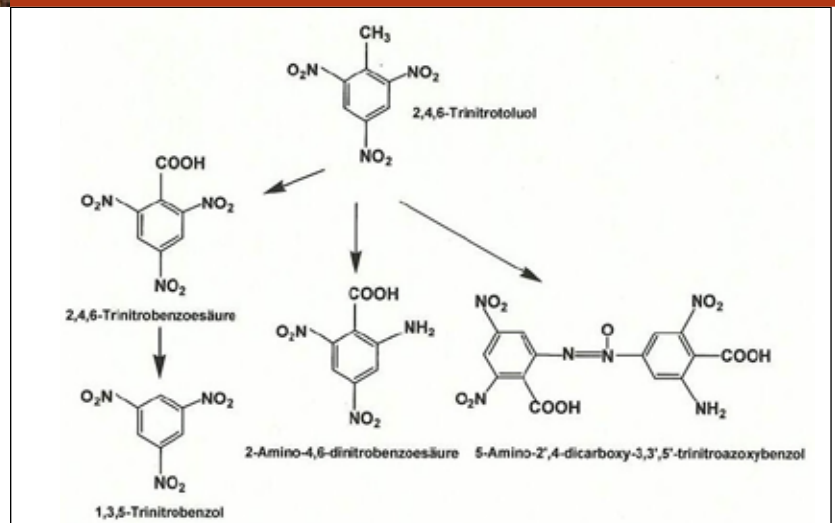




LAND  
BRANDENBURG

Ministerium für Ländliche  
Entwicklung, Umwelt und  
Landwirtschaft

Boden,  
Umweltgeologie  
und Altlasten



Fachinformation des LUGV  
Altlastenbearbeitung im Land Brandenburg

Nr. 21

**Arbeitshilfe**

**„Grundwasserkontaminationen mit sprengstoff-  
typischen Verbindungen im Land Brandenburg“**

**Behandlung, Aufnahmemechanismen,**

**Abbauverhalten**

**Stufe I B –**

**Erarbeitung ergänzender vertiefender**

**Grundlagen zu Aufnahmemechanismen und**

**Abbauverhalten**

Landesamt für  
Umwelt,  
Gesundheit und  
Verbraucherschutz

**Herausgeber:**

Landesamt für Umwelt, Gesundheit und Verbraucherschutz (LUGV) Brandenburg  
Seeburger Chaussee 2  
OT Groß Glienicke  
14476 Potsdam  
Tel.: 033201 - 442 171  
Fax: 033201 - 43678

Die Veröffentlichung basiert auf dem vom LUGV beauftragten Thema an die GFI GmbH Dresden (Auftrag-Nr. S3-VG13-128) über „Arbeitshilfe Grundwasserkontaminationen mit sprengstofftypischen Verbindungen im Land Brandenburg – Behandlung, Aufnahmemechanismen, Abbauverhalten, Stufe I B – Erarbeitung ergänzender vertiefender Grundlagen zu Aufnahmemechanismen und Abbauverhalten.“  
Bearbeiter/innen Dipl.-Chem. L. Schmalz, Dr. S. Tränckner  
Einrichtung GFI Grundwasserforschungsinstitut GmbH Dresden  
Abschlussbericht November 2013

Endredaktion:  
LUGV/Abteilung Technischer Umweltschutz  
Referat Referat Altlasten, Bodenschutz (T6)

Fachliche Ansprechpartnerin: Corinna Masuch  
E-Mail: [Corinna.Masuch@LUGV.Brandenburg.de](mailto:Corinna.Masuch@LUGV.Brandenburg.de)

Titelfoto: © Joos, A., Knackmus, H. J. & Spyra, W. (2008). Leitfaden - Natürliche Schadstoffminderung bei sprengstofftypischen Verbindungen. BMBF-Förderschwerpunkt KORA, Themenverbund 5 Rüstungsaltslasten. IABG mbH (Hrsg), Berlin. Kap. B3, Abb. 8: Lichtinduzierte Transformation von 2,4,6-TNT in Oberflächengewässern (Steinbach)

Potsdam, im November 2014

Diese Veröffentlichung erfolgt im Rahmen der Öffentlichkeitsarbeit des Ministeriums für Ländliche Entwicklung Umwelt und Landwirtschaft des Landes Brandenburg. Sie darf weder von Parteien noch von Wahlwerbenden 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.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Tabellenverzeichnis</b> .....	2
<b>Abkürzungen</b> .....	3
<b>1</b> <b>Veranlassung</b> .....	4
<b>2</b> <b>Vertiefende theoretische Grundlagen</b> .....	5
2.1    Abbau-, Reaktions- und Transportverhalten der STV .....	5
2.1.1   Biotischer Abbau .....	8
2.1.2   Abiotischer Abbau .....	9
2.1.2.1   Transformation/Mineralisierung.....	9
2.1.2.2   Photolytische Transformation.....	9
2.1.2.3   Sorption.....	10
2.1.3   Löslichkeit.....	11
2.2    Technische Verfahren .....	11
2.2.1   Alkoholwäsche .....	11
2.2.2   Chemische Oxidation .....	11
2.2.3   Photolytische Aufbereitung.....	11
<b>3</b> <b>Bewertungshilfen - Bewertungskriterien</b> .....	12
<b>4</b> <b>Standort - Sanierungsverfahren</b> .....	15
<b>5</b> <b>Analytische Verfahren für die Bestimmung der STV in Boden und Wasser</b> .....	17
5.1    Probenahme.....	17
5.2    Analytik.....	17
5.2.1   Bestimmung der STV im Wasser – Grundsätze und Regelwerke.....	18
5.2.2   Bestimmung der STV im Boden – Grundsätze und Regelwerke .....	19
5.2.3   EPA-Regelwerke für die Bestimmung der unpolaren STV .....	21
5.3    Aufklärung der Stoffpalette eines kontaminierten Standortes .....	22
<b>Literaturverzeichnis</b> .....	23
<b>Anlagenverzeichnis</b> .....	24
<b>Anlage 1</b> .....	25
<b>Anlage 2</b> .....	85

## Tabellenverzeichnis

Tab. 1:	Gesamtüberblick aller möglichen Reaktionen der STV in den Reaktionsräumen Oberflächenwasser (OW), Boden und Grundwasserleiter (GWL) und deren Bewertung bezüglich der Einzelstoffe (s. Anlage 1) .....	6
Tab. 2:	Randbedingungen für die biotischen Reaktionswege und Metabolite der STV .....	8
Tab. 3:	Randbedingungen für die abiotischen Reaktionswege und Transformationsprodukte der STV .....	9
Tab. 4:	Sorptionskoeffizienten der STV in Abhängigkeit der Sedimenteigenschaften (aus Untersuchungen des DGFZ e.V. /GFI GmbH).....	10
Tab. 5:	Bewertungskriterien für die Schutzgüter Grundwasser und Mensch - Auszug aus „Bewertungshilfen bei der Gefahrenverdachtsermittlung in der Altlastenbehandlung. Freistaat Sachsen“ 2008 [12] .....	13
Tab. 6:	Analytische Verfahren für die Bestimmung der STV in Boden und Wasser und ihre Merkmale.....	17
Tab. 7:	Unpolare STV im Wasser - Normen und deren Merkmale.....	19
Tab. 8:	Polare STV im Wasser- Normen und deren Merkmale .....	19
Tab. 9:	Unpolare STV im Boden - Normen und deren Merkmale	
Tab. 10:	Polare STV im Boden – Normen und deren Merkmale	

## Abkürzungen

BBodSchG	Bundes-Bodenschutz-Gesetz
BBodSchV	Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung
BG	Bestimmungsgrenze
BTEX	Benzol, Toluol, Ethylbenzol, Xylole
DAD	Diodenarraydetektor
ECD	electron capture detector, Elektronen-Einfang-Detektor
EDA	Elektronen-Donor-Akzeptor
ELISA	Enzyme-linked Immunosorbent Assay
EPA	Environmental Protection Agency, US
FI-FI	Flüssig-Flüssig-Extraktion, auch LLE für liquid-liquid extraction
HET	Heterozyklen
GC	Gaschromatographie
GFS	Geringfügigkeitsschwelle
HPLC	high performance liquid chromatography, Flüssigchromatographie
IMS	Ionenmobilisierungsspektrometrie
LABO	Bund/Länder-Arbeitsgemeinschaft Bodenschutz
LAGA	Bund/Länder-Arbeitsgemeinschaft Abfall
LAWA	Bund/Länder-Arbeitsgemeinschaft Wasser - LAWA
LLE	liquid-liquid extraction
MS	Massenspektrometer
NAPL	Non-Aqueous-Phase-Liquid
PND	phosphorus nitrogen detector, Stickstoff-Phosphor-Detektor
pSTV	polare Sprengstofftypische Verbindungen
PV	Probenvorbereitung
SPE	solid phase extraction, Festphasenextraktion
STV	Sprengstofftypische Verbindungen
TOC	Total organic carbon, gesamter organische Kohlenstoff
uSTV	unpolare Sprengstofftypische Verbindungen

# 1. Veranlassung

Rüstungsaltpasten sind gemäß der Definition in Brandenburg (§ 25 LAbfVG 1996) Altablagerungen und Altstandorte der chemischen Rüstungsproduktion, sofern von diesen nach den Erkenntnissen einer im einzelnen Fall vorausgegangenen Untersuchung und einer darauf beruhenden Beurteilung durch die zuständige Behörde eine Gefahr für die öffentliche Sicherheit und Ordnung ausgeht. Neben den Rüstungsstandorten existieren zahlreiche Munitionsdepots, ehemalige militärische Übungsplätze und Sprengplätze, die ähnlich wie die ehemaligen Rüstungsstandorte zu einem Eintrag von rüstungsspezifischen Schadstoffen in die Umwelt beitragen.

Bund und Länder haben in den letzten Jahren verschiedene Themen und Fragen im Zusammenhang mit Rüstungsaltpasten und militärischen Liegenschaften, dem Verhalten von sprengstofftypischen Verbindungen (STV) in der Umwelt sowie Möglichkeiten zur Bewertung und Sanierung eingehend untersucht.

Im Land Brandenburg existieren auf Grund ermittelter Belastungen des Grundwassers mit sprengstofftypischen Verbindungen spezielle Fragestellungen im Zusammenhang mit konkreten Gefahren für die Trinkwasserversorgung. Die derzeit in Bund und Ländern verfügbaren Arbeitshilfen sollen durch spezifische Lösungsansätze ergänzt werden.

In einem ersten Arbeitsschritt wurde 2012 die Stufe I A Literaturrecherche der Arbeitshilfe „Grundwasserkontaminationen mit sprengstofftypischen Verbindungen im Land Brandenburg – Behandlung, Aufnahmekanismen, Abbauverhalten“ erarbeitet [1].

In der derzeitigen Arbeitsstufe I B wurden die Ergebnisse der Literaturrecherche hinsichtlich Aufnahmekanismen und Abbauverhalten der STV vertieft. Insbesondere die Zusammenstellung vertiefender theoretischer Grundlagen zu Transportvorgängen, Reaktions- und Abbauverhalten, Besonderheiten der Reaktionsräume Boden und Grundwasser, lösungsorientierten technischen Ansätzen und hydrochemischer Zusammenhänge in Grund- und Oberflächengewässer und deren Einfluss auf das Abbauverhalten der STV wurden eingearbeitet.

Die Stufe I B der Arbeitshilfe beinhaltet weiterführend die theoretischen Grundlagen und untersetzt diese durch die Anwendung an einem Beispiel-Standortverfahren. Des Weiteren wurden analytische Grundlagen des Nachweises der typischen Schadstoffe auf Rüstungsaltpasten und militärischen Liegenschaften dargestellt.

## 2. Vertiefende theoretische Grundlagen

### 2.1 Abbau-, Reaktions- und Transportverhalten der STV

Sprengstofftypische Verbindungen/ Nitroaromaten unterliegen in Abhängigkeit der im Boden oder Grund- bzw. Oberflächenwasser vorliegenden Milieubedingungen folgenden Abbau-, Reaktions- und Transportvorgängen:

- Abbau
  - Mineralisierung zu Kohlendioxid und Wasser sowie unter Freisetzung von Stickstoff (biotisch),
  - Transformation zu ebenfalls aromatischen Metaboliten (biotisch/ abiotisch),
  - chemische bzw. photolytische Oxidation (abiotischer Abbau mit Auflösung der aromatischen Ringstruktur)
- Sorption.

Als Mineralisierung wird der vollständige biotische Abbau der STV zu Kohlendioxid, Wasser und Biomasse bezeichnet. Ein vollständiger Abbau der aromatischen Kohlenwasserstoffe ist nur bei einer Spaltung des Kohlenstoffringes möglich. Diese erfolgt vorwiegend durch enzymatisch katalysierte Oxidation des Kohlenstoffringes [3].

Abbauvorgänge, welche nicht zum vollständigen Abbau (Mineralisierung) der Schadstoffe führen, werden als Transformationsvorgänge bezeichnet. Als biotische Transformation ist die cometabolische Verwertung der STV, wobei der Schadstoff selbst mikrobiell nicht als Kohlenstoffquelle genutzt wird, bekannt. Durch Reduktion oder Abspaltung der Substituenten der Nitroaromaten entstehen teilweise Metabolite (z.B. Aminoverbindungen), welche im Weiteren schwer oder nicht weiter abbaubar sind.

Der aerobe mikrobielle Abbau der STV wurde vor allem im Grundwasser bisher selten nachgewiesen, da in den meisten Fällen kein entsprechendes aerobes Milieu mit genügend Sauerstoff im Grundwasserleiter anzutreffen ist. In ungesättigten Bereichen, in denen zum Teil hohe Sauerstoffsättigungen nachweisbar sind, wird von oxidativen Prozessen berichtet, die aber teilweise nicht zu einer aeroben Mineralisierung der STV, sondern zur sogenannten Humifizierung der STV führen. Darunter ist die irreversible Bindung der STV an die Huminstoffe im Boden zu verstehen [26].

Die chemische bzw. photolytische Oxidation der STV ist nur unter Einsatz von sehr starken Oxidationsmitteln bzw. unter Einwirkung von Sonnenlicht im wässri-

gen Milieu möglich. Dabei wird der Zerfall des aromatischen Ringes der STV aufgrund radikalischer Reaktionen bzw. durch die starken Oxidationsmittel initiiert. Es entstehen eine Reihe von unspezifischen und meistens nicht aromatischen Metaboliten, die in der Umwelt mittels biotischer Abbauprozesse weiter mineralisiert werden können.

Einen weiteren physikalischen Prozess, der den Transport der STV im Grundwasser beeinflusst, stellt die Sorption dar. Hier ist die Sorption der Nitroaromaten an Tonmineralen über die EDA-Komplexbildung und an der organischen Bodenmatrix (Huminstoffe) bekannt.

Der Transport der Schadstoffe wird durch die verschiedenen biotischen und abiotischen Prozesse der Schadstoffe selbst, als auch durch Milieuveränderungen, die beim Abbau anderer Stoffe im Grundwasser erfolgen, beeinflusst.

In Abhängigkeit der Milieubedingungen (aerob, anaerob, pH-Wert, Redoxpotential, Elektronenakzeptoren, Bodenmatrix, Bakteriendichte usw.) und dem anzutreffenden Schadstoffcocktail werden die verschiedenen sprengstofftypischen Verbindungen mehr oder weniger gut abgebaut und bilden ein für den jeweiligen Standort typisches Kontaminationsbild.

Im Folgenden werden die möglichen Abbau-, Reaktions- und Transportvorgänge der einzelnen sprengstofftypischen Verbindungen in den verschiedenen Reaktionsräumen (Oberflächenwasser, Grundwasser, Boden) anhand der Ergebnisse eigener Untersuchungen betrachtet.

Folgende hauptsächliche Randbedingungen sind maßgebend:

- Standortbedingungen: Nährstoffangebot, verfügbare Elektronenakzeptoren, pH-Wert usw.,
- Schadstoffkonzentration, Kontaminationsspektrum und inhibierende Begleitkontaminanten bzw. besser abbaubare Schadstoffe,
- Biomasse und Bioaktivität,
- Bodeneigenschaften (Bodenart, Körnung, TOC-Gehalt, Wassergehalt usw.),
- Sickerwassertransport,
- Transport im Grundwasserleiter.

Die nachfolgende Tab. 1 gibt einen Gesamtüberblick über die derzeit bekannten möglichen Reaktionen der STV in den Reaktionsräumen. Die Zusammenstellung basiert auf Labor- und Felduntersuchungen des DGFZ e.V. sowie der GFI GmbH Dresden im Grundwasser-

Zentrum Dresden an verschiedenen Standorten. Die Tabelle stellt eine Übersicht der möglichen und unter verschiedenen Standortbedingungen beobachteten Reaktionen dar. Sie dient dabei vor allem zur Eingrenzung der am jeweiligen Standort zu suchenden Metabolite, um einen Hinweis auf die natürlicherweise ablaufenden Reaktionen im Untergrund zu erhalten. Welche Reaktionen am jeweiligen Standort ablaufen, ist von einer Reihe von Faktoren abhängig. Beeinflussend wirken die Zusammensetzung der organischen (Schad)-Stoffe im Grundwasser, die Milieubedingungen, das Nährstoffangebot, abiotische Einflüsse und die Sedimentzusammensetzung (s. a. [3, 4,6,7,8,9] ) sowie die hydraulischen Gegebenheiten im Grundwasserleiter (Fließgeschwindigkeit, Grundwasserleitertyp, u.a.). Eine Übertragung der Ergebnisse auf andere Standorte ist nur dann möglich, wenn alle bzw. die wesentlichen beeinflussenden Faktoren am zu untersuchenden Standort bestimmt worden sind. Die Wertigkeit wurde jeweils vergleichend innerhalb der Stoffgruppe der STV vorgenommen. Die Aussagen zu den ermittelten Abbau-, Reaktions- und Transportverhalten können nicht ohne weiteres auf andere mit STV kontaminierte Standorte übertragen werden, da die Randbedingungen, die den Abbau maßgeblich beeinflussen, nicht vergleichbar sein müssen und so zu anderen Reaktionen führen

können. Die Aussagen sollen als Hinweis bezüglich möglicher oder nicht möglicher Reaktionen der STV an kontaminierten Standorten angesehen werden. Zur Einschätzung der für den jeweiligen Standort notwendigen spezifischen Untersuchungen sind die in den nachfolgenden Kapiteln beschriebenen Milieu- und Randbedingungen der in **Tab. 1** aufgeführten Abbau-, Reaktions- und Transportvorgänge heranzuziehen. Damit können die auf jeden Fall notwendigen standortspezifischen Untersuchungen zum Abbau der am Standort vorliegenden STV eingegrenzt und effizienter geplant und durchgeführt werden. Im Ergebnis dieser Einschätzung des standorttypischen Reaktionspotentials kann anhand der in Kap. 5 beschriebenen analytischen Nachweisverfahren gezielt nach Metaboliten im Grund- und Oberflächenwasser sowie im Boden gesucht werden. Bei einem positiven Befund ist dann der Nachweis der standorttypischen Reaktionen der STV gelungen und es muss zur Gefährdungsabschätzung die Abbaukinetik mit der Strömungsgeschwindigkeit im Grundwasser und der Aufenthaltszeit in der ungesättigten Bodenzone miteinander in Beziehung gebracht werden, so dass im Ergebnis die Ausbreitung der STV mit dem Grundwasser beschreibbar ist.

**Tab. 1: Überblick der beobachteten Reaktionen der STV in den Reaktionsräumen Oberflächenwasser (OW), Boden und Grundwasserleiter (GWL) und deren Bewertung bezüglich der Einzelstoffe (aus Untersuchungen des DGFZ e.V./ GFI GmbH, s. Anlage 1)**

Wertigkeit: + ... Reaktion prinzipiell möglich, - ... Reaktion wurde in Versuchen nicht nachgewiesen, T ... Transformation, M ... Mineralisierung

Prozess	Abbau biotisch						Abbau abiotisch			Sorptionsneigung
	aerob			anaerob			aerob/anaerob			
Reaktionsraum STV	OW	Boden	GWL	OW	Boden	GWL	OW	Boden	GWL	GWL/ Boden
<b>unpolar</b>										
HMX										
RDX		+(T)	+(T)		+(T)	+(M)	+		+(T)	+
Tetryl										
NB			+			+(T)			?	+
12DNB							+			
13DNB	+		+			+	-		?	+
135TNB	+(T)		+(T)	-		+(T)	+		+(T)	
TNT	+(T)	-	+(T)	+(T)	+(T)	+(T)	+		+(T)	
2A46DNT	-	+(T)			-		+			
4A26DNT	-	+(T)			-		+			



Prozess	Abbau biotisch						Abbau abiotisch			Sorptions- neigung
	aerob			anaerob			aerob/anaerob			
Milieu	OW	Boden	GWL	OW	Boden	GWL	OW	Boden	GWL	GWL/ Boden
Reaktions- raum STV										
24DA6NT	-									
26DA4NT	-									
23DNT	-									
24DNT	+(T)	-	+(M)	+(T)	+(T)	+(T)	+		+	+
26DNT	-	-	+(M)		+(T)	+(T)	+		+	+
34DNT	-	-			+(T)					
35DNT	-	-			+(T)					
2A4NT		+(T)			-					+
2A6NT		+(T)			-					
4A2NT		+(T)			-					+
24DAT										
26DAT										
2NT	+(T/ M)	+(T/M)	+(M)	+(T)	+(T)	+(T)	+		?	+
3NT		+(T/M)	+(M)		+(T)	+(T)	+		?	+
4NT		+(T/M)	+(M)		+(T)	+(T)	+		?	+
2MA										+
3MA										
4MA										+
13DNNph										
15DNNph										
18DNNph							+			
Hexyl										
DPA										
EGDN										
DEGN										
NG										
Nitropenta										
<b>polar</b>										
246TNBs			-			+(T)	+		?	+
2A46DNBs			-			-				
4A26DNBs										
24DNBs			-	+(T)		+(T/M ?)	+		?	+
2A4NBs										
34DNBs										
2M3NBs										
4M3NBs										
35DNBs										
24DNTSs-3			-			-	+		-	+
24DNTSs-5			-			+(T/M ?)	+			+
2NBs										
3NBs										
4NBs										
4MBs										
2ABs										
3ABs										
4ABs										
2NBzOH										

Prozess	Abbau biotisch						Abbau abiotisch			Sorptions- neigung
	aerob			anaerob			aerob/anaerob			
Reaktions- raum STV	OW	Boden	GWL	OW	Boden	GWL	OW	Boden	GWL	GWL/ Boden
4NBzOH										
246TNPh			-			+(T/M ?)	+			+
4M26DNPh										
24DNPh										
25DMPH										
35DNPh			-			+(T/M ?)	+			
2M3NPh										
3M2NPh										
4M2NPh										
5M2NPh										
2NPh			+(M)							
3NPh			+(T)				+			+
4NPh			+(T)				+			+
246TNR										
SEX										
TNX										
DNX										
MNX										

### 2.1.1 Biotischer Abbau

In Tab. 1 sind eine große Anzahl an STV aufgelistet, die an einzelnen Standorten bzw. in Abbauprobungen im Labormaßstab nachgewiesen worden sind. Für einige der nachgewiesenen STV und deren Metabolite sind die bekannten Abbaureaktionen markiert und es wird zwischen Transformation (T) und Mineralisierung (M) unterschieden.

Der Abbau der STV ist sehr stark von den geochemischen Randbedingungen (Kohlenstoffquelle, Sauerstoff- und Nitratkonzentration, Redoxpotential) abhän-

gig. Des Weiteren beeinflusst die vorliegende Gesamtkontamination das Abbauverhalten, so z.B. inhibiert oder hemmt das Vorhandensein bestimmter STV andere STV. Weiterhin können vergleichsweise leichter abbaubare Stoffe wie Phenole oder BTEX oder einige HET bevorzugt vor den STV abgebaut werden.

In Tab. 2 sind für einige unpolare und polare STV die Randbedingungen für die bekannten Reaktionswege sowie die möglichen Metabolite dargestellt.

**Tab. 2: Randbedingungen für die biotischen Reaktionswege und Metabolite der STV (aus Untersuchungen des DGFZ e.V. / GFI GmbH)**

STV	Randbedingungen	STV-typische Metabolite
TNT	aerob, verfügbares Primärsubstrat bzw. Redoxpartner	v.a. ADNT
	anaerob, verfügbares Primärsubstrat bzw. Redoxpartner	bis DNT
RDX	anaerob durch co-metabolische Reduktion oder aerob bei Vorhandensein von Spezialisten	MNX, DNX, TNX, NDAB
135TNB	anaerob beschleunigt durch Zugabe C-Quelle	35DNAn, 13DNB
13DNB	anaerob beschleunigt durch Zugabe C-Quelle	Diaminobenzol
NB	aerob und anaerob beschleunigt durch Zugabe C-Quelle	2-Aminophenol, Anilin (anaerob)
24DNT	aerob/anaerob beschleunigt durch Zugabe C-Quelle, dabei verzögert durch Vorhandensein Nitrat	2A4NT, 4A2NT

STV	Randbedingungen	STV-typische Metabolite
26DNT	aerob/anaerob beschleunigt durch Zugabe C-Quelle (Abbau allmählich, nach Umsetzung von 24DNT, Nitrobenzole, 4NT)	2A6NT
2NT	anaerob aerob (Mineralisierung)	2MA

## 2.1.2 Abiotischer Abbau

### 2.1.2.1 Transformation/ Mineralisierung

In Tab. 1 sind die prinzipiell möglichen abiotischen Abbaureaktionen der STV unter aeroben und anaeroben Bedingungen in den drei Reaktionsräumen dargestellt. Des Weiteren wird in Tab. 1 bei den Reaktionswegen zwischen Transformation (T) und Mineralisierung (M) unterschieden.

In Tab. 3 sind für die unpolaren und polaren STV die Randbedingungen für die abiotischen Reaktionswege sowie die möglichen Metabolite dargestellt. Die Sorption wird an dieser Stelle nicht betrachtet.

### 2.1.2.2 Photolytische Transformation

Tab. 1 ist zu entnehmen, inwieweit die untersuchten STV photolytisch im Oberflächenwasser umsetzbar sind. Für einige unpolare STV zeigen Untersuchungsergebnisse von Labor- und Feldversuchen mittlere bis hohe (TNT, DNT, 1,8-DNNph), geringe (ADNT) und nahezu keine (1,3-DNB) photolytisch katalysierte Transformation durch Sonnenstrahlung im Oberflächenwasser. Die Abbaugeschwindigkeit der polaren STV durch Photolyse ist gegenüber den unpolaren

STV eher gering, aber im Vergleich mit der biotischen Abbaukinetik als hoch einzuschätzen.

Die Abbaugeschwindigkeit der STV mittels Photolyse ist abhängig von:

- Sonnenscheindauer,
- organischen Inhaltsstoffen/ Trübung/ Durchmischung im Oberflächengewässer,
- anzutreffende Schadstoffpalette im Oberflächenwasser,
- sterische Effekte/ Stellung der Nitro- und Methylgruppen.

Die Erhöhung der Sonnenscheindauer kann zur Erhöhung der Abbaugeschwindigkeit führen (nachgewiesen z.B. bei DNT, ADNT, TNT). Eine gute Durchmischung des Wassers erhöht die Abbaugeschwindigkeit geringfügig. Einige Schadstoffe stehen in Konkurrenz und behindern die photolytisch katalysierte Abbaureaktion anderer STV (z.B. kann die Anwesenheit von 1,3-DNB die photolytische Reaktion von 2,4-DNT hemmen).

Bei der Reaktion entstehen Transformationsprodukte, welche wiederum photolytisch transformiert werden können.

**Tab. 3: Randbedingungen für abiotische Reaktionswege und Transformationsprodukte der STV (aus Untersuchungen des DGFZ e.V./ GFI GmbH)**

STV	Randbedingungen	Transformationsprodukte
TNT	Sulfid und reduzierte Spezies	bis ADNT
RDX	reduzierte Minerale, Sulfid, Ammonium und Grauguss; dabei Konkurrenz mit anderen Oxidationsmitteln	MNX, DNX, TNX, NDAB
135TNB	Sulfid und reduzierte Spezies	35DNAn, 13DNB
13DNB	Abbausequenz in Abh. der STV-Spezies	--
24DNT	reduzierte Spezies	2A4NT, 4A2NT
26DNT	reduzierte Spezies	2A6NT
2NT, 4NT	Aerob: Abbau Anaerob: Transformation zu entspr. Methylanilinen	

In Tempel (2006) und KORA, TV5 (2008) sind mögliche Reaktionsschemen der STV mit den jeweilig möglichen Metaboliten dargestellt.

### 2.1.2.3 Sorption

In **Tab. 1** ist die Sorptionsneigung für die STV dargestellt.

Die Sorption der polaren STV ist dabei definitionsgemäß geringer als bei den unpolaren STV.

Die Sorption findet im gesättigten und ungesättigten Bereich (Reaktionsräume Boden und Grundwasserleiter) statt.

Der relativ breite Bewertungsbereich der Sorptionsneigung für die STV hat ihren Grund in der starken Abhängigkeit der Sorption von folgenden Eigenschaften

- TOC-Gehalt (sedimentbürtiger organischer Kohlenstoffgehalt) im Boden,
- Ton- und Schluff-Gehalt im Boden,
- Ionenbeladung der Tonminerale,
- anzutreffende Schadstoffpalette im Untergrund,
- sterische Effekte/ Stellung der Nitro- und Methylgruppen.

Die Sorption der Nitroaromaten ist hauptsächlich abhängig von den Sedimenteigenschaften Ton- und TOC-Gehalt. Am größten ist der Rückhalt durch Sorption in organikreichen Sedimenten. Bei Sedimenten mit geringem TOC-Gehalt macht die Sorption an Tonmineralen den Hauptanteil des Sorptionsvermögens aus. **Tab. 4** zeigt die aus Untersuchungen des DGFZ e.V. / GFI GmbH ermittelten Sorptionskoeffizienten der STV an Sedimenten mit unterschiedlichen Ton- und Schluff- sowie TOC-Gehalten.

Des Weiteren ist die Sorptionskapazität verschiedener Böden entsprechend KORA, TV5 (2008 bzw. Dissertation Weber (2008)) in Abhängigkeit des TOC-Gehaltes der Böden dargestellt.

Bei den untersuchten Böden nach **Tab. 4** zeigt sich, dass in den Sedimenten mit hohen TOC-Gehalten die Sorption der STV um mehr als eine Zehnerpotenz größer ist als in organikarmen Sedimenten. Die Aminonitroverbindungen sorbieren in organikreichen Sedimenten im Vergleich zu den Mononitroaromaten und den Methylanilinen am stärksten. In sandigen Sedimenten mit einem geringen Ton- und TOC-Gehalt ist die Sorption der Nitroverbindungen in etwa vergleichbar gering.

Bei der Sorption an Tonmineralen, die bei Sedimenten mit geringem TOC-Gehalt den Hauptanteil des Sorptionsvermögens ausmachen, nimmt mit steigender Anzahl an Nitrogruppen die Sorptionsstärke zu.

Die Ionenbeladung der Tonminerale beeinflusst ebenfalls die Sorptionskapazität. So behindern stark hydratisierte Kationen wie  $Ca^{2+}$ ,  $Mg^{+}$  oder  $Na^{+}$  die Sorption der Nitroaromaten an Tonmineralen.

Weiterhin wird die Sorptionsstärke durch die Stellung der Nitro- und Methylgruppen am Benzolring beeinflusst. So ist die para-Position, wie beispielsweise beim 2,4-DNT oder beim 4-NT, geeignet, die Affinität zur Sorption im Vergleich zu den anderen Isomeren deutlich zu erhöhen. Ebenso wirkt sich die substituierte Methylgruppe verringernd auf die Sorptionsaffinität aus.

Des Weiteren sind bei der Sorptionskapazität auch kompetitive Effekte zu berücksichtigen.

**Tab. 4: Sorptionskoeffizienten der STV in Abhängigkeit der Sedimenteigenschaften (aus Untersuchungen des DGFZ e.V. / GFI GmbH)**

Sediment	Sedimenteigenschaften			
	Mittelsand	Sand (tonig, schluffig)	Ton	Buntsandstein (Ton- und Schlufflagen)
Ton- und Schluffanteil (%)	0	20-40	84	k.A.
TOC (%)	0,03	0,3-0,5	4,6	<0,01-0,01
	kd (L/kg) (Henrykoeffizient)			
Nitroaromaten	0,1-0,4	1,5-8	14-15	0,5-1,2
Methylaniline	0,1-0,3	0,8-5,5	5,5-12	
Aminonitroverbindungen	0,2-0,8	2,2-2,6	20-32	
Nitrobenzole				0,2-0,4
polare STV	0,05-0,07	0,1-0,3		

Das bedeutet, dass die Zusammensetzung der STV-Cocktails im Grundwasser die Sorptionseigenschaften am Sediment beeinflusst. Die Schadstoffe treten in Konkurrenz zueinander, so verdrängte z.B. das stärker sorbierende 2,4-DNT das bereits sorbierte 1,3-DNB von den Sorptionsplätzen, so dass eine Mobilisierung des 1,3-DNB stattfand.

Die vorhandenen Schadstoffkonzentrationen im Porenwasser beeinflussen ebenfalls die Sorption.

Demzufolge ist der Einsatzbereich der Sorptionskoeffizienten, z.B. im Rahmen der Stofftransportmodellierung, anhand des Konzentrationsbereiches und der Zusammensetzung des Schadstoffcocktails im Grundwasser zu wählen.

Eine geringe Sorption der STV am Sediment führt bezüglich des Transportverhaltens zu einer erhöhten Mobilität.

### 2.1.3 Löslichkeit

Für den Transport der STV in der Bodenzone bis in das Grundwasser (Versickerung und Grundwasserneubildung) ist die Löslichkeit der an der Bodenmatrix festgelegten STV von Bedeutung (s.a. [11], [16]).

Die Wasserlöslichkeit (s. Anlage 1) der in Feststoffproben nachgewiesenen STV liegt bei der einmaligen Wasserextraktion bei immerhin 5-10 % der in der Feststoffprobe nachweisbaren STV (DNT, DNN, DNB). Aufgrund dieser relativ hohen Wasserlöslichkeit der STV sind im Sickerwasser hohe STV-Gehalte zu erwarten.

Für im Grundwasser befindliche Kontaminationsquellen ist mit einer relativ schnellen Auswaschung der STV zu rechnen.

## 2.2 Technische Verfahren

### 2.2.1 Alkoholwäsche

Ziel der in-situ-Waschung mit Lösungsmitteln ist die Effektivierung der herkömmlichen „Pump- and Treat-Maßnahmen“ zur Dekontamination von Primärschadherden in Grundwasserleitern. Durch die beschleunigte Lösung der vor allem immobil an die Feststoffmatrix gebundenen NAPL in das mobile Grundwasser soll eine Verkürzung dieser Maßnahmen erreicht werden. Dabei ist es auch möglich, die Grundwasserschwankungs- und Kapillarzone, die im Bereich des Primärschadherdes die Hauptkontamination tragen und mit

den „Pump- and Treat- Maßnahmen“ nicht effektiv gereinigt werden können, zu waschen und zu spülen.

Die Beeinflussung des Grundwassers im Resultat der Alkoholinjektion besteht vorrangig im Eintrag des eingesetzten Waschmittels, nicht so sehr in der Verlagerung der Schadstoffe. Verfahrensbedingt lagert sich ein Teil des infiltrierten Waschmittels in der Aerationzone an, wo es nachfolgend durch das Spülwasser herausgelöst und in die oberflächennahen Bereiche des Grundwasserkörpers eingetragen wird. Da aber die eingesetzten Alkohole allesamt sehr gut biotisch abbaubar sind, wird durch die zugeführte Kohlenstoffquelle gleichzeitig der in-situ-Abbau der verbliebenen Restschadstoffe gesteigert.

### 2.2.2 Chemische Oxidation

Für die chemische Oxidation aromatischer Verbindungen sind drei Wege bekannt:

1. Oxidation der Aromaten unter Bildung von Oxidationsprodukten (aromatischen Alkoholen, Aldehyden, Carbonsäuren)
2. Ringspaltung in aliphatische Verbindungen,
3. Decarboxylierung unter Bildung kleinerer organischer und anorganischer Verbindungen.

Als in-situ Sanierungstechnologie ist der Einsatz solcher Chemikalien möglich, die zur Bildung von Radikalen in-situ führen. Oxidationsmittel mit einer geringeren Oxidationskraft führen v.a. für das TNT nicht zu einer Oxidationsreaktion. Eine der effektivsten Möglichkeiten, diese Radikale in-situ zu erzeugen, stellt der gasförmige Ozon eintrag dar. Laborversuche zum Transport des Ozons im gesättigten Untergrund zeigten die gute Oxidationswirkung der Radikale, die durch das gasförmig eingetragene Ozon gebildet worden sind.

Trotz der relativen Stabilität des gebildeten Ozons im ca. 12°C kühlen Grundwasser ist die Kontaktzeit der beim Ozonzerfall gebildeten Radikale mit den STV der den Abbau bestimmende Prozess.

### 2.2.3 Photolytische Aufbereitung

Die photolytische Transformation der STV (vgl. 2.1.2.2) kann prinzipiell auch on-site ihre Anwendung finden. In einem künstlich angelegten Aufbereitungsbecken ist der photolytische Abbau durch die Aufenthaltszeit und die ausreichende Durchdringbarkeit der Sonnenstrahlung in die Tiefe bestimmt. Neben

photolytischen Abbaureaktionen werden einige STV bzw. auch deren Metabolite durch biotische Prozesse im Oberflächengewässer abgebaut. Damit stellt dieses Verfahren eine geeignete Kombination aus biotischen und abiotischen Verfahren dar.

### 3. Bewertungshilfen – Bewertungskriterien

Mittels einer Sickerwasserprognose können u.a. die Gefahren durch schädliche Bodenveränderungen für das Schutzgut Grundwasser abgeschätzt werden. Als Rechtsgrundlagen können das BBodSchG und die BBodSchV dafür herangezogen werden. Die Prüfwerte der BBodSchV werden für die verschiedenen Wirkungspfade (Boden-Grundwasser, Boden-Nutzpflanze, Boden-Mensch) separat hergeleitet. Für den Wirkungspfad Boden- Grundwasser gelten die Prüfwerte zur Beurteilung des Sickerwassers nach § 8 BBodSchG im Übergangsbereich von der ungesättigten zur wassergesättigten Bodenzone. Unter Prüfwerten der BBodSchV sind die STV nicht gelistet. Im Rahmen der Novelle der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV) wurden zwar die Prüfwerte ) um einige STV ergänzt, betreffen aber den Wirkungspfad Boden-Mensch (direkter Kontakt). Betrachtet man das Schutzgut Mensch in dem Wirkungspfad Boden-Grundwasser, so sind die toxikologischen Grenzwerte - Besorgnis- und Dringlichkeitswerte- aus Bewertungshilfen des LfULG Sachsen anzuwenden (s. **Tab. 5**).

Besorgniswerte (B-Werte) wurden im Auftrag des LfULG abgeleitet und stellen Geringfügigkeitsschwellen ohne Ökotoxizität dar. Die Unterschreitung der B-Werte schließt jeglichen Gefahrenverdacht aus. Bei Überschreitung ist ein hinreichender Gefahrenverdacht gegeben [12].

Dringlichkeitswerte (D-Werte) sind aus Besorgniswerten durch Multiplikation mit einem Gefahrenfaktor 2-10 abgeleitete Werte. Die Überschreitung der D-Werte bestätigt einen dringenden Gefahrenverdacht [12].

Die Bewertung von Grundwasserschäden erfolgt nach dem Wasserrecht auf der Grundlage der Geringfügig-

keitsschwellen (GFS) der Länderarbeitsgemeinschaft LAWA. Die Geringfügigkeitsschwelle (GFS) ist eine Konzentration, bei der trotz einer Erhöhung der Stoffgehalte gegenüber regionalen Hintergrundwerten keine relevanten ökotoxischen Wirkungen auftreten (LAWA- Definition) und damit Gefahren für Menschen ausgeschlossen werden. Die GFS definieren den guten chemischen Zustand des Grundwassers und dienen der Abgrenzung geschädigter Bereiche. Die GFS-Werte für STV sind in der **Tab. 5** aufgeführt.

Aufgrund der relativ hohen Dampfdrücke und damit verbundener Flüchtigkeit einiger Nitroaromaten werden für die Bodenluft Nitrobenzol und 3-Nitrotoluol in der sächsischen Bewertungshilfe [12] gelistet. Infolge der hohen Verdünnungen bei Austritt in die Atmosphäre ist jedoch eine Gefährdung meistens ausgeschlossen. Bei Erdarbeiten sollte darauf geachtet werden und ggf. eine Probe der Bodenluft genommen werden.

Die Schadstoffkonzentrationen in Boden, Wasser oder Bodenluft werden durch Probenahme, Probenvorbereitung und laborative Analyse bestimmt (Kap. 5). Bei der Bewertung der Expositionsintensität und Expositions-dauer der Schutzgüter sollen außer Schadstoffkonzentrationen weitere Kriterien berücksichtigt werden, die eine Aussage über die vorhandene Stoffmenge, die Mobilität, die Freisetzungsrate, die Dauer der Freisetzung und die Ausbreitungsmöglichkeiten am Standort ermöglichen.

**Tab. 5: Bewertungskriterien für die Schutzgüter Grundwasser und Mensch - Auszug aus „Bewertungshilfen bei der Gefahrenverdachtsermittlung in der Altlastenbehandlung (Freistaat Sachsen“ 2008 [12])**

Stoff	Schadstoffkonzentration im Grundwasser		
	Schutzgut		
	Grund-wasser	Mensch	
<b>Bewertungskriterien</b>	GFS, µg/l (LAWA)	Besorgnis-Wert, µg/l (B-Wert, LfULG)	Dringlichkeitwert, µg/l (D-Wert, LfULG)
Nitropenta (PENT)	10	10	100
2-Nitrotoluol	1	1	5
3-Nitrotoluol	10	10	100
4-Nitrotoluol	3	3	30
2-Amino-4,6-Dinitrotoluol	0,2	0,2	1
4-Amini-2,6-Dinitrotoluol	0,2	0,2	1
2,4-Dinitrotoluol	0,05	0,05	0,25

	Schadstoffkonzentration im Grundwasser		
	Schutzgut		
Stoff	Grund-wasser	Mensch	
Bewertungskriterien	GFS, µg/l (LAWA)	Besorgnis-Wert, µg/l (B-Wert, LfULG)	Dringlichkeitwert, µg/l (D-Wert, LfULG)
2,6-Dinitrotoluol	0,05	0,05	0,25
2,4,6-Trinitrotoluol	0,2	0,2	1
Hexogen (RDX)	1	1	5
2,4-Dinitrophenol	-	7*	70*
2,4,6-Trinitriphenol	0,2	0,2	2
Nitrobenzol	0,7	0,7	7
1,3-Dinitrobenzol	0,3	0,3	3
1,3,5-Trinitrobenzol	100	100	1000
Hexyl (Hexanitrodiphenylamin)	2	2	10
Tetryl	5	5	50
Octogen (HMX)	175	175	1750



## 4. Standort-Sanierungsverfahren

Im folgenden Kapitel werden die in Kap. 2.2 dargestellten technischen Sanierungsverfahren mit einem Standortbeispiel untersetzt.

### Standort

Auf dem Standort (Waldgrundstück) wurden Sprengstoffe hergestellt. Untersuchungen zur Gefährdungsabschätzung sowie Sanierungen des Geländes und des Grundwassers werden derzeit durchgeführt. Die festgestellten Untergrundbelastungen durch STV stammen aus der Herstellung und Abfüllung militärischer Sprengstoffe und der Delaboration von Munition.

### Charakteristika des Standortes (Stoffpalette, Stör- und Begleitstoffe, Ausbreitungspotenzial)

#### Kontamination/ Stoffpalette

In allen militärisch genutzten Geländebereichen wurden Bodenbelastungen durch Nitroaromaten festgestellt:

- Weitläufige Oberbodenbelastungen durch Versickerung der Abwässer sowie Aufbringen und großräumige Verteilung von Abfällen der Produktion
- Tiefreichende Belastung der ungesättigten Bodenzone durch Rekristallisation von Sprengstoffen aus dem Eintrag durch die Versickerungsstellen oder durch Ablagerungen in Rohrleitungen

Die Grundwasserbelastung besteht aus einem Schadstoffcocktail (Mischwasser aus 1. und 2. Weltkrieg) mit

- Dinitrobenzol
- Trinitrotoluol
- Dinitronaphthalin
- Dinitrotoluol untergeordnet

#### Ausbreitungspotenzial

Der Porengrundwasserleiter ist durch sehr organikarme Sande gekennzeichnet, die zu einem geringen Rückhalt der STV und zu einer als gering einzuschätzenden mikrobiellen Aktivität im Grundwasserleiter führen. Damit ist die Ausbreitung der STV sehr stark von der Strömung des Grundwassers abhängig und die Fahnengeometrie deutlich von hydraulischen Bedingungen geprägt. Dennoch werden v.a. reduktiv gebildete Metabolite im Abstrom der Hauptquellen im Grundwasser nachgewiesen., Demnach besteht am

Standort ein Transformationspotential für die uSTV unter Bildung von Aminoverbindungen.

### Auswertung des Sanierungsverfahrens (Randbedingungen, Leitparameter, Erfolgsquote)

#### Durchgeführte Sanierungs- und Sicherungsmaßnahmen

- Die Bodenbelastung wurde soweit als technisch möglich und verhältnismäßig vertretbar durch Auskoffnung entfernt
- Eine weitergehende Bodensanierung erfolgte dahingehend, einen weiteren Eintrag von Nitroaromaten durch Elution ins Grundwasser zu unterbinden. Restbelastungen, die derzeit noch nicht saniert werden können, werden durch Oberflächenabdichtungen gesichert
- Zur Abklärung des Ausbreitungsverhaltens der Schadstofffahne wird eine Stofftransportmodellierung unter Implementierung der standorttypischen Parameter bzgl. Sorption und Abbau durchgeführt
- Möglichkeiten der in-situ-Behandlung wurden im Technikumsmaßstab geprüft und werden zukünftig im Feldversuch getestet
- Eine hydraulische Sicherung und on-site Aufbereitung des kontaminierten Grundwassers wurde ebenfalls installiert und wird derzeit betrieben
- Alternativ zur Aktivkohlereinigung zur Aufbereitung des geförderten Wassers wurden Labor- und Technikumsversuche zur Oxidation (Ozonierung) und zur photolytischen Transformation durchgeführt und am Standort getestet.

#### Sanierungsverfahren chemische Oxidation (Ozonierung)

Auf der Grundlage der Ergebnisse der Laborversuche wurde vorerst eine on-site Anlage zur Ozonierung des geförderten Wassers als Technikumsanlage installiert. Mit dieser Aufbereitungsanlage wird ein Versuchsbetrieb gefahren, bei dem unterschiedlich belastete Wässer in unterschiedlichen Verdünnungsstufen unter variablen Randbedingungen untersucht werden. Bislang wurde Grundwasser mit vorrangiger Dinitrobenzol- und Dinitronaphthalinbelastung behandelt.

#### Sanierungsverfahren photolytische Transformation

Aus den Ergebnissen von Vorversuchen wurde ein photolytisches Aufbereitungsbecken entwickelt mit einem Vorbecken, in das der Wasserbelüfter zur Erzeugung von Zirkulationsströmungen eingebracht

wird und einem Hauptbecken, in dem sich die Wasserbewegung wieder beruhigen kann. Das Becken wird kontinuierlich durchströmt, wobei die Durchströmung variabel gehalten ist und die Aufenthaltszeit zwischen 20 bis 200 Stunden beträgt. Die Versuche dauern noch an.

## 5. Analytische Verfahren für die Bestimmung der STV in Boden und Wasser

### 5.1 Probenahme

Eigenschaften der STV, wie Lichtempfindlichkeit und Leichtflüchtigkeit (MNT, TNB), müssen bei der Probenahme (PN) unbedingt berücksichtigt werden. Die entnommenen Wasser- und Bodenproben sollen lichtgeschützt und gasdicht verpackt an das entsprechende Labor übergeben werden (s. DIN-Normen). Dafür eignen sich Braunglasflaschen mit Schliffstopfen gut.

Um Veränderungen in der Probenzusammensetzung bis zur Analyse zu vermeiden, sollten die Wasserproben konserviert werden. Die Probenkonservierung durch Kühlen (4°C) ist für kurze Zeit (24 Stunden) zugelassen, dabei sollte die Kühlkette während des Transportes nicht unterbrochen werden. Auch kann die Zugabe von 1 ml gesättigter Natriumazid-Lösung je Liter Probe direkt im Feld erfolgen. Eine langfristige Probenlagerung ist bei -18°C möglich [2]. Dafür sollten die Proben in Kunststoffgefäße zu  $\frac{3}{4}$  gefüllt werden.

### 5.2 Analytik

Die im Grundwasser nachgewiesenen STV sind entweder mit dem Sickerwasser eingetragen oder direkt aus im Grundwasser befindlichen Quellherden ausgewaschen worden. Demnach ist es unter analytischen Gesichtspunkten wichtig, sowohl wässrige Proben als auch Feststoffproben auf STV analysieren zu können.

Die in diesem Kapitel beschriebenen analytischen Verfahren für Wasser und Boden befassen sich zwar mit der gleichen Stoffgruppe „STV“, sind aber jeweils für unterschiedliche Stoff-Paletten validiert. Dennoch

ist es zugelassen, verwandte Verbindungen mit diesen Verfahren zu bestimmen, wobei die Anwendbarkeit im Einzelfall seitens des Labors zu prüfen ist.

Die physikalischen Eigenschaften der gesamten STV-Gruppe breiten sich fließend von extrem polaren, stark wasserlöslichen, zu unpolaren, kaum in Wasser löslichen Verbindungen aus. Die Grenze zwischen polaren (pSTV) und unpolaren (uSTV) Verbindungen wurde anhand der Extrahierbarkeit der Stoffe mit Dichlormethan gesetzt [2, S. 9] und soll relativ, innerhalb dieser Stoffgruppe, betrachtet werden.

Zwei Analysetechniken haben sich für die Bestimmung von STV über Jahre etabliert. Das sind die flüssigchromatographische Bestimmung mittels HPLC-DAD und die gaschromatographische Bestimmung mittels GC-ECD bzw. GC-PND oder GC-MS. Generell gilt, dass unpolare STV mit HPLC sowie mit GC analysiert werden können und polare - mit der HPLC. Eine Ausnahme stellen die unpolarsten Vertreter der pSTV - Nitrophenole - dar [s. Anlage 2], die auch gaschromatografisch analysierbar sind. Wesentliche Merkmale beider Verfahren sind bezogen auf die Probenmatrix und den STV-Typ in Tab. 6 zusammengestellt.

Beide Verfahren haben ihre Vor- und Nachteile, die für den jeweiligen Zweck der Analyse gegeneinander abgewogen werden sollten.

Mit dem HPLC-Verfahren können sowohl polare, als auch unpolare STV nachgewiesen werden. Dabei können Wasserproben direkt, ohne Probenvorbereitung, bis zum unteren µg/L-Bereich analysiert werden. Allerdings deckt die Direkt-Injektionstechnik nicht den niedrigsten Konzentrationsbereich (ng/L) ab.

Tab. 6: Analytische Verfahren für die Bestimmung der STV in Boden und Wasser und ihre Merkmale

Proben-Matrix	Art der Probenvorbereitung (PV)	HPLC		GC	
		unpolare STV	polare STV	unpolare STV	polare STV
		BG	BG	BG	BG
Wasser	direkte Injektion, ohne Probenvorbereitung	20-15 µg/L	10-5 µg/L	nicht möglich	nicht möglich
	Extraktion (Festphasen- bzw. Flüssig-Flüssig)	0,1 - 0,05 µg/L	0,05 µg/L	0,1 - 0,05 µg/L (außer thermisch instabilen STV)	nur Nitrophenole
		BG	BG	BG	BG

<b>Boden</b>	Lösungsmittelextraktion	1 – 0,1 mg/kg	0,1 mg/kg	0,1 - 0,05 mg/kg (außer thermisch instabilen STV)	nur Nitrophenole
--------------	-------------------------	---------------	-----------	---	------------------

Für die Analyse im Spurenbereich muss die Probe aufkonzentriert werden. Dabei werden die meistens als komplexe Gemische im Grundwasser vorliegenden Analyten auf einer Festphase zurückgehalten und danach mit einem wassermischbaren Lösungsmittel von der Festphase eluiert. Praktisch werden die Probematrix und das Probenvolumen verändert und damit entstehen mögliche Fehler-Quellen. Die Wiederfindungsrate (Ausbeute) der Extraktion für die Stoffe, die in der entsprechenden DIN nicht validiert sind, sollen vom Labor bestimmt und berücksichtigt werden. Gaschromatographisch lassen sich die unpolaren STV mit Ausnahme von RDX, HMX, Hexyl, Tetryl, Nitropenta bestimmen. Diese thermisch instabilen Verbindungen zerfallen bei der GC-Injektion und können aus diesem Grund gaschromatographisch nicht erfasst werden. Aus der Gruppe der polaren STV können nur die Nitrophenole mit dem GC erfasst werden. Da die Analyte für eine GC-Analyse in einer nicht-wässrigen Lösung vorliegen müssen, werden die Wasserproben grundsätzlich dafür extrahiert und dadurch die im Wasser vorliegenden STV gleichzeitig aufkonzentriert. Analog wie bei der HPLC-Analyse soll die Extraktionsausbeute validiert und mitberücksichtigt werden. Die Kosten für die Analytik setzen sich aus den Kosten für die Anschaffung der Referenzstoffe und dem Zeitaufwand für die Probenanalyse zusammen. Der Zeitaufwand wird im Wesentlichen durch die Arbeitsschritte im Rahmen der Probenvorbereitung (PV) bestimmt. Dadurch ist die Variante der Direktinjektion, ohne Extraktion, in den meisten Fällen preiswerter. Da die genormten Verfahren für die unpolaren STV schon lange existieren, haben Referenzmittel-Hersteller ihr Angebot gut an die Norm-Stoffpaletten angepasst und bieten eine Auswahl an relativ preiswerten uSTV-Standard-Gemischen an. Für die Kalibrierung der umfangreichen Stoffpalette der polaren STV sind die Labore gezwungen, die Referenzstoffe einzeln zu erwerben und zum Teil individuell synthetisieren zu lassen, wodurch die pSTV-Analysekosten enorm steigen.

## 5.2.1 Bestimmung der STV im Wasser - Grundsätze und Regelwerke

### Unpolare STV

Die uSTV in Wasser lassen sich einfach und schnell mittels HPLC bestimmen. Eine filtrierte Wasserprobe wird direkt ins HPLC-System injiziert, wobei die Probenvorbereitung und damit verbundene mögliche Fehler-Quellen ausgeschlossen werden können. Die Bestimmungsgrenzen des Direkt-Injektionsverfahrens, die mit dem instrumentellen Detektionslimit des verwendeten HPLC-Gerätes begrenzt sind, liegen im Bereich von ca. 20µg/L (je nach Stoff) und sind für die kontaminierten Standorte relevant. Sollen die STV im Rahmen der Trinkwasseruntersuchung im Spurenbereich nachgewiesen werden, so müssen die zu bestimmenden STV aufkonzentriert werden. Eine dafür gut geeignete Probenvorbereitung ist die Festphasen-Extraktion (Solid Phase Extraktion, SPE). Dabei werden STV aus dem Wasser an einer Festphase adsorbiert, welche anschließend mit einem für die analytischen Verfahren (HPLC bzw. GC) geeigneten Lösungsmittel extrahiert wird. Im Extrakt werden lediglich die STV-Konzentrationen bestimmt. Im Falle gaschromatographischer Bestimmung kann auch die Flüssig-Flüssig-Extraktion verwendet werden. Hier werden die STV aus der Wasserprobe mit einem unpolaren („mit Wasser nicht-mischbaren“) Lösungsmittel extrahiert und der Extrakt mit GC analysiert.

### **Deutsche bzw. europäische Regelwerke** (Tabelle 7)

- **DIN EN ISO 22478:2006** [Ersatz für 38407-21] Wasserbeschaffenheit - Bestimmung ausgewählter Explosivstoffe und verwandter Verbindungen - Verfahren mittels Hochleistungs-Flüssigkeitschromatographie (HPLC) mit UV-Detektion (ISO 22478:2006). Diese Norm legt insbesondere für Nitrotoluole, Nitramine, Nitratester und verwandte Verbindungen (Nebenprodukte, Abbauprodukte) ein Verfahren zur Bestimmung von 20 ausgewählten Explosivstoffen in Trink-, Grund- und Oberflächenwasser fest. [13].

- **DIN 38407-21:2001-12** [Achtung: DIN wurde zurückgezogen, aber ist noch oft zitiert] Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung - Gemeinsam erfassbare Stoffgruppen (Gruppe F) - Teil 21: Bestimmung ausgewählter Explosivstoffe und verwandter Verbindungen durch Hochleistungs-Flüssigchromatographie (HPLC) mit UV-Detektion (F 21)

- **DIN 38407-17:1999-02** Deutsches Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung - Gemeinsam erfassbare Stoffgruppen (Gruppe F) - Teil 17: Bestimmung ausgewählter nitroaromatischer Verbindungen mittels Gaschromatographie (F 17) [14].

**Tab. 7: Unpolare STV im Wasser - Normen und deren Merkmale**

Norm	Messprinzip	Bemerkungen	BG
DIN EN ISO 22478:2006	SPE-Extraktion der Wasserprobe; Messung mit HLPC-DAD [13]	beim Einengen Verluste an MNTs	0,1-0,5µg/l
DIN 38407-17:1999-02	SPE-/FI-FI-Extraktion der Wasserprobe; Messung mit GC-ECD, -PND, -MS [14]	nicht für RDX, HMX, Hexyl, Tetryl, Nitropenta; beim Einengen Verluste an MNTs	je nach Detektor-Typ: ECD 0,1µg/l PND 0,05µg/l MS 0,05µg/l

### **Polare STV**

Aufgrund der hohen Polarität und starken Affinität der pSTV zum Wasser begrenzen sich die analytischen Verfahren für die Bestimmung der polaren STV auf die Flüssigchromatographie (Tab. 8). Wie auch bei den uSTV können filtrierte Wasserproben direkt, ohne Aufkonzentrierung, auf pSTV analysiert werden. Die Bestimmungsgrenzen liegen dabei bei 10-5 µg/L und können mit der Festphasen-Extraktion bis zu 0,05 µg/L verbessert werden. Gemäß Tab. 7 können mittels GC nur Nitrophenole analysiert werden.

Deutsche bzw. europäische Regelwerke für die Bestimmung polarer STV stehen nicht zur Verfügung. Im Rahmen des KORA-TV5 (2008) wurde eine Methoden-Empfehlung ausgearbeitet [2]. Es handelt sich um die flüssigchromatographische Bestimmung der polaren STV mit Ionensuppression und DAD-Detektion. Die Methoden-Grundlagen sind bei Schmalz und Tränckner beschrieben [16]. Die Methode wurde im KORA-TV5-Arbeitskreis für 12 polare STV validiert und als Standardarbeitsanweisung im Leitfaden KORA-TV-5 dargestellt [2, S. 216].

**Tab. 8: Polare STV im Wasser - Normen und deren Merkmale**

Norm	Messprinzip	Bemerkungen	BG
keine Norm, KORA-TV5 Methoden-Empfehlung	direkte Injektion der Wasserprobe; Messung mit HLPC-DAD [2]	-	5-10µg/L
keine Norm, KORA-TV5 Methoden-Empfehlung	SPE-Extraktion der Wasserprobe; Messung mit HLPC-DAD [2]	-	0,1-0,05µg/l

### **5.2.2 Bestimmung der STV im Boden – Grundsätze und Regelwerke**

#### **Unpolare STV**

Die zu untersuchenden Böden müssen zuerst extrahiert und die gewonnenen Extrakte analog der Wasserproben analysiert werden. Die Extraktion wird

mit den für die anschließende Analytik (HPLC bzw. GC) geeigneten Lösungsmitteln durchgeführt. Für die Extraktion werden sowohl „heiße“ Techniken (Soxhlet-Extraktion, beschleunigte Lösemittel-extraktion (Accelerated Solvent Extraction, ASE) als auch „kalte“ Techniken (Ultraschall-Extraktion, Schüttel-Extraktion)

angesetzt. Eine umfassende Beschreibung und einen Vergleich der Extraktions- und Elutionstechniken hinsichtlich der Effizienz und Kosten gibt die Schrift des Bayerischen Landesamtes für Umwelt „Arbeitshilfen für die Untersuchung von Sprengplätzen“ (2009) [11]. Man muss beachten, dass die schon benannten thermisch instabilen STV bei Verwendung von „heißen“ Extraktionstechniken Minderbefunde aufweisen können.

**Deutsche bzw. europäische Regelwerke** (Tabelle 9)

Im Rahmen der Novelle der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV) wurde die Bestimmung der STV-Gruppe bundeseinheitlich geregelt und methodisch über genormte Untersuchungsverfahren **DIN ISO 11916** auch auf EU-Ebene abgesichert.

**- Norm DIN ISO 11916-1: 2011** Bodenbeschaffenheit - Bestimmung von ausgewählten Explosivstoffen - Teil 1: Verfahren mittels Hochleistungs-Flüssigkeitschromatographie (HPLC) und UV-Detektion (Ausgabe 2011-03, beabsichtigte Zurückziehung mit Ersatz zum November 2014) [17].

Teil 1 der Normenreihe legt ein Verfahren zur Messung von 16 Explosivstoffen (Nitroaromaten und Nitroaminen) in Böden und Bodenmaterialien durch Hochleistungs-Flüssigkeitschromatographie (HPLC) unter Anwendung eines Ultraviolett-detektors (UV Detektors) fest. Als Bestimmungsgrenze gelten die

Konzentrationen von 0,1 mg/kg bis 1mg/kg Trocken-substanz.

**- Norm DIN ISO 11916-2: 2011** Bodenbeschaffenheit - Bestimmung von ausgewählten Explosivstoffen - Teil 2: Verfahren mittels Gaschromatographie (GC) und Elektronen-Einfang-Detektion (ECD) oder massenspektrometrischer Detektion (MS) (Ausgabe 2011-03, beabsichtigte Zurückziehung mit Ersatz zum November 2014) [18].

Teil 2 der ISO 11916 legt ein Verfahren zur Messung von 11 Explosivstoffen (Nitroaromaten und Nitroanen) in Böden und Sedimenten mittels Gaschromatographie (GC) unter Verwendung eines Elektroneneinfangdetektors (ECD) oder eines Massenspektrometers (MS) fest. Als Bestimmungsgrenze ist die Konzentration von 0,05 mg/kg Trockensubstanz angegeben. Das Verfahren ist nicht geeignet für die thermolabilen Stoffe Hexogen (RDX), Octogen (HMX), Hexyl, Tetryl und Nitropenta (PETN).

**Vor-Ort-Analytik**

In der UBA-Schriftreihe 37/03 „Überprüfung von Methoden der BBodSchV zur Beurteilung der Bodenqualität“ werden folgende Techniken für die Vor-Ort-Konzentrationsbestimmung genannt:

- Ionenmobilisierungsspektrometrie (IMS) für DNT, TNT
- Immunoassay-Tests (ELISA) für RDX, TNT

In der Schrift 37/03 ist eine detaillierte Bewertung der Richtigkeit, Präzision, Messgrenzen, Praktikabilität und Wirtschaftlichkeit der Verfahren gegeben [19].

**Tab. 9: Unpolare STV im Boden – Normen und deren Merkmale**

Norm	Messprinzip	Bemerkungen	BG
DIN ISO 11916-1:2011	Bodenextraktion, Extrakt-Messung mit HPLC-DAD [17]	-	0,1mg/kg
DIN ISO 11916-2:E	Bodenextraktion, Extrakt-Messung mit GC-ECD bzw. GC-MS [18]	nicht für RDX, HMX, Hexyl, Tetryl, Nitropenta	0,05mg/kg

**Polare STV**

Eine validierte Arbeitsanweisung für die Bestimmung der pSTV im Boden liefert KORA-TV5 (2008) [2, S. 216]. Die für die Analyse erforderliche Boden-Extraktion wird mit Methanol-Wasser-Gemischen unter Verwendung von Ultraschall-, Soxhlet- bzw. beschleunigte Lösemittelextraktion (ASE) durchge-

führt. Die gewonnenen Extrakte werden ähnlich wie Wasserproben mit HPLC analysiert. Bei der Untersuchung von lehmigen und organikreichen Böden sollte beachtet werden, dass die Wiederfindung nach der Extraktion für manche pSTV vom Lehm- bzw. TOC-Gehalt der Böden abhängig ist [20].



**Tab. 10: Polare STV in Boden – Normen und deren Merkmale**

Norm	Messprinzip	Bemerkungen	BG
keine Norm, KORA-TV5 Leitfaden	Bodenextraktion, Extrakt- Messung mit HPLC-DAD [2]	-	0,2-1mg/kg

### 5.2.3 EPA-Regelwerke für die Bestimmung der unpolaren STV

Die Bestimmung nach EPA (Environmental Protection Agency, USA), US-Norm, findet in den europäischen Laboren oft Anwendung.

Die aufgeführten EPA-Methoden beschreiben die Verfahren für die Bestimmung von **unpolaren STV in Wasser- und Feststoffproben**:

**EPA METHOD 8330A** – Analyse von Nitroaromaten und Nitraminen mittels Hochleistungs-Flüssigkeitschromatographie (HPLC). Diese Methode findet Anwendung bei der Spurenanalyse (ppb-Bereich) von bestimmten explosiven Reststoffen (20 Verbindungen) in Wasser, Boden und Sedimenten. Vor dem Einsatz der Methode müssen die Proben aufbereitet werden. Wässrige Proben können mittels Fest/ Flüssig-Extraktion (Festphasenextraktion), der Low-level salting-out Methode sowie der High-level direct injection Methode vorbereitet werden. Boden- und Sedimentproben werden in einem Ultraschallbad mittels Acetonitril extrahiert und anschließend filtriert und analysiert. [21]

**EPA METHOD 8330B** – Analyse von Nitroaromaten, Nitraminen und Nitrat-Estern mittels Hochleistungs-Flüssigkeitschromatographie (HPLC). Dieses Verfahren wird bei der Spurenanalyse (ppb-Bereich) von Sprengstoffen und Treibmittelrückständen (17 Verbindungen) mittels HPLC und Ultraviolett-Detektor in einer Wasser-, Boden- oder Sedimentmatrix angewandt. Die in dieser Methode aufgelisteten Stoffe werden entweder bei der Herstellung der Explosivstoffe und Treibmittel eingesetzt oder sind Abbauprodukte der zu diesem Zweck genutzten Stoffe. Zur Vorbereitung der Probenanalyse mittels HPLC-UV müssen die Proben aufbereitet werden (z.B. Festphasenextraktion oder Lösungsmittelextraktion). Es können sowohl Proben mit geringen Stoffkonzentrationen im ppt oder ng/L-Bereich (salting-out Extraktionsmethode), als auch Proben mit einer hohen Konzentration (Direct-injection-Methode) analysiert werden. Boden- und Sedimentproben werden in einem Ultraschallbad mittels

Acetonitril extrahiert und anschließend filtriert und im Chromatographen analysiert. Die Nachweisgrenzen, -bereiche sowie eventuell auftretenden Störungen sind abhängig von dem zu untersuchenden Stoff. [22]

**EPA METHOD 8095** – Analyse von Sprengstoffen mittels Gaschromatographie (17 Verbindungen). Die zu analysierenden Proben werden entweder mittels Festphasenextraktion für Wasser (Methode 3535) oder der Ultraschall-Extraktion für Boden- und Sedimentproben (Methode 8330) extrahiert. Die Proben-Extrakte werden in den GC injiziert, und die Analyten nach der Trennung auf der GC-Kapillarsäule mit einem Elektroneneinfangdetektor (ECD) detektiert [23].

**EPA METHOD 8270C** – Analyse mittelflüchtiger organischer Verbindungen durch Gaschromatographie/ Massenspektrometrie (GC/ MS). Die Stoffliste der Methode 8270 ist für Nitroaromaten nicht vollständig: Nitrosamine, aromatische Nitroverbindungen und Phenole, einschließlich **Nitrophenole**; mittelflüchtige Verbindungen: 1,2-Dinitrobenzol; 1,3-Dinitrobenzol; 1,4-Dinitrobenzol; Diphenylamin; 2,4-Dinitrophenol; 2,4-Dinitrotoluol, 2,6-Dinitrotoluol; Dinitrobenzol; 4-Nitrobiphenyl; 2-Nitrophenol, 4-Nitrophenol; 1,3,5-Trinitrobenzol. Die Aufbereitung der Proben für die Analyse mittels Gaschromatographie/ Massenspektrometrie (GC/ MS) erfolgt unter der Verwendung der entsprechenden Probenvorbereitungsmethode (siehe Methode 3500) [24].

**EPA METHOD 4050** – Analyse von TNT Sprengstoff im Boden mittels IMMUNOASSAYS. Die Methode 4050 ist ein Verfahren zum Screening von Bodenproben, welche eine Konzentration von über 0,5 mg/kg Trinitrotoluol aufweisen. Die Methode 4050 ermittelt einen Schätzwert für die Konzentration von TNT durch den Vergleich mit einem Referenzwert [25].

### 5.3 Aufklärung der Stoffpalette eines kontaminierten Standortes

Um möglichst vollständig die vorhandenen Schadstoffe in den Proben eines kontaminierten Standortes analytisch zu erfassen, bietet sich die Durchführung eines Screenings an. Die analytischen Werkzeuge der Target- und non-Target-Analytik erlauben eine ziemlich umfassende Ermittlung der Schadstoffe in den Proben.

Zur Target-Analytik gehören alle oben erwähnten Verfahren (HPLC, GC). Ein Screening im Rahmen der Target-Analytik umfasst die Identifizierung der Stoffe durch den Vergleich chromatographischer (Retentionszeit) und spektrometrischer (UV-, MS-Spektren) Daten der Probe mit den Daten der Referenzsubstanzen und ist somit durch die Anzahl der im jeweiligen Labor validierten Verbindungen begrenzt.

Für ein Target-Screening spielt die Erfahrung des beauftragten Labors eine wichtige Rolle. Das notwendige Know-How des analysierenden Labors muss an dieser Stelle als sehr groß eingeschätzt werden. Daher sollte in der Screening-Anfrage die Liste der im Labor validierten Verbindungen mit den dazu gehörigen Bestimmungsgrenzen angefordert werden. Anhand der Daten kann die Entscheidung zur Labor-Beauftragung getroffen werden. Es ist auch empfehlenswert bei unbekanntem Stoffpaletten zwei Labore mit den unterschiedlichen Verfahren (HPLC bzw. GC) zu beauftragen. Dabei können die Vorteile der beiden Verfahren genutzt und ein vollständigeres Bild für das Kontaminationsspektrum zusammengestellt werden.

Die Ergebnisse der Screenings sollen der Relevanz- und Plausibilitätsprüfung auf Basis der Informationen zu Vornutzung des Standortes unterzogen werden.

Weiterhin kann eine zweckmäßige Abgrenzung des Untersuchungsbedarfes und Auswahl der geeigneten analytischen Verfahren stattfinden.

Die Non-Target-Analytik beschäftigt sich mit der Strukturaufklärung unbekannter Komponenten unter dem Einsatz der Kopplungstechniken HPLC-MS und HPLC-NMR [2]. Jedoch wird die Bestätigung der Identität ermittelter Verbindungen durch Referenzstoffe unvermeidlich. Die Identifizierung der bekannten STV mit diesen Verfahren ist wegen höherer Analysenkosten nicht sinnvoll und die Identifizierung

von unbekanntem Verbindungen ist schwer realisierbar und teuer, da die dafür notwendigen Referenzstoffe meistens nur durch individuelle Synthese erhältlich sind.



- [1] Arbeitshilfe „Grundwasserkontamination mit sprengstofftypischen Verbindungen im Land Brandenburg“, Fachinformation des LUGV Altlastenbearbeitung im Land Brandenburg Nr. 20, 2012
- [2] Joos, A., Knackmus, H. J. & Spyra, W. (2008). Leitfaden - Natürliche Schadstoffminderung bei sprengstofftypischen Verbindungen. BMBF-Förderschwerpunkt KORA, Themenverbund 5 Rüstungsaltslasten. IABG mbH (Hrsg), Berlin
- [3] Tränckner, Simone (2004): Laborative Untersuchung natürlicher Selbstreinigungsprozesse sprengstofftypischer Verbindungen im Grundwasserleiter und deren Quantifizierung. Diss. TU Dresden 17.06.2003; DGFZ Proceedings Heft 23; ISSN: 1430-0176
- [4] Tränckner S., L. Schmalz (2004): Laborgestützte Prognose von „natural attenuation“ Prozessen am Beispiel einer Rüstungsaltslast. Terra Tech/ wlb 3-4 2004, TT21-TT24
- [5] Tempel, Lydia (2006): Transformation sprengstofftypischer Verbindungen in einer nativen Matrix durch Einwirkung von Sonnenlicht. Master thesis TU Dresden, 2006
- [6] Dissertation Anne Weber (2008): „Randbedingungen für Sorption und Abbau sprengstofftypischer Verbindungen am Beispiel der Rüstungsaltslast Elsnig/Torgau“, Proceeding des DGFZ e.V., ISSN 1430-0176, Heft 33
- [7] Weber A., Tränckner S. (2008): Rüstungsaltslast Elsnig bei Torgau – Ermittlung standortspezifischer Randbedingungen für den Abbau sprengstofftypischer Verbindungen im Grundwasserleiter. TerraTech, 1-2, S. 22-24.
- [8] Weber, A., Tränckner, S. (2010): Boundary conditions for explosives degradation in a qua-ternary aquifer. Proc. 7th International Groundwater Quality Conference held in Zurich, Switzerland, 13–18 June 2010, IAHS Publ. 342, S. 263-266.
- [9] Meßling, A., Lieser, U.; Weingran, C., Weis, M., Tränckner, S. (2012): Quellensanierung von Nitroaromaten-In-situ Testsanierung mit Alkohol. Altlastenspektrum 2/2012
- [10] „Entwicklung und Applikation innovativer Grundwasserschutz- und Grundwasserbehandlungsmaßnahmen“, Proceeding des DGFZ e.V., ISSN 1430-0176, Heft 49, 2013
- [11] Schrift des Bayrischen Landesamtes für Umwelt „Arbeitshilfen für die Untersuchung von Sprengplätzen“ (2009)
- [12] „Bewertungshilfen bei der Gefahrenverdachtsermittlung in der Altlastenbearbeitung“, Freistaat Sachsen, LfULG (2008)
- [13] DIN EN ISO 22478:2006 Wasserbeschaffenheit - Bestimmung ausgewählter Explosivstoffe und verwandter Verbindungen - Verfahren mittels Hochleistungs-Flüssigkeitschromatographie (HPLC) mit UV-Detektion (ISO 22478:2006
- [14] DIN 38407-17:1999-02 Deutsches Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung - Gemeinsam erfassbare Stoffgruppen (Gruppe F) - Teil 17: Bestimmung ausgewählter nitroaromatischer Verbindungen mittels Gaschromatographie (F 17)
- [15] KORA (2008) Handlungsempfehlungen mit Methodensammlung. Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten. Bewertung und Anwendung.
- [16] Schmalz, L. ; Tränckner, S. (2004): Flüssigchromatographische Bestimmung von polaren nitroaromatischen Verbindungen im Grundwasser von Rüstungsaltslasten, VOM WASSER; 102, 4; 7-15
- [17] DIN ISO 11916-1: 2011 Bodenbeschaffenheit - Bestimmung von ausgewählten Explosivstoffen - Teil 1: Verfahren mittels Hochleistungs-Flüssigkeitschromatographie (HPLC) und UV-Detektion (Ausgabe 2011-03);
- [18] DIN ISO 11916-2: 2011 Bodenbeschaffenheit - Bestimmung von ausgewählten Explosivstoffen - Teil 2: Verfahren mittels Gaschromatographie (GC) und Elektronen-Einfang-Detektion (ECD) oder massenspektrometrischer Detektion (MS) (Norm-Entwurf) (Ausgabe 2011-03)
- [19] Meiler, H., Plagemann, R., Saring, U., Uhlig, S. (2003): Überprüfung von Methoden des Anhanges 1 der Bundesbodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV) zur Beurteilung der Bodenqualität. Serie: Texte - Umweltbundesamt; 37/03
- [20] Schmalz, L. , Weber, A., Tränckner, S. (2010): Determination of polar nitroaromatic compounds in soils and the impact of the soil properties on the extraction results. Anal Chim Acta 678(2), S. 189-194

- [21] METHOD 8330A, NITROAROMATICS AND NITRAMINES BY HIGH PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPHY (HPLC), 2007
- [22] METHOD 8330B, NITROAROMATICS, NITRAMINES, AND NITRATE ESTERS BY HIGH PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPHY (HPLC), 2006
- [23] METHOD 8095, EXPLOSIVES BY GAS CHROMATOGRAPHY, 2007
- [24] EPA 8270C, SEMIVOLATILE ORGANIC COMPOUNDS BY GAS CHROMATOGRAPHY/MASS SPECTROMETRY (GC/MS), 1996
- [25] EPA 4050, TNT Explosives in Soil by Immunoassay, 1996
- [26] Steinbach, K.; Hellmann, B. (2008): "Nutzung von Selbstreinigungspotenzialen in TNT belasteten Oberböden am Standortbeispiel Clausthal Zellerfeld" KORA TV 5.1. ; Philipps Univ. Marburg
- [27] HIM, HMULV (2013): "Boden gut gemacht" (2013) - Die Sanierung der ehemaligen Sprengstofffabrik Hesisch Lichtenau

## Anlagenverzeichnis

Anlage 1 Vorläufige Datenblätter zu STV-Verbindungen.....	25
Anlage 2 Liste der uSTV und deren Validierung in den analytischen Normverfahren .....	85

# **Anlage 1**

## **Stoffdaten**

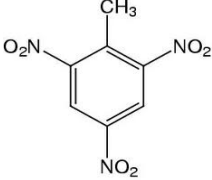
### **Vorläufige Datenblätter zu STV-Verbindungen**

(Eigene Zusammenstellung der GFI GmbH Dresden auf Basis der Datenbank  
<http://esc.syrres.com.interkow/>)

## Nitrotoluole


### 2,4,6-Trinitrotoluol

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>
CAS	000118-96-7
Strukturformel	
Synonym	Trinitrotoluol, 2,4,6-Trinitrotoluol, TNT, 2,4,6-rinitrotoluene, Trinitrotoluene, 2,4,6-Trinitrotoluen, Trinitrotoluen, Trinitrotoluol, Benzene, 2-methyl-1,3,5-trinitro- 2-Methyl-1,3,5-trinitrobenzol
Löslichkeit in Wasser	115 mg/L (23°C)
Molare Masse	227,13 g/mol
Dichte	1,65 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	240 °C
Schmelzpunkt	80,1 °C
Dampfdruck	8,02E-006 mm Hg
Flammpunkt	2 °C
LD50 Ratte (oral)	607 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	1-4,2 mg/l

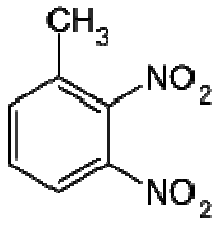
#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H201:</b> Explosiv, Gefahr der Massenexplosion. <b>H331:</b> Giftig bei Einatmen. <b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt. <b>H301:</b> Giftig bei Verschlucken. <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen (alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht). <b>H411:</b> Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
Sicherheitshinweise	<b>P210:</b> Von Hitze/Funken/offener Flamme/heißen Oberflächen fernhalten. Nicht rauchen. <b>P230:</b> Feucht halten mit ... <b>P240:</b> Behälter und zu befüllende Anlage erden. <b>P250:</b> Nicht schleifen/stoßen/.../reiben. <b>P260:</b> Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol nicht einatmen. <b>P261:</b> Einatmen von Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol vermeiden. <b>P264:</b> Nach Gebrauch ... gründlich waschen.

	<p><b>P270:</b> Bei Gebrauch nicht essen, trinken oder rauchen.</p> <p><b>P271:</b> Nur im Freien oder in gut belüfteten Räumen verwenden.</p> <p><b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.</p> <p><b>P280:</b> Schutzhandschuhe/Schutzkleidung/Augenschutz/Gesichtsschutz tragen.</p> <p><b>P301+P310:</b> BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.</p> <p><b>P302+P352:</b> BEI KONTAKT MIT DER HAUT: Mit viel Wasser und Seife waschen.</p> <p><b>P304+P340:</b> BEI EINATMEN: An die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, die das Atmen erleichtert.</p> <p><b>P311:</b> GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.</p> <p><b>P312:</b> Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.</p> <p><b>P314:</b> Bei Unwohlsein ärztlichen Rat einholen/ärztliche Hilfe hinzuziehen.</p> <p><b>P321:</b> Besondere Behandlung (siehe ... auf diesem Kennzeichnungsetikett).</p> <p><b>P322:</b> Gezielte Maßnahmen (siehe ... auf diesem Kennzeichnungsetikett).</p> <p><b>P330:</b> Mund ausspülen.</p> <p><b>P361:</b> Alle kontaminierten Kleidungsstücke sofort ausziehen.</p> <p><b>P363:</b> Kontaminierte Kleidung vor erneutem Tragen waschen.</p> <p><b>P370+P380:</b> Bei Brand: Umgebung räumen.</p> <p><b>P372:</b> Explosionsgefahr bei Brand.</p> <p><b>P373:</b> KEINE Brandbekämpfung, wenn das Feuer explosive Stoffe/Gemische/Erzeugnisse erreicht.</p> <p><b>P391:</b> Verschüttete Mengen aufnehmen.</p> <p><b>P403+P233:</b> Behälter dicht verschlossen an einem gut belüfteten Ort aufbewahren.</p> <p><b>P405:</b> Unter Verschluss aufbewahren.</p> <p><b>P501:</b> Inhalt/Behälter sind in Abhängigkeit der nationalen und internationalen Regularien zuführen.</p>
R-Satz	R40-2-23/24/25-33-51/53
S-Satz	S1/2-35-45-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 3: stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	kanzerogen, giftig, umweltgefährlich, explosiv
Gefahrensymbole	

## 2,3-Dinitrotoluol


### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
CAS	000602-01-7
Strukturformel	
Synonym	1-Methyl-2,3-dinitrobenzol, 2,3-DNT
Löslichkeit in Wasser	220 mg/L (20°C)
Molare Masse	182.1 g/mol
Dichte	1.3 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	250 - 300 °C
Schmelzpunkt	63 °C
Dampfdruck	0.000397 mm Hg (25°C)
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	911 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 0,33 mg/l Maximalwert: 2,3 mg/l

k.A. – keine Angabe

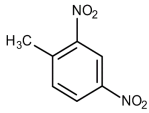
### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H350:</b> Kann Krebs erzeugen (Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H341:</b> Kann vermutlich genetische Defekte verursachen (Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H361:</b> Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.</p> <p><b>H301:</b> Giftig bei Einatmen.</p> <p><b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt.</p> <p><b>H331:</b> Giftig bei Einatmen.</p> <p><b>H373:</b> Kann die Organe schädigen (alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H410:</b> Sehr giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung.</p>
Sicherheitshinweise	<p><b>P201:</b> Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen.</p> <p><b>P261:</b> Einatmen von Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol vermeiden.</p> <p><b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.</p> <p><b>P280:</b> Schutzhandschuhe/Schutzkleidung tragen.</p>

	<b>P301+P310:</b> BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen. <b>P311:</b> GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
R-Satz	23/24/25-33
S-Satz	(1/2-)28-37-45
Wassergefährdungsklasse	k.A.
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, gesundheitsschädlich, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	

## 2,4-Dinitrotoluol


### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
CAS	000121-14-2
Strukturformel	
Synonym	1-Methyl-2,4-dinitrobenzol
Löslichkeit in Wasser	0.3 g/l (20 °C)
Molare Masse	182.14 g/mol
Dichte	1.52 g/cm <sup>3</sup> (20 °C)
Siedepunkt	300 °C (Zersetzung)
Dampfdruck	0.0001 hPa (20 °C)
Flammpunkt	155 °C
LD50 Ratte (oral)	268 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 6,3 mg/l Maximalwert: 32,8 mg/l

k.A. – keine Angabe

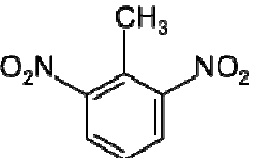
### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H301 + H311 + H331:</b> Giftig bei Verschlucken, Hautkontakt oder Einatmen <b>H341:</b> Kann vermutlich genetische Defekte verursachen. <b>H350:</b> Kann Krebs erzeugen. <b>H361f:</b> Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen. <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition. <b>H410:</b> Sehr giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung.
Sicherheitshinweise	<b>P201:</b> Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen. <b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden. <b>P280:</b> Schutzhandschuhe/ Schutzkleidung/ Augenschutz/ Gesichtsschutz tragen. <b>P302 + P352:</b> BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT: Mit

	<p>viel Wasser und Seife waschen.</p> <p><b>P304 + P340:</b> BEI EINATMEN: An die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, in der sie leicht atmet.</p> <p><b>P308 + P310:</b> BEI Exposition oder falls betroffen: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.</p>
R-Satz	R 45-23/24/25-48/22-68-50/53-62
S-Satz	S 53-45-60-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	krebserzeugend, giftig, erbgutverändernd, umweltgefährlich, fortpflanzungsgefährdend
Gefahrensymbole	

## 2,6 Dinitrotoluol


### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_7H_6N_2O_4$
CAS	000606-20-2
Strukturformel	
Synonym	1-Methyl-2,4-dinitrobenzol, 2,6-Binitrotoluol
Löslichkeit in Wasser	182 mg/l 20°C
Molare Masse	182.14 g/mol
Dichte	1,2833 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	300°C
Schmelzpunkt	60,5 °C
Dampfdruck	1,49 x 10 <sup>-4</sup> Pa (20 °C)
Flammpunkt	c.c. 207 °C
LD50 Ratte (oral)	177-795 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	19-50 mg/l

### Sicherheitshinweise

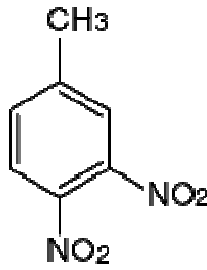
Gefahrenhinweise	<p><b>H301:</b> Giftig bei Verschlucken.</p> <p><b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt.</p> <p><b>H330:</b> Lebensgefahr bei Einatmen.</p> <p><b>H341:</b> Kann vermutlich genetische Defekte verursachen (Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H350:</b> Kann Krebs erzeugen (Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H361f:</b> Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.</p>
------------------	--



	<p><b>H372:</b> Schädigt die Organe (alle betroffenen Organe nennen) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H412:</b> Schädlich für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.</p>
Sicherheitshinweise	<p><b>P260:</b> Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol nicht einatmen.</p> <p><b>P301+310:</b> Bei Verschlucken: Sofort Giftinformationszentrum oder Arzt anrufen.</p> <p><b>P320:</b> Besondere Behandlung dringend erforderlich (siehe auf diesem Kennzeichnungsetikett).</p> <p><b>P361:</b> Alle kontaminierten Kleidungsstücke sofort ausziehen.</p> <p><b>P405:</b> Unter Verschluss aufbewahren.</p> <p><b>P501:</b> Inhalt / Behälter ... zuführen. <a href="http://de.wikipedia.org/wiki/2,6-Dinitrotoluol_-_cite_note-GESTIS-1">http://de.wikipedia.org/wiki/2,6-Dinitrotoluol_-_cite_note-GESTIS-1</a></p>
R-Satz	R: 23/24/25-33 /16/; S: 28-37-44 /16/
S-Satz	S: <a href="#">53-45-60-61</a>
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, gesundheitsschädlich, umweltgefährlich, kanzerogen
Gefahrensymbole	

### 3,4-Dinitrotoluol


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_7H_6N_2O_4$
CAS	000610-39-9
Strukturformel	
Synonym	3,4-Dinitrotoluen, 3,4-DNT; 1-Methyl-3,4-dinitrobenzol; 3,4-Binitrotoluol
Löslichkeit in Wasser	Schwer löslich
Molare Masse	182,14 g/mol
Dichte	1,259 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	250 - 300 °C
Schmelzpunkt	58,3 °C
Dampfdruck	k.A.

Flammpunkt	>110 °C
LD50 Ratte (oral)	807 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	1,5 mg/l

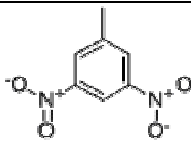
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H350:</b> Kann Krebs erzeugen (Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H341:</b> Kann vermutlich genetische Defekte verursachen (Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H361:</b> Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.</p> <p><b>H301:</b> Giftig bei Verschlucken.</p> <p><b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt.</p> <p><b>H331:</b> Giftig bei Einatmen.</p> <p><b>H373:</b> Kann die Organe schädigen (alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H411:</b> Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.</p>
Sicherheitshinweise	<p><b>P201:</b> Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen.</p> <p><b>P261:</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden.</p> <p><b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.</p> <p><b>P280:</b> Schutzhandschuhe / Schutzkleidung / Augenschutz / Gesichtsschutz tragen.</p> <p><b>P301 + P310:</b> Bei Verschlucken: Sofort Giftinformationszentrum oder Arzt anrufen.</p> <p><b>P311:</b> Giftinformationszentrum oder Arzt anrufen.</p>
R-Satz	R: 23/24/25-33 /16
S-Satz	S: 28-37-44 /16
Wassergefährdungsklasse	3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, umweltgefährlich, gesundheitsschädlich
Gefahrensymbole	


### 3,5-Dinitrotoluol

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
CAS	618-85-9
Strukturformel	
Synonym	3,5-DNT, 1-Methyl-3,5-dinitrobenzene
Löslichkeit in Wasser	145 mg/l (25°C)
Molare Masse	182,14 g/mol
Dichte	1,2772 g/cm <sup>3</sup> (111 °C)
Siedepunkt	307.5 °C bei 760 mmHg 360 °C (Zersetzungstemperatur)
Schmelzpunkt	93 °C
Dampfdruck	0.00131 mmHg bei 25°C
Flammpunkt	153°C
LD50 Ratte (oral)	216 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 22 mg/l Maximalwert: 22,6 mg/l

#### Sicherheitshinweise

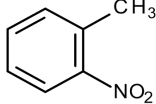
Gefahrenhinweise	<p><b>H350:</b> Kann Krebs erzeugen (Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H341:</b> Kann vermutlich genetische Defekte verursachen (Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H361f:</b> Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.</p> <p><b>H331:</b> Giftig bei Einatmen.</p> <p><b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt.</p> <p><b>H301:</b> Giftig bei Verschlucken.</p> <p><b>H373:</b> Kann die Organe schädigen (alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H412:</b> Schädlich für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.</p>
Sicherheitshinweise	k.A.
R-Satz	45-23/24/25-48/22-62-68-52/53
S-Satz	53-45-61

Wassergefährdungsklasse	3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, gesundheitsschädlich
Gefahrensymbole	


k.A. keine Angaben

## 2-Nitrotoluol

### Chemische und physikalische Daten

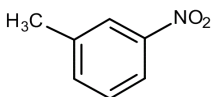
Summenformel	$C_7H_7NO_2$
CAS	000088-72-2
Strukturformel	
Synonym	o-Nitrotoluol
Löslichkeit in Wasser	0,65 g/l (20 °C) (experimentell)
Molare Masse	137,14 g/mol
Dichte	1,16 g/cm <sup>3</sup> (20 °C)
Siedepunkt	225°C
Dampfdruck	0,188 mm Hg (25°C)
Flammpunkt	106 °C
LD50 Ratte (oral)	891 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	19-50 mg/l

### Sicherheitshinweise


Gefahrenhinweise	<b>H350:</b> Kann Krebs erzeugen. <b>H340:</b> Kann genetische Defekte verursachen. <b>H361f:</b> Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen. <b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. <b>H411:</b> Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
Sicherheitshinweise	<b>P201:</b> Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen. <b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden. <b>P308 + P313:</b> Bei Exposition oder falls betroffen: Ärztlichen Rat einholen/ ärztliche Hilfe hinzuziehen.
R-Satz	R 45-46-22-51/53-62.
S-Satz	S 53-45-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	krebserzeugend, erbgutverändernd, gesundheitsschädlich, umweltgefährlich, fortpflanzungsgefährdend
Gefahrensymbole	

### 3-Nitrotoluol

#### Chemische und physikalische Daten

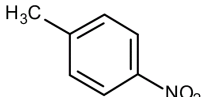
Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>
CAS	000099-08-1
Strukturformel	
Synonym	m-Nitrotoluol
Löslichkeit in Wasser	0.419 g/l (20 °C)
Molare Masse	137.14 g/mol
Dichte	1.16 g/cm <sup>3</sup> (20 °C)
Siedepunkt	231 - 232 °C (1013 hPa)
Dampfdruck	0.2 hPa (20 °C)
Flammpunkt	98 °C
LD50 Ratte (oral)	1070 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 30 mg/l Maximalwert: 33,1 mg/l

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition. <b>H411:</b> Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
Sicherheitshinweise	<b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden. <b>P315:</b> Sofort ärztlichen Rat einholen/ ärztliche Hilfe hinzuziehen.
R-Satz	R 22-33-51/53
S-Satz	S 28-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	gesundheitsschädlich, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	


### 4-Nitrotoluol

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>
CAS	000099-99-0
Strukturformel	
Synonym	p-Nitrotoluene
Löslichkeit in Wasser	0.26 g/l (20 °C)
Molare Masse	137.14 g/mol

Dichte	1.39 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	238 - 239 °C (1013 hPa)
Dampfdruck	0.4 hPa (20 °C)
Flammpunkt	106 °C
LD50 Ratte (oral)	1960 mg/kg.
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 49,7 mg/l Maximalwert: 49,9 mg/l

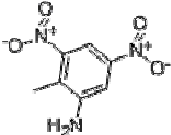
#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H301 + H311 + H331:</b> Giftig bei Verschlucken, Hautkontakt oder Einatmen <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition. <b>H411:</b> Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
Sicherheitshinweise	<b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden. <b>P280:</b> Schutzhandschuhe/ Schutzkleidung tragen. <b>P302 + P352:</b> BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT: Mit viel Wasser und Seife waschen. <b>P304 + P340:</b> BEI EINATMEN: An die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, in der sie leicht atmet. <b>P308 + P310:</b> BEI Exposition oder falls betroffen: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
R-Satz	R 23/24/25-33-51/53
S-Satz	S 28-37-45-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	

### Aminonitrotoluole

#### 2-Amino-4,6-dinitrotoluol


##### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>
CAS	035572-78-2
Strukturformel	
Synonym	2,4-Dinitro-6-aminotoluol /29/; 4,6-Dinitro-2-aminotoluol /29/; Dinitromethylanilin /29/; Dinitroaminotoluol /29/
Löslichkeit in Wasser	k.A.

Molare Masse	197,08 g/mol
Dichte	1.497g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	405.7°C at 760mmHg
Dampfdruck	k.A.
Flammpunkt	199.2°C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	5-15 mg/l

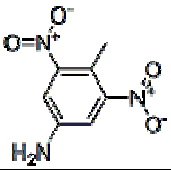
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H301 + H311 + H331:</b> Giftig bei Verschlucken, Hautkontakt oder Einatmen.</p> <p><b>H373:</b> Kann die Organe schädigen (alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H411:</b> Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.</p>
Sicherheitshinweise	<p><b>P261:</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden.</p> <p><b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.</p> <p><b>P280:</b> Schutzhandschuhe / Schutzkleidung / Augenschutz / Gesichtsschutz tragen.</p> <p><b>P301 + P310:</b> Bei Verschlucken: Sofort Giftinformationszentrum oder Arzt anrufen.</p> <p><b>P311:</b> Giftinformationszentrum oder Arzt anrufen.</p>
R-Satz	11-23/24/25-36/37/38
S-Satz	16-27-45
Wassergefährdungsklasse	k.A.
Gefährlichkeitsmerkmal	Reizend, giftig, entzündlich
Gefahrensymbole	

### 4-Amino-2,6-dinitrotoluol


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>
CAS	19406-51-0
Strukturformel	
Synonym	2,6-Dinitro-4-aminotoluol /29/; Dinitromethylanilin /29/; Dinitroaminotoluol /29/, 4-Methyl-3,5-dinitroaniline
Löslichkeit in Wasser	1220 mg/L (25°C)

Molare Masse	197,08 g/mol
Dichte	k.A.
Siedepunkt	k.A.
Schmelzpunkt	170-172°C
Dampfdruck	1.07E-005 mm Hg (25°C)
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	6,9-10 mg/l

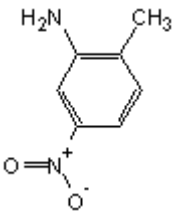
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. <b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Sicherheitshinweise	<b>P261:</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden. <b>P305 + P351 + P338:</b> Bei Kontakt mit den Augen: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	<b>11-20/21/22-36</b>
S-Satz	<b>16-26-36/37</b>
Wassergefährdungsklasse	2 wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend, entzündlich
Gefahrensymbole	

### 2-Amino-4-nitrotoluol

#### Chemische und physikalische Daten


Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
CAS	000099-55-8
Strukturformel	
Synonym	5-NITRO-O-TOLUIDINE, 99-55-8, C16398
Löslichkeit in Wasser	1 g/100 mL (19°C)
Molare Masse	152.1527 g/mol
Dichte	1.365 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	> 130 °C (Zersetzungstemperatur)
Schmelzpunkt	105,5 °C
Dampfdruck	9.8*10 <sup>-4</sup> mm Hg (25°C)



Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 68,8 mg/l Maximalwert: 71,3 mg/l

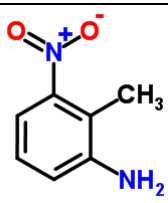
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H301:</b> Giftig bei Verschlucken. <b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt. <b>H331:</b> Giftig bei Einatmen. <b>H351:</b> Kann vermutlich Krebs erzeugen (Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht). <b>H412:</b> Schädlich für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
Sicherheitshinweise	<b>P261:</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden. <b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden. <b>P280:</b> Schutzhandschuhe / Schutzkleidung / Augenschutz / Gesichtsschutz tragen. <b>P301 + P310:</b> Bei Verschlucken: Sofort Giftinformationszentrum oder Arzt anrufen.
R-Satz	<b>23/24/25-40-52/53</b>
S-Satz	<b>36/37-45-61</b>
Wassergefährdungsklasse	3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, gesundheitsschädlich
Gefahrensymbole	

### 2-Amino-6-nitrotoluol


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
CAs	000603-83-8
Strukturformel	
Synonym	3-Nitro-o-toluidine, <b>2-Methyl-3-nitroanilin</b>
Löslichkeit in Wasser	697 mg/L (25°C)
Molare Masse	152.1527 g/mol
Dichte	1.378 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	305°C
Schmelzpunkt	92°C
Dampfdruck	0.000337 mm Hg (25°C)

Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

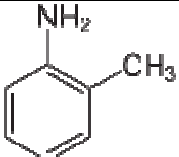
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H301:</b> Giftig bei Verschlucken.  <b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt.  <b>H331:</b> Giftig bei Einatmen.  <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen (alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).  <b>H411:</b> Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.</p>
Sicherheitshinweise	<p><b>P280:</b> Schutzhandschuhe / Schutzkleidung / Augenschutz / Gesichtsschutz tragen.  <b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.  <b>P309:</b> Bei Exposition oder Unwohlsein:  <b>P310:</b> Sofort Giftinformationszentrum oder Arzt anrufen.  <b>P302+P352:</b> Bei Kontakt mit der Haut: Mit viel Wasser und Seife waschen.</p>
R-Satz	R 23/24/25-33-51/53
S-Satz	S 28-36/37-45-61
Wassergefährdungsklasse	3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, gesundheitsschädlich, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	

## 2-Methylanilin


### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N
CAS	000095-53-4
Strukturformel	
Synonym	<i>o</i> -Toluidin, 1,2-Methylanilin, 1,2-Aminotoluol, <i>o</i> -Tolylamin
Löslichkeit in Wasser	15 g/L (20 °C)
Molare Masse	107,16 g/mol
Dichte	0,9984 g/cm <sup>3</sup> (20°C)
Siedepunkt	200 °C (1013 hPa)
Schmelzpunkt	-16 °C
Dampfdruck	0.18 hPa (20 °C)
Flammpunkt	85 °C

LD50 Ratte (oral)	670 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

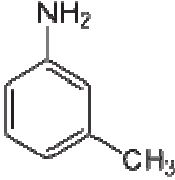
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H301 + H331:</b> Giftig bei Verschlucken oder Einatmen  <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung.  <b>H350:</b> Kann Krebs erzeugen.  <b>H400:</b> Sehr giftig für Wasserorganismen.  <a href="http://de.wikipedia.org/wiki/Toluidine">http://de.wikipedia.org/wiki/Toluidine</a> - cite_note-GESTIS_o-1</p>
Sicherheitshinweise	<p><b>P201:</b> Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen.  <b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.  <b>P304 + P340:</b> BEI EINATMEN: An die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, in der sie leicht atmet.  <b>P305 + P351 + P338:</b> BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen  <b>P308 + P310:</b> BEI Exposition oder falls betroffen: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.</p>
R-Satz	R 45-23/25-36-50
S-Satz	S 53-45-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	krebserzeugend, giftig, reizend, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	

### 3-Methylanilin


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N
CAS	000108-44-1
Strukturformel	
Synonym	<i>m</i> -Toluidin, 1,3-Methylanilin, 1,3-Aminotoluol, <i>m</i> -Tolylamin
Löslichkeit in Wasser	10 g/L (20 °C) <a href="http://de.wikipedia.org/wiki/Toluidine">http://de.wikipedia.org/wiki/Toluidine</a> - cite_note-GESTIS_m-2
Molare Masse	107,16 g/mol
Dichte	0,989 g/cm <sup>3</sup> (20°C)
Siedepunkt	203 °C (1013 hPa)

Schmelzpunkt	-31 °C
Dampfdruck	0.3 hPa (20 °C)
Flammpunkt	86 °C
LD50 Ratte (oral)	450 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.


(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H301 + H311 + H331:</b> Giftig bei Verschlucken, Hautkontakt oder Einatmen</p> <p><b>H373:</b> Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition.</p> <p><b>H400:</b> Sehr giftig für Wasserorganismen.</p>
Sicherheitshinweise	<p><b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.</p> <p><b>P280:</b> Schutzhandschuhe/ Schutzkleidung tragen.</p> <p><b>P302 + P352:</b> BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT: Mit viel Wasser und Seife waschen.</p> <p><b>P304 + P340:</b> BEI EINATMEN: An die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, in der sie leicht atmet.</p> <p><b>P308 + P310:</b> BEI Exposition oder falls betroffen: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.</p>
R-Satz	R 23/24/25-33-50
S-Satz	S 36/37-45-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	

### 4-Methylanilin

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N
CAS	000106-49-0
Strukturformel	
Synonym	4-Aminotoluol, <i>p</i> -Toluidin, 1,4-Methylanilin, 1,4-minotoluol, <i>p</i> -Tolylamin
Löslichkeit in Wasser	7,5 g/L (20 °C)
Molare Masse	107,16 g/mol
Dichte	0,9619 g/cm <sup>-3</sup>
Siedepunkt	200 °C

Schmelzpunkt	45 °C <a href="http://de.wikipedia.org/wiki/Toluidine_-_cite_note-GESTIS_p-3">http://de.wikipedia.org/wiki/Toluidine_-_cite_note-GESTIS_p-3</a>
Dampfdruck	1.3 hPa (50 °C)
Flammpunkt	87 °C
LD50 Ratte (oral)	336 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 149 mg/l Maximalwert: 171 mg/l

#### Sicherheitshinweise

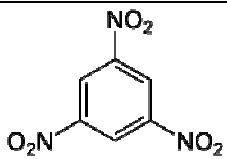
Gefahrenhinweise	<p><b>H301 + H311 + H331:</b> Giftig bei Verschlucken, Hautkontakt oder Einatmen</p> <p><b>H317:</b> Kann allergische Hautreaktionen verursachen.</p> <p><b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung.</p> <p><b>H351:</b> Kann vermutlich Krebs erzeugen.</p> <p><b>H400:</b> Sehr giftig für Wasserorganismen.</p>
Sicherheitshinweise	<p><b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.</p> <p><b>P280:</b> Schutzhandschuhe tragen.</p> <p><b>P302 + P352:</b> BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT: Mit viel Wasser und Seife waschen.</p> <p><b>P304 + P340:</b> BEI EINATMEN: An die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, in der sie leicht atmet.</p> <p><b>P305 + P351 + P338:</b> BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.</p> <p><b>P308 + P310:</b> BEI Exposition oder falls betroffen: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.</p>
R-Satz	R 23/24/25-36-40-43-50
S-Satz	S 28-36/37-45-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, reizend, krebserzeugend, sensibilisierend, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	

## Nitrobenzole


### 1,3,5-Trinitrobenzol

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>
CAS	000099-35-4

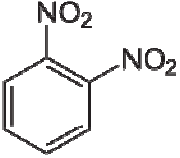
Strukturformel	
Synonym	Trinitrobenzol, TNB, Trinitrobenzen, <i>sym</i> -Trinitrobenzol, Benzit, RC, RA
Löslichkeit in Wasser	330 mg/L bei 20 °C
Molare Masse	213,11 g/mol
Dichte	1,76 g/cm <sup>3</sup> (20 °C)
Siedepunkt	315 °C
Schmelzpunkt	125,3 °C (Polymorph I)
Dampfdruck	0,063 mbar (50 °C)
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	275 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 0,38 mg/l Maximalwert: 1,1 mg/l

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H201:</b> Explosiv, Gefahr der Massenexplosion.</p> <p><b>H300:</b> Lebensgefahr bei Verschlucken.</p> <p><b>H310:</b> Lebensgefahr bei Hautkontakt.</p> <p><b>H330:</b> Lebensgefahr bei Einatmen.</p> <p><b>H373:</b> Kann die Organe schädigen (alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H410:</b> Sehr giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung.</p>
Sicherheitshinweise	<p><b>P260:</b> Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol nicht einatmen.</p> <p><b>P264:</b> Nach Gebrauch ... gründlich waschen.</p> <p><b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.</p> <p><b>P280:</b> Schutzhandschuhe / Schutzkleidung / Augenschutz / Gesichtsschutz tragen.</p> <p><b>P284:</b> Atemschutz tragen.</p> <p><b>P301+310:</b> Bei Verschlucken: Sofort Giftinformationszentrum oder Arzt anrufen.</p>
R-Satz	R: 3-26/27/28-33-50/53
S-Satz	S: 28-36/37-45-60-61
Wassergefährdungsklasse	3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	explosionsgefährlich, umweltgefährlich, gesundheitsschädlich, giftig
Gefahrensymbole	

## 1,2-Dinitrobenzol

### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
CAS	000528-29-0
Strukturformel	
Synonym	o-Dinitrobenzol,
Löslichkeit in Wasser	unlöslich in Wasser
Molare Masse	168,11 g/mol
Dichte	1,57 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	318 °C
Schmelzpunkt	118 °C
Dampfdruck	0,08 Pa (30 °C) 0,34 Pa (50 °C)
Flammpunkt	150 °C (Angabe bezieht sich auf Messung im geschlossenen Tiegel.)
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	0,6 mg/l

(k.A. – keine Angabe)

### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	H300: Lebensgefahr bei Verschlucken. H310: Lebensgefahr bei Hautkontakt. H330: Lebensgefahr bei Einatmen. H373: Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition. H410: Sehr giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung.
Sicherheitshinweise	P260: Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol nicht einatmen. P264: Nach Gebrauch Hände gründlich waschen. P273: Freisetzung in die Umwelt vermeiden. P280: Schutzhandschuhe/Schutzkleidung tragen. P284: Atemschutz tragen. P301+P310: BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
R-Satz	R: 26/27/28-33-50/53
S-Satz	S: 1/2-28-36/37-45-60-61
Wassergefährdungsklasse	3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, gesundheitsschädlich, umweltgefährlich

Gefahrensymbole	
-----------------	--

### 1,3-Dinitrobenzol

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_6H_4N_2O_4$
CAS	000099-65-0
Strukturformel	
Synonym	m-Dinitrobenzol, 1,3-DNB
Löslichkeit in Wasser	500 mg/L (20 °C)
Molare Masse	168.11 g/mol
Dichte	1.575 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	297 °C
Schmelzpunkt	86 °C
Dampfdruck	4 mbar (50 °C)
Flammpunkt	149 °C
LD50 Ratte (oral)	83 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	5-15 mg/l

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H330:</b> Lebensgefahr bei Einatmen.  <b>H310:</b> Lebensgefahr bei Hautkontakt.  <b>H300:</b> Lebensgefahr bei Verschlucken.  <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition.  <b>H410:</b> Sehr giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung.</p>
Sicherheitshinweise	<p><b>P260:</b> Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol nicht einatmen.  <b>P264:</b> Nach Gebrauch Hände gründlich waschen.  <b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.  <b>P280:</b> Schutzhandschuhe/Schutzkleidung tragen.  <b>P284:</b> Atemschutz tragen.  <b>P301+P310:</b> BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.</p>
R-Satz	26/27/28-33-50/53-40-36/37/38-23/24/25-11
S-Satz	28-36/37-45-60-61-28A-27-16
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, umweltgefährlich, umweltgefährlich



Gefahrensymbole	
-----------------	--

## 1,4-Dinitrobenzol


### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_6H_4N_2O_4$
CAS	000100-25-4
Strukturformel	
Synonym	p-Dinitrobenzol
Löslichkeit in Wasser	sehr schwer löslich in Wasser
Molare Masse	168,11 g/mol
Dichte	1,625 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	299 °C
Schmelzpunkt	174 °C
Dampfdruck	0,07 Pa (30 °C) 0,23 Pa (50 °C)
Flammpunkt	150 °C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 0,603 mg/l Maximalwert: 1,7 mg/l

(k.A. – keine Angabe)

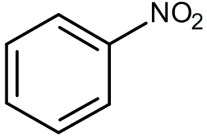
### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H300:</b> Lebensgefahr bei Verschlucken.  <b>H310:</b> Lebensgefahr bei Hautkontakt.  <b>H330:</b> Lebensgefahr bei Einatmen.  <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition.  <b>H410:</b> Sehr giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung.</p>
Sicherheitshinweise	<p><b>P260:</b> Staub/Rauch/Gas/Nebel/Dampf/Aerosol nicht einatmen.  <b>P264:</b> Nach Gebrauch Hände gründlich waschen.  <b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.  <b>P280:</b> Schutzhandschuhe/Schutzkleidung tragen.  <b>P284:</b> Atemschutz tragen.  <b>P301+P310:</b> BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.</p>

R-Satz	26/27/28-33-50/53
S-Satz	28-36/37-45-60-61
Wassergefährdungsklasse	3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, gesundheitsschädlich, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	


## Nitrobenzol

### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>
CAS	000098-95-3
Strukturformel	
Synonym	Mononitrobenzol, Nitrobenzen, Benzalin, Mirbanöl, Mirbanessenz, (falsches Bittermandelöl)
Löslichkeit in Wasser	1.90 g/l (20 °C)
Molare Masse	123.11 g/mol
Dichte	1.20 g/cm <sup>3</sup> (20 °C)
Siedepunkt	211 °C (1013 hPa)
Schmelzpunkt	6.0 °C
Dampfdruck	0.3 hPa (20 °C)
Flammpunkt	88 °C
Explosionsgrenze	1.8 - 40 % (V)
Zündtemperatur	480 °C DIN 51794
LD50 Ratte (oral)	640 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 24,3 mg/l Maximalwert: 135 mg/l

### Sicherheitshinweise

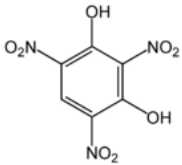
Gefahrenhinweise	<p><b>H351:</b> Kann vermutlich Krebs erzeugen.</p> <p><b>H361f:</b> Kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen.</p> <p><b>H301 + H311 + H331:</b> Giftig bei Verschlucken, Hautkontakt oder Einatmen</p> <p><b>H372:</b> Schädigt die Organe bei längerer oder wiederholter Exposition.</p> <p><b>H411:</b> Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.</p>
Sicherheitshinweise	<p><b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.</p> <p><b>P280:</b> Schutzhandschuhe/ Schutzkleidung/ Augenschutz/ Gesichtsschutz tragen.</p> <p><b>P302 + P352:</b> BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT: Mit viel Wasser und Seife waschen.</p>

	<p><b>P304 + P340:</b> BEI EINATMEN: An die frische Luft bringen und in einer Position ruhigstellen, in der sie leicht atmet.</p> <p><b>P308 + P310:</b> BEI Exposition oder falls betroffen: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.</p>
R-Satz	R 23/24/25-40-48/23/24-51/53-62
S-Satz	S 28-36/37-45-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, krebserzeugend, umweltgefährlich, fortpflanzungsgefährdend
Gefahrensymbole	

## Nitrophenole

### 2,4,6-Trinitroresorcin


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_6H_3N_3O_8$
CAS	000082-71-3
Strukturformel	
Synonym	Styphninsäure, 2,4,6-Trinitro-1,3-dihydroxybenzen, 2,4,6-Trinitro-3-hydroxyphenol, 2,4,6-Trinitroresorcin(ol), Oxy-pikrinsäure
Löslichkeit in Wasser	schlecht
Molare Masse	245,11 g/mol
Dichte	1,83 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	257 °C (Verpuffung)
Schmelzpunkt	175,5 °C
Dampfdruck	k.A.
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 3000 mg/l Maximalwert: 3000 mg/l

(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise


Gefahrenhinweise	<p><b>H201:</b> Explosiv, Gefahr der Massenexplosion.</p> <p><b>H332:</b> Gesundheitsschädlich bei Einatmen.</p> <p><b>H312:</b> Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt.</p> <p><b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken.</p>
Sicherheitshinweise	k.A.

R-Satz	R: 3-4-20/21/22
S-Satz	S: (2)-35-36/37
Wassergefährdungsklasse	k.A.
Gefährlichkeitsmerkmal	Gesundheitsschädlich, explosionsgefährlich
Gefahrensymbole	

(k.A. – keine Angabe)


### 3-Methyl-2,4,6-trinitrophenol

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_7H_5N_3O_7$
CAS	000602-99-3
Strukturformel	
Synonym	2,4,6-Trinitro-m-kresol, Kresylith; Cresylite; Trinitro-meta-cresol; Trinitro-m-cresol; Trinitro-m-cresolic acid; UN 0216
Löslichkeit in Wasser	2,2 g/l bei 20 °C
Molare Masse	243.13 g/mol
Dichte	1,68 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	320.9 °C at 760 mmHg
Schmelzpunkt	107-108 °C
Dampfdruck	2.6E-007 mm Hg (25°C)
Flammpunkt	139.1 °C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

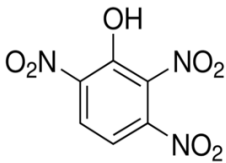
Gefahrenhinweise	k.A.
Vorsichtsmaßnahmen	k.A.
R-Satz	R: 2-4-20/21/22
S-Satz	S: 35
Wassergefährdungsklasse	k.A.
Gefährlichkeitsmerkmal	Brandfördernd, gesundheitsschädlich
Gefahrensymbole	

(k.A. – keine Angabe)

### 2,4,6-Trinitrophenol

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_6H_3N_3O_7$
CAS	000088-89-1

Strukturformel	
Synonym	Pikrinsäure
Löslichkeit in Wasser	14 g·l <sup>-1</sup> (20 °C) <a href="http://de.wikipedia.org/wiki/Pikrins%C3%A4ure_-_cite_note-GESTIS-3">http://de.wikipedia.org/wiki/Pikrins%C3%A4ure_-_cite_note-GESTIS-3</a>
Molare Masse	229,1 g/mol
Dichte	1,76 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	300°C
Schmelzpunkt	119 - 120 °C
Dampfdruck	1 mm Hg (195 °C)
Flammpunkt	150°C
LD50 Ratte (oral)	200 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 110 mg/l Maximalwert: 170 mg/l

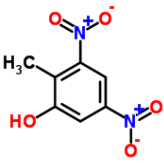
#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H228:</b> Entzündbarer Feststoff. <b>H301:</b> Giftig bei Verschlucken. <b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P210:</b> Von Hitze/Funken/offener Flamme/heißen Oberflächen fernhalten. Nicht rauchen. <b>P280:</b> Schutzhandschuhe/ Schutzkleidung tragen. <b>P301 + P310:</b> BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen. <b>P312:</b> Bei Unwohlsein GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
R-Satz	R 1 – 4 – 11 – 24/25
S-Satz	S 7 – 16 – 35 – 45
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	Brandfördernd, giftig
Gefahrensymbole	

### 2-Methyl-3,5-dinitrophenol

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
CAS	000497-56-3

Strukturformel	
Synonym	3,5-Dinitro-ortho-cresol
Löslichkeit in Wasser	13 mg/L (15°C)
Molare Masse	198.14 g/mol
Dichte	k.A.
Siedepunkt	k.A.
Schmelzpunkt	k.A.
Dampfdruck	5.48E-006 mm Hg (25°C)
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

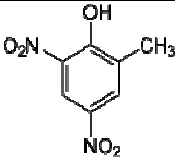
#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	k.A.
Vorsichtsmaßnahmen	k.A.
R-Satz	k.A.
S-Satz	k.A.
Wassergefährdungsklasse	k.A.
Gefährlichkeitsmerkmal	k.A.
Gefahrensymbole	

(k.A. – keine Angabe)


## **2-Methyl-4,6-dinitrophenol**

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
CAS	000534-52-1
Strukturformel	
Synonym	4,6-DINITRO-O-CRESOL, 3,5-Dinitro-2-hydroxytoluene, 4,6-Dinitro-2-methylphenol, DNOC
Löslichkeit in Wasser	198 mg/L (20°C)
Molare Masse	198.14 g/mol
Dichte	1,58 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	378°C
Schmelzpunkt	86.6°C
Dampfdruck	10 hPa (20 °C) <a href="http://de.wikipedia.org/wiki/2-Methyl-4,6-dinitrophenol_-_cite_note-GESTIS-2">http://de.wikipedia.org/wiki/2-Methyl-4,6-dinitrophenol_-_cite_note-GESTIS-2</a>
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	7 mg/kg

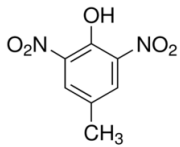
LC50 Fisch (96 Stunden)	1,54 mg/l
(k.A. – keine Angabe)	

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H341:</b> Kann vermutlich genetische Defekte verursachen (Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H330:</b> Lebensgefahr bei Einatmen.</p> <p><b>H310:</b> Lebensgefahr bei Hautkontakt.</p> <p><b>H300:</b> Lebensgefahr bei Verschlucken.</p> <p><b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen.</p> <p><b>H318:</b> Verursacht schwere Augenschäden.</p> <p><b>H317:</b> Kann allergische Hautreaktionen verursachen.</p> <p><b>H410:</b> Sehr giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung.</p>
Vorsichtsmaßnahmen	<p><b>P260:</b> Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol nicht einatmen.</p> <p><b>P264:</b> Nach Gebrauch ... gründlich waschen.</p> <p><b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.</p> <p><b>P280:</b> Schutzhandschuhe / Schutzkleidung / Augenschutz / Gesichtsschutz tragen.</p> <p><b>P284:</b> Atemschutz tragen.</p> <p><b>P301+310:</b> Bei Verschlucken: Sofort Giftinformationszentrum oder Arzt anrufen.</p>
R-Satz	R: 26/27/28-38-41-43-44-50/53-68
S-Satz	S: (1/2)-36/37-45-60-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 (wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	Ätzend, giftig, gesundheitsschädlich, umweltschädlich
Gefahrensymbole	

### 4-Methyl-2,6-dinitrophenol


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_7H_6N_2O_5$
CAS	000609-93-8
Strukturformel	
Synonym	2,6-DINITRO-P-CRESOL; 2,6-Dinitro-4-methylphenol; 3,5-Dinitro-4-hydroxytoluene
Löslichkeit in Wasser	512 mg/L (25°C)
Molare Masse	198.14 g/mol
Dichte	1,58 g·cm <sup>-3</sup>
Siedepunkt	312 °C.

Schmelzpunkt	78°C
Dampfdruck	5.48E-006 mm Hg (25°C)
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	7 mg·kg <sup>-1</sup>
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

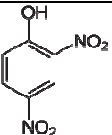
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H300:</b> Lebensgefahr bei Verschlucken. <b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P261:</b> Einatmen von Staub/ Rauch/ Gas/ Nebel/ Dampf/ Aerosol vermeiden. <b>P264:</b> Nach Handhabung Hände gründlich waschen. <b>P301 + P310:</b> BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen. <b>P305 + P351 + P338:</b> BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	R36/37/38 - 25
S-Satz	S26 – 45
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	gifitg
Gefahrensymbole	

## 2,4-Dinitrophenol

### Chemische und physikalische Daten


Summenformel	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
CAS	000051-28-5
Strukturformel	
Synonym	α-Dinitrophenol.
Löslichkeit in Wasser	2790 mg/L (20°C)
Molare Masse	184,11 g/mol
Dichte	1,683 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	k.A.
Schmelzpunkt	110–112 °C
Dampfdruck	0.00039 mm Hg (20°C)
Flammpunkt	k.A.



LD50 Ratte (oral)	30 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	1,76 - 5,9 mg/l

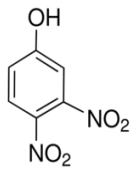
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H301 + H311 + H331:</b> Giftig bei Verschlucken, Hautkontakt oder Einatmen <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition. <b>H400:</b> Sehr giftig für Wasserorganismen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P261:</b> Einatmen von Staub vermeiden. <b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden. <b>P280:</b> Schutzhandschuhe/ Schutzkleidung tragen. <b>P301 + P310:</b> BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen. <b>P311:</b> GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.
R-Satz	R23/24/25 – 33 - 50
S-Satz	S: (1/2)-28-37-45-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	Giftig, reizend, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	

### 3,4-Dinitrophenol


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
CAS	000577-71-9
Strukturformel	
Synonym	k.A.
Löslichkeit in Wasser	6.05E+004 mg/L (82°C)
Molare Masse	184,11 g/mol
Dichte	1,68 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	k.A.
Schmelzpunkt	134°C

Dampfdruck	1.2E-005 mm Hg (25°C)
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

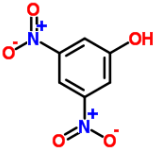
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H301:</b> Giftig bei Verschlucken.  <b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt.  <b>H331:</b> Giftig bei Einatmen.  <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition.  <b>H411:</b> Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.</p>
Vorsichtsmaßnahmen	<p><b>P261:</b> Einatmen von Staub/ Rauch/ Gas/ Nebel/ Dampf/ Aerosol vermeiden.  <b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.  <b>P280:</b> Schutzhandschuhe/ Schutzkleidung tragen.  <b>P301 + P310:</b> BEI VERSCHLUCKEN: Sofort GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.  <b>P311:</b> GIFTINFORMATIONSZENTRUM oder Arzt anrufen.</p>
R-Satz	R23/24/25 – 33 – 51/53
S-Satz	28-37-45-61
Wassergefährdungsklasse	3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	Giftig, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	

### 3,5-Dinitrophenol


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
CAS	000586-11-8
Strukturformel	
Synonym	k.A.
Löslichkeit in Wasser	4000 mg/L (25°C)
Molare Masse	184.11 g/mol
Dichte	1.7±0.1 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	341.1±32.0 °C at 760 mmHg
Schmelzpunkt	125.1°C

Dampfdruck	1.2E-005 mm Hg (25°C)
Flammpunkt	157.2±13.6 °C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

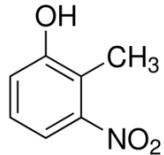
#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H331:</b> Giftig bei Einatmen.  <b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt.  <b>H301:</b> Giftig bei Verschlucken.  <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen (alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).  <b>H410:</b> Sehr giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung.</p>
Vorsichtsmaßnahmen	k.A.
R-Satz	23/24/25-33-50/53
S-Satz	(1/2)-28-37-45-60-61
Wassergefährdungsklasse	k.A.
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, gesundheitsschädlich, umweltschädlich.
Gefahrensymbole	

(k.A. – keine Angabe)

### 2-Methyl-3-nitrophenol


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>
CAS	005460-31-3
Strukturformel	
Synonym	3-Nitro-o-cresol
Löslichkeit in Wasser	k.A.
Molare Masse	153.14 g/mol
Dichte	k.A.
Siedepunkt	147.0-152.0°C
Schmelzpunkt	146-148 °C
Dampfdruck	k.A.

Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

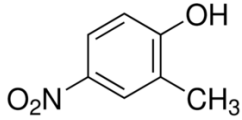
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. <b>H312:</b> Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt. <b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H332:</b> Gesundheitsschädlich bei Einatmen. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P261:</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden. <b>P280:</b> Schutzhandschuhe / Schutzkleidung / Augenschutz / Gesichtsschutz tragen. <b>P305 + P351 + P338:</b> Bei Kontakt mit den Augen: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	R 20/21/22-36/37/38
S-Satz	S 26-36/37
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend, giftig
Gefahrensymbole	


## 2-Methyl-4-nitrophenol

### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_7H_7NO_3$
CAS	000099-53-6
Strukturformel	
Synonym	
Löslichkeit in Wasser	2230 mg/L (25°C)
Molare Masse	153.14 g/mol
Dichte	k.A.
Siedepunkt	k.A.
Schmelzpunkt	93-98 °C
Dampfdruck	k.A.
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

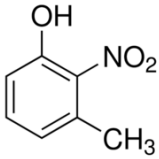
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. <b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P261:</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden. <b>P305 + P351 + P338:</b> Bei Kontakt mit den Augen: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	R 22-36/37/38
S-Satz	S 26-36
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	


### 3-Methyl-2-nitrophenol

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>
CAS	004920-77-8
Strukturformel	
Synonym	2-Nitro-m-cresol
Löslichkeit in Wasser	3510 mg/L (20°C)
Molare Masse	153.14 g/mol
Dichte	k.A.
Siedepunkt	106-108°C at 9.50E+00 mm Hg
Schmelzpunkt	35-39°C
Dampfdruck	0.0372 mm Hg (20°C)
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	1,200 mg/kg (weiblich), 2,300 mg/kg (männlich)
LC50 Fisch (96 Stunden)	46,1 mg/l

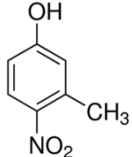
#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. <b>H312:</b> Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt. <b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung.
------------------	--

	<b>H332:</b> Gesundheitsschädlich bei Einatmen. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P261:</b> Einatmen von Staub/ Rauch/ Gas/ Nebel/ Dampf/ Aerosol vermeiden. <b>P280:</b> Schutzhandschuhe/ Schutzkleidung tragen. <b>P305 + P351 + P338:</b> BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	R20/21/22-36/37/38
S-Satz	S26-36/37
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark Wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	

### 3-Methyl-4-nitrophenol


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>
CAS	002581-34-2
Strukturformel	
Synonym	4-Nitro-m-kresol 4-Hydroxy-2-methyl-1-nitrobenzol 5-Hydroxy-2-nitrotoluol
Löslichkeit in Wasser	1,34 g/l (20°C)
Molare Masse	153.14 g/mol
Dichte	650 kg/m <sup>3</sup>
Siedepunkt	200°C
Schmelzpunkt	125 - 130 °C
Dampfdruck	k.A.
Flammpunkt	110°C
LD50 Ratte (oral)	1.200 mg/kg
LC50 Fisch (48 Stunden)	8,4 mg/l

(k.A. – keine Angabe)

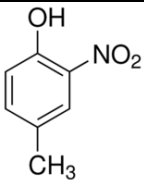
#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. <b>H312:</b> Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt. <b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H332:</b> Gesundheitsschädlich bei Einatmen.
------------------	---

	<b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P261:</b> Einatmen von Staub/ Rauch/ Gas/ Nebel/ Dampf/ Aerosol vermeiden. <b>P280:</b> Schutzhandschuhe/ Schutzkleidung tragen. <b>P305 + P351 + P338:</b> BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	R20/21/22 - R36/37/38
S-Satz	26-36/37
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark Wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	

#### 4-Methyl-2-nitrophenol


##### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>
CAS	000119-33-5
Strukturformel	
Synonym	2-Nitro-p-cresol
Löslichkeit in Wasser	633 mg/L (25°C)
Molare Masse	153.14 g/mol
Dichte	1,24 g/cm <sup>3</sup> bei 25 °C
Siedepunkt	125°C bei 29 hPa
Schmelzpunkt	36.5°C
Dampfdruck	0.000632 mm Hg (25°C)
Flammpunkt	108 °C - geschlossener Tiegel
LD50 Ratte (oral)	3.360 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

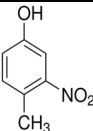
##### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P261:</b> Einatmen von Staub/ Rauch/ Gas/ Nebel/ Dampf/ Aerosol vermeiden. <b>P305 + P351 + P338:</b> BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontakt-

	linsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	R36/37/38
S-Satz	26-36
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 (wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	


#### 4-Methyl-3-nitrophenol

##### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>
CAS	002042-14-0
Strukturformel	
Synonym	3-NITRO-P-CRESOL
Löslichkeit in Wasser	3840 mg/L (25°C)
Molare Masse	153.14 g/mol
Dichte	k.A.
Siedepunkt	k.A.
Schmelzpunkt	78 - 81 °C
Dampfdruck	0.000632 mm Hg (25°C)
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

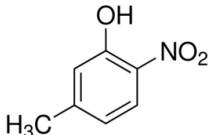
##### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P261:</b> Einatmen von Staub/ Rauch/ Gas/ Nebel/ Dampf/ Aerosol vermeiden. <b>P305 + P351 + P338:</b> BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	R36/37/38.
S-Satz	S36.
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	




## 5-Methyl-2-nitrophenol

### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>
CAS	000700-38-9
Strukturformel	
Synonym	3-Hydroxy-4-nitrotoluene, 6-Nitro-m-cresol
Löslichkeit in Wasser	272 mg/L (20°C)
Molare Masse	153.14 g/mol
Dichte	k.A.
Siedepunkt	k.A.
Schmelzpunkt	53°C
Dampfdruck	0.02 mm Hg (20°C)
Flammpunkt	109 °C - geschlossener Tiegel
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	47 mg/l

(k.A. – keine Angabe)

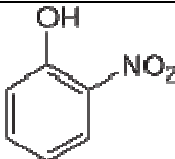
### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P261:</b> Einatmen von Staub/ Rauch/ Gas/ Nebel/ Dampf/ Aerosol vermeiden. <b>P305 + P351 + P338:</b> BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	36/37/38
S-Satz	26
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend, ätzend
Gefahrensymbole	

## 2-Nitrophenol


### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>
CAS	000088-75-5

Strukturformel	
Synonym	<i>o</i> -Nitrophenol, 1-Hydroxy-2-nitrobenzol
Löslichkeit in Wasser	2,1 g/L (20 °C)
Molare Masse	139,11 g/mol
Dichte	k.A.
Siedepunkt	214 °C
Schmelzpunkt	44 °C
Dampfdruck	0.15 hPa (25 °C)
Flammpunkt	108 °C
LD50 Ratte (oral)	2830 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

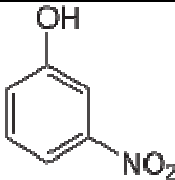
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H412:</b> Schädlich für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P262:</b> Nicht in die Augen, auf die Haut oder auf die Kleidung gelangen lassen. <b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.
R-Satz	52/53
S-Satz	S 24-61
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	

### 3-Nitrophenol


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>
CAS	000554-84-7
Strukturformel	
Synonym	<i>m</i> -Nitrophenol, 1-Hydroxy-3-nitrobenzol
Löslichkeit in Wasser	13,5 g/l (25 °C)
Molare Masse	139,11 g/mol
Dichte	1.49 g/cm <sup>3</sup> (20 °C)
Siedepunkt	194 °C (93 mbar) <a href="http://de.wikipedia.org/wiki/Nitrophenole">http://de.wikipedia.org/wiki/Nitrophenole</a> <a href="#">- cite note-GESTIS m-2</a>
Schmelzpunkt	97 °C

Dampfdruck	k.A.
Flammpunkt	>100 °C
LD50 Ratte (oral)	328 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.


(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P305 + P351 + P338:</b> BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen
R-Satz	R 22-36
S-Satz	S 24-26
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	gesundheitsschädlich, reizend
Gefahrensymbole	

### 4-Nitrophenol


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>
CAS	000100-02-7
Strukturformel	
Synonym	<i>p</i> -Nitrophenol, 1-Hydroxy-4-nitrobenzol
Löslichkeit in Wasser	14,8 g/l (25 °C)
Molare Masse	139,11 g/mol
Dichte	1,48 g/cm <sup>3</sup> (20 °C) (wasserfreie Substanz)
Siedepunkt	279 °C (1013 hPa) (Zersetzung),(wasserfreie Substanz)
Schmelzpunkt	113–115 °C <a href="http://de.wikipedia.org/wiki/Nitrophenole_-_cite_note-GESTIS_p-3">http://de.wikipedia.org/wiki/Nitrophenole_-_cite_note-GESTIS_p-3</a>
Dampfdruck	k.A.
Flammpunkt	169 °C (wasserfreie Substanz)
LD50 Ratte (oral)	202 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

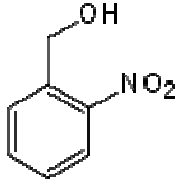
Gefahrenhinweise	<b>H332:</b> Gesundheitsschädlich bei Einatmen.
------------------	---

	<b>H312:</b> Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt. <b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen bei längerer oder wiederholter Exposition durch Verschlucken.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P302 + P352:</b> BEI BERÜHRUNG MIT DER HAUT: Mit viel Wasser und Seife waschen.
R-Satz	R 20/21/22-33
S-Satz	S 28.
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	gesundheitsschädlich
Gefahrensymbole	

## Nitrobenzylalkohole

### 2-Nitrobenzylalkohol

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_7H_7NO_3$
CAS	000612-25-9
Strukturformel	
Synonym	k.A.
Löslichkeit in Wasser	(20 °C) unlöslich
Molare Masse	153,14 g/mol
Dichte	k.A.
Siedepunkt	270 °C
Schmelzpunkt	69–72°C
Dampfdruck	k.A.
Flammpunkt	168°C/20mm
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

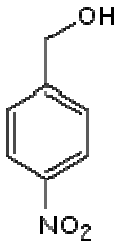
#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	k.A.
Vorsichtsmaßnahmen	k.A.
R-Satz	11-34
S-Satz	22-24/25-45-36/37/39-26-16
Wassergefährdungsklasse	WGK 2 wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	k.A.
Gefahrensymbole	k.A.

(k.A. – keine Angabe)


## 4-Nitrobenzylalkohol

### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>
CAS	000619-73-8
Strukturformel	
Synonym	k.A.
Löslichkeit in Wasser	2 g/l (20 °C)
Molare Masse	153,14 g/mol
Dichte	k.A.
Siedepunkt	185 °C (12 mmHg)
Schmelzpunkt	92–94 °C
Dampfdruck	k.A.
Flammpunkt	180 °C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken.
Vorsichtsmaßnahmen	k.A.
R-Satz	R 22
S-Satz	k.A.
Wassergefährdungsklasse	WGK 1 schwach wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend.
Gefahrensymbole	

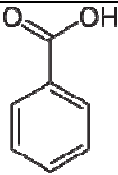
(k.A. – keine Angabe)

## substituierte Benzoessäuren

### Benzoessäure


### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>
CAS	000065-85-0

Strukturformel	
Synonym	Phenylameisensäure, Benzolcarbonsäure
Löslichkeit in Wasser	3.4 g/l (20°C)
Molare Masse	k.A.
Dichte	1.321 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	249 °C (1013hPa)
Schmelzpunkt	121-123 °C
Dampfdruck	1.3 Pa
Flammpunkt	121 °C
LD50 Ratte (oral)	1700 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	44.6 mg/l

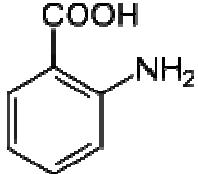
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H 302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P305 + P351 + P338:</b> Bei Kontakt mit den Augen: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	R 22-36
S-Satz	S 24
Wassergefährdungsklasse	WGK 1 (schwach wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	gesundheitsschädlich
Gefahrensymbole	

### 2-Aminobenzoesäure


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>
CAS	000118-92-3
Strukturformel	
Synonym	Anthranilsäure
Löslichkeit in Wasser	5.7 g/l (25 °C)
Molare Masse	137.14 g/mol
Dichte	1.41 g/cm <sup>3</sup> (20 °C)
Siedepunkt	k.A.

Schmelzpunkt	146 - 148 °C
Dampfdruck	0.001 hPa (52.6 °C)
Flammpunkt	150 °C
LD50 Ratte (oral)	4550 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

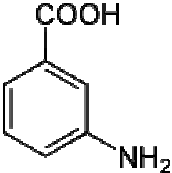
(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H318:</b> Verursacht schwere Augenschäden.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P280:</b> Augenschutz tragen. <b>P305 + P351 + P338:</b> BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen. <b>P313:</b> Ärztlichen Rat einholen/ ärztliche Hilfe hinzuziehen.
R-Satz	R 41
S-Satz	S 26-39
Wassergefährdungsklasse	WGK 1 schwach wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	

### 3-Aminobenzoessäure


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>
CAS	99-05-8
Strukturformel	
Synonym	m-Aminobenzoessäure
Löslichkeit in Wasser	5,9 g/l (20 °C)
Molare Masse	137,14 g/mol
Dichte	1,51 g/cm <sup>3</sup> (20°C)
Siedepunkt	308°C
Schmelzpunkt	174 °C
Dampfdruck	k.A.
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	2850 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

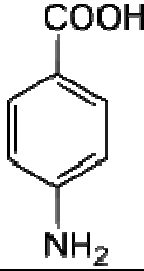
#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H317:</b> Kann allergische Hautreaktionen verursachen.
------------------	---

	<b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P261:</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden. <b>P280:</b> Schutzhandschuhe / Schutzkleidung / Augenschutz / Gesichtsschutz tragen. <b>P305 + P351 + P338:</b> Bei Kontakt mit den Augen: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	36/37/38-43
S-Satz	26-36
Wassergefährdungsklasse	2 wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	

#### 4-Aminobenzoesäure


##### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>
CAS	000150-13-0
Strukturformel	
Synonym	p-Aminobenzoesäure
Löslichkeit in Wasser	4.7 g/l (25 °C)
Molare Masse	137.14 g/mol
Dichte	1.41 g/cm <sup>3</sup> (20 °C)
Siedepunkt	k.A.
Schmelzpunkt	186–189 °C
Dampfdruck	0.001 hPa (52.6 °C)
Flammpunkt	150 °C
LD50 Ratte (oral)	4550 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

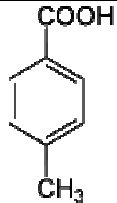
##### Sicherheitshinweise



Gefahrenhinweise	<b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen <b>H317:</b> Kann allergische Hautreaktionen verursachen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P261:</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden. <b>P280:</b> Schutzhandschuhe / Schutzkleidung / Augenschutz / Gesichtsschutz tragen. <b>P305 + P351 + P338:</b> Bei Kontakt mit den Augen: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	36/37/38-43
S-Satz	26-36
Wassergefährdungsklasse	WGK 1 schwach wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	

#### 4-Methylbenzoesäure


##### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>
CAS	000099-94-5
Strukturformel	
Synonym	p-Toluylsäure, p-Tolylsäure
Löslichkeit in Wasser	0.3 g/l (20 °C)
Molare Masse	136.15 g/mol
Dichte	1.06 g/cm <sup>3</sup> (20 °C)
Siedepunkt	274 °C (1013 hPa)
Schmelzpunkt	179 - 181 °C
Dampfdruck	0.02 hPa (70 °C)
Flammpunkt	181 °C
LD50 Ratte (oral)	400 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

##### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P305 + P351 + P338:</b> BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN:

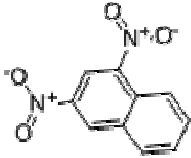
	Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Eventuell vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	R 22-36
S-Satz	k.A.
Wassergefährdungsklasse	WGK 1 schwach wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	gesundheitsschädlich, reizend
Gefahrensymbole	

(k.A. – keine Angabe)

## Nitronaphtalene

### 1,3-Dinitronaphtalin


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
CAS	000606-37-1
Strukturformel	
Synonym	1,3-dinitro-naphthalen,
Löslichkeit in Wasser	54,9 mg/l
Molare Masse	218,17 g/mol
Dichte	1.482g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	377.211°C bei 760 mmHg
Schmelzpunkt	148 °C
Dampfdruck	k.A.
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

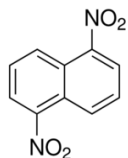
Gefahrenhinweise	<b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P261:</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden. <b>P305 + P351 + P338:</b> Bei Kontakt mit den Augen: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	36/37/38

S-Satz	26-37/39
Wassergefährdungsklasse	3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	

(k.A. – keine Angabe)

### 1,5-Dinitronaphthalin

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_{10}H_6N_2O_4$
CAS	000605-71-0
Strukturformel	
Synonym	1,5-Dinitronaphthalene, Naphthalene, 1,5-dinitro-
Löslichkeit in Wasser	58 mg/l (12 °C)
Molare Masse	218,17 g/mol
Dichte	1.58 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	k.A.
Schmelzpunkt	214 °C
Dampfdruck	0,0002 mbar (50 °C)
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung</p> <p><b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen</p> <p><b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen</p> <p><b>H341:</b> Kann vermutlich genetische Defekte verursachen</p> <p><b>H412:</b> Schädlich für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung</p>
Vorsichtsmaßnahmen	<p><b>P261:</b> Einatmen von Staub/ Rauch/ Gas/ Nebel/ Dampf/ Aerosol vermeiden</p> <p><b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden</p> <p><b>P302 + P352:</b> BEI KONTAKT MIT DER HAUT: Mit viel Wasser und Seife waschen</p> <p><b>P280:</b> Schutzhandschuhe/ Schutzkleidung/Augenschutz/ Gesichtsschutz tragen</p> <p><b>P305 + P351 + P338:</b> BEI KONTAKT MIT DEN AUGEN: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsennach Möglichkeit entfernen.</p>

	Weiter spülen
R-Satz	41-43-52/53-68
S-Satz	26-36/37/39
Wassergefährdungsklasse	3 stark wassergefährdend
Gefährlichkeitsmerkmal	ätzend, reizend, gesundheitsschädlich
Gefahrensymbole	

(k.A. – keine Angabe)

### 1,8-Dinitronaphthalin

#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_{10}H_6N_2O_4$
CAS	000602-38-0
Strukturformel	
Synonym	1,8-Dinitronaphthalene
Löslichkeit in Wasser	34 mg/l (15°C)
Molare Masse	218,17 g/mol
Dichte	1.481g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	394.8°C
Schmelzpunkt	171-173 °C
Dampfdruck	k.A.
Flammpunkt	200.3°C
LD50 Ratte (oral)	k.A.
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

(k.A. – keine Angabe)

#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H228:</b> Entzündbarer Feststoff. <b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Vorsichtsmaßnahmen	<b>P210:</b> Von Hitze / Funken / offener Flamme / heißen Oberflächen fernhalten. Nicht rauchen. <b>P261:</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden. <b>P305+P351+P338:</b> Bei Kontakt mit den Augen: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	11-36/37/38
S-Satz	16-26-36

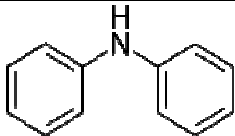
Wassergefährdungsklasse	3
Gefährlichkeitsmerkmal	entzündlich, reizend
Gefahrensymbole	

(k.A. – keine Angabe)

## weitere Verbindungen

### Diphenylamin


#### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N
CAS	000122-39-4
Strukturformel	
Synonym	N-Phenylanilin, N-Phenylbenzolamin, Anilinobenzene
Löslichkeit in Wasser	sehr wenig löslich in Wasser
Molare Masse	169,23 g/mol
Dichte	1,16 g·cm <sup>-3</sup>
Siedepunkt	302 °C
Schmelzpunkt	53 °C
Dampfdruck	0,33 Pa bei 20 °C
Flammpunkt	153 °C
LD50 Ratte (oral)	2.000 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	>100mg/l

k.A. – keine Angabe

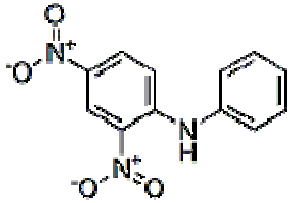
#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H301:</b> Giftig bei Verschlucken.  <b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt.  <b>H331:</b> Giftig bei Einatmen.  <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen (alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).  <b>H411:</b> Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.</p>
Sicherheitshinweise (p-Sätze)	<p><b>P273:</b> Freisetzung in die Umwelt vermeiden.  <b>P302/P352:</b> Bei Kontakt mit der Haut: Mit viel Wasser und Seife waschen.  <b>P309:</b> Bei Exposition oder Unwohlsein:  <b>P310:</b> Sofort Giftinformationszentrum oder Arzt anrufen.</p>

	<b>P501:</b> Inhalt / Behälter ... zuführen.
R-Satz	R 23/24/25.R 33 R 50/53
S-Satz	S 1/2 S 28 S 36/37/39 S 45 S 61
Wassergefährdungsklasse	WGK 2: wassergefährdender Stoff
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, gesundheitsgefährdend, umweltgefährlich
Gefahrensymbole	

## 2,4-Dinitrodiphenylamin


### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>
CAS	000961-68-2
Strukturformel	
Synonym	2,4-dinitro-n-phenyl-benzenamin, 2,4-dinitro-N-phenyl-Benzenamine
Löslichkeit in Wasser	k.A.
Molare Masse	259.22
Dichte	k.A.
Siedepunkt	k.A.
Schmelzpunkt	159-161 C
Dampfdruck	3E-009 mm Hg
Flammpunkt	k.A.
LD50 Maus (intravenös)	180 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

k.A. – keine Angabe

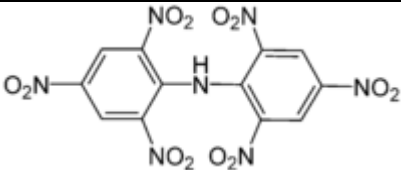
### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H315</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335</b> Kann die Atemwege reizen.
Sicherheitshinweise (p-Sätze)	<b>P261</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden. <b>P305 + P351 + P338</b> Bei Kontakt mit den Augen: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	36/37/38
S-Satz	26-37/39
Wassergefährdungsklasse	3 stark wassergefährdend

Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	

## Hexyl


### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_{12}H_5N_7O_{12}$
CAS	000131-73-7
Strukturformel	
Synonym	2,2',4,4',6,6'-Hexanitrodiphenylamin, Dipikrylamin (auch Aurantia oder Kaisergelb)
Löslichkeit in Wasser	sehr schlecht löslich in Wasser
Molare Masse	439,21 g/mol
Dichte	1,64 g·cm <sup>-3</sup> [
Siedepunkt	243-244 °C
Schmelzpunkt	238 °C
Dampfdruck	2.89E-014 mm Hg
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	500 mg·kg <sup>-1</sup>
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

k.A. – keine Angabe

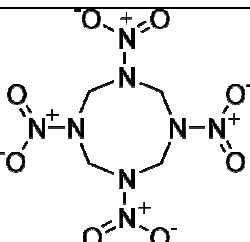
### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H201:</b> Explosiv, Gefahr der Massenexplosion.</p> <p><b>H330:</b> Lebensgefahr bei Einatmen.</p> <p><b>H310:</b> Lebensgefahr bei Hautkontakt.</p> <p><b>H300:</b> Lebensgefahr bei Verschlucken.</p> <p><b>H373:</b> Kann die Organe schädigen (alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H411:</b> Giftig für Wasserorganismen, mit langfristiger Wirkung.</p>
Sicherheitshinweise	-
R-Satz	R 3 R 26/27/28 R 33 R 51/53
S-Satz	S 1/2 S 27/28 S 35 S 36/37 S 45 S 61 S 63
Wassergefährdungsklasse	WGK 3
Gefährlichkeitsmerkmal	explosiv, giftig, gesundheitsgefährdend, umweltschädlich

Gefahrensymbole	
-----------------	--

## HMX

### Chemische und physikalische Daten


Summenformel	$C_4H_8N_8O_8$
CAS	002691-41-0
Strukturformel	
Synonym	Octahydro-1,3,5,7-Tetranitro-11,3,5,7-Tetraazocan, Cyclo-tetramethyletetranitramin
Löslichkeit in Wasser	praktisch unlöslich
Molare Masse	296,16 g/mol
Dichte	1,9 g·cm <sup>-3</sup> [
Siedepunkt	ohne
Schmelzpunkt	273–281 °C
Dampfdruck	4,4 10 <sup>-14</sup> mbar
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	6.490 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

k.A. – keine Angabe

### Sicherheitshinweise

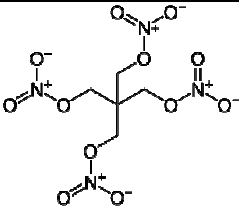
Gefahrenhinweise	<b>H201:</b> Explosiv, Gefahr der Massenexplosion. <b>H302:</b> Gesundheitsschädlich bei Verschlucken. <b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt.
Sicherheitshinweise	<b>P210:</b> von Hitze, Funken, offenen Flammen, heißen Oberflächen fernhalten <b>P230:</b> feucht aufbewahren <b>P240:</b> Behälter und zu befüllende Anlage erden <b>P250:</b> Nicht schleifen / stoßen / ... / reiben. <b>P280:</b> Schutzhandschuhe / Schutzkleidung / Augenschutz / Gesichtsschutz tragen. <b>P380:</b> Umgebung räumen.
R-Satz	R 2 <a href="http://de.wikipedia.org/wiki/R- und_S-S%C3%A4tze">http://de.wikipedia.org/wiki/R- und S-S%C3%A4tze</a> -  <a href="#">R11-22-24</a>



S-Satz	S <a href="#">36-37-45</a>
Wassergefährdungsklasse	k.A.
Gefährlichkeitsmerkmal	explosive, toxisch
Gefahrensymbole	

## Nitropenta

### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_5H_8N_4O_{12}$
CAS	000078-11-5
Strukturformel	
Synonym	Pentaerythrittetranitrat, Nitropenta, PETN
Löslichkeit in Wasser	Nicht löslich
Molare Masse	316,15 g·mol <sup>-1</sup>
Dichte	1,778 g·cm <sup>-3</sup> (22 °C, PETN-I)
Siedepunkt	Zersetzung 163 – 170 °C
Schmelzpunkt	141 – 142,9 °C
Dampfdruck	67 mPa (95,3 °C)
Flammpunkt	195°C.
LD50 Maus in den Bauchraum	5 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	27.000 mg/l

k.A. – keine Angabe

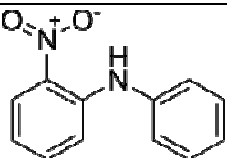
### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H200:</b> Instabil, explosiv.
Sicherheitshinweise (p-Sätze)	<b>P201:</b> Vor Gebrauch besondere Anweisungen einholen. <b>P281:</b> Vorgeschriebene persönliche Schutzausrüstung verwenden. <b>P272:</b> Kontaminierte Arbeitskleidung nicht außerhalb des Arbeitsplatzes tragen. <b>P373:</b> Keine Brandbekämpfung, wenn das Feuer explosive Stoffe / Gemische / Erzeugnisse erreicht. <b>P380:</b> Umgebung räumen. <b>P501:</b> Inhalt / Behälter ... zuführen.
R-Satz	R 3.

S-Satz	S 2 S 35
Wassergefährdungsklasse	WGK 3 (stark wassergefährdend)
Gefährlichkeitsmerkmal	explosionsgefährlich


## 2-Nitrodiphenylamin

### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
CAS	000119-75-5
Strukturformel	
Synonym	NDPA oder 2-NDPA
Löslichkeit in Wasser	nahezu unlöslich in Wasser
Molare Masse	214,24 g/mol
Dichte	1,36 g·cm <sup>-3</sup>
Siedepunkt	346 °C
Schmelzpunkt	75 °C
Dampfdruck	1E-005 mm Hg
Flammpunkt	346 °C
LD50 Ratte (oral)	3200 mg·kg <sup>-1</sup>
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

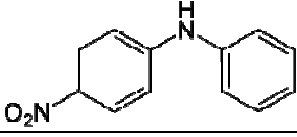
k.A. – keine Angabe

### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Sicherheitshinweise (p-Sätze)	<b>P261:</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden. <b>P305 + P351 + P338:</b> Bei Kontakt mit den Augen: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	36/37/38
S-Satz	26-36-37/39
Wassergefährdungsklasse	k.A.
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	


## 4-Nitrodiphenylamin

### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
CAS	000836-30-6
Strukturformel	
Synonym	4-Nitro-N-phenylanilin, p-Nitrodiphenylamin, 4-NDPA
Löslichkeit in Wasser	unlöslich
Molare Masse	214,24 g/mol
Dichte	k.A.
Siedepunkt	343 °C
Schmelzpunkt	132–136 °C
Dampfdruck	< 0,1 hPa (50 °C)[
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	7940 mg·kg <sup>-1</sup>
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

k.A. – keine Angabe

#### Sicherheitshinweise

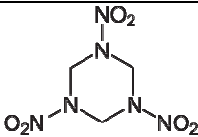
Gefahrenhinweise	<b>H315:</b> Verursacht Hautreizungen. <b>H319:</b> Verursacht schwere Augenreizung. <b>H335:</b> Kann die Atemwege reizen.
Sicherheitshinweise (p-Sätze)	<b>P261:</b> Einatmen von Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol vermeiden. <b>P305 + P351 + P338</b> Bei Kontakt mit den Augen: Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.
R-Satz	36/37/38
S-Satz	26-37/39
Wassergefährdungsklasse	k.A.
Gefährlichkeitsmerkmal	reizend
Gefahrensymbole	

Gefahrensymbole	
-----------------	---

#### RDX

##### Chemische und physikalische Daten


Summenformel	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>
CAS	000121-82-4

Strukturformel	
Synonym	Hexogen, Perhydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazin, Cyclotrimethylentrinitramin, Cyclonit
Löslichkeit in Wasser	Schlecht löslich
Molare Masse	222,12 g/mol
Dichte	1,82 g/cm <sup>3</sup>
Siedepunkt	Der Stoff zersetzt sich bei Erhitzen. Zersetzungstemperatur (213 °C)
Schmelzpunkt	204 - 206°C
Dampfdruck	4.1 x 10 <sup>-9</sup> Torr (20°C)
Flammpunkt	k.A.
LD50 Ratte (oral)	100 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	Minimalwert: 3,6 mg/l Maximalwert: 43 mg/l

k.A. – keine Angabe

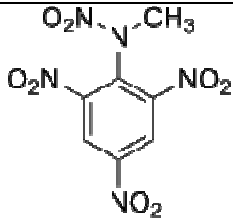
#### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H201:</b> Explosiv, Gefahr der Massenexplosion.</p> <p><b>H301:</b> Giftig bei Verschlucken.</p> <p><b>H370:</b> Schädigt die Organe (oder alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) (Expositionsweg angeben, sofern schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p> <p><b>H373:</b> Kann die Organe schädigen (alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p>
Sicherheitshinweise (p-Sätze)	<p><b>P210:</b> Von Hitze / Funken / offener Flamme / heißen Oberflächen fernhalten. Nicht rauchen.</p> <p><b>P250:</b> Nicht schleifen / stoßen / ... / reiben.</p> <p><b>P260:</b> Staub / Rauch / Gas / Nebel / Dampf / Aerosol nicht einatmen.</p> <p><b>P270:</b> Bei Gebrauch nicht essen, trinken oder rauchen.</p> <p><b>P280:</b> Schutzhandschuhe / Schutzkleidung / Augenschutz / Gesichtsschutz tragen.</p> <p><b>P301+P310:</b> Bei Verschlucken: Sofort Giftinformationszentrum oder Arzt anrufen.</p> <p><b>P309+P311:</b> Bei Exposition oder Unwohlsein: Giftinformationszentrum oder Arzt anrufen.</p> <p><b>P370+P380:</b> Bei Brand: Umgebung räumen.</p> <p><b>P373:</b> Keine Brandbekämpfung, wenn das Feuer explosive Stoffe / Gemische / Erzeugnisse erreicht.</p>
R-Satz	2-25
S-Satz	33-36/37-35-45-59

Wassergefährdungsklasse	k.A.
Gefährlichkeitsmerkmal	giftig, explosiv
Gefahrensymbole	

## Tetryl


### Chemische und physikalische Daten

Summenformel	$C_7H_5N_5O_8$
CAS	000479-45-8
Strukturformel	
Synonym	2,4,6-Tetranitrophenyl-N-methylamin, Tetralit
Löslichkeit in Wasser	sehr schlecht in Wasser
Molare Masse	287,15 g·mol <sup>-1</sup>
Dichte	1,57 g·cm <sup>-3</sup>
Siedepunkt	ab 180 °C Zersetzung
Schmelzpunkt	129 °C
Dampfdruck	5.66E-008 mm Hg
Flammpunkt	k.A.
LD50 Maus subkutan	5.000 mg/kg
LC50 Fisch (96 Stunden)	k.A.

k.A. – keine Angabe

### Sicherheitshinweise

Gefahrenhinweise	<p><b>H201:</b> Explosiv, Gefahr der Massenexplosion.  <b>H331:</b> Giftig bei Einatmen.  <b>H311:</b> Giftig bei Hautkontakt.  <b>H301:</b> Giftig bei Verschlucken.  <b>H373:</b> Kann die Organe schädigen (alle betroffenen Organe nennen, sofern bekannt) bei längerer oder wiederholter Exposition (Expositionsweg angeben, wenn schlüssig belegt ist, dass diese Gefahr bei keinem anderen Expositionsweg besteht).</p>
Sicherheitshinweise (p-Sätze)	<p><b>P210:</b> Von Hitze / Funken / offener Flamme / heißen Oberflächen fernhalten. Nicht rauchen.  <b>P303 + P361 + P353:</b> Bei Kontakt mit der Haut (oder dem Haar): Alle beschmutzten, getränkten Kleidungsstücke sofort ausziehen. Haut mit Wasser abwaschen/duschen.  <b>P305 + P351 + P338:</b> Bei Kontakt mit den Augen:</p>

	<p>Einige Minuten lang behutsam mit Wasser spülen. Vorhandene Kontaktlinsen nach Möglichkeit entfernen. Weiter spülen.</p> <p><b>P361:</b> Alle kontaminierten Kleidungsstücke sofort ausziehen.</p> <p><b>P405:</b> Unter Verschluss aufbewahren.</p> <p><b>P501:</b> Inhalt / Behälter ... zuführen.</p>
R-Satz	3-23/24/25-33
S-Satz	1/2-35-36/37-45-63
Wassergefährdungsklasse	k.A.
Gefährlichkeitsmerkmal	Explosiv, giftig, gesundheitsgefährdend
Gefahrensymbole	

## **Anlage 2**

Liste der polaren STV-Verbindungen und deren Validierung in den analytischen Normverfahren

	unpolare STV	CAS	Abkürzung	Wasser		Boden	
				DIN EN ISO 22478	DIN 38407-17	DIN ISO 11916-1	DIN ISO 11916-2
1	Nitrobenzol	98-95-3	NB	-	X	X	X
2	1,2-Dinitrobenzol	528-29-0	12DNB	-	-	-	-
3	1,3-Dinitrobenzol	99-65-0	13DNB	X	X	X	-
4	1,3,5-Trinitrobenzol	99-35-4	135TNB	X	-	X	X
5	2-Nitrotoluol	88-72-2	2NT	X	X	X	X
6	3-Nitrotoluol	99-08-1	3NT	X	-	X	X
7	4-Nitrotoluol	99-99-0	4NT	X	X	X	X
8	2-Methylanilin (2-Aminotoluol)	95-53-4	2MA	-	-	-	-
9	3-Methylanilin (3-Aminotoluol)	108-44-1	3MA	-	-	-	-
10	4-Methylanilin (4-Aminotoluol)	106-49-0	4MA	-	-	-	-
11	2,3-Dinitrotoluol	602-01-07	23DNT	-	-	-	-
12	2,4-Dinitrotoluol	121-14-2	24DNT	X	X	X	X
13	2,6-Dinitrotoluol	606-20-2	26DNT	X	X	X	X
14	3,4-Dinitrotoluol	610-39-9	34DNT	-	X	-	X
15	3,5-Dinitrotoluol	618-85-9	35DNT	-	-	-	-
16	2,4-Diaminotoluol	98-80-7	24DAT	-	-	-	-
17	2,6-Diaminotoluol	59229-75-3	26DAT	-	-	-	-
18	2-Amino-4-Nitrotoluol	99-55-8	2A4NT	-	-	-	-
19	2-Amino-6-Nitrotoluol	603-83-8	2A6NT	-	X	-	-
20	4-Amino-2-Nitrotoluol	119-32-4	4A2NT	-	X	-	-
21	2,4,6-Trinitrotoluol	118-96-7	TNT	X	X	X	X
22	2-Amino-2,4-Dinitrotoluol	35572-78-2	2A46DNT	X	-	X	X
23	4-Amino-4,6-Dinitrotoluol	19406-51-6	4A26DNT	X	X	X	X
24	2,4-Diamino-6-Dinitrotoluol	66-29-4	24DA6NT	-	X	-	-
25	2,6-Diamino-4-Dinitrotoluol	59229-75-3	26DA4NT	-	-	-	-
26	1,3-Dinitronaphthalin	606-37-1	13DNNph	X	-	-	-
27	1,5-Dinitronaphthalin	605-71-0	15DNNph	X	-	-	-
28	1,8-Dinitronaphthalin	602-38-0	18DNNph	X	-	-	-
29	2,4,6-Trinitrophenol	88-89-1	PA	X	-	-	-
30	Methylpikrylnitramin	479-45-8	Tetryl	X	-	X	-
31	2,2',4,4',6,6'-Hexanitrodiphenylamin	131-73-7	Hexyl	X	-	X	-
32	Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazin	121-82-4	RDX	X	-	X	-
33	Octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine	2691-41-0	HMX	X	-	X	-
34	Pentaerythrittetranitrat	78-11-5	Nitropenta	X	-	X	-
35	Ethylenglykoldinitrat	628-96-6	EGDN	X	-	-	-
36	Diethylenglykoldinitrat	693-21-0	DEGN	X	-	-	-



	<b>polare STV</b>	<b>CAS</b>	<b>Abkürzung</b>	<b>Wasser KORA</b>	<b>Boden KORA</b>
1	2-Aminobenzoesäure	118-92-3	2ABs	-	-
2	3-Aminobenzoesäure	99-05-8	3ABs	-	-
3	4-Aminobenzoesäure	150-13-0	4ABs	-	-
4	4-Methylbenzoesäure	99-94-5	4MBs	-	-
5	2-Nitrobenzoesäure	552-16-9	2NBs	X	X
6	3-Nitrobenzoesäure	121-92-6	3NBs	X	X
7	4-Nitrobenzoesäure	62-23-7	4NBs	X	X
8	2,4-Dinitrobenzoesäure	610-30-0	24DNBs	X	X
9	3,4-Dinitrobenzoesäure	528-45-0	34DNBs	-	-
10	3,5-Dinitrobenzoesäure	99-34-3	35DNBs	X	X
11	2-Amino-4-Nitrobenzoesäure	619-17-0	2A4NBs	-	-
12	2-Methyl-3-Nitrobenzoesäure	1975-50-4	2M3NBs	-	-
13	4-Methyl-3-Nitrobenzoesäure	96-98-0	4M3NBs	-	-
14	2,4,6-Trinitrobenzoesäure	129-66-8	246TNBs	X	X
15	2-Amino-4,6-Dinitrobenzoesäure	14380-55-8	2A46DNBs	X	X
16	4-Amino-2,6-Dinitrobenzoesäure	114168-48-8	4A26DNBs	X	X
17	2,4-Dinitrotoluen-3-Sulfonsäure	63348-71-0	24DNTSs-3	X	X
18	2,4-Dinitrotoluen-5-Sulfonsäure	52146-86-8	24DNTSs-5	X	X
19	2-Nitrobenzoealkohol	612-25-9	2NBzOH	-	-
20	4-Nitrobenzoealkohol	619-73-8	4NBzOH	-	-
21	2-Nitrophenol	88-75-5	2NPh	-	-
22	3-Nitrophenol	554-84-7	3NPh	-	-
23	4-Nitrophenol	100-02-7	4NPh	-	-
24	2,4-Dinitrophenol	51-28-5	24DNPh	X	X
25	2,5-Dinitrophenol	329-71-5	25DMPh	-	-
26	3,5-Dinitrophenol	586-11-8	35DNPh	-	-
27	2-Methyl-3-Nitrophenol	5460-31-1	2M3NPh	-	-
28	3-Methyl-2-Nitrophenol	4920-77-8	3M2NPh	-	-
29	4-Methyl-2-Nitrophenol	119-33-5	4M2NPh	-	-
30	5-Methyl-2-Nitrophenol	700-38-9	5M2NPh	-	-
31	2,4,6-Trinitrophenol (Pikrinsäure)	88-89-1	246TNPh	X	X
32	4-Methyl-2,6-Dinitrophenol	609-93-8	4M26DNPh	-	-
33	2,4,6-Trinitroresorcin	82-71-3	246TNR	-	-
34	Hexahydro-1,3-nitro 5-nitroso -1,3,5-triazin	5755-27-1	MXN	-	-
35	Hexahydro-1-nitro 3,5-dinitroso -1,3,5-triazin	100-02-0	DNX	-	-
36	Hexahydro-1,3,5-trinitroso-1,3,5-triazin	13980-04-6	TNX	-	-
37	Octahydro-1-N-acetyl-3,5,7-trinitro-1,3,5,7-tetrazonin	13980-00-2	SEX	-	-