

Forschungsbericht 1998

Toxikologische Bewertung von mit sprengstofftypischen Verbindungen (STV) kontaminiertem Grundwasser

Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie

1 Veranlassung

Im Rahmen der wissenschaftlichen Begleitung des Teilkomplexes Human- und Ökotoxikologie innerhalb des MOST-Projektes „Rüstungsaltnlast WASAG Elsrig“ wurde das Umweltbüro Dr. Gerhard Möschwitzer & Partner GmbH (UGM) am 24. Juli 1998 durch die Dresdner Grundwasser Consulting GmbH beauftragt, eine humantoxikologische Bewertung der STV-Belastungen im Grundwasser vorzunehmen.

2 Einleitung

Im Rahmen der wissenschaftlichen Begleitung sollen folgende Fragestellungen geklärt werden:

1. Wie wird das toxikologische Gefährdungspotential der aktuellen Daten im Vergleich zu den bisher durchgeführten Bewertungen für die bekannten Schwerpunktbereiche eingeschätzt?
2. Können anhand der seit 1994/1996 analysierten STV-Belastungen tendenzielle Aussagen zum Gefährdungspotential getroffen werden?
3. Wie sind die Grundwasser-Belastungen auf der südwestlich der „Tankstelle“ gelegenen Fläche einschließlich des Grundwasser-Abstromes im Vergleich zu den bekannten Schwerpunktbereichen toxikologisch zu bewerten?
4. Welche grundsätzlichen Aussagen lassen sich aus den STV-Belastungen an den Quellen zur Gefährdungsbetrachtung an den Wasserfassungen treffen?
5. Welche Maßnahmen leiten sich aus den unter 1. - 4. getroffenen Aussagen für die Notwendigkeit weiterführender Maßnahmen ab?

3 Zur Toxikologie der Kontaminanten

Nach 3 sind fast alle STV unterschiedlich starke Methämoglobinbildner und können dadurch den Sauerstofftransport im Blut stören. Die Folge können Veränderungen der Erythrocyten

(Bildung von Heinz-Körpern), Anämie und Störungen verschiedener Organsysteme (z.B. des Zentralnervensystems) sein /14/.

Für einige dieser Verbindungen ist außerdem ein krebserzeugendes Potential experimentell eindeutig nachgewiesen oder wird vorläufig angenommen. Überlegungen zu Struktur und Metabolismus legen nahe, dass mehr oder weniger allen Vertretern dieses Strukturtyps ein kanzerogenes Potential zukommt, wenn nicht als Initiator, so wenigstens als Tumorverstärker /12/). Die Kanzerogenität von STV ist also, bis zum jeweils substanzspezifischen Beweis des Gegenteils, als ihr toxikologisch kritischer Endpunkt zu betrachten /3/.

In den folgenden Datenblättern werden zur Einschätzung der zu bewertenden Substanzen neben chem.-physikalischen Eigenschaften die Toxizität der Einzelstoffe mit der entsprechenden Literaturangabe dargestellt.

Hexogen

CAS-Nr.	121-82-4	
Synonyme	RDX	
Summenformel	$C_3H_6N_6O_6$	
Molekulargewicht	222,1	
Physik.-chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 204	/7/
	Siedepunkt [°C]: ohne, Verpuffung	/7/
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]	
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]: 44	/7/
Verwendung	wichtiger hochbrisanter Sprengstoff; während des 2. Weltkrieges an fünf Standorten produziert; in Elsnig fielen 125 Monatstonnen an	/11/, /6/
Verhalten in der Umwelt	Photolyse möglich; LC_{50} (Fische): 3,9-18 mg/l; mäßig hohe Mobilität im Boden; schneller photochemischer Abbau in der Atmosphäre; kein aerober mikrobieller Abbau; anaerober mikrobieller Abbau	/7/
Aufnahme, Verteilung, Wirkungsmechanismus, Elimination	Hautresorption; langsame orale und inhalative Aufnahme; Blut/Hirnschranke wird durchbrochen; Zielorgan: ZNS; Metabolisierung in der Leber; Elimination über Urin und Ausatmung	/7/
Akute Toxizität (Tier)	LD_{50} (oral Ratte): 40-300 mg/kg	/7/
	LD_{50} (oral Maus): 59 mg/kg (Krämpfe, Anfälle)	/7/
Akute Humantoxizität	Krämpfe, Hautreizungen, cardiovasculäre Anzeichen (schneller Puls, Blutdruckveränderungen)	/7/
Chron. tierexp.	oral NOEL(Ratte): 0,3 mg/kg KG * d	/22/

Toxizität		
Chron.	epileptische Anfälle, Krämpfe, Bewußtlosigkeit, erhöhte Reizbarkeit	/7/
Humantoxizität	(neurotoxische Effekte)	
RfD/ TRD/ TDI/ UR/	RfD: oral 0,003 mg/kg KG * d	/22/
Äq	UR: oral 0,11/(mg/kg KG * d)	/22/
	TDI: 0,3 µg/kg KG * d	/2/
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	reproduktiver Effektor	/20/
	EPA: C (möglicherweise kanzerogen für den Menschen)	/22/
MAK		

2,4,6-Trinitrotoluol

CAS-Nr.	118-96-7	
Synonyme	2,4,6-TNT	
Summenformel	C ₇ H ₅ N ₃ O ₆	
Molekulargewicht	227,1	
Physik.-chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 80,35	/7/
	Siedepunkt [°C]: ohne, Zersetzung	/7/
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]: 2,6*10 ⁻⁴	/7/
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]: 100	/7/
Verwendung	zum Füllen von Granaten, Minen und Torpedos; wesentlicher Bestandteil gewerblichen Sprengstoffs; Zusatz zu rauchschwachen Schießpulvern	/11/
Verhalten in der Umwelt	Gefahr kumulativer Wirkungen; in der Umwelt persistent; geringes Bioakkumulationspotential; wird von verschiedenen Pilzspezies metabolisiert; Photolyse; toxisch für Mikroorganismen und Wasserpflanzen; 1 mg/l für Fische tödlich	/7/
Aufnahme, Verteilung, Wirkungs- mechanismus, Elimination	dermale und inhalative Resorption; arom. Nitroverbindungen: Reduktion der Nitrogruppe zu Hydroxylaminen und aromatischen Aminen über die Zwischenstufe der Nitroso-Aromaten; Metabolisierungsreaktion in der Leber und an Erythrocyten (Methämoglobin); Sulfatierung; Glutathion-Konjugate; Glucuronide; Metabolite können DNA-Addukte bilden; Elimination der Metabolite über Niere und Urin	/7/
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 800-1300 mg/kg	/7/

	LD ₅₀ (oral Maus): 600-1000 mg/kg	/7/
Akute Humantoxizität	Methämoglobinbildung, Cyanose, Anämie, Leber-, Herz-, Nieren- und Kreislaufschäden	/7/
Chron. tierexp. Toxizität	oral LOAEL (Hund): 0,5 mg/kg KG * d (Lebertoxizität)	/22/
Chron. Humantoxizität	Blutbildveränderungen, Anämie, Hämolyse, Methämoglobinbildung, Cyanose, toxische Hepatitis mit Ikterus, Allergien, Sensibilisierung, Kontaktdermatitis, grauer Star	/7/
RfD/ TRD/ TDI/ UR	RfD: oral 0,0005 mg/kg KG * d	/22/
Äq	UR: oral 0,03/(mg/kg KG * d)	/22/
	TDI: 0,05 µg/kg KG * d (vorläufig)	/2/
	TRD: oral 0,5 µg/kg KG * d	/4/
	Krebsrisiko von 10 ⁻⁵ : 0,33 µg/kg KG * d	/14/
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	tumorigen, mutagen, reproduktiver Effektor	/20/
	IARC: 3 (nicht ausreichender Beweis f. Kanzerogenität beim Menschen)	/20/
	EPA: C (möglicherweise kanzerogen beim Menschen)	/22/
MAK	0,01 ml/m ³ ; 0,1 mg/m ³ ; 3 (begründeter Verdacht auf krebserzeugendes Potential)	/1/

2,6-Dinitrotoluol

CAS-Nr.	606-20-2	
Synonyme	2,6-DNT	
Summenformel	C ₇ H ₆ N ₂ O ₄	
Molekulargewicht:	182,15	
Physik.-chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 64,3	/7/
	Siedepunkt [°C]: 285	/7/
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]: 1,49*10 ⁻⁴	/7/
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]: 145	/7/
Verwendung	als Sprengstoff, in Schießpulvern; Zwischenprodukt der TNT-Herstellung	/11/, /7/
Verhalten in der Umwelt	keine Hydrolyse; toxisch für Algen, aquatische Mikroorganismen und Fische; Photolyse möglich; LC ₅₀ (Fische): 19-50 mg/l; wenig mobil; mittlere Geo- und Bioakkumulationstendenz; aerober und anaerober mikrobieller Abbau	/7/, /24/

Aufnahme, Verteilung, Wirkungs- mechanismus, Elimination	Metabolite in Rattenleber: Aminonitrotoluole, Hydroxylamino- nitrotoluole; Elimination der Metabolite über Niere und Urin	/5/
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 180-795 mg/kg	/7/
	LD ₅₀ (oral Maus): 621-1000 mg/kg	/23/
Akute Humantoxizität	Leberschäden, Ikterus, Kopfschmerzen, Übelkeit, Schwäche, Erbrechen, ZNS-Schäden, Methämoglobinbildung, Cyanose, Hämolyse	/7/
Chron. tierexp. Toxizität	Subchron. Hund: 4 mg/kg KG * d (geringe tox. Effekte), 20 mg/kg KG*d (starke tox. Effekte: Gewichtsverlust, ZNS-Schäden, Blutschäden, Leber- und Nierenveränderungen)	/7/
Chrom. Humantoxizität	Methämoglobinbildung, Cyanose, ZNS-Schäden	/7/
RfD/ TRD/ TDI/ UR/ Äq	UR: oral 0,68/(mg/kg KG * d) (Mixtur 2,6-, 2,4-DNT) Äq: 0,5 (kurzfristige Exposition), 150 (langfristige Exposition)	/22/ /14/
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	tumorigen, mutagen	/20/
	EPA: B2 (wahrscheinlich kanzerogen für den Menschen)	/22/
MAK	Isomeregemisch: 2 (im Tierversuch eindeutig krebserzeugend)	/1/

2,4-Dinitrotoluol

CAS-Nr.	121-14-2	
Synonyme	2,4-DNT	
Summenformel	C ₇ H ₆ N ₂ O ₄	
Molekulargewicht	182,14	
Physik.-chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 69,6-71	/7/
	Siedepunkt [°C]: 300-320	/7/
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]: 0,0068-0,000079	/7/
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]: 166	/7/
Verwendung	Sprengstoff, teils Verwendung in Schießpulvern; als Phlegmatisierungsmittel in Treibmitteln	/7/
Verhalten in der	keine Hydrolyse; toxisch für Algen, aquatische Mikroorganismen und	/7/

Umwelt	Fische; Photolyse; LC ₅₀ (Fische): 28,5-37,7 mg/l; wenig mobil; mittlere Geo- und Bioakkumulationstendenz; anaerober mikrobieller Abbau	
Aufnahme, Verteilung, Wirkungsmechanismus, Elimination	Hautresorption; arom. Nitroverbindungen: Reduktion der Nitrogruppe zu Hydroxylaminen und aromatischen Aminen über die Zwischenstufe der Nitroso-Aromaten; Metabolisierungsreaktion in der Leber und an Erythrocyten (Methämoglobin); Sulfatierung; Glutathion-Konjugate; Glucuronide; Metabolite können DNA-Addukte bilden; Elimination der Metabolite über Niere und Urin	/7/
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 268-650 mg/kg	/7/
	LD ₅₀ (oral Maus): 1340-1954 mg/kg	/7/
Akute Humantoxizität	ZNS-Schäden, Methämoglobinbildung, Cyanose, Leber- und Nierenschäden	/7/
Chron. tierexp. Toxizität	oral NOAEL(Hund): 0,2 mg/kg KG * d (Neurotoxizität)	/22/
Chron. Humantoxizität	ZNS-Schäden, Methämoglobinbildung, Cyanose	/7/
RfD/ TRD/ TDI/ UR	RfD: oral 0,002 mg/kg KG * d	/22/
Äq	TDI: 0,2 µg/kg KG * d	/2/
	Äq: 1 (kurzfristige Exposition), 5 (langfristige Exposition)	/14/
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	tumorigen; mutagen; reproduktiver Effektor	/20/
	IARC: 2B (im Tierversuch krebserzeugend)	/20/
	EPA:	
MAK	Isomergemisch: 2 (im Tierversuch eindeutig krebserzeugend)	/1/

3,4-Dinitrotoluol

CAS-Nr.	610-39-9	
Synonyme	3,4-DNT	
Summenformel	C ₇ H ₆ N ₂ O ₄	
Molekulargewicht		
Physik.-chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 58,3-59,8	/7/
	Siedepunkt [°C]:	
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]:	
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]:	

Verwendung	Nebenprodukt der TNT-Herstellung	/7/
Verhalten in der Umwelt	wenig mobil; mittlere Geo- und Bioakkumulationstendenz	/7/
Aufnahme, Verteilung, Wirkungsmechanismus, Elimination	aromat. Nitroverbindungen: Reduktion der Nitrogruppe zu Hydroxylaminen und aromatischen Aminen über die Zwischenstufe der Nitroso-Aromaten; Metabolisierungsreaktion in der Leber und an Erythrocyten (Methämoglobin); Sulfatierung; Glutathion-Konjugate; Glucuronide; Metabolite können DNA-Addukte bilden; Elimination der Metabolite über Niere und Urin; Metabolisierung: Reduktion der Nitrogruppe durch die intestinale Mikroflora, Oxidation der Methylgruppe in der Leber; Glucuronidierung; Acetylierung	/7/
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 1072 mg/kg	/5/
	LD ₅₀ (oral Maus): 1414 mg/kg	/5/
Akute Humantoxizität	Leberschäden, Ikterus, Kopfschmerzen, Übelkeit, Schwäche, Erbrechen, ZNS-Schäden, Methämoglobinbildung, Cyanose, Hämolyse	/7/
Chron. tierexp. Toxizität		
Chron. Humantoxizität	Methämoglobinbildung, Cyanose, ZNS-Schäden	/7/
RfD/ TRD/ TDI/ UR		
Äq		
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	mutagen	/20/
MAK	Isomergemisch: 2 (im Tierversuch eindeutig krebserzeugend)	/1/

3,5-Dinitrotoluol

CAS-Nr.	618-85-9	
Synonyme	3,5-DNT	
Summenformel	C ₇ H ₆ N ₂ O ₄	
Molekulargewicht	182,15	
Physik.- chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 93	/7/
	Siedepunkt [°C]:	
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]:	
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]:	

Verwendung	Nebenprodukt der TNT-Herstellung	/7/
Verhalten in der Umwelt	wenig mobil; mittlere Geo- und Bioakkumulationstendenz	/7/
Aufnahme, Verteilung, Wirkungsmechanismus, Elimination	aromat. Nitroverbindungen: Reduktion der Nitrogruppe zu Hydroxylaminen und aromatischen Aminen über die Zwischenstufe der Nitroso-Aromaten; Metabolisierungsreaktion in der Leber und an Erythrocyten (Methämoglobin); Sulfatierung; Glutathion-Konjugate; Glucuronide; Metabolite können DNA-Addukte bilden; Elimination der Metabolite über Niere und Urin; Metabolisierung: Reduktion der Nitrogruppe durch die intestinale Mikroflora, Oxidation der Methylgruppe in der Leber; Glucuronidierung; Acetylierung	/7/
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 216-309 mg/kg	/5/
	LD ₅₀ (oral Maus): 611-607 mg/kg	/5/
Akute Humantoxizität	Leberschäden, Ikterus, Kopfschmerzen, Übelkeit, Schwäche, Erbrechen, ZNS-Schäden, Methämoglobinbildung, Cyanose, Hämolyse	/7/
Chron. tierexp. Toxizität		
Chron. Humantoxizität	Methämoglobinbildung, Cyanose, ZNS-Schäden	/7/
RfD/ TRD/ TDI/ UR		
Äq		
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	tumorigen, mutagen	/20/
	IARC: 3 (nicht ausreichender Beweis f. Kanzerogenität beim Menschen)	/20/
MAK	Isomergemisch: 2 (im Tierversuch eindeutig krebserzeugend)	/1/

2-Amino-4,6-Dinitrotoluol

CAS-Nr.	35572-78-2	
Synonyme	2-A-4,6-DNT	
Summenformel	C ₇ H ₇ N ₃ O ₄	
Molekulargewicht	197,17	
Physik.- chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 173-255	/7/
	Siedepunkt [°C]:	
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]:	
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]:	

Verwendung	Metabolit von TNT	/71
Verhalten in der Umwelt	Fische (<i>Pimephales promelas</i>): LC ₅₀ 5-15 mg/l; kein Bioakkumulationspotential	/71, /24/
Aufnahme, Verteilung, Wirkungsmechanismus, Elimination	aromat. Nitroverbindungen: Reduktion der Nitrogruppe zu Hydroxylaminen und aromatischen Aminen über die Zwischenstufe der Nitroso-Aromaten; Metabolisierungsreaktion in der Leber und an Erythrocyten (Methämoglobin); Sulfatierung; Glutathion-Konjugate; Glucuronide; Metabolite können DNA-Addukte bilden; Elimination der Metabolite über Niere und Urin	/71
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 1394 mg/kg	/20/
	LD ₅₀ (oral Maus): 1522 mg/kg	/20/
Akute Humantoxizität		
Chron. tierexp. Toxizität		
Chron. Humantoxizität		
RfD/ TRD/ TDI/ UR		
Äq	Äq: 0,5 (langfristige Exposition)	/14/
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	mutagen	/20/
MAK		

4-Amino-2,6-Dinitrotoluol

CAS-Nr.	19406-51-0	
Synonyme	4-Amino-2,6-dinitrotoluol	
Summenformel	C ₇ H ₇ N ₃ O ₄	
Molekulargewicht	197,17	
Physik.- chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 167-255	/71

	Siedepunkt [°C]:	
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]:	
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]:	
Verwendung	Metabolit von TNT	/7/
Verhalten in der Umwelt	Fische (<i>Pimephales promelas</i>): LC ₅₀ 6,9-10 mg/l; kein Bioakkumulationspotential	/7/, /24/
Aufnahme, Verteilung, Wirkungsmechanismus, Elimination	aromat. Nitroverbindungen: Reduktion der Nitrogruppe zu Hydroxylaminen und aromatischen Aminen über die Zwischenstufe der Nitroso-Aromaten; Metabolisierungsreaktion in der Leber und an Erythrocyten (Methämoglobin); Sulfatierung; Glutathion-Konjugate; Glucuronide; Metabolite können DNA-Addukte bilden; Elimination der Metabolite über Niere und Urin	/7/
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 959 mg/kg	/20/
	LD ₅₀ (oral Ratte): 1318 mg/kg	/20/
Akute Humantoxizität		
Chron. tierexp. Toxizität		
Chron. Humantoxizität		
RfD/ TRD/ TDI/ UR		
Äq	Äq: 0,1 (langfristige Exposition)	/14/
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	mutagen	/20/
MAK		

1,3,5-Trinitrobenzol

CAS-Nr.	99-35-4
Synonyme	1,3,5-TNB
Summenformel	C ₆ H ₃ N ₃ O ₄
Molekulargewicht	213,11

Physik.- chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 122,5-123,2	/7/
	Siedepunkt [°C]: 315	/7/
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]: 0,00043	/7/
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]:	
Verwendung	in Gieß- und Preßladung; mikrobielles Abbauprodukt von TNT	/7/
Verhalten in der Umwelt	keine Hydrolyse; Gefahr kumulativer Wirkung; geringe Geoakkumulationstendenz; keine Bioakkumulation; in Wasser Photolyse	/7/
Aufnahme, Verteilung, Wirkungsmechanismus, Elimination	Hautresorption; arom. Nitroverbindungen: Reduktion der Nitrogruppe zu Hydroxylaminen und aromatischen Aminen über die Zwischenstufe der Nitroso-Aromaten; Metabolisierungsreaktion in der Leber und an Erythrocyten (Methämoglobin); Sulfatierung; Glutathion-Konjugate; Glucuronide; Metabolite können DNA-Addukte bilden; Elimination der Metabolite über Niere und Urin; Überschreitung der Blut/Hirnschranke	/7/
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 280 mg/kg	/7/
	LD ₅₀ (oral Maus): 32 mg/kg	/20/
Akute Humantoxizität	Methämoglobinbildung, Cyanose, Anämie, Leber- und Nierenschäden	/7/
Chron. tierexp. Toxizität	oral NOAEL(Ratte): 2,7 mg/kg KG * d	/22/
Chron. Humantoxizität	Methämoglobinbildung; Cyanose	/7/
RfD/ TRD/ TDI/ UR	RfD: 0,03 mg/kg KG * d	/22/
Äq	Äq: 2 (kurzfristige Exposition); 5 (langfristige Exposition)	/14/
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und	mutagen	/20/

Fetotoxizität

MAK

1,3-Dinitrobenzol

CAS-Nr.	99-65-0	
Synonyme	1,3-Dinitrobenzol	
Summenformel	C ₆ H ₄ N ₂ O ₄	
Molekulargewicht	99-65-0	
Physik.- chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 89,9-90	/71/
	Siedepunkt [°C]: 297-303	/71/
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]: < 0,013	/24/
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]: 20900	/71/
Verwendung	als Ersatz für TNT in Explosivstoffen	/71/
Verhalten in der Umwelt	keine Hydrolyse; Fische (Pimephales promelas) LC ₅₀ 5-15 mg/l; Reduktion unter anaeroben Bedingungen zu m-Nitroanilin; aerober und anaerober Abbau; Photolyse	/71/
Aufnahme, Verteilung, Wirkungsmechanismus, Elimination	Hautresorption; arom. Nitroverbindungen: Reduktion der Nitrogruppe zu Hydroxylaminen und aromatischen Aminen über die Zwischenstufe der Nitroso-Aromaten; Metabolisierungsreaktion in der Leber und an Erythrocyten (Methämoglobin); Sulfatierung; Glutathion-Konjugate; Glucuronide; Metabolite können DNA-Addukte bilden; Elimination der Metabolite über Niere und Urin	/71/
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 59500 µg/kg	/20/
	LD ₅₀ (oral Maus): 74700 µg/kg	/20/
Akute Humantoxizität	Anämie, Cyanose, Leberschäden, Methämoglobinbildung	/71/
Chron. tierexp. Toxizität	oral NOAEL(Ratte): 3 ppm (subchron.)	/22/
Chron. Humantoxizität	für Hund: Methämoglobinbildung; ZNS-Schäden, Leber- und Milzschäden	/71/
RfD/ TRD/ TDI/ UR	RfD: 0,0001 mg/kg KG * d	/20/

Äq	TDI: 0,014 µg/kg KG * d (vorläufig)	/2/
	Äq: 10 (kurzfristige Exposition); 0,5 (langfristige Exposition)	/14/
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	mutagen, reproduktiver Effektor	/20/
	EPA: D (nicht klassifizierbar)	/22/
MAK	alle Isomere: 3 (begründeter Verdacht auf krebserzeugendes Potential)	/1/

2-Nitrotoluol

CAS-Nr.	88-72-2	
Synonyme	o-Nitrotoluol, o-Methylnitrobenzol	
Summenformel	C ₇ H ₇ NO ₂	
Molekulargewicht	137,15	
Physik.- chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: - 9,5 (Nadeln), -2,9 (Kristalle)	/7/
	Siedepunkt [°C]: 222	/7/
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]:	/24/
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]: 437	/7/
Verwendung	in Gesteins- und Bergbausprengstoffen; Zwischenprodukt der TNT-Herstellung	/7/
Verhalten in der Umwelt	Wassergefährdender Stoff (WGK 2); aerobe und anaerobe mikrobielle Metabolisierung; mikrobiell schwer abbaubar	/7/
Aufnahme, Verteilung, Wirkungs- mechanismus, Elimination	Hautresorption; Resorption über die Lungen und den Magen-Darm-Trakt; arom. Nitroverbindungen: Reduktion der Nitrogruppe zu Hydroxylaminen und aromatischen Aminen über die Zwischenstufe der Nitroso-Aromaten; Metabolisierungsreaktion in der Leber und an Erythrocyten (Methämoglobin); Sulfatierung; Glutathion-Konjugate; Glucuronide; Metabolite können DNA-Addukte bilden; Elimination der Metabolite über Niere und Urin	/7/
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 891 mg/kg	/20/
	LD ₅₀ (oral Maus): 970 mg/kg	/20/
Akute Humantoxizität	Akute Vergiftung ab 0,7 mg/m ³ ; Methämoglobinbildung, Cyanose, Lähmung und Erregung des ZNS, Leberschäden, Nierenschäden; Kopfschmerzen, Übelkeit, Brechreiz, Schwindel, Atembeschwerden, Kollaps, Bewußtlosigkeit, Krämpfe, leichte Reizung der Augen, Muskelschwäche	/7/

Chron. tierexp. Toxizität	oral LOAEL (Ratte): 200 mg/kg KG * d	/22/
Chron. Humantoxizität	Methämoglobinbildung, Cyanose, Anämie	/7/
RfD/ TRD/ TDI/ UR Äq	RfD: 0,01 mg/kg KG * d Äq: 0,02 (kurzfristig), 150 (langfristig)	/20/ /2/
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	tumorigen, mutagen, reproduktiver Effektor IARC: 3 (nicht ausreichender Beweis f. Kanzerogenität beim Menschen) EPA:	/14/ /20/ /22/
MAK	2 (im Tierversuch eindeutig krebserzeugend)	/1/

3-Nitrotoluol

CAS-Nr.	99-08-1	
Synonyme	m-Nitrotoluol, m-Methylnitrobenzol	
Summenformel	C ₇ H ₇ NO ₂	
Molekulargewicht	137,15	
Physik.- chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 15,5 Siedepunkt [°C]: 231,9 bei 760 mm Hg Dampfdruck [Pa bei 20°C]: Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]: 500	/23/ /23/ /23/
Verwendung	Nebenprodukt der TNT-Produktion, Zwischenprodukt der Pestizid- und Farbenherstellung	/7/
Verhalten in der Umwelt	Wassergefährdender Stoff (WGK 2); aerobe und anaerobe mikrobielle Metabolisierung; geringe Bioakkumulation	/7/
Aufnahme, Verteilung, Wirkungsmechanismus, Elimination	Hautresorption; Resorption über die Lungen und den Magen-Darm-Trakt; arom. Nitroverbindungen: Reduktion der Nitrogruppe zu Hydroxylaminen und aromatischen Aminen über die Zwischenstufe der Nitroso-Aromaten; Metabolisierungsreaktion in der Leber und an Erythrocyten (Methämoglobin); Sulfatierung; Glutathion-Konjugate; Glucuronide; Metabolite können DNA-Addukte bilden; Elimination der Metabolite über Niere und Urin	/7/

Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 1072 mg/kg	/20/
	LD ₅₀ (oral Maus): 330 mg/kg	/20/
Akute Humantoxizität	Methämoglobinbildung, Cyanose, Lähmung und Erregung des ZNS, Leberschäden, Nierenschäden; Kopfschmerzen, Übelkeit, Brechreiz, Schwindel, Atembeschwerden, Kollaps, Bewußtlosigkeit, Krämpfe, leichte Reizung der Augen und der Haut, Muskelschwäche	/7/
Chron. tierexp. Toxizität		
Chron. Humantoxizität	Methämoglobinbildung, Cyanose, Anämie	/7/
RfD/ TRD/ TDI/ UR Äq	RfD: 0,01 mg/kg KG * d	/21/
	Äq: 0,02 (kurzfristig)	/16/
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	tumorigen, mutagen, reproduktiver Effektor	/20/
	IARC: 3 (nicht ausreichender Beweis f. Kanzerogenität beim Menschen)	/20/
	EPA:	
MAK	5 ml/m ³ , 28 mg/m ³	/1/

4-Nitrotoluol

CAS-Nr.	99-99-0	
Synonyme	p-Nitrotoluol, p-Methylnitrobenzol	
Summenformel	C ₇ H ₇ NO ₂	
Molekulargewicht	137,15	
Physik.- chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 53-54	/23/
	Siedepunkt [°C]: 238,3 bei 760 mm Hg	/23/
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]:	
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]: 442 bei 30 °C	/23/
Verwendung	in Gesteins- und Bergbausprengstoffen; Vorprodukt der TNT-Herstellung; Zwischenprodukt der Farbenherstellung	/7/
Verhalten in der Umwelt	Wassergefährdender Stoff (WGK 2); anaerobe mikrobielle Metabolisierung; geringe Bioakkumulation; mikrobiell schwer abbaubar	/7/

Aufnahme, Verteilung, Wirkungsmechanismus, Elimination	Hautresorption; Resorption über die Lungen und den Magen-Darm-Trakt; arom. Nitroverbindungen: Reduktion der Nitrogruppe zu Hydroxylaminen und aromatischen Aminen über die Zwischenstufe der Nitroso-Aromaten; Metabolisierungsreaktion in der Leber und an Erythrocyten (Methämoglobin); Sulfatierung; Glutathion-Konjugate; Glucuronide; Metabolite können DNA-Addukte bilden; Elimination der Metabolite über Niere und Urin	/7/
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 1960 mg/kg	/20/
	LD ₅₀ (oral Maus): 1231 mg/kg	/20/
Akute Humantoxizität	Methämoglobinbildung, Cyanose, Lähmung und Erregung des ZNS, Leberschäden, Nierenschäden; Kopfschmerzen, Übelkeit, Brechreiz, Schwindel, Atembeschwerden, Kollaps, Bewußtlosigkeit, Krämpfe, leichte Reizung der Augen und der Haut, leichte Nasen- und Rachenreizung	/7/
Chron. tierexp. Toxizität		
Chron. Humantoxizität	Methämoglobinbildung, Cyanose, Anämie	/7/
RfD/ TRD/ TDI/ UR Äq	RfD: 0,01 mg/kg KG * d	/21/
		/16/
		/20/
	Äq: 0,05 (kurzfristig)	/20/
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	tumorigen, mutagen, reproduktiver Effektor	
	IARC: 3 (nicht ausreichender Beweis f. Kanzerogenität beim Menschen)	/1/
	EPA:	
MAK	5 ml/m ³ , 28 mg/m ³	

Hexyl

CAS-Nr.	131-73-7
Synonyme	Bis(2,4,6-trimethylphenyl)amin, Hexanitrodiphenylamin, Dipikrylamin
Summenformel	C ₁₂ H ₅ N ₇ O ₁₂
Molekulargewicht	439-24

Physik.- chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 238	/23/
	Siedepunkt [°C]:	
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]:	
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]:	
Verwendung		
Verhalten in der Umwelt		
Aufnahme, Verteilung, Wirkungsmechanismus, Elimination		
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): > 500 mg/kg	/20/
Akute Humantoxizität		
Chron. tierexp. Toxizität		
Chron. Humantoxizität		
RfD/ TRD/ TDI/ UR		
Äq		
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	tumorigen, mutagen	/20/
MAK		

Oktofen

CAS-Nr.	2691-41-0	
Synonyme	HMX, Tetramethylen tetranitramin	
Summenformel	C ₄ H ₈ N ₈ O ₈	
Molekulargewicht	296,20	
Physik.- chem. Daten	Schmelzpunkt [°C]: 282	/7/

	Siedepunkt [°C]:	
	Dampfdruck [Pa bei 20°C]:	
	Wasserlöslichkeit [mg/l bei 20°C]:	
Verwendung	Verwendung mit technischen Hexogen in militärischen Sprengstoffen (Octol); Nebenprodukt der Hexogen-Herstellung	/7/
Verhalten in der Umwelt	Photolyse	/7/
Aufnahme, Verteilung, Wirkungsechanismus, Elimination		
Akute Toxizität (Tier)	LD ₅₀ (oral Ratte): 6490 mg/kg	/7/
	LD ₅₀ (oral Maus): 1500 mg/kg	/7/
Akute Humantoxizität	Hyperaktivität und Krämpfe	/15/
Chron. tierexp. Toxizität	oral NOAEL(Ratte): 50 mg/kg KG * d	/22/
Chron. Humantoxizität	Wirkungen auf das ZNS und das cardiovasculäre System; leichte Methämoglobinbildung;	/15/
RfD/ TRD/ TDI/ UR Äq	RfD: 50 mg/kg KG * d	/22/
Kanzerogenität, Mutagenität, Teratogenität, Embryo- und Fetotoxizität	mutagene Aktivität festgestellt	/11/
MAK	EPA: D (nicht klassifizierbar)	/22/

4 Methodik zur Beurteilung der Humantoxizität von Schadstoffen und zur Bewertung von Schadstoffkonzentrationen in Grundwasser

4.1 Grundlagen zur Bewertung der Humantoxizität von Schadstoffen

Zur humantoxikologischen Bewertung von Schadstoffen muss eine Dosis-Wirkungsabschätzung vorgenommen werden, damit eine Aussage über die mit der Dosis eines Stoffes verbundene Intensität bzw. Häufigkeit der Schädigung getroffen werden kann. Hierfür werden meist tierexperimentelle Untersuchungen herangezogen, da oft nur wenige bzw. schlecht reproduzierbare Humandaten vorliegen. Bei der Dosis-Wirkungsabschätzung wird zwischen nicht-karzinogenen und karzinogen wirkenden Stoffen unterschieden. Nicht-karzinogene wirkende Substanzen haben eine Wirkschwelle, die unter Berücksichtigung von (Un)sicherheitsfaktoren als Gesamtkörperdosen eines Gefahrstoffes (tägliche Aufnahmemengen, die nicht zu nachteiligen Wirkungen führen) ausgedrückt werden. Dagegen kann für karzinogene wirkende Stoffe kein Schwellenwert angegeben werden, unterhalb dessen eine Wirkung auszuschließen ist. Hier können nur als tolerabel angenommene Körperdosen aus Risikoabschätzungen ermittelt werden, die dann mit einem abgeschätzten Krebsrisiko verbunden sind. Ein Krebsrisiko von 10^{-5} bis 10^{-6} wird als sog. praktisch sichere Dosis („virtually safe-dose“) betrachtet. In der vorliegenden Gefährdungsbewertung wird in Anlehnung an [8] das zumutbare Krebsrisiko auf $1 : 10^5$ begrenzt, d.h. auf 100000 Einwohner kann ein zusätzlicher Krebsfall bei lebenslanger Exposition gegenüber dem Schadstoff entfallen.

4.2 Prinzipielle Möglichkeiten der humantoxikologischen Bewertung von STV-Konzentrationen in Trink-/Grundwasser

Eine Bewertung von STV-Konzentrationen in Trink-/Grundwasser kann orientierend, expositionsunabhängig sowie quantitativ, expositionsabhängig und durch Anwendung des Minimierungsgebotes erfolgen:

- Orientierend, expositionsunabhängig:
 - Vergleich gemessener/prognostizierter STV-Konzentrationen mit toxikologisch gestützten, expositionsunabhängigen Vergleichswerten:
 - Vorsorgewerte (BGA)
 - Richtwerte (BGA).
- Quantitativ, **expositionsabhängig**:
 - Vergleich toxikologisch abgeleiteter, tolerabler Gesamtkörperdosen:
 - „tolerable daily intake“ - TDI Krebsrisiko nur im (Un)sicherheitsfaktor berücksichtigt (BGA)

- tolerable resorbierte Dosis - TRD zusätzliches Krebsrisiko 1 : 10⁵ /4/ mit expositions- bzw. nutzungsabhängig tatsächlich aufgenommenen Schadstoffmengen.
- Anwendung des Minimierungsgebotes ALARA („As Low As Reasonably Achievable“ = so wenig Belastung wie vernünftigerweise bzw. mit vertretbarem Aufwand erreichbar) für die Konzentrationsbewertung kanzerogener und/oder genotoxischer Schadstoffe (Uni Würzburg).

In den folgenden Kapiteln werden die aufgeführten Möglichkeiten für die Bewertung der Einzelstoffe erläutert.

4.2.1 Expositionsunabhängige Bewertung

Die expositionsunabhängige Bewertung erfolgt in 2 Stufen /10/, /2/

1. Ableitung einer dimensionslosen Bewertungszahl (BZ) zwischen 1 und 100.
2. Zuordnung toxikologisch gestützter Orientierungskonzentrationen für die Trinkwassergewinnung am Nutzungsort.

Die Bewertungszahl wird aus fünf verschiedenen Informationsbereichen nach einer standardisierten Methodik abgeleitet. Folgende Kriterien gehen in die Ermittlung ein:

- Vollständigkeit der getesteten Kriterien (subchronische bzw. chronische Toxizität, Reproduktionstoxizität, subchronische bzw. chronische Immuntoxizität, Toxikokinetik, Biochemie, Genotoxizität),
- Dosis/Wirkungsbeziehung (NOAEL, LOAEL, Sicherheitsfaktoren),
- Kanzerogenität (Gruppe A, B1, B2, B3, C, D),
- Sonstige toxikologische Prüfungen (Bewertung von Toxikokinetik, Biochemie, Enzymaktivität, Genotoxizität),
- Humantoxikologie.

Die Bewertungszahlen sind zur Ableitung **toxikologisch gestützter** und darüber hinaus trinkwasserhygienisch akzeptabler Konzentrationsbereiche in der Trinkwasserefassung geeignet. Sie dürfen aber **nicht** mit „echten“ **toxikologisch begründeten** Grenz- oder Richtwerten verwechselt werden /9/.

Zur Ableitung der Orientierungswerte werden die Schadstoffe nach ihrer BZ in sechs Klassen eingeordnet, denen jeweils ein Konzentrationsbereich zugeordnet ist (Tabelle 1).

Tabelle 1: Toxizitätsklassen und Orientierungskonzentrationen für die Bewertungszahlen BZ (nach:/2/)

BZ	Toxikologische Einstufung		Orientierungskonzentration
	Begründung	Toxizitätsklasse	
100 bis 90	hoch toxisch oder humankanzerogen A oder Initiator	I	nicht nachweisbar bis 0,1 µg/l
89 bis 68	stark toxisch und min. B2	II	> 0,1 µg/l bis 1 µg/l

BZ	Toxikologische Einstufung		Orientierungskonzentration
	Begründung	Toxizitätsklasse	
67 bis 51	stark toxisch oder mäßig und min. B3	IIIa	> 1 µg/l bis 3 µg/l
50 bis 34	oder schwach tox. und min. B2	IIIb	> 3 µg/l bis 10 µg/l
33 bis 12	mäßig toxisch oder schwach tox. und min. D	IV	> 10 µg/l bis 100 µg/l
11 bis 2	schwach toxisch	V	> 100 µg/l bis 10000 µg/l
1	toxikologisch nicht relevant	VI	> 10000 µg/l

Erläuterung:

A eindeutig humankanzerogen;

B1 eindeutig kanzerogen im Tierversuch als Initiator oder Anfangsverdacht aus Humandaten bei wahrscheinlicher Initiatorwirkung;

B2 Initiatorwirkung im Tierversuch zweifelhaft und/oder begründeter Anfangsverdacht aus Tier- und Strukturdaten;

B3 oral wie Gruppe C; andere Pfade aber wie B2/B1/A;

C nicht kanzerogen bei adäquater Testung;

D nicht adäquat getestet, aber kein Verdacht aus Strukturdaten

4.2.2 Expositionsabhängige Bewertung

- Gesamtkörperdosis (TDI-Wert)

Vom Institut für Wasser-, Boden- und Lufthygiene (WaBoLu) des ehemaligen Bundesgesundheitsamtes wurden gesundheitlich unschädliche Körperdosen (TDI-Werte) abgeleitet, soweit LOAEL- bzw. NOAEL-Werte für die STV vorlagen. Dabei wurden (Un)Sicherheitsfaktoren berücksichtigt (Tabelle 2).

Tabelle 2: LOAEL-, NOAEL-Werte, (Un)Sicherheitsfaktoren, TDI-Werte für STV (nach: DIETER 1994a)

Nr	Stoff	CAS-Nr	LOAEL	NOAEL	(Un)Sicherheitsfaktoren				TDI
					SF _a	SF _c	SF _d	SF _{mka}	
			[mg/kg KG*d]	[mg/kg KG*d]					[µg/kg KG*d]
1	Hexogen	121-82-4	-	0,3	1	10	10	10	0,3
2	2,4,6-TNT	118-96-7	0,5	0,05	1	10	10	10	0,05*
3	2,6-DNT	606-20-2	-	-	-	-	-	-	-
4a	2,4-DNT	121-14-2	-	0,2	1	10	10	10	0,2
4b	3,4-DNT	610-39-9	-	-	-	-	-	-	-
4c	3,5-DNT	618-85-9	-	-	-	-	-	-	-
5a	2-A-4,6-DNT	35572-78-2	-	-	-	-	-	-	-

Nr Stoff	CAS-Nr	LOAEL	NOAEL	(Un)Sicherheitsfaktoren				TDI
				SF _a	SF _c	SF _d	SF _{mka}	
		[mg/kg KG*d]	[mg/kg KG*d]					[µg/kg KG*d]
5b 4-A-2,6-DNT	19406-51-0	-	-	-	-	-	-	-
6a 1,3,5-TNB	99-35-4	-	-	-	-	-	-	-
6b 1,3-DNB	99-65-0	0,4	0,04	≥3	10	10	10	0,014*
7a 2-NT	88-72-2	-	-	-	-	-	-	-
7b 3-NT	99-08-1	-	-	-	-	-	-	-
7c 4-NT	99-99-0	-	-	-	-	-	-	-
8 Hexyl	131-73-7	-	-	-	-	-	-	-
9 Oktogen	2691-41-0	-	-	-	-	-	-	-

Erläuterung:

SF_a zur Hochrechnung von subchronischer auf chronische Expositionsdauer;

SF_c zur Abdeckung der zwischenartlichen Varianz zwischen Mensch und Versuchstier;

SF_d zur Abdeckung der innerartlichen Varianz beim Menschen;

SF_{mka} zur Abschätzung der möglichen Humankanzerogenität;

* Toxizitätspotential läßt sich nur vorläufig bewerten

- Gesamtkörperdosis (TRD-Wert)

Nach /14/ und /15/ kann eine Bewertung der toxischen Wirkung von Nitroaromaten folgendermaßen vorgenommen werden:

- Bei kurzfristiger Exposition wird eine Bewertung von Gesundheitsgefahren über die hämatotoxische Wirkung der Verbindung, insbesondere der Fähigkeit zur Methämoglobinbildung durchgeführt (TRD für akute Exposition).
- Bei langfristiger Exposition werden die genotoxischen und krebserzeugenden Effekte herangezogen (TRD für chronische Exposition bei einem zusätzlichen Krebsrisiko von $1 : 10^5$).

Für die toxikologische Bewertung von Nitroaromaten wird 2,4,6-TNT als Referenzverbindung gewählt und dessen Wirkungsstärke mit Hilfe von entsprechend auf akute und chronische Exposition bezogenen TRD-Werten erfasst. Nach dem Vergleich der Toxizität der Referenzverbindung mit der anderer Nitroaromaten (STV) können Äquivalenzfaktoren gebildet werden, die die Wirkungsstärke der betrachteten Substanz im Vergleich zu 2,4,6-TNT zeigen (Tabelle 3). Somit werden Wirkungen verschiedener STV (aber mit gleichen toxikologischen Endpunkten) normier- und kombinierbar.

Tabelle 3: TRD-Werte, Äquivalenzfaktoren bei kurz- und langfristiger Exposition (nach: /14/, /15/, /16/)

Nr. Stoff	CAS-Nr	TRD	Äquivalenzfaktor	TRD	Äquivalenzfaktor
		akut	akut	chronisch	chronisch

			[µg/kg KG * d] [Äq]		[µg/kg KG * d] [Äq]	
1	Hexogen	121-82-4	-	-	-	-
2	2,4,6-TNT	118-96-7	10	1	0,33	1
3	2,6-DNT	606-20-2	-	0,5	-	150
4a	2,4-DNT	121-14-2	-	1	-	5
4b	3,4-DNT	610-39-9	-	-	-	-
4c	3,5-DNT	618-85-9	-	-	-	-
5a	2-A-4,6-DNT	35572-78-2	-	-	-	0,5
5b	4-A-2,6-DNT	19406-51-0	-	-	-	0,1
6a	1,3,5-TNB	99-35-4	-	2	-	5
6b	1,3-DNB	99-65-0	-	10	-	0,5
7a	2-NT	88-72-2	-	0,02	-	150
7b	3-NT	99-08-1	-	0,02	-	-
7c	4-NT	99-99-0	-	0,05	-	-
8	Hexyl	131-73-7	-	-	-	-
9	Oktogen	2691-41-0	-	-	-	-

Erläuterung:

Für Hexogen, 3-NT, 4-NT, Hexyl und Oktogen liegt aufgrund anderer toxikologischer Endpunkte kein Äquivalenzfaktor vor

- Gesamtkörperdosis (RfD-Wert)

Für einige Stoffe werden vom Wasser-, Boden- und Lufthygiene-Institut und vom Umweltbundesamt keine tolerierbaren Gesamtkörperdosen angegeben. Daher wurde eine Recherche nach Referenzdosen der amerikanischen Environmental Protection Agency vorgenommen. Die Ergebnisse werden in Tabelle 4 dargestellt.

Tabelle 4: RfD-Werte (nach: /21/ und /22/)

Nr.	Stoff	CAS-Nr	RfD	Gesamtkörperdosis bei Krebsrisiko von 10 ⁻⁵
			[µg/kg KG * d]	[µg/kg KG * d]
1	Hexogen	121-82-4	3	0,09
2	2,4,6-TNT	118-96-7	0,5	0,33
3	2,6-DNT	606-20-2	-	0,015 *
4a	2,4-DNT	121-14-2	2	-
4b	3,4-DNT	610-39-9	-	-
4c	3,5-DNT	618-85-9	-	-
5a	2-A-4,6-DNT	35572-78-2	-	-
5b	4-A-2,6-DNT	19406-51-0	-	-

Nr.	Stoff	CAS-Nr	RfD	Gesamtkörperdosis bei Krebsrisiko von 10^{-5}
			[$\mu\text{g}/\text{kg KG} \cdot \text{d}$]	[$\mu\text{g}/\text{kg KG} \cdot \text{d}$]
6a	1,3,5-TNB	99-35-4	30	-
6b	1,3-DNB	99-65-0	0,1	-
7a	2-NT	88-72-2	10	-
7b	3-NT	99-08-1	10	-
7c	4-NT	99-99-0	10	-
8	Hexyl	131-73-7	-	-
9	Oktogen	2691-41-0	50	-

Erläuterung:

* = Gilt für das Gemisch 2,4- und 2,6-DNT

- **Bewertung der STV-Konzentration durch Vergleich mit Prüfwerten**

Eine Bewertung der gemessenen oder prognostizierten STV-Kontamination ist durch Vergleich der STV-Konzentrationen mit Besorgnis- und Prüfwerten möglich. Für die vorliegenden TDI-Werte (s. Tab. 2), TRD-Werte (Tabelle 3), RfD-Werte bzw. Körperdosis mit einem Krebsrisiko von 10^{-5} (s. Tab. 4) können rein toxikologisch begründete Besorgniswerte („B-Wert“) bzw. Prüfwerte („P-Wert“) für Trinkwasser abgeleitet werden. Nach /3/ kann für die Berechnung von Besorgniswerten bei einer akut zu behebenden Kontaminationssituation eine Zufuhr von mindestens 20 - 40% des jeweiligen TDI mit täglich 2 l Trinkwasser angenommen werden.

4.2.3 Kombinationswirkungen

Wenn für die Einzelstoffe eines Gemisches von Nitroaromaten Äquivalenzfaktoren vorliegen, kann nach /14/ und /15/ eine Bewertung der Belastung unter Beachtung von Kombinationswirkungen in Anlehnung an die toxikologische Beurteilung von Dioxingemischen erfolgen. Dafür müssen die Konzentrationen der Schadstoffe $c(x)$ mit dem jeweiligen Äquivalenzfaktor $\ddot{A}q(x)$ multipliziert und anschließend aufsummiert werden.

Gleichung 1

$$\sum_x c(x) \cdot \ddot{A}q(x) \geq \text{Prüfwert}$$

x = Index für Schadstoff

c(x) = Konzentration des Schadstoffes x im aufgenommenen Medium, z.B. für Wasser in [$\mu\text{g}/\text{l}$]

$\ddot{A}q(x)$ = Äquivalenzfaktor für Schadstoff x [$\ddot{A}q$]

Zur Bewertung wird die Summe der tatsächlich in Abhängigkeit von der Exposition aufgenommenen Schadstoffäquivalente (hier: TNT-Äquivalente) mit dem entsprechend toxikologisch abgeleiteten Prüfwert verglichen. Dieser Prüfwert stellt den kleinsten, denkbaren Gefahrenwert dar.

4.3 Angewandte Methodik der humantoxikologischen Bewertung von STV-Konzentrationen in Grundwasser

Für die vorliegende toxikologische Bewertung bestand die Notwendigkeit, die dargestellten prinzipiellen Möglichkeiten auf den konkreten Begutachtungsfall anzuwenden. Dazu war es notwendig, die methodischen Schritte (5 Stufen) zu formulieren, Expositionsszenarien und Konventionen festzulegen und fallspezifische Prüfwerte für Einzelstoffe abzuleiten bzw. zu berechnen. Zusätzlich zu den Prüfwerten wurden zur Gewichtung der Gefährdung Gefahrenwerte (= $10 \cdot \text{Prüfwert}$) definiert.

Die Bewertung der Schadstoffkonzentrationen an den Kontaminationsquellen und den Trinkwasserfassungen (hohe/niedrige Entnahme) erfolgte zunächst orientierend, expositionsunabhängig und anschließend quantitativ, expositionsabhängig in insgesamt fünf Stufen:

Orientierend, expositionsunabhängig:

Stufe 1: Vergleich der Schadstoffkonzentrationen mit toxikologisch gestützten **Vorsorgewerten**

Stufe 2: Vergleich der Schadstoffkonzentrationen mit toxikologisch gestützten **Richtwerten**

Quantitativ, expositionsabhängig:

Stufe 3: Vergleich der expositionsabhängig aufgenommenen Schadstoffmenge/Konzentration mit der chronisch tolerablen Menge/Konzentration (TDI bzw. TRD bei einem zusätzlichen Krebsrisiko von $1 : 10^5$) **Prüfwert** (kleinster denkbare Gefahrenwert)

Stufe 4: Vergleich der expositionsabhängig aufgenommenen Schadstoffmenge/Konzentration mit der 10fachen chronisch tolerablen Menge/Konzentration ($10 \cdot \text{TDI}$ bzw. $10 \cdot \text{TRD}$ bei einem zusätzlichen Krebsrisiko von $1 : 10^5$) **Gefahrenwert** (Gefährdung der menschlichen Gesundheit mit hinreichender Wahrscheinlichkeit gegeben)

Stufe 5: Vergleich der expositionsabhängig aufgenommenen Schadstoffmenge/Konzentration (als aufsummierte TNT-Äquivalente) mit der auf TNT-Äquivalente normierten 1 und 10fachen chronisch tolerablen Menge/Konzentration (ohne Hexogen) (1 bzw. $10 \cdot \text{TDI}$ bzw. $10 \cdot \text{TRD}$ bei einem Krebsrisiko von $1 : 10^5$) **Prüf- bzw. Gefahrenwert** (TNT-normiert)

Für die Kontaminationsquellen wird zusätzlich die akute Exposition durch Schadstoffe berücksichtigt, da unter ungünstigen Umständen bereits bei wenigen Schadstoffkontakten Gesundheitsgefährdungen möglich sind und vor allem bei Sanierungsarbeiten und Störfällen eine Bewertung kurzfristiger Spitzenbelastungen von Bedeutung ist (SRU 1995).

4.3.1 Expositionsunabhängige Bewertung

Mit Hilfe von Bewertungszahlen BZ (4.2.1) können für STV Orientierungskonzentrationen (toxikologisch gestützte Richtwerte) ermittelt werden. In Tabelle 5 werden diese toxikologisch gestützten Richtwerte nach ihrer Ableitung über die Kanzerogenität bzw. Genotoxizität und die Bewertungszahl im Vergleich mit dem Vorsorge-Richtwert nach der Trinkwasserverordnung (TrinkwV) dargestellt.

Tabelle 5: STV-spezifische Daten, Bewertungszahl, Toxizitätsklasse, toxikologisch gestützter Richtwert und Vorsorgewert nach TrinkwV (nach: DIETER 1994a und WOLLIN et al. 1996)

Nr.	Stoff	CAS-Nr	bewert- bar?	Kanzero- genität	Geno- toxizität	BZ	Tox.- klasse	TW- Richtwert tox. gestützt [µg/l]	TW- Richtwert Vorsorge [µg/l]
1	Hexogen	121-82-4	+	(B2)	nicht	49	IIIb	3	0,1
2	2,4,6-TNT	118-96-7	(+)	(B2)	strittig genotoxisch	80*	II	1	0,1
3	2,6-DNT	606-20-2	+	B1	genotoxisch	100	I		0,1
4a	2,4-DNT	121-14-2	+	B2	strittig genotoxisch	59	IIIa	3	0,1
4b	3,4-DNT	610-39-9	--	(B2)	strittig genotoxisch	keine			0,1
4c	3,5-DNT	618-85-9	--	(B2)	vorerst strittig genotoxisch	keine			0,1
5a	2-A-4,6-DNT	35572-78-2	--	(B2)	vorerst genotoxisch	100*	I		0,1
5b	4-A-2,6-DNT	19406-51-0	--	(B2)	vorerst genotoxisch	100*	I		0,1
6a	1,3,5-TNB	99-35-4	(+)	(B2)	vorerst genotoxisch	100*	I	0,1	0,1
6b	1,3-DNB	99-65-0	(+)	(B2)	vorerst genotoxisch	92*	I	0,1	0,1
7a	2-NT	88-72-2	(+)	(B1)	vorerst genotoxisch	100	I	0,1	0,1
7b	3-NT	99-08-1	(+)	(B2)	strittig	56*	IIIa	1,0	0,1

Nr.	Stoff	CAS-Nr	bewert- bar?	Kanzero- genität	Geno- toxizität	BZ	Tox.- klasse	TW- Richtwert tox. gestützt [µg/l]	TW- Richtwert Vorsorge [µg/l]
					genotoxisch				
7c	4-NT	99-99-0	(+)	(B2)	vorerst strittig genotoxisch	65*	IIIa	1,0	0,1
8	Hexyl	131-73-7	--	(B2)	genotoxisch	100	I		0,1
9	Oktogen	2691-41-0	--	(B2)	vorerst nicht genotoxisch	keine		1,0	0,1

Erläuterung:

BZ Bewertungszahl;

TW Trinkwasser;

+ Stoff ist per BZ ausreichend sicher bewertbar;

() Stoff per BZ nur vorläufig toxikologisch bewertbar bzw. wurde nur für praktische Zwecke einer Kanzerogenitätsklasse zugeordnet;

* Toxizitätspotential lässt sich nur vorläufig bewerten;

strittig Datenbasis für die Beurteilung der Genotoxizität ist ausreichend, die Bewertung strittig;

-- Stoff ist nicht oder nur sehr unsicher bewertbar

Für die Einzelstoffe Hexogen, 2,4,6-TNT, 2,4-DNT, 1,3,5-TNB, 1,3-DNB, 3-NT, 2-NT, 4-NT und Oktogen ist ein Vergleich der im Grundwasser vorliegenden Konzentrationen mit den toxikologisch gestützten TW-Richtwerten möglich. Außerdem können alle STV nach dem Vorsorge-Richtwert nach der Trinkwasserverordnung bewertet werden.

4.3.2 Expositionsabhängige Bewertung

In der vorliegenden Bewertung wird die Exposition für die beiden Nutzergruppen Kinder und Erwachsene unterschieden. Dabei wird hypothetisch angenommen, dass die Nutzer eine bestimmte Menge des Grund- bzw. Rohwassers aufnehmen. Weitere Nutzungsszenarien, wie z.B. episodisch genutzter Trinkwasserbrunnen, Nutzung des Wassers als Gießwasser, Schadstoffaufnahme über die Pflanzen, dermalen Kontakt mit dem Wasser beim Duschen oder Baden werden in der vorliegenden Bewertung nicht berücksichtigt.

Für die vorliegenden Gesamtkörperdosen (Tabelle 2) werden toxikologisch begründete Besorgniswerte („B-Werte“) und Prüfwerte („P-Werte“) berechnet. Bei der Berechnung der Besorgniswerte wird eine Aufnahme von 20 - 40% der tolerablen Gesamtkörperdosis und für die Prüfwerte eine 100%ige Aufnahme angenommen. Damit entsprechen die Besorgniswerte 20 bzw. 40% der Prüfwerte. Zusätzlich zu B- und P-Werten werden Gefahrenwerte („G-Werte“ = 10 * „P-Wert“) ermittelt. Dieses Verfahren ist für die Bewertung von kontaminiertem Grund- bzw. Trinkwasser wegen eindeutig gegebenen Expositionsszenarien nicht zwingend notwendig, erleichtert jedoch die Gewichtung der Gefährdung. In den folgenden Gleichungen wird die Berechnung der Prüf- und Gefahrenwerte aufgezeigt:

Berechnung des Prüfwertes nach dem TDI- bzw. TRD-Wert:

Gleichung 2

$$\text{Prüfwert(TDI bzw. TRD)} = \text{TDI bzw. TRD} \cdot \frac{\text{KG}}{\text{A}}$$

KG Körpergewicht [kg KG]:

70 [kg KG] für die Nutzergruppe Erwachsene;

10 [kg KG] für die Nutzergruppe Kinder

A Aufnahme rate des Schadstoffes x im aufgenommenen Medium, z.B. für Wasser in [l/d]:

2 [l/d] für die Nutzergruppe Erwachsene;

1 [l/d] für die Nutzergruppe Kinder

Berechnung des TNT-normierten Prüfwertes:

Gleichung 3

$$\text{Prüfwert}(TRD_{TNT}) = TRD_{TNT} \cdot \frac{\text{KG}}{\text{A}}$$

TRD_{TNT} 0,33 [$\mu\text{g}/\text{kg KG} \cdot \text{d}$]

KG Körpergewicht [kg KG]:

70 [kg KG] für die Nutzergruppe Erwachsene;

10 [kg KG] für die Nutzergruppe Kinder

A Aufnahme rate des Schadstoffes x im aufgenommenen Medium, z.B. für Wasser in [l/d]:

2 [l/d] für die Nutzergruppe Erwachsene;

1 [l/d] für die Nutzergruppe Kinder

Gleichung 4

$$\text{Prüfwert}(TRD) = \frac{\text{Prüfwert}(TRD)_{TNT}}{\ddot{A}q(x)}$$

$\ddot{A}q(x)$ Äquivalenzfaktor für Schadstoff x

Berechnung des Gefahrenwertes nach dem TDI- bzw. TRD-Wert:

Gleichung 5

$$\text{Gefahrenwert}(TDI \text{ bzw. } TRD) = \text{Prüfwert}(TDI \text{ bzw. } TRD) \cdot 10$$

Berechnung des TNT-normierten Gefahrenwertes:

Gleichung 6

$$\text{Gefahrenwert}(TRD) = \text{Prüfwert}(TRD) \cdot 10$$

Mit Hilfe dieser Gleichungen werden die Besorgnis-, Prüf- und Gefahrenwerte nach Ableitung vom TDI für die Stoffe Hexogen, 2,4,6-TNT, 2,4-DNT, 1,3-DNB berechnet (Tabelle 6).

Tabelle 6: Besorgnis- („B-Wert“), Prüf- („P-Wert“) und Gefahrenwerte („G-Wert“) für STV in Wasser nach Ableitung von TDI-Werten für Kinder und Erwachsene

Nr.	Stoff	Vergleichswerte für Kinder (10 kg KG; 1 l Trinkmenge)				Vergleichswerte für Erwachsene (70 kg KG; 2 l Trinkmenge)			
		[µg/l]				[µg/l]			
		„B-Wert“	„P-Wert“	„G-Wert“	„G-Wert“	„B-Wert“	„P-Wert“	„G-Wert“	„G-Wert“
		20%	40%	100%	1000%	20%	40%	100%	1000%
1	Hexogen	0,6	1,2	3	30	2,1	4,2	10,5	105
2	2,4,6-TNT	0,1	0,2	0,5	5	0,35	0,7	1,75	17,5
3	2,6-DNT	-	-	-	-	-	-	-	-
4a	2,4-DNT	0,4	0,8	2	20	1,4	2,8	7	70
4b	3,4-DNT	-	-	-	-	-	-	-	-
4c	3,5-DNT	-	-	-	-	-	-	-	-
5a	2-A-4,6-DNT	-	-	-	-	-	-	-	-
5b	4-A-2,6-DNT	-	-	-	-	-	-	-	-
6a	1,3,5-TNB	-	-	-	-	-	-	-	-
6b	1,3-DNB	0,03	0,06	0,14	1,4	0,098	0,2	0,49	4,9
7a	2-NT	-	-	-	-	-	-	-	-
7b	3-NT	-	-	-	-	-	-	-	-
7c	4-NT	-	-	-	-	-	-	-	-
8	Hexyl	-	-	-	-	-	-	-	-
9	Oktogen	-	-	-	-	-	-	-	-

Erläuterung: Die 20, 40, 100 und 1000% - Angaben beziehen sich auf den TDI

Entsprechende Ableitungen des TNT normierten Besorgnis-, Prüf- und Gefahrenwertes werden in Tabelle 7 für die kurzfristige Exposition und in Tabelle 8 für die langfristige Exposition gezeigt. Bei kurz- und langfristiger Exposition können B-, P- und G-Werte für 2,4,6-TNT, 2,6-DNT, 2,4-DNT, 1,3,5-TNB, 1,3-DNB und 2-NT angegeben werden. Für die Aminodinitrotoluole können nur bei langfristiger Exposition und für die NTs nur bei kurzfristiger Exposition entsprechende Vergleichswerte aufgeführt werden.

Tabelle 7: Besorgnis- („B-Wert“), Prüf- („P-Wert“) und Gefahrenwert („G-Wert“) für STV in Wasser nach Ableitung von TRD-Werten bzw. Äquivalenzfaktoren 0 bei kurzfristiger Exposition für Kinder und Erwachsene

Nr.	Stoff	Vergleichswerte für Kinder				Vergleichswerte für Erwachsene			
		(10 kg KG; 1 l Trinkmenge)				(70 kg KG; 2 l Trinkmenge)			
		[µg/l]				[µg/l]			
		„B-Wert“		„P-Wert“		„G-Wert“		„G-Wert“	
20%	40%	100%	1000%	20%	40%	100%	1000%		
1	Hexogen	-	-	-	-	-	-	-	-
2	2,4,6-TNT	20	40	100	1000	70	140	350	3500
3	2,6-DNT	40	80	200	2000	140	280	700	7000
4a	2,4-DNT	20	40	100	1000	70	140	350	3500
4b	3,4-DNT	-	-	-	-	-	-	-	-
4c	3,5-DNT	-	-	-	-	-	-	-	-
5a	2-A-4,6-DNT	-	-	-	-	-	-	-	-
5b	4-A-2,6-DNT	-	-	-	-	-	-	-	-
6a	1,3,5-TNB	10	20	50	500	35	70	175	1750
6b	1,3-DNB	2	4	10	100	7	14	35	350
7a	2-NT	1000	2000	5000	50000	3500	7000	17500	175000
7b	3-NT	1000	2000	5000	50000	3500	7000	17500	175000
7c	4-NT	400	800	2000	20000	1400	2800	7000	70000
8	Hexyl	-	-	-	-	-	-	-	-
9	Oktofen	-	-	-	-	-	-	-	-

Erläuterung: Die 20, 40, 100 und 1000% - Angaben beziehen sich auf den TRD

Tabelle 8: Besorgnis- („B-Wert“), Prüfwert („P-Wert“) und Gefahrenwert („G-Wert“) für STV in Wasser nach Ableitung von TRD-Werten bzw. Äquivalenzfaktoren 0 und 0 bei langfristiger Exposition für Kinder und Erwachsene

Nr.	Stoff	Vergleichswerte für Kinder				Vergleichswerte für Erwachsene			
		(10 kg KG; 1 l Trinkmenge)				(70 kg KG; 2 l Trinkmenge)			
		[µg/l]				[µg/l]			
		„B-Wert“		„P-Wert“		„G-Wert“		„G-Wert“	
20%	40%	100%	1000%	20%	40%	100%	1000%		
1	Hexogen	-	-	-	-	-	-	-	-
2	2,4,6-TNT	0,66	1,32	3,3	33	2,3	4,6	11,5	115

Nr.	Stoff	Vergleichswerte für Kinder (10 kg KG; 1 l Trinkmenge) [µg/l]				Vergleichswerte für Erwachsene (70 kg KG; 2 l Trinkmenge) [µg/l]			
		„B-Wert“	„P-Wert“	„G-Wert“	„G-Wert“	„B-Wert“	„P-Wert“	„G-Wert“	„G-Wert“
		20%	40%	100%	1000%	20%	40%	100%	1000%
4c	3,5-DNT	-	-	-	-	-	-	-	-
5a	2-A-4,6-DNT	-	-	-	-	-	-	-	-
5b	4-A-2,6-DNT	-	-	-	-	-	-	-	-
6a	1,3,5-TNB	60	120	300	3000	210	420	1050	10500
6b	1,3-DNB	0,2	0,4	1	10	0,7	1,4	3,5	35
7a	2-NT	20	40	100	1000	70	140	350	3500
7b	3-NT	20	40	100	1000	70	140	350	3500
7c	4-NT	20	40	100	1000	70	140	350	3500
8	Hexyl	-	-	-	-	-	-	-	-
9	Oktofen	100	200	500	5000	350	700	1750	17500

Erläuterung: Die 20, 40, 100 und 1000% - Angaben beziehen sich auf den RfD-Wert bzw. die Gesamtkörperdosis mit einem Krebsrisiko von 10^{-5}

4.3.3 Zusammenfassung der Bewertungsgrundlagen für die expositionsunabhängige und -abhängige Bewertung

In Tabelle 10 werden die Vergleichswerte für die expositionsabhängige und -unabhängige Bewertung zusammengestellt. Dabei wird zwischen den Nutzergruppen Kinder und Erwachsene sowie zwischen kurz- und langfristiger Exposition unterschieden.

Tabelle 10: Expositionsun- und expositionsabhängigen Vergleichswerte in [µg/l] für die vierstufige Bewertung

Stoffe	Expositionsunabhängig		Expositionsabhängig							
	Stufe 1	Stufe 2	Stufe 3	Stufe 4	Stufe 3	Stufe 4	Stufe 3	Stufe 4	Stufe 3	Stufe 4
			Kinder				Erwachsene			
			kurzfristig		langfristig		kurzfristig		langfristig	
	Vorsorgewert	Richtwert	100%-P-Wert	1000%-G-Wert	100%-P-Wert	1000%-G-Wert	100%-P-Wert	1000%-G-Wert	100%-P-Wert	1000%-G-Wert
Hexogen	0,1	3	-	-	3	30	-	-	10,5	105
2,4,6-TNT	0,1	1	100	1000	3,3	33	350	3500	11,5	115
2,6-DNT	0,1	-	200	2000	0,02	0,22	700	7000	0,08	0,8
DNTs	0,1	3	100	1000	0,66	6,6	350	3500	2,31	23,1
A-DNTs	0,1	-	-	-	6,6	66	-	-	23,1	231
NBs	0,1	0,1	10	100	0,66	6,6	35	350	2,31	23,1
2-NT	0,1	0,1	5000	50000	0,02	0,22	17500	175000	0,08	0,8
NTs	0,1	1	2000	20000	100	1000	7000	70000	350	3500
Hexyl	0,1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Oktofen	0,1	1	-	-	500	5000	-	-	1750	17500

Erläuterung:

Die expositionsabhängigen Vergleichswerte für Hexogen werden vom TDI abgeleitet, für die NTs und Oktofen vom RfD und für die übrigen Stoffe werden die Vergleichswerte vom TRD abgeleitet;

DNTs 2,4-DNT + 3,4-DNT + 3,5-DNT;

A-DNTs 2-A-4,6-DNT + 4-A-2,6-DNT;

NBs 1,3,5-TNB + 1,3-DNB

NTs 3-NT + 4-NT

4.3.4 Kombinationswirkungen

Auch bei der Bewertung von Kombinationswirkungen wird zwischen kurz- und langfristiger Exposition unterschieden. Die entsprechenden Prüfwerte können aus Tabelle 10 entnommen werden. Für die Nutzergruppe Kinder wurde ein Prüfwert von 100 µg Äq/l bei kurzfristiger Exposition bzw. 3 µg Äq/l bei langfristiger Exposition berechnet. Entsprechende Berechnungen für die Nutzergruppe Erwachsene ergaben Prüfwerte von 350 µg Äq/l (akut) bzw. 11,5 µg Äq/l (chronisch). Der Gefahrenwert ist entsprechend um den Faktor 10 höher.

5 Zusammenfassung

Die Gefährdung der menschlichen Gesundheit durch Vertreter der sprengstofftypischen Verbindungen (STV) im Grundwasser erfolgte orientierend, expositionsunabhängig sowie

quantitativ, expositionsabhängig in insgesamt fünf Stufen unter Berücksichtigung von Kombinationswirkungen.

Durch den Vergleich der Wirkungsstärken der STV (mit Ausnahme von Hexogen) mit der gewählten Referenzsubstanz 2,4,6-Trinitrotoluol wurde die Toxizität der STV bei gleichem toxikologischen Endpunkt mit Hilfe von Äquivalenzfaktoren normier- und kombinierbar. Jedoch konnte die Bewertung der Kombinationswirkung mit Hilfe von TNT-Äquivalenten nicht gemeinsam für alle Kontaminanten durchgeführt werden, da sich die toxikologischen Endpunkte von Hexogen von denen der übrigen STV unterscheiden. Daher wurde die Gesamtbewertung durch die Betrachtung der Wirkung des noch nicht berücksichtigten Einzelstoffes Hexogen ergänzt.

6 Literatur

- /1/ Dfg (1998): MAK- und BAT-Werte-Liste. Senatskommission zur Prüfung gesundheitsschädlicher Arbeitsstoffe. Mitteilung 34. VCH, Weinheim.
- /2/ DIETER, H.H. (1994a): Kriterien und Konzentrationsvorschläge zur gesundheitlichen Bewertung von 35 Sprengstofftypischen Verbindungen und Abbauprodukten in Böden und Trinkwasser. WaBoLu-Hefte 7/1994.
- /3/ DIETER, H.H. (1994B): Humantoxikologische Bewertung von sprengstofftypischen Verbindungen und Abbauprodukten (STV). CPM. Bewertung von sprengstoffspezifischen Schadstoffen auf Rüstungs- und militärischen Standorten. 22.-23. November 1994.
- /4/ FOBIG (1996): Toxikologische Begleitung für das UMS. Stoff: 2,4,6-Trinitrotoluol.
- /5/ GREIM, H. (1994): Gesundheitsschädliche Arbeitsstoffe. Toxikologisch-arbeitsmedizinische Begründung von MAK-Werten (Maximale Arbeitsplatz-Konzentration). VCH, München.
- /6/ HAAS, R. (1992): Konzepte zur Untersuchung von Rüstungsaltslasten. Abfallwirtschaft in Forschung und Praxis, 55. Erich Schmidt Verlag, Berlin.
- /7/ HAAS, R. (1994): Explosivstofflexikon mit Stoffdatenblättern, Mischungslexikon und Synonymverzeichnis. 2. erweiterte Auflage.
- /8/ HASSAUER, M., KALBERLAH, F., OLTMANN, J., SCHNEIDER, K. (1993): Basisdaten Toxikologie für umweltrelevante Stoffe zur Gefahrenbeurteilung bei Altlasten. Forschungsbericht 10203443/01. Im Auftrag des Umweltbundesamtes.
- /9/ HÖRING, H. (1994A): Toxikologische Bewertung einzelner Explosivstoffe, Vorprodukte und Metabolite im Grund- und Trinkwasser. CPM. Bewertung von sprengstoffspezifischen Schadstoffen auf Rüstungs- und militärischen Standorten. 25.-26. April 1994.
- /10/ HÖRING, H. (1994B): Toxikologische Bewertung einzelner Explosivstoffe, Vorprodukte und Metabolite im Grund- und Trinkwasser. CPM. Bewertung von sprengstoffspezifischen Schadstoffen auf Rüstungs- und militärischen Standorten. 22.-23. November 1994.
- /11/ KÖHLER, J., MEYER, R. (1998): Explosivstoffe. 9. Auflage, VCH, Weinheim.
- /12/ KOSS, G., LOMMEL, A., OLLROGE, I., TESSERAUX, I., HAAS, R., KAPPOS, A.D. (1992): Zur Toxikologie der Nitrotoluole aus rüstungsbedingten Altlasten. In: Expertengespräch Rüstungsaltslasten am 25.-26. April 1989 in Hannover. Dokumentation einer Veranstaltung des Niedersächsischen Umweltministeriums.
- /13/ NEUMANN, H.-G. (1994): humantoxikologische Bewertung von Nitroaromaten. In: CPM-Symposium „Bewertung von sprengstoffspezifischen Schadstoffen auf Rüstungs- und militärischen Standorten“, Bad Godesberg.

- /14/ SCHNEIDER, K., HASSAUER, M., KALBERLAH, F. (1994A): Toxikologische Bewertung von Rüstungsaltslasten. II.: Bewertung der toxischen Potenz nitroaromatischer Schadstoffe. UWSF - Z. Umweltchem. Ökotox. 6 (6), 333-340.
- /15/ SCHNEIDER, K.; HASSAUER, M.; KALBERLAH, F. (1994B): Vorschlag zur bodenbezogenen Summenbewertung von 15 sprengstofftypischen Verbindungen (STV). Anhang 2 zum Bericht des Bundesgesundheitsamtes vom Mai 1994.
- /16/ SCHNEIDER, K.; OTTMANN, J.; HASSAUER, M.; KALBERLAH, F. (1995): Toxikologische Bewertung von Rüstungsaltslasten. In: Rippen - Handbuch Umweltchemikalien.
- /17/ SRU (1995): Altslasten II. Sondergutachten.
- /18/ UGM (1995): Toxikologische Bewertung von mit sprengstofftypischen Verbindungen (STV) und Chlorbenzolen kontaminiertem Grundwasser auf/außerhalb der Bundeswehr-Liegenschaft MunHptDp41.
- /19/ UGM (1997): Toxikologische Bewertung von mit sprengstofftypischen Verbindungen (STV) kontaminiertem Grundwasser auf der Rüstungsaltslast WASAG Elsnig (MOST-Projekt).
- /20/ US DEPARTMENT OF HEALTH AND HUMAN SERVICES (1998): Registry of toxic effects of chemical substances (RTECS). ChemBank.
- /21/ US EPA (1997): Health Effects Assessment Summary Table FY 1997 Update. PB97-921199
- /22/ US EPA (1998): Integrated Risk Information System (IRIS). ChemBank.
- /23/ US NATIONAL LIBRARY OF MEDICINE (1998): Hazardous substance database (HSDB). In: Chem-Bank.
- /24/ WENZEL, A., GRUNDMANN, B., DIEDRICH, M. (1991): Rüstungsaltslasten in Niedersachsen. Physikalisch-chemische, öko- und humantoxikologische Stoffdaten ausgewählter aromatischer Amine, Aminonitroaromaten, Nitroaromaten und Nitroamine. Auftragnehmer: Fraunhofer-Institut für Umweltchemie und Ökotoxikologie, Auftraggeber: Niedersächsisches Landesamt für Wasser und Abfall.
- /25/ WOLLIN, K.M.; HÖRING, H.; DIETER, H.H. (1996): Kriterien zur toxikologischen Bewertung sprengstofftypischer Verbindungen (STV). UWSF - Z. Umweltchem. Ökotox. 8, 261-266.

Anlage 1 -Glossar-

A	Aufnahmerate des Schadstoffes x für den betrachteten Aufnahmeweg
Anämie	sog. Blutarmut; Verminderung der Erythrocytenzahl, der Hämoglobinkonzentration und/oder des Hämatokrit (zelluläre Bestandteile des Blutes)
Äq	Äquivalenzfaktor; hier: Äquivalenzfaktor für nitroaromatische Verbindungen
Blut/Hirn-Schranke	selektiv durchlässige Schranke zwischen Blut und Hirnsubstanz, durch die der Stoffaustausch mit dem ZNS einer aktiven Kontrolle unterliegt; Schutz Einrichtung, die schädliche Stoffe von den Nervenzellen abhält; erhöhte Durchlässigkeit durch Bakterientoxine, Fieber ...
B-Wert	Besorgniswert: entspricht dem Vorsorgewert nach dem künftigen BBodSchG, der die Besorgnis bzw. Möglichkeit einer schädlichen Bodenveränderung mit humantoxikologischem Bezug darstellt
BZ	(toxikologische) Bewertungszahl

Cyanose	blau-rote Färbung von Haut und Schleimhäuten infolge Abnahme des Sauerstoffgehaltes im Blut
EPA	U.S. Environmental Protection Agency
Glucuronide	Verbindungen der Glucuronsäure mit endo- und exogenen Substanzen (Glykoside); wichtige Entgiftungsreaktion in der Leber
Glutathion	zum Redoxsystem gehörendes wichtiges Tripeptid; Funktion als Coenzym
G-Wert	Gefahrenwert: Schadstoffkonzentration im Transfermedium, für die bei ungehindertem Geschehensablauf (Exposition) eine Schädigung der menschlichen Gesundheit, und zwar als Folge der Überschreitung des O-Wertes, hinreichend wahrscheinlich wäre. Bei Erreichen oder Überschreitung eines G-Wertes entsteht deshalb die Notwendigkeit, Maßnahmen zu treffen, die dieser Gefahr entgegenwirken
Hämolyse	Auflösung bzw. Abbau der Erythrocyten
Heinz-Körper	in Erythrocyten vorhandenes, oxidativ denaturiertes Hämoglobin; kommen z.B. bei bestimmten zu Methämoglobinämie führenden Intoxikationen (Vergiftungen durch z.B. Anilin, Aromatische Nitroverbindungen) vor
Hepatitis	Entzündung des Leberparenchyms
IARC	International Agency for Research on Cancer
Ikterus	Gelbsucht
kanzerogen	Krebserzeugendes Agens
KG	Abkürzung für Körpergewicht
Kumulation	allmähliche Anhäufung von Substanzen im Organismus bei wiederholter Dosis, wenn die Einzelgaben schneller erfolgen, als die Substanz eliminiert werden kann
LD	(„lethal dose low“) - niedrigste aufgenommene Dosis einer Substanz, die in einer bestimmten Zeit tödlich wirkt
LD ₅₀	(„lethal dose fifty“) - berechnete Dosis einer Substanz, für die der Tod von 50% der Versuchstiere angenommen wird
LOAEL	(„lowest observed adverse effect level“) - niedrigste Dosis mit beobachteter, als schädlich bewerteter Wirkung; LOAEL _{TV} =LOAEL aus einem Tierversuch ermittelt; LOAEL _e = LOAEL für die empfindlichste Risikogruppe; LOAEL _E = LOAEL für eine durchschnittlich empfindliche Subpopulation
LOEL	(„lowest observed effect level“) - niedrigste Dosis mit beobachteter Wirkung
Methämoglobinbildung	Das im Hämoglobin enthaltene Eisen wird zur dreiwertigen Form oxidiert;
mutagen	Mutationen erzeugend

NOAEL	(„no observed adverse effect level“) - höchste Dosis ohne beobachtete, als schädlich bewerteter Wirkung; $NOAEL_{TV}$ = NOAEL aus einem Tierversuch ermittelt; $NOAEL_e$ = NOAEL für die empfindlichste Risikogruppe; $NOAEL_E$ = NOAEL für eine durchschnittlich empfindliche Subpopulation
NOEL	(„no observed effect level“) - höchste Dosis ohne beobachtete Wirkung
O-Wert	Orientierungswert für Stoffe mit Wirkschwelle: stellt pfadspezifische (inhalativ, dermal, oral) resorbierte Stoffdosis dar, deren Einhaltung oder Unterschreitung unter den festgelegten Rahmenbedingungen mit hinreichender Wahrscheinlichkeit (noch) gesundheitlich unbedenklich ist; bei vorgegebenen Expositionszeitraum O-Wert = TRD Orientierungswerte für Stoffe ohne Wirkschwelle: in diesem Fall kann kein umsetzbarer gesundheitlich unbedenklicher oder wenigstens akzeptierbarer O-Wert angegeben werden, es lässt sich nur in Abhängigkeit vom gesellschaftlich akzeptierten Risiko ein O-Wert mit Hilfe konsensfähiger Verfahren zur Risikoabschätzung errechnen
P-Wert	Prüfwert: ist identisch mit dem ortsspezifisch zu benennenden, tiefsten noch denkbaren und wirklichkeitsnahen G-Wert (Gefahrenwert)
RfD	(„reference dose“); Abschätzung einer täglichen Exposition, bei der für den Menschen (einschließlich sensibler Personengruppen) wahrscheinlich keine Risiken bzgl. schädliche Effekte während der Lebenszeit auftreten
SF_a	Faktor zur Hochrechnung von subchronischer auf chronische Expositionsdauer (Faktor 10)
SF_b	Faktor zur Abschätzung eines $NOAEL_{TV}$ aus einem experimentellen $LOAEL_{TV}$, oder zur Ableitung eines $NOAEL_E$ aus einem epidemiologisch ermittelten $LOAEL_E$ oder zur Abschätzung eines $NOAEL_e$ aus einem $LOAEL_e$ (Faktor 4-10)
SF_c	Faktor zur Abdeckung der zwischenartlichen Varianz zwischen Mensch und Versuchstier (Faktor 10)
SF_d	Faktor zur Abdeckung der innerartlichen Varianz beim Menschen. Falls der $NOAEL_E$ aus Tierversuch abgeleitet wurde $SF_d' = 10$, falls der $NOAEL_E$ epidemiologisch ermittelt wurde $SF_d'' = 4-10$
SF_{mka}	Faktor zur Abschätzung der möglichen Humankanzerogenität
STV	Abkürzung für sprengstofftypische Verbindungen
TDI	„tolerable daily intake“ in [$\mu\text{g}/\text{kg KG} \cdot \text{d}$] orale Aufnahme; bedeutungsgleich mit DTA bzw. MUTA (maximale ubiquitäre (umweltbedingte, unvermeidliche) tägliche Aufnahme)
TRD	maximal tolerable Körperdosis = tolerierbare resorbierte Dosis, wobei der resorbierte Anteil der Schadstoffmenge an der zugeführten Menge berücksichtigt wird; bei den sehr gut resorbierten nitroaromatischen Stoffen wird bei oraler Aufnahme von 100% Resorption ausgegangen, d.h. die resorbierte Menge entspricht der zugeführten Menge; diese Körperdosis beinhaltet (Un)Sicherheitsfaktoren, wenn z.B. tierexperimentelle Daten auf

den Menschen übertragen werden; ähnliche Methodik bei der Ermittlung des TDI (= „tolerable daily intake“) von WHO bzw. bei der Ermittlung der Referenzdosen von der EPA

Unit-Risk; UR geschätztes zusätzliches Risiko, daß eine Erkrankung durch Krebs eintritt, wenn eine dauernde inhalative Exposition gegenüber dem Gefahrstoff über Lebenszeit (70 Jahre) in Höhe von $1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ besteht; bei oraler Exposition bedeutet das Unit-Risk analog das Risiko bei einer Aufnahme von $1 \mu\text{g}$ des Gefahrstoffes pro Liter Wasser; während sich das Unit-Risk streng genommen auf die Konzentration des Schadstoffes im Umweltmedium bezieht ($\mu\text{g}/\text{m}^3$ bzw. $\mu\text{g}/\text{l}$), wird das auf die Körperdosis bezogene Risiko mit dem sog. slope-factor gekennzeichnet; dieser hat die Einheit $1/(\text{mg}/\text{kg KG} \cdot \text{d})$; in der Praxis werden die Begriffe jedoch meist nicht differenziert