenimin, 9-Azafluoren, Dibenzo[b,d]pyrrol
Zündtemperatur	395 °C
Löslichkeit in Wasser	0,1 g/l(20 °C) löslich
Schmelzpunkt	244 - 246 °C
Molare Masse	167,2 g/mol
Schüttdichte	620 kg/m^3
Siedepunkt	255 °C (1013 hPa)
Flammpunkt	-10 °C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	0,93 mg/l

(k.A. – keine Angabe)

Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H410: sehr giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung
R-Satz	R 50/53
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	umweltgefährlich
Gefahrensymbole	N

Chinolin

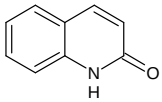
Schmelzpunkt	-15 °C
Molare Masse	129,16 g/mol
Dichte	1,09 g/cm^3 (20 °C)
pH-Wert	7,3 (5 g/l, H_2O, 20 °C)
Siedepunkt	237 - 238 °C (1013 hPa)
Dampfdruck	0,8 hPa (20 °C)
Flammpunkt	107 °C
LD50 Ratte (oral)	331 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	0,44 – 77,8 mg/l

Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H350: Kann Krebs erzeugen. H302 + H312: Gesundheitsschädlich bei Verschlucken oder Hautkontakt. H341: Kann vermutlich genetische Defekte verursachen. H319: Verursacht schwere Augenreizung. H315: Verursacht Hautreizungen. H411: Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
R-Satz	R 45-21/22-36/38-51/53-68
S-Satz	S 53-45-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 (wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	krebserzeugend, gesundheitsschädlich, reizend, umweltgefährlich, erbgutverändernd
Gefahrensymbole	T, N

Chinolin-2-on

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C_9H_7NO
Strukturformel	
Synonym	Quinolinone
Molare Masse	145,16 g/mol
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

Dibenzothiophen

Löslichkeit in Wasser	0,0015 g/l (25 ℃)
Schmelzpunkt	95 - 98 ℃
Molare Masse	184,25 g/mol
pH-Wert	7 (50 g/l, 20 ℃) (Anschlämmung)
Siedepunkt	331 - 333 ℃
Flammpunkt	170 ℃
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	0,7 mg/l

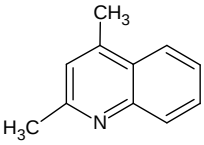
(k.A. – keine Angabe)

Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H410: Sehr giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung
R-Satz	R 50/53
S-Satz	S 61
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	umweltgefährlich
Gefahrensymbole	N

2,4-Dimethylchinolin

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_{11}H_{11}N$
Strukturformel	
Synonym	2,4-Dimethylquinolin
Molare Masse	157,21 g/mol
Dichte	1,061 g/cm^3 (25 °C)
Siedepunkt	264 - 265 °C (1013 hPa)
Flammpunkt	113 °C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

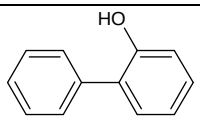
(k.A. – keine Angabe)

Sicherheitshinweise

R-Satz	R 36/37/38
S-Satz	S 26-37/39
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	Xi

2-Hydroxybiphenyl

Chemische und physikalische Daten

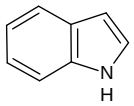
Summenformel	$C_{12}H_{10}O$
Strukturformel	
Synonym	Biphenyl-2-ol, 2-Phenylphenol
Zündtemperatur	>520 °C
Löslichkeit in Wasser	0,7 g/l (20 °C)
Schmelzpunkt	56 - 58 °C
Molare Masse	170,21 g/mol
Dichte	1,26 g/cm^3 (20 °C)
Schüttdichte	600 kg/m^3
pH-Wert	7 (0,1 g/l, H_2O, 20 °C)
Siedepunkt	286 °C (1013 hPa)
Dampfdruck	0,4 hPa (20 °C)
Flammpunkt	138 °C
LD50 Ratte (oral)	2.000 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	2,74 - 29,5 mg/l

Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H319: Verursacht schwere Augenreizung H335: Kann die Atemwege reizen H315: Verursacht Hautreizungen H400: Sehr giftig für Wasserorganismen
R-Satz	R 36/37/38-50
S-Satz	S 22-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 (wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	Xi, N

Indol

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C_8H_7N
Strukturformel	
Synonym	2,3-Benzopyrrole
Löslichkeit in Wasser	3,56 g/l(20 ℃) löslich
Schmelzpunkt	52 ℃
Molare Masse	117,15 g/mol
Dichte	1,22 g/cm^3 (20 ℃)
pH-Wert	5,9 (1000g/l, H_2O, 20 ℃)
Schüttdichte	230 kg/m^3
Siedepunkt	254 ℃
Dampfdruck	0,016 hPa (25 ℃)
Flammpunkt	110 ℃
LD50 Ratte (oral)	1.000 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

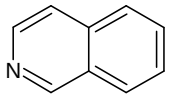
(k.A. – keine Angabe)

Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H302: Gesundheitsschädlich bei Verschlucken H311: Giftig bei Hautkontakt H319: Verursacht schwere Augenreizung H400: Sehr giftig für Wasserorganismen
R-Satz	R 21/22-36-50
S-Satz	S 36/37-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 1 (schwach wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	gesundheitsschädlich, reizend, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	Xn, N

Isochinolin

Chemische und physikalische Daten

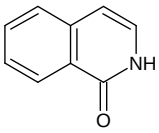
Summenformel	C_9H_7N
Strukturformel	
Synonym	2-Azanaphthalene, 2-Benzazine, Benzo[c]pyridin
Löslichkeit in Wasser	5,00 g/l(20 ℃) löslich
Schmelzpunkt	21 - 26 ℃
Molare Masse	129,16 g/mol
Dichte	1,09 g/cm^3 (20 ℃)
pH-Wert	7,5 (5 g/l, H_2O, 20 ℃)
Siedepunkt	243 ℃
Dampfdruck	0,5 hPa (25 ℃)
Flammpunkt	107 ℃
LD50 Ratte (oral)	360 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	14 mg/l

Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H302: Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. H310: Lebensgefahr bei Hautkontakt.
R-Satz	R 22-24
S-Satz	S 24/25-36/37-45
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 (wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig
Gefahrensymbole	T

Isochinolin-1-on

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C_9H_7NO
Strukturformel	
Synonym	Isocarbostyril Isochinolinone, Isoquinolinone
Schmelzpunkt	211 - 214 ℃
Molare Masse	145,16 g/mol
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

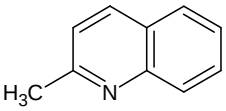
(k.A. – keine Angabe)

Sicherheitshinweise

S-Satz	S 22-24/25-36
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (wassergefährdend)

2-Methylchinolin

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_{10}H_9N_1$
Strukturformel	
Synonym	Chinaldin
Löslichkeit in Wasser	2,5 g/l (20 °C)
Schmelzpunkt	-2 °C
Molare Masse	143,19 g/mol
Dichte	1,06 g/cm^3 (20 °C)
pH-Wert	6,9 (H_2O, 20°C) (gesättigte wässrige Lösung)
Siedepunkt	246,9 °C (1013 hPa)
Dampfdruck	<0,1 hPa (20 °C)
Flammpunkt	79 °C
LD50 Ratte (oral)	1.230 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

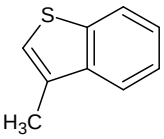
(k.A. – keine Angabe)

Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H302: Gesundheitsschädlich bei Verschlucken H312: Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt
R-Satz	R 21/22
S-Satz	S 24-36/37
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 (wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	gesundheitsschädlich
Gefahrensymbole	Xn

3-Methylbenzothiophen

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C_9H_8S
Strukturformel	
Molare Masse	148,23 g/mol
Dichte	1,106 g/cm^3 (25 °C)
Siedepunkt	72 - 74°C (1013 hPa)
Flammpunkt	104 °C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

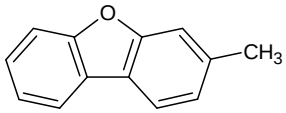
(k.A. – keine Angabe)

Sicherheitshinweise

S-Satz	S 22/24
Gefährlichkeitsmerkmal	gesundheitsschädlich
Gefahrensymbole	Xn

1-,2-,4-Methyldibenzofuran

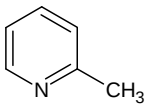
Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_{13}H_{10}O$
Strukturformel	
Molare Masse	182,22 g/mol
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

2-Methylpyridin

Chemische und physikalische Daten

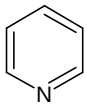
Summenformel	C_6H_7N
Strukturformel	
Synonym	2-Picolin
Zündtemperatur	535 °C
Löslichkeit in Wasser	(20 °C) löslich
Schmelzpunkt	-70 °C
Molare Masse	93,13 g/mol
Dichte	0,94 g/cm^3 (20 °C)
pH-Wert	8,5 (100 g/l, H_2O, 20 °C)
Siedepunkt	129 °C (1013 hPa)
Dampfdruck	12 hPa (20 °C)
Flammpunkt	28 °C
LD50 Ratte (oral)	790 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	897 mg/l

Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H226:Flüssigkeit und Dampf entzündbar H302: Gesundheitsschädlich bei Verschlucken H312: Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt H332: Gesundheitsschädlich bei Einatmen H319: Verursacht schwere Augenreizung H335: kann die Atemwege reizen
R-Satz	R 10-20/21/22-36/37
S-Satz	S 26-36
Wassergefährdungsklasse	WGK 1 (schwach wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	leichtentzündlich, gesundheitsschädlich
Gefahrensymbole	Xn

Pyridin

Chemische und physikalische Daten

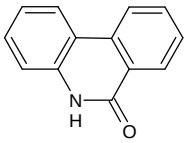
Summenformel	C_5H_5N
Strukturformel	
Zündtemperatur	482 °C
Löslichkeit in Wasser	(20 °C) löslich
Schmelzpunkt	-42 °C
Molare Masse	79,1 g/mol
Dichte	0,982 g/cm^3 (20 °C)
pH-Wert	8,5 (16 g/l, H_2O, 20 °C)
Siedepunkt	115 °C (1013 hPa)
Dampfdruck	20 hPa (20 °C)
Flammpunkt	17 °C
LD50 Ratte (oral)	891 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	1,1 - 106 mg/l

Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H225: Flüssigkeit und Dampf leicht entzündbar H302 + H312 + H332: Gesundheitsschädlich bei Verschlucken, Hautkontakt oder Einatmen
R-Satz	R 11-20/21/22
S-Satz	S 26-28
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 (wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	leichtentzündlich, gesundheitsschädlich
Gefahrensymbole	F, Xn

Phenanthridinon

Chemische und physikalische Daten

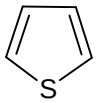
Summenformel	$C_{13}H_9NO$
Strukturformel	
Synonym	6(5H)-Phenanthridinone
Schmelzpunkt	290 - 292 °C
Molare Masse	195,22 g/mol
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

Sicherheitshinweise

S-Satz	S 22-24/25
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)

Thiophen

Chemische und physikalische Daten

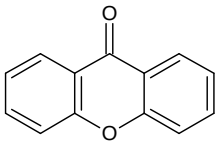
Summenformel	C_4H_4S
Strukturformel	
Synonym	Thiofuran
Zündtemperatur	395 °C
Löslichkeit in Wasser	(20 °C) unlöslich
Schmelzpunkt	-38 °C
Molare Masse	84,13 g/mol
Dichte	1,06 g/cm^3 (20 °C)
Siedepunkt	83 - 84 °C (1013 hPa)
Dampfdruck	80 hPa (20 °C)
Flammpunkt	-10 °C
LD50 Ratte (oral)	1.400 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H225:Flüssigkeit und Dampf leicht entzündbar H302: Gesundheitsschädlich bei Verschlucken H319: Verursacht schwere Augenreizung H412: Schädlich für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung
R-Satz	R 11-22-36-52/53
S-Satz	S 16-23-24-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	leichtentzündlich, gesundheitsschädlich
Gefahrensymbole	F, Xn

Xanthenon

Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_{13}H_8O_2$
Strukturformel	
Synonym	9-Xanthenon, Xanthone, 9H-Xanthen-9-one, 9-Xanthenon
Löslichkeit in Wasser	(20 ℃) schwer löslich
Schmelzpunkt	173 - 176 ℃
Molare Masse	196,21 g/mol
Siedepunkt	349 – 350 ℃ (971 hPa)
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

Sicherheitshinweise

R-Satz	R 22
S-Satz	S 24/25
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 (wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	gesundheitsschädlich, reizend
Gefahrensymbole	Xn

Anlage II

Auswertung von Standortuntersuchungen (Land Brandenburg)

Minimale und maximale Schadstoffkonzentrationen (Grundwasser)

Kokerei: Standort 1 (Kohleveredlung)

Parameter	Schadstoffkonzentration im Grundwasser [µg/l] minimal / maximal
2-Methylbenzofuran	106,00 – 470,00
2-Methylpyridin	500,00 – 9.750,00
Benzofuran	325,00 – 1390,00
Pyridin	3.600,00 – 9.310,00
Thiophen	358,00 – 1.130,00

Kokerei: Standort 2 (Kohleveredlung)

Parameter	Schadstoffkonzentration im Grundwasser [µg/l] minimal / maximal
2-Methylpyridin	6.000,00 – 7.200,00
3-Methylpyridin	7.200,00 – 9.800,00
Pyridin	7.600,00 – 8.900,00

Gaswerk: Standort 3 (Kohleveredlung)

Parameter	Schadstoffkonzentration im Grundwasser [µg/l] minimal / maximal
2-Methylbenzofuran	<0,05 – 0,28
3-Methylbenzothiophen	<0,05 – 0,05
4-Methylchinolin-2-on	0,20 – 0,60
Acridinon	0,20 - 0,30
Benzofuran	<0,05 – 0,07
Benzothiophen	<0,05 – 0,22
Chinolin-2-on	0,40 – 1,50
Dibenzofuran	<0,05 – 0,23
Isochinolin-2-on	0,20 –1,40
Phenanthridinon	0,14 – 0,14

Gaswerk Standort 4 (Kohleveredlung)

Parameter	Schadstoffkonzentration im Grundwasser [µg/l] minimal / maximal
Acridinon	0,26 – 0,35
Benzofuran	0,14 – 0,33
Hydroxybiphenyl	0,16 – 0,17

Gaswerk: Standort 5 (Kohleveredlung)

Parameter	Schadstoffkonzentration im Grundwasser [µg/l] minimal / maximal
2,3-Benzofuran	<2,00 – 203,00
Pyridin	<1,00 – 41,00
Thiophen	<2,00 – 9,40

Gaswerk: Standort 6 (Kohleveredlung)

Parameter	Schadstoffkonzentration im Grundwasser [µg/l] minimal / maximal
1-Methylisochinolin	0,19 – 0,50
1-,2-,4-Methyldibenzofuran	<0,10 – 1,20
2-Methylbenzofuran	180,00 – 517,00
2-Methylpyridin	180,00 – 950,00
2-Hydroxybiphenyl	72,00 – 149,00
2,3-Benzofuran	17,00 – 478,00
2,3-Dimethylbenzofuran	12,20 – 101,00
3-Methylbenzothiophen	1,60 – 8,40
4-Methyl-2-chinolinon	<0,50 – 2,20
6-Methylchinolin	0,10 – 6,50
Acridinon	<0,10 – 0,15
Benzothiophen	53,00 – 159,00
Chinolin	6,10 – 134,00
Chinolin-2-on	4,90 – 19,00
Dibenzofuran	0,11 – 39,00
Dibenzothiophen	0,12 – 0,80
Isochinolin	0,93 – 1,70
Pyridin	8,60 – 87,00
Thiophen	14,00 – 250,00
Xanthenon	0,10 – 0,82

Teerwerk Standort 7 (Produktverarbeitung)

Parameter	Schadstoffkonzentration im Grundwasser [µg/l] minimal / maximal
1-,2-,4-Methyldibenzofuran	7,30 – 170,00
2-Methylbenzofuran	220,00 – 240,00
2-Hydroxybiphenyl	25,00 – 58,00
2,3-Benzofuran	1.000,00 – 1.100,00
2,3-Dimethylbenzofuran	11,00 – 51,00
3-Methylbenzothiophen	11,00 – 45,00

Parameter	Schadstoffkonzentration im Grundwasser [µg/l] minimal / maximal
Acridin	1,20 – 14,00
Benzothiophen	170,00 – 290,00
Chinolin	0,80 – 5,70
Dibenzofuran	55,00 – 790,00
Dibenzothiophen	3,10 – 65,00
Indol	3,20 – 300,00
Xanthen	0,26 – 4,70

Dachpappenfabrik: Standort 8 (Produktverarbeitung)

Parameter	Schadstoffkonzentration im Grundwasser [µg/l] minimal / maximal
1-,2-,4-Methyldibenzofuran	344,93 – 10.021,08
2-Methylbenzofuran	916,30 – 3.801,48
2-Methylchinolin	242,60 – 1.239,24
2-Methylisochinolin	21,86 – 99,22
2-Hydroxybiphenyl	184,91 – 1.082,64
2,3-Dimethylbenzofuran	43,61 – 246,56
2,4-Dimethylchinolin	62,87 – 691,81
3-Methylbenzothiophen	64,96 – 436,66
4-Methyl-2-chinolinon	40,27 – 76,46
Acridinon	90,65 – 120,91
Benzofuran	942,58 – 8.472,69
Benzothiophen	1.148,07 – 2.804,65
Carbazol	375,90 – 3.090,26
Chinolin	103,92 – 3.668,41
Chinolin-2-on	438,10 – 2.537,99
Dibenzofuran	1.148,07 – 21.302,86
Isochinolin	248,93 – 689,30
Isochinolin-1-on	477,77 – 789,50
Phenanthridinon	101,58 – 997,70
Xanthenon	30,43 – 248,42

Anlage III

Standorte der ehemaligen Carbochemie im Land Brandenburg

(Quelle: http://www.chemieforum-erkner.de/)

Standorte der ehemaligen Carbochemie im Land Brandenburg

Im Folgenden werden ehemalige Standorte der carbochemischen Industrie im Land Brandenburg aufgelistet. Sie wurden vom „Freundeskreis Chemie Erkner e.V.“ mit dem Schwerpunkt auf Gaswerke zusammen getragen. Die Liste erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit.

- 1855 - Frankfurt/O., Am Graben 6, an der Oder, Deutsche Continental-Gasgesellschaft Dessau
- 1856 - Potsdam, Freundsche Gasanstalt, Schiffbauergasse, 1916 Übernahme der Gasanstalt einschl. Rohrnetz durch die Stadt Potsdam, Einstellung der Produktion am 01.07.1990
- 1856 - Luckenwalde, Weg zur Gasanstalt, 1.11.1856 erste Gaslaternen in der Breitenstraße
- 1857 - Guben
- 1858 - Fürstenwalde/Spree, Vor dem/Am Niederlagetor, zunächst Holzgas aus Keinstubben, 1868 Umstellung auf Steinkohle, 1967 stillgelegt und abgerissen
- 1858 - Wittstock
- 1858/59 - Prenzlau, "Allgemeine Gas-Aktiengesellschaft zu Magdeburg", Kietzstraße 7, 1909 - 1911 abgetragen
- 1861 - Cottbus
- 1862 - Brandenburg/Havel, Caasmannstraße 1, 1966 stillgelegt
- 1863 - Eberswalde "Städtische Gasanstalt", Bergerstraße
- 1863 - Finsterwalde, Berliner Straße 22, Forststraße 1
- 1863 - Forst
- 1864 - Neuruppin
- 1864 - Pritzwalk
- 1864/65 - Wriezen
- 1865 - Nauen, Städtische GA (heute Graf-Arco-Straße) am Hauptbahnhof
- 1865 - Schwedt/O., Lindenallee 34
- 1866 - Rathenow, erste GA in der Bahnhofstraße
- 1867 - Bernau, Lohmühlentraße/Heinersdorfer Straße,
- 1868 - Oranienburg, Haveleck/Stresemannstraße,
- 1881 - Erkner, Rütgers Theerproductenfabrik, Betriebs-GA
- 1898 - Beeskow, Schützenstraße, 1910 v. d. Stadt erworben
- 1898 - Frankfurt/O., städt. GA
- 1898 - Lenzen
- 1899 - Rheinsberg, Gasproduktion 1968 eingestellt
- 1899 - Freienwalde
- 1899 - Zehdenick, 1909 von der Stadt übernommen, Eisenbahnstraße 5

- 1899 - Ketzin
- 1900/1901 - Friesack
- 1902 - Rathenow, Neubau der GA südlich des Weinbergs
- 1903 - Erkner, Gemeinde-GA, Flakenstr., 1990er abgerissen
- 1903 - Neustadt/Dosse, Havelberger Str. 25 (evtl. schon 1893)
- 1904 - Niemegk
- 1908 - Oranienburg, OT Sachsenhausen
- 1908 - Prenzlau, neues Gas- und Elektrizitätswerk (vgl. 1858/59), Freyschmidtstraße 20,
- 1909 - Angermünde
- 1909 - Hennigsdorf
- 1910 - Königs Wusterhausen, am Nottekanal
- 1912 - Ketschendorf (heute zu Fürstenwalde), 1941 stillgelegt
- 1957 - Lauchhammer
  - Produktion von Koks, Teer, Mittelöl, Leichtöl, Rohphenol, Gas
  - 1951 - 1957 - Bau der Großkokerei
  - 1952 - Produktionsbeginn von hüttenfähigem BHT-Koks
  - 1957 - Aufnahme der Produktion von vorgereinigtem Industriegas und der Gasversorgung von Abnehmern über Gaskompressionsstation und Fernleitungsnetz
  - 1961 - mit der Inbetriebnahme der Rectisolanlage wird Rohgas in Stadtgas veredelt
  - 1973 - erstmals Verarbeitung von sowjetischem Erdgas
  - 1975 - erstmals Verarbeitung von DDR-Erdgas
  - 1991 - Beginn des Rückbaus (Abriss) der Anlagen
- 1964 - Schwarze Pumpe (OT von Spremberg)
  - Produktion von Briketts, BHT-Koks und Gas
  - 1955 - Baubeginn des Braunkohlenveredlungswerkes "Schwarze Pumpe"
  - 1959 - Beginn der Brikett- und Stromproduktion
  - 1964 - Beginn der Gasproduktion
  - 1970 - Bildung des VEB Gaskombinat Schwarze Pumpe durch Zusammenschluss verschiedener Betriebe mit dem Stammbetrieb Schwarze Pumpe, produziert ca. 80% des Stadtgases der DDR
  - 1973 - erstmals Verarbeitung von sowjetischem Erdgas
  - 1990 - Bildung der ESPAG (Energiewerke Schwarze Pumpe AG)
  - 1993 - ESPAG geht in der Laubag auf
  - 1995 - Ende der Stadtgasproduktion
- Eisenhüttenstadt, Scheibengasbehälter (Gasometer) des EKO-Stahlwerks
- Fürstenberg/O. (heute OT von Eisenhüttenstadt), Heinrich-Pritzsche-Straße 24

Anlage IV

Literatursammlung, Informationssysteme und Datenbanken

Literatursammlung

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[1]	Antrag der Abg. Dr. Gisela Splett u. a. GRÜNE und Stellungnahme des Umweltministeriums PAK-haltiges Baustoffrecycling Landtag von Baden-Württemberg Drucksache 14 / 3357, 14. Wahlperiode, 2008	DIN-Arbeitskreis Methodenentwicklung zur Bestimmung von NSO-Heterocyclen - 20 prioritäre NSO-Heterocyclen.
[2]	Werner, P. und Börke, P. und N. Hüsers: Leitfaden – Natürliche Schadstoffminderung bei Teerölaltlasten, Themenverbund 2, Gaswerke, Kokereien, Teerverarbeitung, (Holz-) Imprägnierung im BMBF-Förderschwerpunkt KORA, Techn. Universität Dresden, Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten, 2008	technisch-wissenschaftliche Grundlagen zu natürlichen Schadstoffminderungsprozessen, Emfpehlungen zu Einzelfallbearbeitung, Übersicht über Untersuchungs- und Bewertungsmethoden, Darstellung von vier Referenzstandorten, KORA Prioritärliste
[3]	Hüsers, N. und M.J. Gehring: Verhalten und Abbau von Polyzyklischen Aromatischen Kohlenwasserstoffen im Untergrund, Schriftenreihe für Abfallwirtschaft und Altlasten, Bd. 61, 4. Dresdner Symposium „Endokrin Aktive Stoffe in Abwasser, Klärschlamm und Abfällen“, 2009	Zusammensetzung Teeröle, phsikalisch-chemische Eigenschaften, Verhalten im Boden und Grundwasser, biologische Abbaubarkeit
[4]	Blotevogel, J und Reineke, A.-K. und Hollender, J und T. Held: Identifikation NSO-heterocyclischer Prioritärsubstanzen zur Erkundung und Überwachung Teeröl-kontaminierter Standorte, Grundwasser – Zeitschrift der Fachsektion Hydrogeologie, 2008	Zusammensetzung Teeröle und Stoffbewertung, physikalisch-chemische Eigenschaften, biologische Abbaubarkeit, Identifikation von Prioritärsubstanzen, Toxikologische Ableitung von Kontrollwerten
[5]	Sächsisches Landesamt für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie: Grundwasser Altlasten Aktuell, 2008	Zwickauer Mulde – Grundwasserreinigungsanlage Brückenstraße – Ablaufwert - Einleitwert
[6]	Sagner, S. und Brinkman, C. und Eisenträger, A. und Hollert, H. und A. Tiehm: Ökotoxikologie von Hetero-PAK, KORA-Vortragsfolien, 2010	Verbreitung NSO-HET, Struktur NSO-HET, Ökotoxische Testverfahren im Überblick

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[7]	I. Blankenhorn: Vortrag AQS-Jahrestagung, Stuttgart, NSO-Heterocyclen – Bedeutung, Beurteilung und Analytik, Einführung, Referat 44 – Altlasten, Schadenfälle, Landesanstalt für Umwelt, Messungen und Naturschutz Baden-Württemberg, 2009	Vorkommen NSO-HET, physikalisch-chemische Eigenschaften, biologische Abbaubarkeit, Bewertungsansätze Wirkungspfad Boden – Grundwasser
[8]	Kern, F. und Möhser, H. und Reinhard, M und Sagner, A. und Sorg, K.-P. und A. Thiem: NSO-Heterocyclen – Vorkommen Analytik, Beurteilung – Hinweise für die Praxis, Altlastenforum Baden-Württemberg e.V., Schriftenreihe, Heft 12, 2007	Stoffdaten, Herkunft, Entstehung, Ableitung GFS, Verhalten in Schadstofffahnen, Bedeutung, Chemische Analyseverfahren
[9]	A.K. Reineke: Heterocyclic compounds in tar oil contaminated groundwater - occurrence, fate, and indications for natural attenuation, Dissertation, Rheinisch-Westfälischen Techn. Hochschule Aachen, Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften, 2008	Zusammensetzung Teeröle und Stoffbewertung, physikalisch-chemische Eigenschaften, biologische Abbaubarkeit, Analytikmethoden
[10]	T. Ziegler: Heterocyclen, Eberhard Karls Universität Tübingen, Vorlesungsskript Wintersemester 2001/02	physikalisch-chemische Eigenschaften, Strukturen, Reaktionen
[11]	Piepenbrink, M und de Biase, C. und Dietze, M. und Grathwohl, P. und Herold, M. und Ptak, T. und Trötschler, O. und Haslwimmer, T und H.-P. Koschitzky: IAG, Technische Universität Darmstadt, ZAG, Universität Tübingen, GZG, Universität Göttingen, VEGAS, Universität Stuttgart: Immissionspumpversuche zur Ermittlung von Schadstofffrachten im Grundwasser Fallbeispiel: Enhanced Natural Attenuation (ENA) zur biologischen In-Situ-Sanierung von NSO Heterozyklen im Grundwasser, HLUG Fachgespräch, 2009	Quantifizierung des in-situ NA-Potentials von HET-PAK im Feldmaßstab, Immissionspumpversuche, Batchversuche, Großtankversuche, Umsetzung im Feldmaßstab

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[12]	Schlanges, I und Mänz, J.S. und Palm, W.U. und W. Ruck: Universität Lüneburg, Institut für Ökologie und Umweltchemie Verbundprojekt: Anwendung von Reinigungswänden, RUBIN Teilprojekt 3: standortübergreifende Untersuchungen zur Langzeitretardation von BTEX, PAK, Hetero-PAK und Cyaniden in Aktivkohlen Reinigungswänden an ehemaligen Gaswerksstandorten, 2007	Untersuchung der Effizienz von Aktivkohlefüllungen für Reinigungswände, Entwicklung von Rückhaltesystemen für polare PAKs (NSO-HET), Batch- und Säulenversuche
[13]	Mänz, J.S. und Palm, W.-U. und Birke, V. und W. Ruck: Standortübergreifende Untersuchungen zur Langzeit-Retardation von BTEX, PAK, und NSO-Heterocyclen in Aktivkohle-Reinigungswänden, DECHEMA Symposium „Strategien zur Boden- und Grundwassersanierung“, 2009	Vorkommen NSO-HET, Extraktions- und Anreicherung, Batch- und Säulenversuche, Adsorptionskapazitäten, Einfluß pH-Wert
[14]	Fiedler, H. und Mertens, C. und Morgenstern, M. und Scheidt, M und O. Hutzinger: Stoffverhalten von gaswerkspezifischen PAK, Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg, 1997	Entstehung (HET-) PAK, chemische Charakterisierung, Expositionspfade, Transportverhalten, Abbau, Probennahme und Analytik
[15]	H. Ninnemann: Strukturelle Merkmale N-modifizierter Braunkohlen unter besonderer Berücksichtigung der Huminstoffe, http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:14-ds-1200330094858-14006	
[16]	Börke, P. und Brill, V. und Feskorn, M. und Frank, D. und Kabardin, B. und Kohler, W. und Mitschard, A. und Mock, S. und Müller, J. und Odensaß, M. und Pinther, W. und Ruland, H. und Wirth, H. und V. Zeisberger: LABO, Bund / Länder-Arbeitsgemeinschaft Bodenschutz, Ständiger Ausschuss Altlasten – ALA, Ad-hoc Unterausschuss, „Natürliche Schadstoffminderung", Positionspapier, 2009	Standortbezogene Untersuchungen, Schadstoffquelle -> Schadstofffahne, Grundwasserschutz, Überwachung MNA,

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[17]	Michels, J. und Stuhrmann, M. und Frey, C. und H.P. Koschitzky: DECHEMA e.V., Handlungsempfehlung mit Methodensammlung, Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten, Bewertung und Anwendung, Rechtliche Aspekte, Wirtschaftlichkeit und Akzeptanz, KORA, 2008	Rechtliche Rahmenbedingungen, Umsetzung MNA, Erkundung und Monitoring, Untersuchung NA-Prozesse, Methodensammlung zur Untersuchung von NA-Prozessen
[18]	S. Meyer: Mikrobieller Abbau typischer Teeröl-PAK und Hetero-PAK (N,S,O) in einem Modellbodenhorizont, Wechselwirkungen, Metabolitenbildung und Ansätze zur ökotoxikologischen Metabolitenbewertung, Dissertation, Universität Hamburg, Institut für Biochemie und Lebensmittelchemie, 1999	Analytische Methoden, Mikrobieller Abbau eines komplexen PAK- bzw. HET-PAK-Gemisches
[19]	Johansen, S.S. und Hansen, A.B. und Mosbaek, H. und E. Arvin: Identification of heteroaromatic and other compounds in groundwater at creosote-contaminated sites in Denmark, Ground Water Monitoring and Remediation, 1997	Identifikation von HET-PAK, Grundwasser
[20]	Mueller, J.P. und Middaugh, D.P. und Lantz, S.E. und P.J. Chapman: Biodegration of Creosote and Pentachlorophenol in Contaminated Groundwater: Chemical and Biological Assessment, Applied and Environmental Microbiology, 1991	
[21]	Blotevogel,J. und Reineke, A.-K. und Hollender, J. und T. Held: NSO-Heterozyklen und ihre Bedeutung für die Altlastenbearbeitung, KORA-Workshop Themenverbund 2: Gaswerke, Kokereien, Teerverarbeitung, Holzimprägnierung, 2006, (S.33-36)	biologische Abbaubarkeit, Toxizität, Nachweis, Prioritärsubstanzen und Geringfügigkeitsschwellenwerte,
[22]	R. Wege: Untersuchungs- und Überwachungsmethoden für die Beurteilung natürlicher Selbstreinigungsprozesse im Grundwasser, Dissertation, Universität Stuttgard, Fakultät für Bau- und Umweltingenieurwissenschafte, 2005	

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[23]	Annweiler, E. und Michaelis, W. und R.U. Meckenstock: Anaerobic Cometabolic Conversion of Benzothiophen by a Sulfate-Reducing Enrichment Culture and in a Tar-Oil-Contaminated Aquifer, Applied and Environmental Microbiology, 2001	Cometabolischer Abbau von Benzothiophene durch sulfatreduzierende Bakterien
[24]	I.M. Rivas: Cometabolic transformation of thiophene with benzene as primary substrate, Dissertation, Environmental & Resources DTU, Technical University of Denmark, 2001	Cometabolischer Abbau von Thiophene mit Benzol als Primärsubstrat
[25]	Upgrading heavy Oil/Bitumen Emulsions via in Situ Hydrogen Generation, Literatursammlung	
[26]	Kurita, S. und Endo, T. und Nakamura, H. und Yagi, T. und N. Tamiya: Deconposition of some organic sulfur compounds in petroleum by anaerobic bacteria, The Journal of General and Applied Microbiology, 1971	Mikrobieller Abbau von Thiophene unter Freisetzung von H_2S
[27]	K.W. Miller: Reductive Desulfurization of Dibenzylsulfide	
[28]	Seo, J.-S. und Keum, Y.-S. und Q.X. Li: Bacterial Degradation of Aromatic Compounds, International Journal of Environmental Research and Public Health, 2009	Mikrobieller Abbau von PAKs und NSO-HET, Dibenzofuran, Dibenzothiophen, Dibenzodioxin, Carbazol
[29]	Rhee, S.-K. und Lee, G. M. und Yoon, J.-H. und Park, Y.-H. und Bae, H.-S und S.-T. Lee: Anaerobic and Aerobic Degradation of Pyridine by a Newly Isolated Denitrifying Bacterium, Applied and Environmental Microbiology, 1997	Anaerober und aerobe Abbau von Pyridin durch denitrifizierende Bakterien
[30]	Michels, J. und Wachinger, G. und V. Franzius: BMBF-Förderschwerpunkt "Natural attenuation": KORA – Kontrollierter Natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Grundwässer und Böden, Beitrag zur Wasser Berlin, 2003	Überblick, Struktur und Ziele des BMBF-Förderschwerpunkt KORA

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[31]	Zhonghui Gai, Z. und Yu, B. und Li, L. und Wang, Y. und Ma, C. und Feng, J. und Deng, Z. und P. Xu: Cometabolic Degradation of Dibenzofuran and Dibenzothiophene by a Newly Isolated Carbazole-Degrading Sphingomonas sp. Strain, Applied and Environmental Microbiology, 2007	Cometabolischer Abbau von Dibenzofuran und Dibenzothiophen durch Carbazol abbauende Bakterien
[32]	Lee, J. J. und Rhee, S.-K. und S.-T. Lee: Degradation of 3-Methylpyridine and 3-Ethylpyridine by Gordonia nitida LE31, Applied and Environmental Microbiology, 2001	Abbau von 3-Methylpyridin und 3-Ethylpyridin
[33]	Wang, X. und Gai, Z und Yu, B. und Feng, J. und Xu, C. und Yuan, Y. und Lin, Z. und P. Xu: Degradation of Carbazole by Microbial Cells Immobilized in MagneticGellan Gum Gel Beads, Applied and Environmental Microbiology, 2007	Abbau von Carbozol durch immobilisierte mikrobielle Zellen
[34]	B. Kapp: Verfahren zur chemischen Analyse der NSO-Heterozyklen, Berghof Analytik + Umweltengineering GmbH & Co. KG	Übersicht NSO-Heterocyclen, Analyseverfahren
[35]	Berry. D.F. und Francis A.J. und J.-M. Bollag: Microbial Metabolism of Homologic and Heterocyclic Aromatic Compounds under Anaerobic Conditions, Microbiological Review, 1987	Mikrobieller Metabolismus von homocyclischen und heterocyclischen Aromaten unter aerobe Bedingungen
[36]	Kaiser, J.-P. und Feng, Y und J.-M. Bollag: Microbial Metabolism of Pyridine, Quinoline, Acridine, and Their Derivatives under Aerobic and Anaerobic Conditions, Applied and Environmental Microbiology, 1996	Mikrobieller Abbau von Pyridin, Chinolin, Acridin und deren Derivate unter aeroben und anaeroben Bedingungen
[37]	Gai, Z. und Yu, B. und Wang, X. und Deng Z. und P. Xu: Microbial transformation of benzothiophenes, with carbazole as the auxiliary substrate, by Sphingomonas sp. strain XLDN2-5, Microbiology, 2008	Mikrobieller Abbau von Benzothiophen mit Carbazol als Co-Substrat
[38]	Shukla, O. P.: Microbial Transformation of Quinoline by a Pseudomonas sp, Applied and Environmental Microbiology, 1986	Mikrobieller Abbau von Chinolin durch Pseudomonaden

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[39]	Jonathan D. Van Hamme, J. D. und Singh, A und O. P. Ward: Recent Advances in Petroleum Microbiology, Microbiology and Molecular Biology Reviews, 2003	Mikrobielle Abbauprozesse von Ölen
[40]	Kilbane II, J. J. und Ranganathan, R. und Cleveland, L. und K. J. Linhares: Selective Removal of Nitrogen from Quinoline and Petroleum by Pseudomonas ayucida IGTN9m, Applied and Environmental Microbiology, 2000	Selectives Entfernen von Stickstoff aus Chinolin
[41]	Held, T. und Mahro, B. und Meckenstock, R. und Michels, J. und Pferfer, F. und Richnow, H.-H. und Schenk, T. und Tebbe, C. und Thiem, A. und J. Wiesener: Kontrollierter natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Grundwässer und Böden – Mikrobiologische NA-Untersuchungsmethoden, Fachliche Grundlagen für die Anwendung von Methoden zur Erfassung des natürlichen mikrobiellen Schadstoffabbaus im Aquifer, 2007	Identifizierung und Quantifizierung von Schadstoffminderungsprozessen (Natural Attenuation)
[42]	Palm, W.-U. und Mänz, J.S. und W. Ruck: Eigenschaften und Adsorption von N,S,O-Heterocyclen auf Aktivkohle, Universität Lüneburg, Institut für Ökologie und Umweltchemie, DECHEMA Symposium Strategien zur Boden- und Grundwassersanierung, 2009	Vorkommen NSO-HET, Extraktions- und Anreicherung, Batch- und Säulenversuche, Adsorptionskapazitäten, Einfluß pH-Wert
[43]	Mänz, J.S und Palm, W.-U. und Birke, V. und W. Ruck: Standortübergreifende Untersuchungen zur Langzeit-Retardation von BTEX, PAK und N,S,O-Heterocyclen in Aktivkole-Reinigungswänden, Universität Lüneburg, Institut für Ökologie und Umweltchemie, DECHEMA Symposium Strategien zur Boden-und Grundwassersanierung, 2009	Vorkommen NSO-HET, Extraktions- und Anreicherung, Batch- und Säulenversuche, Adsorptionskapazitäten, Einfluß pH-Wert

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[44]	Mänz, J.S und Palm, W.-U. und Birke, V. und W. Ruck: Eigenschaften der verwendeten Aktivkole (siehe [42 und 43], Universität Lüneburg, Institut für Ökologie und Umweltchemie, DECHEMA Symposium Strategien zur Boden- und Grundwassersanierung, 2009	Vorkommen NSO-HET, Extraktions- und Anreicherung, Batch- und Säulenversuche, Adsorptionskapazitäten, Einfluß pH-Wert
[45]	Positionspapier – Kohleveredlung, erarbeitet durch Initiativkreis „Kohleveredlung“ von DGMK und DECHEMA, 2009	
[46]	Fedorak, P. F. und Grbić-Galić: Aerobic Microbial Cometabolism of Benzothiophene and 3-Methylbenzothiophene, Applied and Environmental Microbiology, 1991	Biotransformation von Benzothiophen und 3-Methylbenzothiophen unter aeroben Bedingungen
[47]	Aislabie, J. und Bey, A. K. und Hurst, H. und Rothenburger, S. und R. M. Atlas: Microbial Degradation of Quinoline and Methylquinolines, Applied and Environmental Microbiology, 1990	Mikrobieller Abbau von Chinolin und Methylchinolin
[48]	Cain, R. B. und Houghton, C. und K. A. Wright: Microbial Metabolism of the Pyridine Ring, Biochemical Journal, 1973	Mikrobieller Abbau des Pyridin-Rings
[49]	Long, R.F. und J. Hornby: The Metabolism of some Substituted Benzofuran Beta-Adrenergic Blocking Agents, Department of Biochemistry, Roche Products Ltd.	
[50]	Toxicological Profile for Pyridin, Agency for Toxic Substances and Disease Registry U.S. Public Health Service, 1992	Beschreibung der toxikologischen Eigenschaften von Pyridin
[51]	Geller und Brauch und Werner: Handbuch Mikrobiologische Bodenreinigung, Zentraler Fachdienst Wasser-Boden-Abfall-Altlasten bei der Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg, 1991	
[52]	Gai, Z. und Yu, B. und Wang, Y. und Ma, C. und Feng, J. und Deng Z. und P. Xu: Comethabolic Degradation of Dibenzofuran and Dibenzothiophen by a Nexly Isolated Carbacol-Degrading Sphingomonas sp. Strain, Applied and Environmental Microbiology, 2007	Mikrobieller Dibenzofuran- und Dibenzothiophen-Abbau

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[53]	Bressler, D.C. und P.M: Fedorak: Purificatin, Stability and Miniralization of 3-Hydroxy-2-Formylbenzothiophene, a Methabolith of Dibenzothiophene, Applied and Environmental Microbiology, 2001	Mikrobieller Abbau von Dibenzothiophen und Derivaten
[54]	Arvin,E. und Jensen, B. K. und A. T. Gundersen: Substrate Interactions during Aerobic Biodegradation of Benzene, Applied and Environmental Microbiology, 1989	Substrateinfluß beim aeroben Benzolabbau
[55]	J. Stark: Aktuelles aus dem Umweltministerium Baden-Württemberg, AQS – Jahrestagung 07/08	Rechtliche Vorschriften
[56]	Bray, H.G. und F.M.B. Carpanini: The Metabolism of Thiophen and Benzo[b]-thiophen, Department of Physiological Chemistry, University of Birmingham	
[57]	Sagner, A. und Brinkmann, C. und Eisenträger, A. und Hilger, G. und Hollert, H. und A. Tiehm, Vorkommen und Ökotoxizität von heterozyklischen Kohlenwasserstoffen (NSO-HET), KORA-Workshop Themenverbund 2: Gaswerke, Kokereien, Teerverarbeitung, Holzimprägnierung, 2006	Vorkommen NSO-HET, analytischer Nachweis, toxikologische Verfahren, Toxizität und Prioritärsubstanzen
[58]	Hermann, D.H. und Frank, D. und Hermann, H. und Konietzka, R. und Moll, B und Six, E. und Stockerl, R und T.K. Trenck: Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser - NSO-Heterozyklen, Unterausschuss „Geringfügigkeitsschwellenwerte für NSO-Heterozyklen“ des ständigen Ausschusses „Grundwasser und Wasserversorgung“ der LAWA, 2009/2010	LAWA 2009/2010
[59]	Vorläufige Datenblätter NSO-HET (unvollständig), Stand 16.08.2010	
[60]	Stoffliste mit Bewertung und Analytik, Stand 16.08.2010	
[61]	A. Friedberger: Monitoring von Trinkwasser: Anforderungen und Beispiel eines Detekionssystems	Biologische Detektoren

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[62]	H. Hoffmann: Untersuchungen zur Biozidauswirkung auf Bodenbakterien mit Hilfe von mikrobiologischen und molekularbiologischen Methoden, Dissertation, Fachbereich Geowissenschaften der Universität Hamburg, 2004	Toxikologische Bewertung von Chemikalien, Bioziden und schadstoffbelastete Böden, mikrobiologische und molekularbiologische Methoden
[63]	Kepner, R.L. und J.R. Pratt: Use of Fluorochromes for Direct Enumeration of Total Bacteria in Environmental Samples: Past and Present, Microbial Reviews, 1994	Zellfärbung, historische Entwicklung, Methoden
[64]	Struppe, T. und Kühn, S. und C. Charle: Nachweis aktiver mikrobieller Abbauzonen im GW von Abfallablagerungen, Struppe & Dr. Kühn Umweltberatung GbR Protektum Umweltinstitut GmbH	Erkennen von Abbauzonen im Grundwasserabstrom
[65]	Amann, R. und Glöckner, F.-O. und A. Neef: Modern methods in subsurfaces microbiology: in situ identification of microoganisms with nucleic acid probes, Microbial Reviews, 1997	Fluorescence In Situ Hybridization (FISH)
[66]	Amann, R. und Ludwig, W. und K.-H. Schleifer: Phylogenetic Identification and In Situ Detection of Individual Microbial Cells without Cultivation, Microbial Reviews, 1995	Fluorescence In Situ Hybridization (FISH)
[67]	Pernthaler, A. und Pernthaler, J. und R. Amann: Fluorescence In Situ Hybridization and Catalyzed Reporter Deposition for the Identification of Marine Bacteria, Applied and Environmental Microbiology, 2002	Fluorescence In Situ Hybridization (FISH) Catalyzed Reporter Deposition - Fluorescence In Situ Hybridization (CARD-FISH)
[68]	LABO – Altlastenausschuss, AG Arbeitshilfen Qualitätssicherung: Biologische Verfahren in der Laboranalytik bei Altlasten, 2000	Biotest. Testsysteme, Testorganismen
[69]	LAWA Arbeitskreis Biomonitoring: Empfehlungen zum Einsatz von kontinuierlichen Biotestverfahren für die Gewässerüberwachung, 1995	LAWA kontinuierliche Biotestverfahren
[70]	U.A. Althoff: Entwicklung von Labormethoden zur Prognose des mikrobiellen Selbstreinigungspotentials kontaminierter Grundwässer und Böden, Dissertation, Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften der Rheinisch- Westfälischen Technischen Hochschule Aachen, 2002	Ermittlung des Selbstreinigungspotentials von kontaminierter Grundwässer und Böden

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[71]	Licht, D. und Ahring, B. K.und Erik Arvin: Effects of Electron Acceptors, reducing Agents, and toxic Metabolites on aromatic Degradation of heterocyclic Compounds, Biodegradation, 1996	
[72]	S. Fetzner: Bacterial Degradation of Pyridine, Indole, Quinoline, and their Derivatives under different Redox Conditions, Appl. Microbiol. Biotechnol., 1997	Mikrobieller Abbau von Pyridin, Indol, Chinolin und deren Derivate unter verschiedenen Redoxbedingungen
[73]	King, M. W. G. und Barker, J. F. und Devlin, J. F. und B. J. Butler: Migration and natural fate of a coal tar creosote plume 2. Mass balance and biodegradation inductors, J. Contam. Hydrol., 1999	
[74]	Herold, M. und Ptak, T. und P. Grathwohl: Bestimmung der Schadstofffrachten an Kontrollebenen mit Hilfe von Punktkonzentrationsmessungen und Immissionspumpversuchen, Grundwasser-Zeitschrift der Fachsektion Hydrogeologie, 2008	
[75]	D. Zamfirescu: Release and Fate of Specific Organic Contaminants at a Former Gasworks Site, Tübinger Geowissenschaftliche Arbeiten (TGA) : Reihe C ; 53, Bereich 16 Geowissenschaftliche Fakultät, http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:21-opus-20183, 2000	
[76]	Braun, J. und Koschitzky, H.-P. und M. Stuhrmann (Hrsg.): VEGAS-Statuskolloquium 2006, 28.September 2006 von Jürgen Braun et al. (Hrsg.), Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, Stuttgart: Inst. für Wasserbau, Mitteilungen / Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart: H. 150), 2006	
[77]	Braun, J. und Koschitzky, H.-P. und M. Stuhrmann (Hrsg.): VEGAS-Kolloquium 2007, 26.September 2007 von Jürgen Braun et al. (Hrsg.), Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, Stuttgart: Inst. für Wasserbau, Mitteilungen / Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart: H. 165), 2007	

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[78]	Pereira, W.E. und Rostad, C.E. und Leiker, T.J. und Updegraf, D.M. und J.L. Bennet: Microbial hydroxylation of quinoline in contaminated groundwater - evidence for incorporation of the oxygen atom of water, Applied and Environmental Microbiology, 1988	Chinolinabbau Ringspaltung durch Sauerstoff
[79]	Empfehlungen für die Durchführung und Auswertung von Säulenversuchen gemäß BBodSchV, Merkblatt Nr.20, Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen, 2000	Beurteilung des Austrags von Schadstoffen aus dem Boden durch Sickerwasser ins GW
[80]	Wagner, R. und R. Schatten: Vergleich von Säulen- und Schüttelelutions-verfahren zur Beurteilung der Bioverfügbarkeit von Schadstoffen, Freie Universität, Institut für Geographische Wissenschaften, AG Organische Umweltgeochemie	
[81]	J. Behrend: Biologisch-chemische Behandlung von Prozesswässern der Altlastensanierung sowie von kontaminierten Grundwässern, Dissertation, Technische Universität, Fachbereich Verfahrenstechnik und Energietechnik, 1993	
[82]	Song, H.-G. und Wang, X und R. Bartha: Bioredimation Potential of Terrestrial Fuel Spills, Applied and Environmental Microbiology, 1990	
[83]	Ch. Alewell: Bodensanierung und Altlasten, Universität Basel, www.unibas.ch/environment	
[84]	U.K. Althoff: Entwicklung von Labormethoden zur Prognose des mikrobiellen Selbstreinigungspotentials kontaminierter Grundwässer und Böden, Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften, 2002	
[85]	A.W. Schmidt: Heterocyclenchemie, Technische Universität Dresden, 2010	
[86]	Watson, G.K. und Houghto, C. und R.B. Cain: Microbial Metabolism oft he Pyridine Ring, Biochem. J., 1974	
[87]	W. Kohler: Monitored Natural Attenuation – Konzepte im Rahmen der systematischen Altlastenbearbeitung in Baden-Württemberg, Landesamt für Umwelt, Messungen und Naturschutz Baden-Württemberg, 2006	
[88]	T. Ziegler: Heterocyclen – Wintersemester 2001/2002,	

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
	Eberhard Karls Universität Tübingen, 2001/02	
[89]	Fiedler, S. und F.-M. Lange: Bodenmanagement und Bodensanierung - organische Schadstoffe, Vorlesungsskript Sommersemester 06, Universität Hohenheim, Institut für Bodenkunde und Standortslehre, 2006	
[90]	Strupp, H.D. und L. Paus: Migrationsverhalten organischer Grundwasserinhaltstoffe und daraus resultierende Ansätze zur Beurteilung von Monitored Natural Attenuation, TerraTech, 1999	
[91]	Strupp, H.D. und W. Püttmann: Migrationsverhalten von PAK in Grundwasserleitern, Altlastenspektrum, 2001	
[92]	H.D. Strupp: DNAPL in Boden und Grundwasser- Verhalten von LCKW und PAK-Ölen, Handbuch der Altlastensanierung, 2001	
[93]	Ch. Neumann: Natural Attenuation – Neue Methoden der Altlastensanierung, Interdisziplinäres Ökologisches Zentrum, AG Geoökologie, Technische Universität Freiberg, 2005	
[94]	D.P. Meyer: Untersuchung zum Ausbreitungsverhalten polyzyklischer aromatischer Verbindungen an teerölkontaminierten Standorten, Dissertation, Universität Lüneburg, 2005	
[95]	P.Börke: Untersuchungen zur Quantifizierung der Grundwasserimmission von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen mit Hilfe von passiven Probennahmesystemen, Dissertation, Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten, Technische Universität Dresden, 2007	
[96]	Terytze, K. und Wagner, R. und Hund-Rinke, K. und Bernhardt, C. und Rotard, W. und Vogel, I. und Scahtten, R. und R. Machold: Bewertungsmaßstäe zur Beurteilung von Schadstoffbelastungen in Böden an Hand der Bioverfügbarkeit, Freie Universität, Institut für Geographische Wissenschaften, AG Organische Umweltgeochemie	

Informationssysteme und Datenbanken

Lfd. Nr.	Quelle	Inhalt / Schlagwörter
[1]	ECOTOX	Ecotoxicology, US EPA http://www.epa.gov/ecotox
[2]	ETOX	Informationssystem Ökotoxikologie und Umweltqualitätsziele, Umweltbundesamt http://webetox.uba.de/webETOX/index.do
[3]	ESIS	European chemical Substances Information System, European Commision – Joint Research Centre http://ecb.jrc.it/esis/
[4]	HSDB	Hazardous Substances Data Bank, United States National Library of Medicin (NLM) http://www.nlm.nih.gov
[5]	TOXNET	Toxicology Data Network http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB
[6]	GSBL	Gemeinsamer Stoffdatenpool Bund/Länder http://www.gsbl.de
[7]	GESTIS	Stoffdatenbank, Gefahrstoffinformationssystem der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung www.dguv.de/ifa/stoffdatenbank
[8]	PubChem	Datenbank chemischer Verbindungen, wird unterhalten vom nationalen Zentrum für Biotechnologische Information der USA (National Center for Biotechnology Information, NCBI), einem Bestandteil der nationalen medizinischen Bibliothek der USA (United States National Library of Medicine, NLM), die Teil des nationalen Instituts für Gesundheit der USA (National Institutes of Health, NIH) ist. http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez
[9]	ECHA	Europäische Chemikalienagentur http://echa.europa.eu/home_de.asp
[10]	Bureau Veritas HSE	Skandinaviens leitendes Beratungsunternehmen für Chemie, Gefahrgut und Sicherheit http://www.chemtox.com/Empfehlungen-906.aspx
[11]	Chemical Book	http://www.chemicalbook.com/