Umweltforschungsplan
des Bundesministeriums für Umwelt,
Naturschutz und Reaktorsicherheit

Gewässergüte und Wasserwirtschaft

Förderkennzeichen (UFOPLAN) 297 23 663

Anwendung von Modellen zur Abschätzung der Grundwassergefährdung durch organische Stoffe aus Reststoffen

von

Dr. Michael Klein

Fraunhofer-Institut
für Umweltchemie und Ökotoxikologie
57392 Schmallenberg

Institutsleiter:
Prof. Dr. W. Klein

IM AUFTRAG
DES UMWELTBUNDESAMTES

Schmallenberg, 31. August 2000

Umweltforschungsplan
des Bundesministeriums für Umwelt,
Naturschutz und Reaktorsicherheit

Gewässergüte und Wasserwirtschaft

Förderkennzeichen (UFOPLAN) 297 23 663

Anwendung von Modellen zur Abschätzung der Grundwassergefährdung durch organische Stoffe aus Reststoffen

von

Dr. Michael Klein

Fraunhofer-Institut
für Umweltchemie und Ökotoxikologie
57392 Schmallenberg

Institutsleiter:
Prof. Dr. W. Klein

IM AUFTRAG
DES UMWELTBUNDESAMTES

Schmallenberg, 31. August 2000

Berichts - Kennblatt

1. Berichtsnummer	2.	3.
297 23 663		Gewässergüte und Wasserwirtschaft

4. Titel des Berichts

Die Anwendung von Modellen zur Abschätzung der Grundwassergefährdung durch organische Stoffe aus Reststoffen

5. Autor(en), Name(n), Vorname(n)	8. Abschlußdatum
Klein, Michael	31.August 2000
	9. Veröffentlichungsdatum: 31. August 2000
	10. UFOPLAN - Nr.: 297 23 663
6. Durchführende Institution (Name, Anschrift)	
Fraunhofer-Institut für Umweltchemie und Ökotoxikologie, Am Aberg 1 57392 Schmallenberg	11. Seitenzahl: 152 (Anhänge: 44, 204 und 27)
	12. Literaturangaben: 41
7. Fördernde Institution (Name, Anschrift)	13. Tabellen: 45 (ohne Anhänge)
Umweltbundesamt Postfach 33 00 22 14191 Berlin	14. Abbildungen: 68 (ohne Anhänge)

15. Zusätzliche Angaben

16. Kurzfassung

In diesem Vorhaben wurde das deterministische Versickerungsmodell PELMO um zwei zusätzliche Transportprozesse erweitert (schneller Stofftransport über das Makroporensystem ohne Einstellung von Sorptionsgleichgewichten, sowie Transport von Stoffen im Bodenwasser gebunden an Huminsäuren) und das erweiterte Modell in das stochastische Abschätzmodell MCPELMO 2.0 eingebaut. Im neuentwickelten MCPELMO 2.0 sind insgesamt 22 Versickerungsszenarien definiert, die auf einer Kombination der Bodenregionenkarte der Bundesrepublik Deutschland (12 Bodenregionen) mit 9 repräsentativen Klimastationen basieren, von denen tägliche Temperatur- und Niederschlagsdaten über einen Zeitraum von 30 Jahren vorlagen. Parallel zu der Modellentwicklung wurden Nomogramme auf der Basis der Algorithmen von MCPELMO 2.0 erstellt, mit denen die Sickerwasserkonzentrationen ebenfalls grafisch abgeschätzt werden konnten. Die Ergebnisse des Simulationsprogramms MCPELMO 2.0 wurden mit ausführlichen Simulationen über jeweils 1000 Jahre mit dem Computerprogramm PELMO verglichen. Die Analyse zeigte, dass das (im Vergleich mit PELMO) um Größenordnungen schnellere Screeningmodell MCPELMO 2.0 in der Lage war, sinnvolle Konzentrationen im Sickerwasser für die meisten Substanzen abzuschätzen. Darüber hinaus kann davon ausgegangen werden, dass die Abschätzung im Vergleich mit einer ausführlichen Simulation konservativ ist, das heißt das MCPELMO 2.0 die Konzentrationen tendenziell über- und nicht unterschätzt. Geringere Konzentrationen als bei den ausführlichen PELMO-Simulationen traten nur bei Substanzen mit KOC-Werten oberhalb von 5000 L/kg bzw. Halbwertszeiten oberhalb von 2000 Tagen auf.

17. Schlagwörter Computermodell, PELMO, MCPELMO, Simulationsmodell
Klärschlamm, Reststoff, Grundwassergefährdung, Sickerwasserkonzentrationen,
Nomogramme, stochastische Modellierung, Versickerungspotenzial

18. Preis	19.	20.

1. Report No. UBA-FB 297 23 663	2.	3. water quality and management

4. Report Title

The use of models for the estimation of
the hazard potential for groundwater by organic pollutants in soild waste

5. Author(s), Family Name(s), First Name(s)
Klein, Michael

8. Report Date

August 31, 2000

9. Publication Date

August 31, 2000

10. UFOPLAN - Ref.No.

297 23 663

6. Performing Organisation (Name, Adress)

Fraunhofer-Institut für Umweltchemie und Ökotoxikologie,
Am Aberg 1
57392 Schmallenberg

11. No. of Pages

151 (appendices: 44, 204 and 27)

12. No. of References

41

7. Sponsoring Agency (Name, Adress)

Umweltbundesamt
Postfach 33 00 22
14191 Berlin

13. No. of Tables and Diagrams

45 (without appendices)

14. No. of Figures

68 (without appendices)

15. Supplementary Notes

16. Abstract

In this study the deterministic leaching model PELMO was extended in order to consider two additional transport processes (fast transport via the macro porous flow system without equilibrium conditions with respect to sorption, and transport of pollutants in the soil water bound to humic substances). The extended model was implemented into the stochastic estimation model MCPELMO 2.0. The new development has built in 22 leaching scenarios based on a combination of the German soil regions map (12 soil regions) and 9 representative weather stations. As daily temperature and precipitation data over a period of 30 years were available the influence of climatic fluctuations on the percaloate concentrations could be considered. In parallel to the model development nomograms were calculated based on the algorithms of MCPELMO 2.0 making it possible to estimate concentrations in leachate also graphically. The results of the MCPELMO 2.0 simulations were compared with comprehensive simulations over a period of 1000 years performed with the computer model PELMO. The analysis showed that the screening model MCPELMO 2.0 that was orders of magnitude faster than PELMO was nevertheless able to estimate concentrations close to PELMO for most of the substances. It was additionally concluded that the results of the estimation model behave conservative compared to the comprehensive simulations: MCPELMO is often slightly overestimating pollutant concentrations in the percolate. Only for pollutants having KOC values above 5000 L/kg and DT50 numbers above 2000 days MCPELMO was estimating lower concentrations in the percolate than PELMO.

17. Keywords computer model, PELMO, MCPELMO, simulation model
sludge, percolate concentrations, leaching potential, nomograms, stochastic modelling
hazard potential for ground water

18. Price	19.	20.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung 9

2 Einführung in das Modell PELMO 13

2.1 Allgemeines 13
2.2 Die Berechnung der Evapotranspiration 13
2.3 Bodenwasserhaushalt 14
2.4 Bodentemperaturen 15
2.5 Runoff und Erosion 15
2.6 Sorption 16
2.7 Abbau 18
2.8 Verflüchtigung von Stoffen aus dem Boden und Transport in der Bodenluft 21
2.9 Übersicht über die zur Modellierung benötigten Parameter 23
2.9.1 Stoffspezifische Daten 23
2.9.2 Bodenparameter 24
2.9.3 Meteorologische Parameter 24
2.9.4 Pflanzenparameter 24

3 Die Durchführung von Simulationsrechnungen auf der Stufe 1 mit dem Computerprogramm *MCPELMO 1.0* 26

3.1 Die Zusammenstellung der erforderlichen Eingabedaten für die Simulationen 26
3.2 Durchführung von MCPELMO1.0 –Simulationsrechnungen) 31
3.3 Interpretation der Ergebnisse der Stufe 1 Simulationen 33

4 Berücksichtigung zusätzlicher Prozesse in MCPELMO 2.0 34

4.1 Berücksichtigung des schnellen Stofftransports im Boden (“preferential flow”) 34
4.2 Die Verlagerung von Substanzen im Boden gebunden an Huminstoffen 36
4.3 Überprüfung der Erweiterungen mit experimentellen Daten 39
4.3.1 Versuchsperiode 1992/1993 41
4.3.2 Versuchsperiode Frühjahr/Sommer 1993 46
4.3.3 Versuchsperiode 1993/1994 50
4.3.4 Versuchsperioden Frühjahr/Sommer 1994 und Herbst/Winter 1994/95 55
4.3.5 Zusammenfassung der Ergebnisse 58

5 Die Definition neuer Versickerungsszenarien in MCPELMO 2.0 60

5.1 Einführung 60
5.2 Die Definition der Applikationsfolge und der Simulationsdauer 60
5.3 Die Definition der Bodenszenarien 61
5.4 Die Klimastationen 70
5.5 Die Definition der Versickerungsregionen 72
5.6 Die Flächenrepräsentanz der verschiedenen Sickerwasserszenarien 76

6 Die Durchführung von Simulationsrechnungen auf der Stufe 2 mit dem erweiterten Computermodell 78

6.1 Substanzabhängige Eingabedaten 78
6.2 Ergebnisse der Stufe 2 Simulationsrechnungen 82
6.3 Zusammenfassung und Bewertung der Simulationsergebnisse 110

7 Das Programm MCPELMO 2.0 zur Berechnung möglicher Grundwassereinträge 111

7.1 Allgemeines 111
7.2 Die Berechnungsmethodik 112
7.2.1 Umfang der ausführlichen Simulationsrechnungen 112
7.2.2 Erläuterungen zur Interpolation 114

8 Die Berechnung von Sickerwasserkonzentrationen mit *MCPELMO 2.0* 117

8.1 Ergebnisübersicht 117
8.2 Diskussion einzelner Ergebnisse der Simulationen 130
8.3 Analyse der Abweichungen der Simulationen mit MCPELMO 2.0 136

9 Zusammenfassung und Bewertung der Ergebnisse 140

10 Glossar 146

11 Literatur 151

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Übersicht über die zur Modellierung benötigten Parameter 23
Abbildung 2: Korrelation der Biowin-Maßzahl mit der angenommenen Halbwertszeit 29
Abbildung 3: Geografische Verteilung der Versickerungsszenarien 30
Abbildng 4: Experimentelle Ergebnisse zum Wasserhaushalt (1992/93) 41
Abbildung 5: Niederschlagsdaten für die PELMO-Simulation (1992/93), Programmausgabe 42
Abbildung 6: Simuliertes Sickerwasser (PELMO-Simulation, 1992/93) , Programmausgabe 42
Abbildung 7: Experimenteller Wirkstoffaustrag (Isoproturon, 1992/93), 43
Abbildung 8: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, Isoproturon, 1992/93), 43
Abbildung 9: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, Isoproturon, 1992/93) 43
Abbildung 10: Experimenteller Wirkstoffaustrag (Pendimethalin, 1992/93) 44
Abbildung 11: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, Pendimethalin, 1992/93) 44
Abbildung 12: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, Pendimethalin, 1992/93) 44
Abbildung 13: Experimentelle Ergebnisse zum Wasserhaushalt (1993) 46
Abbildung 14: Niederschlagsdaten für die PELMO-Simulation (1993), Programmausgabe 47
Abbildung 15: Simuliertes Sickerwasser (PELMO-Simulation, 1993), 47
Abbildung 16: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, Bentazon, 1993) 48
Abbildung 17: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, Bentazon, 1993) 48
Abbildung 18: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, MCPA, 1993) 49
Abbildung 19: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, MCPA, 1993) 49
Abbildung 20: Experimentelle Ergebnisse zum Wasserhaushalt (1993/94) 50
Abbildung 21: Niederschlagsdaten für die PELMO-Simulation (1993/94) 51
Abbildung 22: Simuliertes Sickerwasser (PELMO-Simulation, 1993/94) 51
Abbildung 23: Experimenteller Wirkstoffaustrag (Isoproturon, 1993/94) 52
Abbildung 24: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, Isoproturon, 1993/94) 52
Abbildung 25: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, Isoproturon, 1993/94) 52
Abbildung 26: Experimenteller Wirkstoffaustrag (Chlortoluron, 1993/94) 53
Abbildung 27: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, Chlortoluron, 1993/94) 53
Abbildung 28: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, Chlortoluron, 1993/94) 53
Abbildung 29: Experimentelle Ergebnisse zum Wasserhaushalt (1994/95) 55
Abbildung 30: Niederschlagsdaten für die PELMO-Simulation (1994/95) 56
Abbildung 31: Simuliertes Sickerwasser (PELMO-Simulation, 1994/95) 56
Abbildung 32: Experimenteller Wirkstoffaustrag (1994/95, Metolachlor) 57
Abbildung 33: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, 1994/95, Metolachlor) 57
Abbildung 34: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, 1994/95, Metolachlor) 57
Abbildung 35: Bodenregionen in Deutschland nach der BÜK1000 62
Abbildung 36: Karte der Boden-Klima-Regionen der Bundesrepublik Deutschland (MCPELMO 2.0) 74
Abbildung 37: Berechnete geom. Mittel aller Stoffe für das Szenario 6 (Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im Mai) 95

Abbildung 38: Berechnete geom. Mittel aller Stoffe für das Szenario 6 (Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im Juli) 95

Abbildung 39: Berechnete geom. Mittel aller Stoffe für das Szenario 6 (Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im November) 96

Abbildung 40: Berechnete geom. Mittel aller Stoffe für das Szenario 17 (Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im Mai) 97

Abbildung 41: Berechnete geom. Mittel aller Stoffe für das Szenario 17 (Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im Juli) 97

Abbildung 42: Berechnete geom. Mittel aller Stoffe für das Szenario 17 (Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im November) 98

Abbildung 43: Berechnete 90. Perzentilen aller Stoffe für das Szenario 6 (Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im Mai) 99

Abbildung 44: Berechnete 90. Perzentilen aller Stoffe für das Szenario 17 (Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im Mai) 99

Abbildung 45: Berechnete geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Benzol (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im Mai) 101

Abbildung 46: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Benzol (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im Mai) 101

Abbildung 47: Berechnete geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Lindan (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im Juli) 102

Abbildung 48: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Lindan (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im Juli) 103

Abbildung 49: Berechnetes geom. Mittel Sickerwasserkonzentration von Tributylzinnoxid (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im November) 104

Abbildung 50: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Tributylzinnoxid (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im November) 104

Abbildung 51: Berechnetes geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im Mai) 105

Abbildung 52: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im Mai) 105

Abbildung 53: Berechnetes geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im November) 106

Abbildung 54: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im November) 107

Abbildung 55: Berechnete geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Benzol (MCPELMO 2.0, Ausbringung des Reststoffs im Mai) 130

Abbildung 56: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Benzol (MCPELMO 2.0, Ausbringung des Reststoffs im Mai) 131

Abbildung 57: Berechnete geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Lindan (MCPELMO 2.0, Ausbringung des Reststoffs im Juli) 132

Abbildung 58: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Lindan (MCPELMO 2.0, Ausbringung des Reststoffs im Juli) 132
Abbildung 59: Berechnetes geom. Mittel Sickerwasserkonzentration von Tributylzinnoxid (MCPELMO 2.0, Ausbringung des Reststoffs im November) 133
Abbildung 60: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Tributylzinnoxid (MCPELMO 2.0, Ausbringung des Reststoffs im November) 133
Abbildung 61: Berechnetes geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (MCPELMO 2.0, Ausbringung des Reststoffs im Mai) 134
Abbildung 62: Berechnetes geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (MCPELMO 2.0, Ausbringung des Reststoffs im November) 134
Abbildung 63: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (MCPELMO 2.0, Ausbringung des Reststoffs im Mai) 135
Abbildung 64: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (MCPELMO 2.0, Ausbringung des Reststoffs im November) 135
Abbildung 65: Vergleich der MCPELMO 2.0 – Simulationen mit den Ergebnissen der Stufe 2 136
Abbildung 66: Vergleich der MCPELMO 2.0 – Simulationen mit den Ergebnissen der Stufe 2 137
Abbildung 67: Vergleich der MCPELMO 2.0 – Simulationen mit den Ergebnissen der Stufe 2 138
Abbildung 68: Vergleich der MCPELMO 2.0 – Simulationen mit den Ergebnissen der Stufe 2 139

Liste der Tabellen

Tabelle 1: Eingabedaten für MCPELMO1.0 verwendet für die Simulationen im Rahmen der Stufe 1 27
Tabelle 2: Vorgenommene Umrechnungen von Biowin-Klassen in Halbwertszeiten 28
Tabelle 3: Sickerwasserszenarien von MCPELMO 1.0 30
Tabelle 4: Ergebnisse der MCPELMO für das Szenario „Westliche Podsolregion“ (Alle Substanzen: jährliche Rate von 1 kg/ha) 32
Tabelle 5: Verwendete Daten zu Verlagerung und Abbau der Wirkstoffe 40
Tabelle 6: Kumulierte Stoffeinträge in Dränage (exp) und Perkolat (PELMO-Simulation) 58
Tabelle 7: Eigenschaften des Bodenszenarios 1 63
Tabelle 8: Eigenschaften des Bodenszenarios 2 64
Tabelle 9: Eigenschaften des Bodenszenarios 3 64
Tabelle 10: Eigenschaften des Bodenszenarios 4 65
Tabelle 11: Eigenschaften des Bodenszenarios 5 65
Tabelle 12: Eigenschaften des Bodenszenarios 6 66
Tabelle 13: Eigenschaften des Bodenszenarios 7 66
Tabelle 14: Eigenschaften des Bodenszenarios 8 66
Tabelle 15: Eigenschaften des Bodenszenarios 9 67
Tabelle 16: Eigenschaften des Bodenszenarios 10 67
Tabelle 17: Eigenschaften des Bodenszenarios 11 68
Tabelle 18: Eigenschaften des Bodenszenarios 12 68
Tabelle 19: effektive gesättigte Wasserleitfähigkeiten der Bodenszenarien 69
Tabelle 20: Klimaregionen Deutschlands mit mit repräsentativen Klimastationen 70
Tabelle 21: jährliche Niederschläge [mm] für die neun repräsentativen Standorte 71
Tabelle 22: Mai-Niederschläge [mm] für die neun repräsentativen Standorte 71
Tabelle 23: Juli-Niederschläge [mm] für die neun repräsentativen Standorte 72
Tabelle 24: November-Niederschläge [mm] für die neun repräsentativen Standorte 72
Tabelle 25: Definition der Sickerwasserszenarien von MCPELMO 2.0 73
Tabelle 26: Bedeutung des präferentiellen Flusses in den Sickerwasserszenarien 75
Tabelle 27: Flächenrepräsentanz der Sickerwasserszenarien 77
Tabelle 28: Für die Simulationen der Stufe 2 verwendete Stoffliste 78
Tabelle 29: Wichtige Bestandteile von Ottokraftstoff [] 79
Tabelle 30: Verwendete stoffabhängige Eingabedaten für die Simulationen im Rahmen der Stufe 2 80
Tabelle 31: Mittlere Auftragsmengen für die PELMO Simulationen (Stufe 2) 82
Tabelle 32: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Mai (geom. Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L) (1. Teil) 83
Tabelle 33: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Juli (geom. Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L) (1. Teil) 85
Tabelle 34: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im November (geom. Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L) (1. Teil) 87

Tabelle 35: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Mai (90. Perz. der Sickerwasserkonz. (µg/L]) (1. Teil) 89

Tabelle 36: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Juli (90. Perz. der Sickerwasserkonz. (µg/L]) (1. Teil) 91

Tabelle 37: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im November (90. Perz. der Sickerwasserkonz. (µg/L]) (1. Teil) 93

Tabelle 38: Simulationsjahr, in dem zum ersten Mal die jährliche Sickerwasserkonzentration des letzten Simulationsjahres überschritten wurde (regelmäßige Anwendung im Mai) 108

Tabelle 39: Perzentilenfaktoren für einige Perzentilen 115

Tabelle 40: Ergebnisse der MCPELMO 2.0- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Mai (Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L) (1. Teil) 118

Tabelle 41: Ergebnisse der MCPELMO 2.0- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Juli (Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L) (1. Teil) 120

Tabelle 42: Ergebnisse der MCPELMO 2.0- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im November (Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L) (1. Teil) 122

Tabelle 43: Ergebnisse der MCPELMO 2.0- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Mai (90. Perz. der Sickerwasserkonz. in µg/L) (1. Teil) 124

Tabelle 44: Ergebnisse der MCPELMO 2.0- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Juli (90. Perz. der Sickerwasserkonz. in µg/L) (1. Teil) 126

Tabelle 45: Ergebnisse der MCPELMO 2.0- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Nov. (90. Perz. der Sickerwasserkonz. [µg/L]) (1. Teil) 128

Tabelle 46: In diesem Vorhaben verwendete Stoffliste und ihre Ausgangskonzentrationen 143

1 Einleitung

Der Einsatz von Computermodellen zur Beschreibung des Verhalten von Stoffen in der Umwelt ist häufig eine nützliche Alternative zu experimentellen Untersuchungen, mit dem man sich ohne großen Kosten- und Zeitaufwand einen ersten vergleichenden Eindruck von möglichen Gefahren, die von Umweltchemikalien in bestimmten Situationen ausgehen können, machen kann. Vor allem die Berechnung des Sickerwasserpotenzials stand dabei häufig im Vordergrund, so dass es nicht überraschend war, dass schon seit längerer Zeit entsprechende Programme zur Verfügung stehen (z.B. SESOIL [1], PRZM [2], PELMO [3], WASMOD/STOMOD [4], EQUI [5], LEACHM [6].) Eine genauere Übersicht über verschiedene Computerprogramme findet man in [7].

Obwohl sich diese Modelle beim direkten Vergleich durch die Berücksichtigung spezieller Prozesse durchaus unterscheiden, so ist die Beschreibung eines Prozesses, der seit geraumer Zeit immer stärker in den Vordergrund tritt, mit all diesen klassischen Transportmodellen nicht möglich. Es handelt sich dabei um den *preferential flow*, häufig auch mit „schnellen Transport durch Makroporen im Boden“ beschrieben. Während die klassischen Verlagerungsmodelle von einem chromatographischen Transport im Boden ausgehen, bei dem sich stets die Gleichgewichtsbedingungen für die Sorptionsprozesse einstellen können, werden beim *preferential flow* in kurzer Zeit Substanzmengen in tiefere Schichten verlagert, ohne dass im Oberboden eine Sorption an die Bodenmatrix zustande gekommen ist [8, 9, 10]. Während bei den konventionellen Transportprozessen die Substanzeigenschaften (z.B. die Sorptionskonstante) das Verlagerungsverhalten bestimmen, werden beim *preferential flow* die Substanzeigenschaften von der Bodenhydrologie stark überlagert. Obwohl inzwischen einige Computermodelle entwickelt worden sind, in denen dieser Prozess berücksichtigt wird (z.B. MACRO [11] oder PLM [12]), ist eine Modellierung, mit einer vergleichbaren Qualität wie beim chromatographischen Transport, (noch) nicht möglich. Im Rahmen dieses Vorhabens soll jedoch der *preferential flow* einbezogen werden, um in jedem Fall eine konservative Abschätzung der möglichen Einträge vornehmen zu können.

Die traditionellen Simulationsmodelle müssen jedoch noch in einem zweiten Punkt für die zu bearbeitende Fragestellung erweitert werden:

Berechnet wird die Versickerung einer Chemikalie - ob mit oder ohne Berücksichtigung des *preferential flow* - stets für ein bestimmtes Szenario, das heißt für eine *singuläre Situation* hinsichtlich aller Klima-, Boden- und Wirkstoffdaten. Zum Beispiel kann mit den Modellen berechnet werden, wie hoch der Anteil der Chemikalie ist, der bei dem Klima von Hamburg

von 1978 (Niederschlagsmenge 778 mm), dem Boden Borstel bei Neustadt (mit zwar tiefenabhängigen aber sonst festen Bodenparametern für Korngröße, Kohlenstoffgehalt und Biomasse) in tiefere Schichten verlagert wird.

Mit all diesen Modellen ist es also nur möglich, eine festgelegte und deshalb einzigartige Situation in der Umwelt zu simulieren. Wiederholungen einer Simulation mit dem gleichen Szenario führen daher automatisch auch wieder zum gleichen Resultat. Man bezeichnet daher alle diese Modelle als *deterministisch*.

Der Vergleich der Ergebnisse der Simulationen mit realen Umweltdaten macht jedoch eine Schwierigkeit dieser deterministischen Modelle deutlich. Im Gegensatz zu den Simulationen findet man in der Umwelt kein konstantes, reproduzierbares Verhalten von Wirkstoffen sondern ein Spektrum verschiedener Werte, selbst wenn die Daten am gleichen Standort und im gleichen Jahr gewonnen werden. Dies ist eine Folge der Tatsache, dass alle wichtigen Eingabeparameter keine konstanten Größen darstellen, sondern bei jeder Wiederholung Schwankungen unterworfen sind.

Für die Interpretation der Ergebnisse deterministischer Modellansätze ergibt sich somit die Schwierigkeit, das singuläre Rechenergebnis sinnvoll der Schar möglicher realer Ergebnisse zuzuordnen. Da letztlich aber nicht das Verhalten des Stoffes bei einem einzigen Szenario, sondern die *Wahrscheinlichkeit* des Überschreitens bestimmter Konzentrationen im Sickerwasser (z.B. die Überschreitung eines Grenzwertes wie 0.1 µg/l) von Interesse ist, ist die Frage der Interpretierbarkeit der Ergebnisse deterministischer Modellansätze von zentraler Bedeutung.

Eine Möglichkeit, die Ergebnisse von Simulationsmodellen besser den Beobachtungen in der Umwelt gegenüberzustellen, ist eine Erweiterung von deterministischen zu *stochastischen* Modellen.

Im Unterschied zu deterministischen Verfahren benötigen stochastische Modelle zusätzlich zu den verschiedenen Eingabeparametern die *Häufigkeitsverteilungen* dieser Größen. Da die Ursache für die Schwankungen des Versickerungsverhaltens von organischen Stoffen in der Schwankungsbreite wichtiger Eingabegrößen (Niederschlag, Sorption, Abbau, Wasserhaushalt) liegen, kann nur eine Berücksichtigung der Verteilung dieser Größe und damit eine Erfassung ihrer Schwankungen zu einer angemessenen Beschreibung der Umwelt führen. Das ist der Grund, wieso auch die Ergebnisse stochastischer Modelle mit Häufigkeitsverteilungen des entsprechenden berechneten Parameters (z.B. der Konzentration im Sickerwasser) beschrieben werden. Die Analyse von Häufigkeitsverteilungen für das Erreichen bestimmter Konzentrationen im Sickerwasser ist in jedem Fall ein angemessenes Verfahren, wenn im Vordergrund der Modellierung weniger die

möglichst exakte Beschreibung von einmaligen Ereignissen ist, sondern die Simulation als Bestandteil einer Risikoanalyse für den betreffenden Stoff verwendet werden soll.

Im Rahmen des Forschungsvorhabens 106 02 089 „Erweiterung von Expositionsmodellen auf der Basis von statistischen Umweltparametern“ [13] wurde das deterministische Versickerungsmodell PELMO zu einem stochastischen Modell erweitert (MCPELMO) [14], [15]) . Dazu wurde zunächst die Fläche der Bundesrepublik Deutschland in relativ homogene Regionen hinsichtlich der Boden- und der Klimaeigenschaften aufgeteilt. Durch Überlagerung von neun Klimaregionen mit Bereichen von insgesamt fünf unterschiedlichen Bodenarten konnten so insgesamt 13 Versickerungsszenarien als Basis für die weiteren Analysen definiert werden. Für jede dieser Regionen lagen Daten zu den klimatischen Schwankungen vom Deutschen Wetterdienst vor.

Insgesamt gaben die Ergebnisse mit *MCPELMO* einen raschen Überblick über die in den verschiedenen Regionen Deutschlands zu erwartenden mittleren Sickerwasserkonzentrationen und deren Schwankungsbreiten. Allerdings werden bereits bei der Bewertung der Ergebnisse im Abschlussbericht des Vorhabens notwendige Verbesserungs- und Erweiterungsmöglichkeiten genannt, die in diesem Vorhaben aufgegriffen werden sollen. Dazu gehört zum einen eine Erweiterung der Bodenszenarien auf der Grundlage der von der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe herausgegebenen Bodenübersichtskarte im Maßstab 1:100 000. Das Programm *MCPELMO 1.0* war in erster Linie konzipiert zur Beurteilung von Pflanzenschutzmitteln. Es werden daher in diesem Vorhaben für die Fragestellung der Beurteilung von Reststoffen gezielt Anpassungen an dem Computerprogramm bzw. seiner Benutzeroberfläche vorgenommen.

Die Gliederung des vorliegenden Berichts orientiert sich im wesentlichen am Verlauf des Projekts:

- Es wurde zunächst das Versickerungspotenzial für eine größere Zahl von Stoffen (383) mit Hilfe des bestehenden Computerprogramms *MCPELMO 1.0* berechnet (siehe Kapitel 3, ab Seite 26. Die Ergebnisse dieser Simulationsrechnungen wurden auch bei der Zusammenstellung einer Stoffliste berücksichtigt, mit der das zu erweiternde Computerprogramm *MCPELMO 2.0* getestet werden sollte.
- Im zweiten Arbeitsschritt wurde das bestehende Computerprogramm PELMO, die Grundlage für das in diesem Vorhaben entwickelte *MCPELMO 2.0,* gezielt weiterentwickelt, um zusätzliche Prozesse wie den schnellen Stofftransport berücksichtigen zu können (siehe Kapitel 4, ab Seite 34).
- In Kapitel 5 (ab Seite 60) werden die neuen Versickerungsszenarien auf der Grundlage der von der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe herausgegebenen Bodenübersichtskarte erläutert.
- Die Erweiterungen von PELMO sowie die neuen Versickerungsszenarien werden in Kapitel 6 (ab Seite 78) mit Hilfe einer reduzierten Stoffliste von 23 Substanzen getestet. Da alle Simulationen über eine Zeitraum von 1000 Jahren durchgeführt wurden, können auch die jährlich zu erwartenden Klimaschwankungen berücksichtigt werden.
- Auf der Grundlage der in den Kapiteln 4 und 5 beschriebenen Erweiterungen wurde das Screeningmodell *MCPELMO 2.0* entwickelt. In Kapitel 6 (ab Seite 78) wird die Berechnungsmethodik vorgestellt, im Anhang 3 wird eine Einführung in das Arbeiten mit dem neuen Computerprogramm gegeben.
- Schließlich werden die Ergebnisse des neuen Computerprogramms *MCPELMO 2.0* in Kapitel 8 (ab Seite 117) vorgestellt und die Unterschiede zu den ausführlichen PELMO-Simulationen (1000 Simulationsjahre) diskutiert.

2 Einführung in das Modell PELMO

2.1 Allgemeines

Das deterministische Computermodell PELMO berechnet primär den vertikalen Transport von Chemikalien in der ungesättigten Bodenzone, sowohl innerhalb als auch außerhalb des Wurzelbereichs der Pflanzen. Es wird heute standardmäßig im Zulassungsverfahren für Pflanzenschutzmittel zur Berechnung des Versickerungspotenzials dieser Substanzen eingesetzt.

Weitere Prozesse, die im Rahmen des Modells PELMO berechnet werden können, sind Oberflächenabfluss nach Starkregenereignissen (im folgenden kurz Run-off genannt), Erosionsprozesse, Pflanzenaufnahme über die Wurzel, Abbau im Boden sowie die Verflüchtigung von Substanzanteilen aus dem Boden heraus. Schwerpunkt des Programms ist es jedoch, das Versickerungspotenzial einer Chemikalie zu berechnen.

PELMO berechnet die Konzentration im Boden mit Hilfe eines dynamischen Kompartimentansatzes. Dies bedeutet, dass der Boden in verschiedene Kompartimente aufgeteilt ist, innerhalb derer alle Programmparameter (z.B. Feuchtegehalt, Bodendichte, Konzentration des Wirkstoffs im Bodenwasser und Bodenkörper ...) homogen vorliegen.

Die Dicke dieser Kompartimente können vom Benutzer festgelegt werden, üblich sind Werte zwischen 2 und 5 cm. Das sich stetig verändernde Konzentrationsprofil im Boden wird dadurch im Programm mehr oder weniger stark gestuft wiedergegeben. Für jeden Tag werden alle Bodenparameter neu berechnet. Dabei wird die Wasserbewegung, ein Schlüsselprozess für das Programm, durch einen einfachen Ansatz unter Berücksichtigung von Feldkapazität und Welkepunkt berechnet (Kapazitätsmodell). Eine Berechnung des schnellen Stofftransports durch Makroporen ist nicht vorgesehen. Die Verdunstung von Wasser kann durch direkte Eingabe der potentiellen Evapotranspiration, mit Hilfe der Gleichung von Hamon oder alternativ Haude-Beziehung berücksichtigt werden. Für den Transport des Wirkstoffs wird davon ausgegangen, dass sich nach einem Tag das Gleichgewicht zwischen den Phasen Bodenkörper, Bodenluft und Bodenwasser eingestellt hat.

2.2 Die Berechnung der Evapotranspiration

Die Berechnung der Evapotranspiration, also der Verdunstung vom Boden (Evaporation) und der Transpiration der Pflanzen ist ein bedeutender Prozess für die Beschreibung des

Bodenwasserhaushalts. Eine adäquate Beschreibung der Evapotranspiration ist daher Voraussetzung für eine sinnvolle Beschreibung auch des Pflanzenschutzmitteltransports.
In PELMO sind verschiedene Berechnungsmethoden für diesen Prozess realisiert:

- keine Berechnung der potentiellen Evapotranspiration, Eingabe der Daten zur potentiellen Evapotranspiration durch den Benutzer,
- Berechnung der potentiellen Evapotranspiration mit Hilfe der Haudeformel und kulturspezifischen Haudefaktoren,
- Berechnung der potentiellen Evapotranspiration mit Hilfe der Formel von Hamon.

Je nach Wahl des Berechnungsmodus werden verschiedene meteorologische Parameter benötigt. Weitere Informationen zu diesem Thema findet man im Benutzerhandbuch zu PELMO [3]

2.3 Bodenwasserhaushalt

Zur Berechnung des Wasserhaushalts wird der Boden in verschiedene Kompartimente aufgeteilt; dabei wird davon ausgegangen, dass in jeder dieser Unterschichten (Kompartimente) stets alle Modellparameter (zum Beispiel Bodendichte, Bodenfeuchte, Temperatur, aber auch die Stoffmenge) homogen verteilt vorliegen. Um die Konzentrationsgradienten im Boden sinnvoll beschreiben zu können und um mit Hilfe der numerischen Dispersion eine Mimikry der stofflichen Dispersion zu erreichen, ist eine hohe Anzahl von Kompartimenten erforderlich (in der Regel 50 bis 60).
Je nach Bodentiefe werden unterschiedliche Prozesse für die Berechnung der Wassergehalte berücksichtigt. Es wird zwischen der Oberflächenschicht, den Schichten innerhalb des Wurzelbereichs der Pflanzen und den Schichten unterhalb der aktiven (das heißt signifikanten) Pflanzendurchwurzelung differenziert.
Wie bereits erläutert, sind für PELMO Feldkapazität und Welkepunkt Schlüsselparameter für die Wasserbewegung im Boden. Diese Größen können entweder direkt eingegeben werden, oder sie werden aus anderen Bodenparametern berechnet. Soll eine Berechnung durchgeführt werden, so kann prinzipiell zwischen einer Regression unter Berücksichtigung der Eingabeparameter Bodendichte, Kohlenstoffgehalt, Sandgehalt und Tongehalt vorgenommen werden (analog zu dem Computerprogramm PRZM-1) oder man kann eine PELMO-spezifische Regression verwenden, die nur auf der Korngrößenverteilung basiert

2.4 Bodentemperaturen

Abbauvorgänge im Boden sind in der Regel von ausgeprägter Temperaturabhängigkeit. Die Berücksichtigung von Bodentemperaturen mit der charakteristischen tiefenabhängigen und jahreszeitlichen Schwankung ist daher ein entscheidender Faktor für ein Computerprogramm zur Berechnung der Versickerungsneigung von Schadstoffen. Es ist jedoch nicht nötig, diese Temperaturen direkt als Eingabeparameter für eine Simulation mit PELMO zur Verfügung zu stellen. Vielmehr wurden Funktionen in das Modell eingebaut, mit denen aus dem Verlauf der täglichen durchschnittlichen Lufttemperatur die täglichen Bodentemperaturen und tägliche Schwankungen der Temperatur im gesamten Bodenkern berechnet werden können. Grundlage für die zugrundeliegenden Gleichungen sind gleichzeitige Messungen von Boden- und Lufttemperatur. Die Bodentemperaturen wurden in 10, 30, 60 und 90 cm Tiefe bestimmt. Die im Modell verwendete Gleichung zur Berechnung der Bodentemperaturen lautet:

$$T = T_{Vortag} + (T_{Luft}-T_{Vortag}) * 0.346 * \exp(-0.027028 * d/cm) \quad (1)$$

T: Bodentemperatur
T_{Vortag}: Bodentemperatur des Vortags
T_{Luft}: Lufttemperatur
d: Tiefe der Bodenschicht (cm)

Diese Gleichung verwendet die Bodentemperatur des Vortags als Grundlage für die Berechnung des neuen Werts. Weicht die aktuelle Lufttemperatur von dieser Temperatur ab, so findet eine Anpassung in Richtung der aktuellen Lufttemperatur statt. Als Startbedingung wird im gesamten Bodenkern die Lufttemperatur des ersten Simulationstages angenommen.

2.5 Runoff und Erosion

Der Einfluss der nach Starkregenereignissen beobachteten Erosionsprozesse auf die Verlagerung von Schadstoffen im Boden kann erheblich sein, da die Substanzen sowohl sorbiert an Bodenpartikel als auch gelöst im Oberflächenabfluss (Run-off) abgeschwämmt werden können. Doch auch langandauernde Regenereignisse ohne Bodenerosion können durch Auswaschungsprozesse zu merklichen Austrägen führen.
Die Berechnung der Stärke des Oberflächenabflusses erfolgt empirisch mit Hilfe des amerikanischen Curve-Number-Verfahrens:

$$Q = \frac{(P - 10\,S)^2}{P + 40\,S} \qquad (2\,a)$$

$$S = 0.508\,(1000\,RCN\text{-}1 - 10) \qquad (2\,b)$$

Q: Oberflächenabfluss [l/m²]
RCN: aktuelle Run-off-Curvenumber
P: Niederschlag [l/m²]

Weitere Inforemationen zu den Curve-Numbers sowie Vorschläge für die Wahl dieses Parameters findet man in [2] Basierend auf der Wassermenge Q wird die Erosion nach der Modified Universal Soil loss Equation (MUSLE), wie sie von Williams [16] aufgestellt wurde, berechnet:

$$X = a\,(VR\ QP)0.56 * K * LS * C * P \qquad (3)$$

X: Bodenverlust [Tonnen]
a: Faktor zur Umrechnung verschiedener Einheiten
VR: Oberflächenabfluss [m3]
QP: Intensität des Oberflächenabflusses [m3 d-1]
K: Boden-Erosionsfaktor
LS: Slope-Faktor
P: Bodenbearbeitungsfaktor
C: Bodenbedeckungsfaktor

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde im Sinne einer konservativen Abschätzung der Versickerung die Berechnung des Runoffs und der Erosion abgeschaltet

2.6 Sorption

Neben dem Abbau von Schadstoffen ist die Sorption der zentrale Prozess in PELMO zur Berechnung des Versickerungspotenzials dar. Zur Berechnung der Sorptionsstärke wird in PELMO der kd-Wert verwendet. Er beschreibt das Gleichgewichtsverhältnis einer Substanz in sorbierter und gelöster Phase:

$$kd = \frac{c_{ads}}{c_{gel}} \quad (4)$$

kd: Gleichgewichtskonstante für die Sorption im Boden [L/kg)

c_{ads}: Konzentration des Stoffs sorbiert am Boden[µg/g]

c_{gel}: Konzentration des Stoffs gelöst Stoffmenge im Porenwasser [µg/mL]

Liegen für einen Boden keine Sorptionskonstanten vor, so kann näherungsweise mit Hilfe des KOC-Wertes eine Sorptionskonstante berechnet werden.
Der KOC ist eine auf den Gehalt an organischem Kohlenstoff im Boden bezogene Sorptionskonstante:

$$KOC = Kd * 100 / OC \quad (5)$$

Kd: Sorptionskonstante des Wirkstoffs am Boden

OC: Gehalt an organischem Kohlenstoff im Boden [%]

KOC: Sorptionskonstante bezogen auf den org. Kohlenstoffgehalt (L/kg)

Durch die Beziehung der Sorption auf den Gehalt an organischem Kohlenstoff in einem Bodenhorizont ist es möglich, für jeden Bodenhorizont einen spezifischen kd-Wert zu berechnen, wenn der KOC und der Kohlenstoffgehalt in der Bodenschicht bekannt sind.
Diese Beziehung ist jedoch keine exakte Beschreibung der Realität, sondern gilt nur annähernd für unpolare Stoffe. Dagegen zeigen viele Substanzen, die in Abhängigkeit vom pH-Wert in ionische Spezies aufspalten, auch eine stark vom pH-Wert im Boden abhängige Sorption. Im Rahmen dieses Vorhabens wurde eine mögliche Abhängigkeit der Sorptionskonstanten vom pH-Wert mangels verfügbarer Daten nicht berücksichtigt. Weitere Informationen zur Beschreibung einer vom pH-Wert abhängigen Sorption im Computerprogramm PELMO findet man jedoch im Benutzerhandbuch von PELMO [3].
Neben dem Einfluss der Sorption von Kohlenstoffgehalt und pH-Wert ist auch seine Abhängigkeit von der Konzentration des Wirkstoffs im Boden von Bedeutung. Das einfachste Modell geht von einem linearen Zusammenhang zwischen den Konzentrationen in sorbierter

und gelöster Form im Boden aus und führt zu einer Unabhängigkeit der Sorptionskonstante von der Substanzkonzentration im Boden. Die Konstanz einer Sorptionskonstante gilt jedoch nur bedingt. Sie ist zum einen konzentrationsabhängig, zum anderen bodenabhängig.
In der Regel werden bei Sorptionsexperimenten konzentrationsabhängige Sorptionskonstanten bestimmt. Mit Hilfe der Gleichung von Freundlich kann diese Konzentrationsabhängigkeit mathematisch erfasst werden:

$$c_{sorb} = kf * c_{gel}^{1/n} \quad (6)$$

kf: Sorptionskonstante für Freundlich-Sorption [g/ml]
1/n: Exponent der Freundlichbeziehung (in der Regel <1)

oder anders formuliert:

$$kd = kf * c_{gel}^{(1/n-1)} \quad (7)$$

kd: Adsorptionskonstante [g/ml]
c_{gel}: Konzentration der Substanz im Bodenwasser [µg/mL]

Wie aus der letzten Gleichung deutlich zu sehen ist, wird die Sorptionskonstante kd bei Exponenten 1/n ungleich 1.0 abhängig von der aktuellen Bodenwasserkonzentration modifiziert. Sinnvoll sind bei dieser Geichung nur Exponenten 1/n kleiner als 1.0. In diesen Fällen werden für kleinere Bodenwasserkonzentrationen als 1 µg/ml höhere Sorptionskontanten berechnet. Die Gleichung berücksichtigt also gewissermaßen Sättigungseffekte bei hohen Bodenwasserkonzentrationen für die Sorption.
Im Rahmen dieses Vorhabens wurde mit einem konstanten Freundlichexponenten von 0.9 für alle Simulationen gerechnet.

2.7 Abbau

Die Berechnung des Abbaus eines Wirkstoffs im Boden erfolgt in PELMO auf der Basis einer Kinetik von 1. Ordnung:

$$\frac{dc}{dt} = -k\,c\,t \qquad (8)$$

k: Geschwindigkeitskonstante [d^{-1}]

t: Zeit [d]

c: Konzentration des Wirkstoff [mol/L]

Die Lösung dieser Differentialgleichung lautet:

$$c(t) = c_0 * e^{-k*t} \qquad (9)$$

c0: Anfangskonzentration des Wirkstoffs (mol/L)

Bei allen monomolekularen Reaktionen hängt der Abbau, neben der Reaktionskonstante k, nur von der aktuellen Konzentration der Substanz im Boden ab. Daher besitzt die Reaktionskonstante k auch die einfache Einheit 1/s, und nicht, wie die Reaktionskonstanten aller übrigen Kinetiken, mehr oder weniger komplizierte Formen mit wechselnden Exponenten von Konzentrationen. Die einfache Dimension der Reaktionskonstanten macht auch deutlich, wieso bei der Reaktion erster Ordnung feste, von der Konzentration des Wirkstoffs unabhängige, Halbwertszeiten existieren. Sie sind wie folgt definiert:

$$DT50 = \frac{\ln(2)}{k} \qquad (35)$$

DT50: Halbwertszeit des Wirkstoffs (d)

Das bekannteste Beispiel für diese Kinetik und auch für konstante Halbwertszeiten ist der radioaktive Zerfall instabiler Elemente.

Nun verlaufen Abbaureaktionen im Boden erheblich komplizierter als der einfache radioaktive Zerfall, so dass der Ansatz in PELMO erheblich erweitert werden musste.

Zunächst wird die Abbaukonstante linear über die Biomasse im Boden tiefenabhängig korrigiert:

$$k_{bio} = k_{Substanz} * k_{Boden} \quad (11)$$

k_{bio}: Bioabbaukonstante [d^{-1}]
$k_{Substanz}$: Bioabbaukonstante unter Standardbedingungen [d^{-1}]
k_{Boden}: tiefenabhängiger Bioabbaufaktor [-]

Mit diesen Bioabbaufaktoren, die in PELMO schichtenabhängige Konstanten sind, erreicht man eine Abnahme der Abbauaktivität mit zunehmenden Bodentiefen, wie sie auch im Freiland aufgrund der Abnahme der Bakterienpopulation als dem wichtigsten Träger des Bioabbaus beobachtet werden.
Die Abbaukonstanten sind normalerweise temperaturabhängig. In PELMO wird die Temperaturabhängigkeit durch einen Q10-Ansatz (vergleichbar einem Arrheniusansatz) berücksichtigt:

$$k_{Temp} = Q^{(T-T_0)/10} \quad (12)$$

k_{Temp}: Korrekturfaktor für den Bioabbau aufgrund der aktuellen Temperatur
Q Faktor für Geschwindigkeitszunahme bei einer Temperaturerhöhung um 10 °C
T_0: Temperatur, auf die sich die Abbaukonstante bezieht [°C]
T: aktuelle Bodentemperatur [°C]

Bei diesem Ansatz führt eine Temperaturerhöhung um ein festes Intervall stets zu der gleichen Beschleunigung des Abbaus Q. Ein derartige Gleichung wird häufig zur Beschreibung der Temperaturabhängigkeit von Reaktionen eingesetzt. Der Benutzer hat als Eingabeparameter die Möglichkeit, sowohl den Geschwindigkeitsfaktor Q als auch die Temperatur während der Abbaustudie anzugeben. Im Rahmen dieser Studie wurde für alle Simulationen von der gleichen Temperaturabhängigkeit ausgegangen (Standardbedingung: 20 °C, Q-Faktor: 2).

Auch die Bodenfeuchte hat gewöhnlich einen maßgeblichen Einfluss auf die Geschwindigkeit des Bioabbaus, der in PELMO durch einen entsprechenden Korrekturterm berücksichtigt wurde. Verwendet wurde eine Gleichung basierend auf der Näherung von Allan Walker [17], [18], um eine Feuchtekorrektur vorzunehmen.

Wird eine Korrektur über die absolute Bodenfeuchte vorgenommen, so vergleicht PELMO die aktuelle Feuchte in der Simulation mit der Feuchte während der Abbaustudie und korrigiert mit folgender Gleichung:

$$k_{Feuchte} = \left(\frac{\Theta}{\Theta_0}\right)^{fm} \quad (13)$$

$k_{Feuchte}$: Korrekturfaktor für den Bioabbau aufgrund der aktuellen Feuchte

Θ: aktuelle Feuchte in der betreffenden Bodenschicht [Vol %]

Θ_0: Feuchte während des Versuchs zum Bioabbau [Vol %]

fm: Exponent zur Beschreibung der Feuchteabhängigkeit

Mangels genauerer Daten wurden für alle Simulationen in dieser Studie eine Standardfeuchte von 20 Vol % und ein Exponent von 0.7 verwendet.

2.8 Verflüchtigung von Stoffen aus dem Boden und Transport in der Bodenluft

PELMO berechnet die Verteilung einer Substanz im Boden basierend auf dem Gleichgewicht zwischen den Phasen Bodenkörper, Bodenluft und Bodenwasser. Um das Konzentrationsgleichgewicht eines Stoffs in den Phasen fest, flüssig und gasförmig berechnen zu können, wird in PELMO neben der Sorptionskonstante zusätzlich die Henry-Konstante benötigt.

Die Konzentration eines Wirkstoffs in der Gasphase wird ausgehend von der gelösten Phase nach der folgenden Gleichung berechnet:

$$c_L = \Theta_L \, c_{gel} \, H \quad (14)$$

Θ_L: Anteil der Bodenluft im Boden [$m^3\ m^{-3}$]

c_L: Konzentration in der Luft [$g\ cm^{-3}$]

c_{gel}: Konzentration in der Bodenlösung [$g\ cm^{-3}$]

H: Henry-Konstante [-]

Der Anteil der Bodenluft im Boden wird mit Hilfe von Feldkapazität und aktueller Bodenfeuchte berechnet:

$$\Theta_L = \Theta_{FK} - \Theta_s \quad (15)$$

Θ_{FK}: Feldkapazität [m3 m-3]

Θ_s: aktuelle Bodenfeuchte [m3 m-3]

Ist neben der Henry-Konstante, mit der also stets der Gleichgewichtszustand berechnet wird, auch die Diffusionskonstante bekannt, so kann daraus die Diffusion zwischen verschiedenen Bodenschichten im Bodenkörper nach dem Fick'schen Gesetz berechnet werden:

$$J_{Dif} = - D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (16)$$

J_{Dif}: Diffusionsrate [g d-1 cm-2]

D: Diffusionskonstante in Luft [cm²/d]

$\frac{\partial c}{\partial x}$: Konzentrationsgradient im Boden [g cm^{-4}]

Zur Berechnung der Verflüchtigung - also des Übergangs von der Bodenoberfläche in die Atmosphäre - wird von der Annahme ausgegangen, dass die Konzentration an Wirkstoff in der Atmosphärenluft vernachlässigbar gering ist. Weiter muss der Benutzer die Dicke der aktiven Grenzschicht d für den Übergang angeben. Zuletzt wird angenommen, dass die Verflüchtigung nur aus der Bodenlösung stattfindet. Mit diesen Angaben wird die Volatilität nach folgender Gleichung berechnet:

$$J_{Volat} = - D * \frac{H' c_{gel}}{d} \quad (17)$$

J_{Volat}: Volatilisierung [g cm-2 d-1]

d: aktive Grenzschicht [cm]

Für die Grenzschicht wurde für alle Simulationen von einer Dicke von 2 mm ausgegangen.

2.9 Übersicht über die zur Modellierung benötigten Parameter

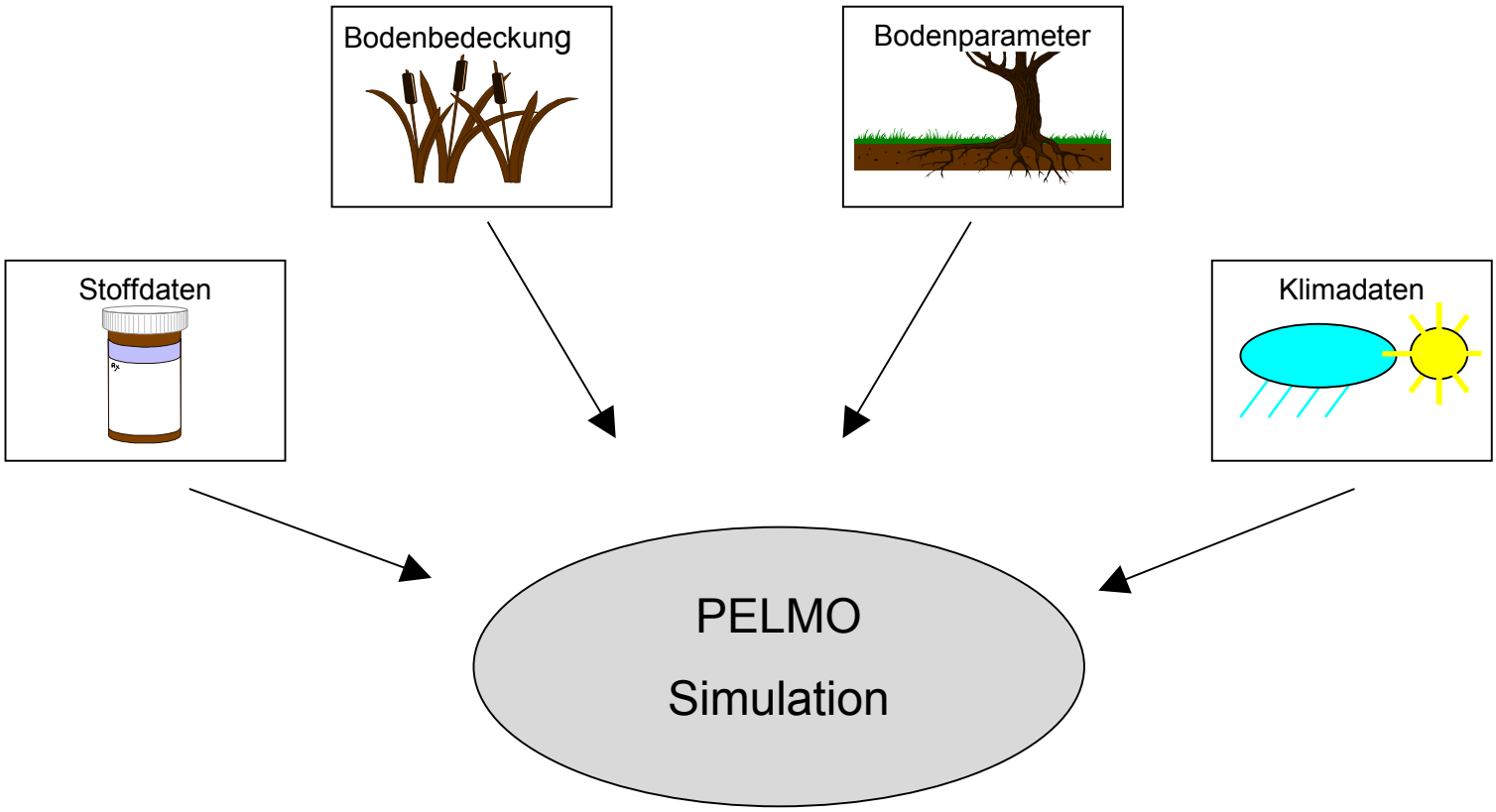


Abbildung 1: Übersicht über die zur Modellierung benötigten Parameter

Eine große Anzahl von Parametern ist zur Berechnung der Sickerwasserkonzentration mit PELMO erforderlich. PELMO speichert die Eingabedaten in verschiedenen Dateien ab, die durch den Anwender für eine Simulation kombiniert werden müssen. Im folgenden werden kurz die wichtigsten Eingabeparameter für eine Simulation des Sickerwasserpotenzials mit PELMO erläutert. Weitere Informationen findet man im Benutzerhandbuch von PELMO [3].

2.9.1 Stoffspezifische Daten

Voraussetzung für die Durchführung einer PELMO-Simulation sind Informationen über das Ausbringungsmuster der Substanz (Ausbringungsrate (Einheit kg/ha), Ausbringungsdatum (Tag – Monat – Jahr) und die Ausbringungsfrequenz). Zur Berechnung des Gleichgewichts im Boden werden die Sorptionskonstante am Boden (Einheit L/kg) oder alternativ der KOC-Wert (Einheit L/kg) und die Henry-Konstante benötigt. Schließlich werden zur Abschätzung möglicher Abbaureaktionen die Halbwertszeit im Boden (Einheit: d) sowie die

Bodentemperatur und die Bodenfeuchtebedingungen während der experimentellen Studie zur Bestimmung des Abbaus benötigt.

2.9.2 Bodenparameter

Die wesentlichen Bodenparameter, die den Bodenwasserhaushalt steuern, sind bei dem Computerprogramm PELMO die tiefenabhängigen Bodenfeuchten bei Feldkapazität und Welkepunkt. Die Feldkapazität stellt dabei gewissermaßen die maximale Bodenfeuchte oberhalb der ein Transport von Wasser in tiefere Schichten beginnt. Der Welkepunkt ist die untere Grenze für die Verdunstung von Wasser aus dem Boden.

Die wichtigsten Bodenparameter für die Berechnung des Versickerungspotenzials von Substanzen stellen der tiefenabhängige organische Kohlenstoffgehalt (Einheit: %) und die tiefenabhängigen Bioabbaufaktoren dar. Experimentelle Bestimmungen der Bioabbaufaktoren lagen nicht vor. Die Bioabbaufaktoren wurden daher in dieser Studie im obersten Bodenhorizont grundsätzlich auf “1” gesetzt und in den tieferen Bodenschichten linear mit dem organischen Kohlenstoffgehalt im Boden korreliert. Das bedeutet, daß im obersten Bodenhorizont stets von dem Bioabbau, wie sie in der Abbaustudie bestimmt worden war ausgegangen wird. Für die tieferen Bodenschichten wird von einer geringeren Aktivität ausgegangen.

2.9.3 Meteorologische Parameter

Der wichtigste Klimaparameter für die Berechnung der Versickerung von Schadstoffen stellt die tägliche Niederschlagsmenge dar. Zur Abschätzung der Evapotranspiration ist die Eingabe verschiedener Parameterkombinationen möglich. Die tägliche potentielle Evapotranspiration kann direkt eingetragen werden, oder sie kann nach den Gleichungen von Hamon [19] (aus der täglichen mittleren Lufttemperatur und der geografischen Breite des Standorts) oder Haude [20] (aus der täglichen Lufttemperatur um 14.00 Uhr und der relativen Luftfeuchtigkeit um 14.00 Uhr zusammen mit kulturspezifischen monatlichen Haudefaktoren) abgeschätzt werden. Zur Berechnung von Abbauprozessen wird außerdem in jedem Fall die mittlere tägliche Lufttemperatur benötigt, aus der tiefenabhängige Bodentemperaturen abgeschätzt werden.

2.9.4 Pflanzenparameter

Vor allem zur Berechnung der Transpiration sind Daten zur Bodenbedeckung bzw. zur Fruchtfolge von Bedeutung. PELMO benötigt für die Berechnung des Wassertransports über Pflanzen die maximale Wurzeltiefe (Reifezeitpunkt). Die aktuelle Wurzeltiefe wird mit Hilfe der Angaben zu Feldauflauf, Reife und Ernte berechnet. Werden Pflanzenschutzmittel direkt

auf die Kultur appliziert, werden weitere Parameter (z.B. Dichte der Kultur) benötigt. Im Rahmen dieser Studie wurden diese Parameter jedoch nicht benötigt. Weiterführende Informationen zu den Pflanzenparametern sind im Benutzerhandbuch von PELMO zu finden [3].

3 Die Durchführung von Simulationsrechnungen auf der Stufe 1 mit dem Computerprogramm *MCPELMO 1.0*

3.1 Die Zusammenstellung der erforderlichen Eingabedaten für die Simulationen

Zur Vorbereitung der Simulationen im Rahmen von Stufe 1 bei der die aktuelle MCPELMO-Version 1.0 eingesetzt worden ist, müssen für alle Stoffe die wirkstoffabhängigen Daten, die *MCPELMO 1.0* für die Analyse des Versickerungsverhalten von organischen Stoffen benötigt, bestimmt werden. Daher wurden zunächst für alle Stoffe der Liste folgende Parameter mit Hilfe von QSAR-Methoden berechnet:

Sorptionskonstante: KOC (bezogen auf organischen Kohlenstoffgehalt im Boden)
Diese Konstante konnte mit ausreichender Genauigkeit aus QSAR-Berechnungen (QSAR = Quantitative Structure Activity Relationship) bestimmt werden. Bei dieser Methode wird direkt aus der chemischen Strukturformel der entsprechende Parameter berechnet [21].

Abbaurate: DT50 (Disappearance) im Boden
Es ist zur Zeit nicht möglich, mit QSAR-Methoden diesen Parameter mit einer vergleichbaren Genauigkeit zu berechnen wie eine Sorptionskonstante. Es wurde daher im Rahmen von Stufe 1 für diesen Parameter mit einer groben Klassifizierung gearbeitet.

Henry-Konstante:
Die Henry-Konstante wird gewöhnlich aus Wasserlöslichkeit, Dampfdruck und molarer Masse berechnet. Es stehen auch QSAR-Methoden zur Verfügung [22].

Für 383 Stoffe aus der Liste des Umweltbundesamts wurden die entsprechenden Daten zu KOC und Abbau berechnet bzw. abgeschätzt. Ein geringer Teil der Stoffe aus der Liste konnte aus unterschiedlichen Gründen nicht mit QSAR-Methoden abgeschätzt werden; zum Teil handelte es sich um reine Metalle, zum Teil um nicht exakt chemisch definierte Stoffe sondern Stoffgruppen. Im Anhang 1 sind die für die Simulation verwendeten Daten der 383 Stoffe zusammengestellt. In der Tabelle 1 sind die Eingabedaten für die 20 Stoffe, die bei den *MCPELMO 1.0* Simulationen die höchsten Sickerwasserkonzentrationen aufwiesen, zusammengestellt.

Tabelle 1: Eingabedaten für *MCPELMO1.0* verwendet für die Simulationen im Rahmen der Stufe 1

Nr,	CASNR	Substanz	Lin, Biodegr,	Non-Linear Biodegr,	Ulitmate Biodegr,	Primary Biodegr,	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
378	16071-86-6	CI Direct Brown 95	0,1336	0	1,0315	2,7249	-2,38	760,11	1,0 10^{06}	1,91 10^{-39}
373	4680-78-8	CI Acid Green 3	0,1172	0,0003	1,5798	2,5881	-0,64	691,82	216,8	9,57 10^{-37}
381	3761-53-3	CI Food Red 5	0,5021	0	1,7438	3,0044	0,98	480,42	1580	3,84 10^{-21}
111	68-76-8	Triaziquone	0,0353	0,0004	1,8788	2,6057	1,29	231,26	3,9410^{05}	0,000256
261	52-68-6	Trichlorfon	0,2656	0,0011	2,0586	3,1505	0,96	257,44	2,55 10^{4}	0,01188
172	39156-41-7	2,4-Diaminoanisolesulfate	0,5332	0,4988	2,484	3,4756	-1,5	236,24	1,0010^{+6}	1,40 10^{-12}
377	2602-46-2	CI Direct Blue 6	-0,5351	0	1,2392	2,6978	2,37	733,75	0,00013	1,27 10^{-36}
375	989-38-8	CI Basic Red 1	0,8803	0,9574	2,1478	3,3942	1,39	479,02	238,1	1,13 10^{-14}
374	569-64-2	CI Basic Green 4	0,4966	0,0693	2,16	3,0381	1,44	364,92	1486	3,27 10^{-11}
120	133-06-2	Captan	0,0863	0,0002	1,8032	2,9588	1,95	300,59	119,9	2,95 10^{-06}
264	12122-67-7	Zineb	0,6163	0,2877	2,5898	3,4499	0,2	275,74	6,97 10^{5}	2,4 10^{-7}
206	615-05-4	2,4-Diaminoanisole	0,3462	0,3731	2,5658	3,5088	0,86	138,17	1,57 10^{5}	0,176
103	4549-40-0	N-Nitrosomethylvinylamine	0,1821	0,1866	2,6238	3,742	0,87	86,09	2,22 10^{5}	209
122	21725-46-2	Cyanazin	0,1156	0,0001	1,6504	2,8422	2,27	240,7	183,8	0,0003
380	81-88-9	CI Food Red 15	0,4911	0,0268	1,9737	2,8764	1,98	479,02	1,636	2,52 10^{-17}
93	95-80-7	2,4-Diaminotoluene	0,2766	0,1231	2,5844	3,3862	1,1	122,17	7,48 10^{4}	0,49
99	25376-45-8	Diaminotoluene (mixed Iso,)	0,2766	0,1231	2,5844	3,3862	1,1	122,17	7,48E+04	0,49
307	59-89-2	N-Nitrosomorpholine	-0,1796	0,0048	2,5488	3,6889	0,8	116,12	2,46E+05	12,6
318	106-50-3	p-Phenylenediamine	0,2286	0,0878	2,6903	3,475	0,82	108,14	1,99E+05	1,64
54	302-17-0	Chloralhydrat	0,4682	0,0123	2,4219	3,4127	1,53	165,4	9225	4,75

Die Ergebnisse für die übrigen Stoffe sind im Anhang 1 dieser Studie aufgeführt.
Abbauraten waren für die Stoffe der Liste nicht bekannt. Mit Hilfe von quantitativen Struktur-Wirkungsbeziehungen wurde deshalb die Abbaurate nach verschiedenen Verfahren abgeschätzt. Die Maßzahlen zum Bioabbau wurden mit dem Computerprogramm Biowin v3.63 von Meyland und Howard [23] berechnet. Die Zahlenangaben in den Spalten *Linear*- bzw. *Non-Linear Biodegradation* sind ein Maß für die Abbaugeschwindigkeit, wobei ein Wert oberhalb von 0.5 bedeutet, dass die Substanz relativ schnell abgebaut wird (*FAST*). Etwas konkretere Bedeutungen haben die Zahlenangaben in den Spalten *Ultimate* und *Primary Biodegradation*: Die Werte bedeuten einen

- Abbau innerhalb von Stunden (Wert = 5,0)
- Abbau innerhalb von Tagen (Wert = 4,0)
- Abbau innerhalb von Wochen (Wert = 3,0)
- Abbau innerhalb von Jahren (Wert = 2,0)

Die mit dem Programm *Biowin* ausgegebenen Maßzahlen mussten für die Simulationen in DT50-Werte übersetzt werden. Für die Rechnungen wurden die Werte der Spalte „*Ultimate Biodegradation*" (*Realistic worst case)* verwendet und mit folgender Gleichung in DT50-Werte umgerechnet:

$$DT50 = \text{Exp}(8{,}87 - 1{,}93 * M) \qquad (18)$$

DT50: Halbwertszeit der Substanz (Tage)
M: "Maßzahl" von Biowin zur Charakterisierung der biologischen Abbaubarkeit

Die Annahmen, die dieser Regressionsrechnung zugrunde liegen, sind in der Tabelle 2 zusammengestellt.

Tabelle 2: Vorgenommene Umrechnungen von Biowin-Klassen in Halbwertszeiten

Biowin-Klasse	angenommene Halbwertszeit	
1 (Abbau innerhalb von Jahren)	3 Jahre	= 1095,0
2 (Abbau innerhalb von Monaten)	0,5 Jahre	= 180,0 d
3 (Abbau innerhalb von Wochen)	0,5 Monate	= 14 d
4 (Abbau innerhalb von Tagen)	0,5 Wochen	= 3,5 d
5 (Abbau innerhalb von Stunden)		0,5 d

In der folgenden Abbildung sind die Biowin-Klassen gegen die Halbwertzeiten der Tabelle aufgetragen.

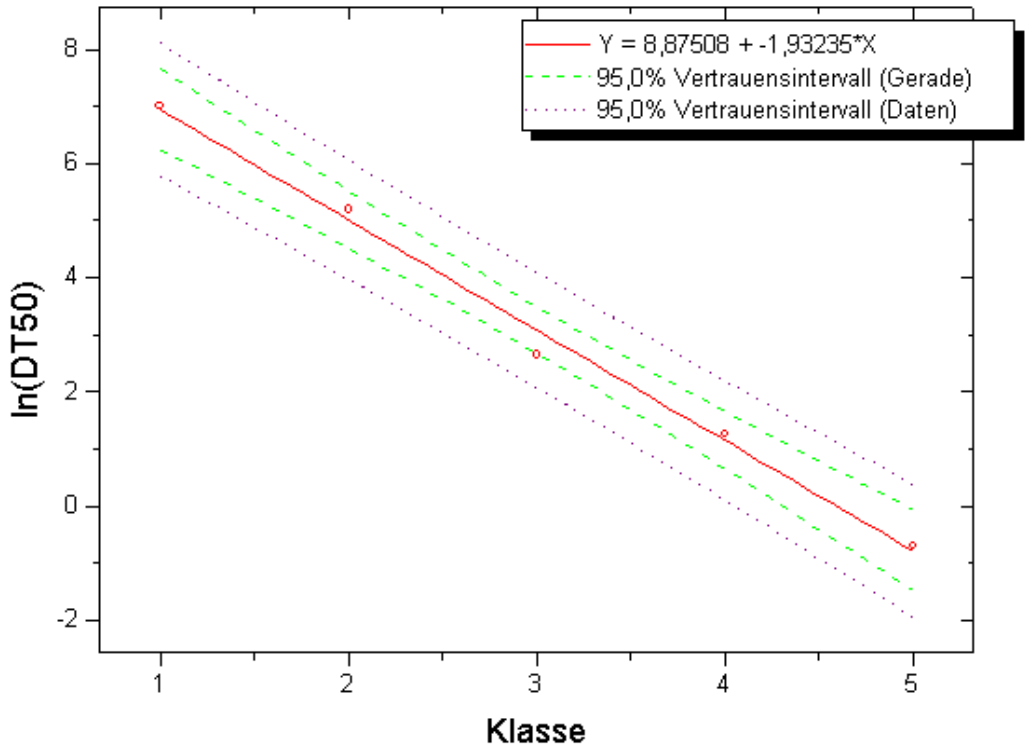


Abbildung 2: Korrelation der Biowin-Maßzahl mit der angenommenen Halbwertszeit

Die 383 in dieser Studie berechneten Stoffe enthalten auch Pflanzenschutzmittel. Im Rahmen des Zulassungsverfahrens dieser Stoffe liegen (vertrauliche) Daten zu Mobilität und Abbau vor, die von den hier verwendeten Daten abweichen können. Dies sollte bei der Interpretation der Ergebnisse berücksichtigt werden.

Im Modell *MCPELMO 1.0* sind insgesamt 13 Szenarien definiert. Sie entstanden durch Kombination einer Karte mit 9 Klimaregionen und einer Karte mit der Verbreitung von 5 wichtigen Bodenarten. Jede dieser 13 Versickerungsszenarien ist jeweils durch eine Klimaregion und einem dort vorherrschenden Bodentyp gekennzeichnet. Die Versickerungsszenarien sind in der Tabelle 3 beschrieben, Abbildung 3 zeigt ihre geografische Verteilung.
Weitere Informationen zu diesem Thema findet man im UBA Bericht 106 02 089 [13].

Tabelle 3: Sickerwasserszenarien von *MCPELMO 1.0*

Nr.	Versickerungsszenario	Klimaregion	Vorherrschender Bodentyp
1	Nordseeküste	1 (Schleswig)	1 (Seemarsch)
2	Nördliche Ostseeküste	1 (Schleswig)	4 (Braunerde)
3	Nordöstliche Podsolregion	2 (Teterow)	2 (Podsole, Podsol-Braunerden)
4	Südöstliche Podsolregion	4 (Berlin)	2 (Podsole, Podsol-Braunerden)
5	Westliche Podsolregion	3 (Hamburg)	2 (Podsole, Podsol-Braunerden)
6	Region um Berlin	4 (Berlin)	4 (Braunerde)
7	Nördliche und Nordöstliche Lössregion	6 (Magdeburg)	3 (Parabraunerde)
8	Nördliche Karstregion	7 (Bad Marienberg)	5 (Rendzina)
9	Westliche und südwestliche Lössregion	5 (Frankfurt/Main)	3 (Parabraunerde)
10	Nördliche Mittelgebirge	7 (Bad Marienberg)	4 (Braunerde)
11	Südliche Karstregion	8 (Nürnberg)	5 (Rendzina)
12	Südliche Lössregion	8 (Nürnberg)	3 (Parabraunerde)
13	Alpen, höhere Lagen von Schwarzwald und Südlicher Wald	9 (Oberstdorf)	4 (Braunerde)

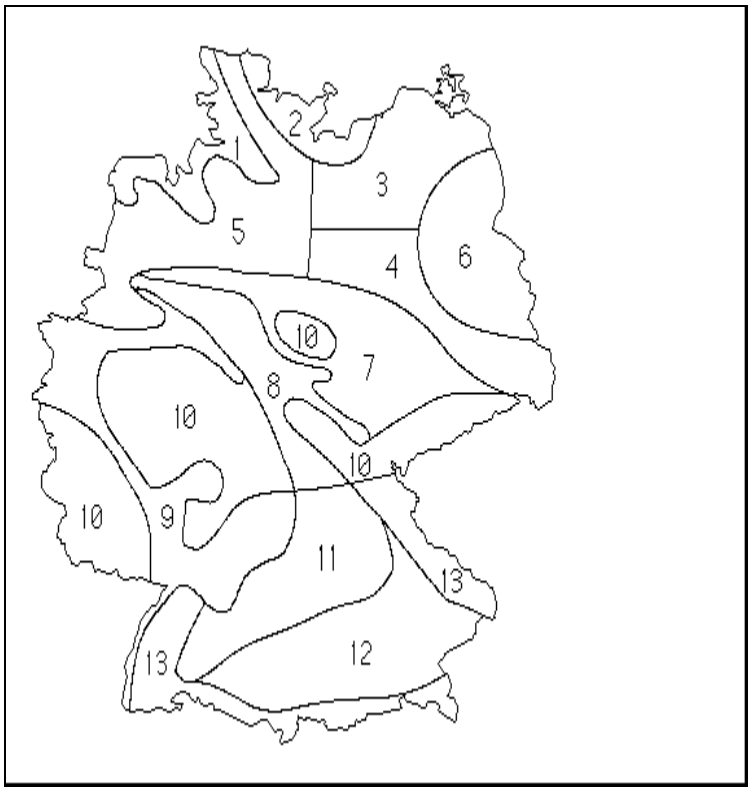


Abbildung 3: Geografische Verteilung der Versickerungsszenarien

Die zu erwartenden Sickerwasserkonzentrationen der Substanzen wurden auf der Basis des Szenarios „Westliche Podsolregion“ durchgeführt. Aufgrund des leichten Bodens und der Niederschlagsverhältnisse werden dort im Vergleich mit anderen Regionen relativ hohe Konzentrationen berechnet (*realistic worst case* Szenario*).* Neben der mittleren Konzentration im Sickerwasser wurde zusätzlich auch das 90. Perzentil der Konzentrationen unter Berücksichtigung der Klimaschwankungen berechnet.

Da die Konzentration der Stoffe im Klärschlamm nicht bekannt war, wurde von einer jährlichen Rate von 1 kg/ha unabhängig von der Substanz ausgegangen. Dies muss bei der Interpretation der Ergebnisse in jedem Fall berücksichtigt werden. Für die Substanzen, für die kein Dampfdruck vorlag, fand der Pfad „Verflüchtigung aus dem Boden“ keine Berücksichtigung.

3.2 Durchführung von MCPELMO1.0 –Simulationsrechnungen)

Die im Kapitel zusammengestellten Stoffdaten wurden nun verwendet, um das Versickerungspotenzial der Substanzen zu bestimmen.

Im Anhang 1 sind die Ergebnisse für die 383 Stoffe entsprechend ihrem Versickerungspotenzial (Bezug: 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration) aufgelistet. In der Tabelle 4 in diesem Bericht sind die 20 Substanzen mit dem höchsten Versickerungspotenzial zusammengestellt.

Tabelle 4: Ergebnisse der MCPELMO für das Szenario „Westliche Podsolregion“ (Alle Substanzen: jährliche Rate von 1 kg/ha)

Nr,	CAS-No,	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90,Perzentil (µg/L)
378	16071-86-6	CI Direct Brown 95	0	0,0	974,4	315,02	343,91
373	4680-78-8	CI Acid Green 3	0	0,2	337,8	284,82	313,97
381	3761-53-3	CI Food Red 5	0	9,5	246,0	249,24	278,21
111	68-76-8	Triaziquone	0	19,5	189,5	207,41	235,47
261	52-68-6	Trichlorfon	$1{,}76\ 10^{-06}$	9,1	133,9	196,95	224,81
172	39156-41-7	2,4-Diaminoanisolesulfate	0	0,0	58,9	144,84	170,40
377	2602-46-2	CI Direct Blue 6	0	234,4	652,3	142,78	168,08
375	989-38-8	CI Basic Red 1	0	24,5	112,7	139,90	164,78
374	569-64-2	CI Basic Green 4	0	27,5	110,1	131,40	155,68
120	133-06-2	Captan	0	89,1	219,3	118,41	141,82
264	12122-67-7	Zineb	0	1,6	48,0	110,66	133,61
206	615-05-4	2,4-Diaminoanisole	0	7,2	50,3	91,66	112,70
103	4549-40-0	N-Nitrosomethylvinylamine	0	7,4	44,9	76,38	95,61
122	21725-46-2	Cyanazin	$3{,}06\ 10^{-07}$	186,2	294,7	74,80	93,77
380	81-88-9	CI Food Red 15	0	95,5	157,8	73,74	92,47
93	95-80-7	2,4-Diaminotoluene	0	12,6	48,5	73,65	92,44
99	25376-45-8	Diaminotoluene (mixed Isom,)	0	12,6	48,5	73,65	92,44
307	59-89-2	N-Nitrosomorpholine	$2{,}53\ 10^{-03}$	6,3	51,9	72,17	91,10
318	106-50-3	p-Phenylenediamine	0	6,6	39,5	67,30	85,30
54	302-17-0	Chloralhydrat	$5{,}90\ 10^{-04}$	33,9	66,4	67,53	84,56

3.3 Interpretation der Ergebnisse der Stufe 1 Simulationen

Bei der Bewertung der Ergebnisse stößt man auf eine Schwierigkeit. Ohne eine realistische Ausgangskonzentration im Boden bzw. eine realistische Konzentration der Substanzen in Reststoffen, kann die Simulation nur das der Substanz inhärente Versickerungspotenzial angeben. So tauchen bei dieser Analyse sechs Farbstoffe unter den zehn Stoffen mit den höchsten Sickerwasserkonzentrationen auf. Dieses Ergebnis ist durchaus nachvollziehbar, da diese Stoffe durch eine geringe Verflüchtigung, eine niedrige Sorption und ein geringe Abbaubarkeit gekennzeichnet sind, alles Eigenschaften, die zu einem hohen Versickerungspotenzial beitragen. Allerdings sind die zu erwartenden Konzentrationen im Reststoff sehr viel kleiner, als es einer Rate von 1 kg/ha, von der bei allen Stoffen ausgegangen wurde, entspricht. Die Sickerwasserkonzentrationen können allerdings leicht linear korrigert werden, wenn die entsprechenden Konzentrationen im Reststoff und die jährliche Aufbringungsrate für den Reststoff bekannt sind. In der folgenden Gleichung ist die notwendige Korrektur aufgeführt.

$$c_S = c_{0 *} (c_R * R_R) / R_0 / 1000 \quad (19)$$

c_S: korrigierte Sickerwasserkonzentration der Substanz (µg/L)
c_0: unkorrigierte Sickerwasserkonzentration der Substanz (µg/L)
c_R: Konzentration der Substanz im Reststoff [mg/kg]
R_R: jährliche Aufbringungsrate für den Reststoff [t/(ha Jahr)]
R_0: ursprüngliche Aufbringungsrate für die Substanz [= 1 kg/ha]
1000: Umrechnungsfaktor aufgrund unterschiedlicher Einheiten

4 Berücksichtigung zusätzlicher Prozesse in MCPELMO 2.0

4.1 Berücksichtigung des schnellen Stofftransports im Boden ("preferential flow")

Die bisherige *MCPELMO 1.0*-Version beruht auf PELMO 2.01. Mit diesem Modell kann nur die chromatographische Verlagerung von Stoffen im Boden berechnet werden. Abgesehen von stark zur Verflüchtigung neigenden Substanzen ist beim chromatographischen Transport die Verlagerungstendenz vor allem durch die Parameter Sorptionskonstante und Abbaurate bestimmt. Die Substanz sorbiert dabei schnell bis zur Gleichgewichtsbedingung am Boden, und nur die im Gleichgewicht gelösten Anteile können nach Niederschlägen in tiefere Bodenschichten verlagert werden. Dieser Prozess ist vor allem bei Sandböden dominierend. Bei schluffigen oder tonigen Böden beobachtet man jedoch neben dem klassischen chromatographischen Transport häufig auch einen schnellen Transport von der Oberfläche in tiefere Bodenschichten, ohne dass es vorher zu den Sorptionsgleichgewichtseinstellungen gekommen ist. Bei diesem sogenannten *preferential flow* kann es unmittelbar nach Ausbringung des Stoffs (z.B. Applikation von Pflanzenschutzmitteln) zu erheblich höheren Verlagerungen kommen, als es der Sorptionskoeffizient der Substanz ausweist.

Der oben definierte Begriff *preferential flows* kann weiter in verschiedene Typen von schnellen Flüssen aufgespalten werden, die mit verschiedenen Modellansätzen simuliert werden können. Beim sogenannten *finger flow* weist die Bodenmatrix insgesamt eine homogene grobporige Struktur auf, während der *funnel flow* durch Variationen in der Bodentextur (feinporig, grobporig) verursacht wird. Schließlich versteht man unter dem eigentlichen Makroporenfluss Risse (z.B. Schrumpfrisse) in einem sonst homogen feinporigen Boden. Jede dieser Variationen muss jeweils durch spezielle Modellansätze simuliert werden. Die in dieser Studie vorgenommenen Modellerweiterungen zur Berücksichtigung des *preferential flows* wurden in Anlehnung an die Methodik des im Rahmen der europäischen Pflanzenschutzmittelzulassung bereits verwendeten Computerprogramm MACRO [11] durchgeführt. MACRO ist konzipiert, den sogenannten *funnel flow* zu simulieren: Es ist ein Zwei-Porositäten-Modell (*Dual-porosity/dual-permeability)*, bei dem der Markoporenfluss einsetzt, wenn das Feinporensystem komplett mit Wasser gesättigt ist, und überschüssiges Wasser anschließend über das Grobporensystem in tiefere Schichten geleitet wird. Aufgrund dieser Vorgaben sind das Computerprogramm MACRO und damit auch die in dieser Studie vorgenommene Modellerweiterung von PELMO nicht geeignet, einen Makoporenfluss vor Erreichen der

Wassersättigung in der Bodenmatrix zu simulieren, wie sie nach Trockenperioden beobachtet werden können.

Für den Einbau der schnellen Stoffverlagerung in PELMO durch den *funnel flow* wurden folgende Modellannahmen gemacht:

- Eine schnelle Stoffverlagerung ist nur möglich ausgehend von der obersten Bodenschicht (üblicherweise die oberen 2 cm bis 3 cm des Oberbodens) in tiefere Bodenschichten.
  Diese Annahme wurde gewählt, weil die schnelle Verlagerung von Stoffen im Boden unter Umgehung von Sorptionsprozessen in der Regel in der obersten Bodenschicht mit ihren hohen Stoffkonzentrationen ihren Ausgangspunkt nimmt, bevor es zu einer Sorptionsgleichgewichtseinstellung kommen konnte.
- Eine schnelle Stoffverlagerung findet immer dann statt, wenn die tägliche Niederschlagsmenge die Permeabilität des Bodens übersteigt.
  In der bisherigen Version von PELMO kann das Bodenwasser nur im Mikroporensystem des Bodens transportiert werden. Unabhängig von der täglichen Niederschlagsmenge ist die Bodenmatrix stets in der Lage, die gesamte Niederschlagsmenge aufzunehmen. Sind alle Poren in einer Schicht bis zur Feldkapazität mit Wasser gefüllt, wird die nächste (darunterliegende) Schicht gefüllt. Mit dem Wasser gelangen auch andere Stoffe in tiefere Bodenschichten und werden dort entsprechend ihrer Sorptionskonstante gebunden. Für die Berücksichtigung der schnellen Stoffverlagerung wurde in PELMO ein zusätzlicher Parameter eingeführt: die effektive gesättigte Wasserleitfähigkeit des Bodens. Solange dieser Parameter (Einheit mm/Tag) nicht kleiner ist als die Niederschlagsrate, findet der chromatographische Transport statt. Für den Fall, dass die Niederschlagsrate höher ist, wird das zusätzliche Wasser über Makroporen nach unten abgeleitet. Auch in die nächste Schicht gelangt nur soviel Wasser in das Mikroporensystem, wie es der Permeabilität des Bodens entspricht. Der Rest wird erneut über Makroporen in die nachfolgende Schicht transportiert. Auf dem Weg in tiefere Bodenschichten wird die Stoffkonzentration im Bodenwasser in den Makroporen nicht durch Sorptionsprozesse reduziert. Es können daher innerhalb eines Tages erhebliche Substanzmengen nach unten verlagert werden.
- Die schnelle Verlagerung endet vor dem letzten Horizont
  Stofftransport durch Makroporen ist ein Phänomen, das normalerweise nur im Oberboden auftritt, in dem die Bodenfeuchten sehr stark schwanken. Die Temperatur- und Feuchtebedingungen in Unterböden sind dagegen relativ konstant, wodurch das Auftreten von Makroporen erschwert wird. Darüber hinaus sind die Verhältnisse im Unterboden gekennzeichnet durch eine deutliche Abnahme von Abbau- und Sorptionsprozessen. Deshalb werden auch dort durch den klassischen

chromatographischen Transport Substanzmengen erheblich schneller verlagert als im Oberboden. Aufgrund beider Gesichtspunkte wurde auf einen zusätzlichen *preferential flow* in der untersten Bodenschicht verzichtet.

Eine alternative Möglichkeit zur Berechnung der Wassermenge, die über das Makroporensystem in tiefere Bodenschichten gelangt, wäre auf der Grundlage des Runoff-Curve-Number-Verfahrens möglich. Mit diesem Verfahren wird normalerweise der Oberflächenabfluss nach Starkregenereignissen berechnet. Dies wurde im Rahmen dieses Vorhabens allerdings nicht weiter verfolgt.

4.2 Die Verlagerung von Substanzen im Boden gebunden an Huminstoffen

PELMO berechnet die Konzentrationsverteilung im Boden zur Zeit auf der Basis eines Drei-Phasen-Gleichgewichts, in dem die Stoffe entweder sorbiert an der Bodenmatrix, gelöst im Bodenwasser oder gasförmig in der Bodenluft vorliegen können. Der Transport findet hauptsächlich in der gelösten Phase statt, doch können (vor allem in Trockenperioden) sich die Substanzen auch über die Bodenluft durch diffusiven Transport im Boden ausbreiten.
Aus experimentellen Untersuchungen ist bekannt, dass nichtpolare organische Substanzen, die gewöhnlich ausgezeichnete Sorptionseigenschaften aufweisen, unter bestimmten Bedingungen gebunden an bewegliche Huminstoffe in tiefere Bodenschichten transportiert werden können [24]. Obwohl dieser Prozess schon längere Zeit bekannt ist, hat er bisher noch keine Berücksichtigung in den Versickerungsmodellen gefunden. Das bisherige Drei-Phasen-Gleichgewicht von PELMO wurde deshalb um eine weitere Phase erweitert, mit der ein Transport von schwerlöslichen Substanzen mit Huminsäuren als Träger simuliert werden kann. Im folgenden werden einige Erläuterungen zu dieser Erweiterung gegeben.

Für ein System, in dem drei Phasen im Gleichgewicht stehen, wie es bisher in dem Computerprogramm PELMO realisiert ist, benötigt man zwei Konstanten, die jeweils das Gleichgewicht zwischen zwei Phasen beschreiben. Es handelt sich in PELMO dabei um die Sorptionskonstante, die das Verhältnis der sorbierten zur gelösten Wirkstoffkonzentration beschreibt und die Henry-Konstante, die das entsprechende Verhältnis zwischen Gasphase und Bodenlösung charakterisiert. Die Gleichgewichte sind in den beiden folgenden Gleichungen mathematisch beschrieben.

$$Q_B = \frac{(kd * d) * 100}{\Theta} \quad (20)$$

$$Q_L = \frac{H}{R * T} \quad (21)$$

Q_B: Verhältnis der Substanzmenge sorbiert zu gelöst im Bodenwasser (-)
Q_L: Verhältnis Stoffmenge in der Bodenluft zu gelöst im Bodenwasser (-)
kd: Sorptionskonstante im Boden [mL/g]
d: Bodendichte [kg/L]
H: Henry-Konstante [J/mol)]
R: Gaskonstante [J/(K*mol)]
T: Absolute Temperatur [K]
Θ: Wassergehalt des Bodens [Vol %]

Aus diesen beiden Verhältnissen kann leicht der jeweilige Anteil des Stoffs, der in den drei Phasen vorliegt, berechnet werden. Es gilt:

$$f_B = \frac{Q_B}{1 + Q_B + Q_L} \quad (22)$$

$$f_L = \frac{Q_L}{1 + Q_B + Q_L} \quad (23)$$

$$f_W = \frac{1}{1 + Q_B + Q_L} \quad (24)$$

f_B : Anteil der Substanz sorbiert an der Bodenmatrix (-)
f_L : Anteil der Substanz in der Bodenluft (-)
f_W : Anteil der Substanz im Bodenwasser (-)

Zur Berücksichtigung des Transports von Stoffen gebunden an Huminsäuren wurde eine weitere Phase im Bodenwasser definiert. Ihre Konzentration in der Bodenlösung wird mit Hilfe des DOC-Gehalts (DOC = *Dissolved Organic Carbon*, „gelöster organischer Kohlenstoff“) charakterisiert. Die zusätzliche Gleichgewichtsbedingung in Gleichung (25) beschreibt das Verhältnis von Substanz gebunden am “gelösten organischen Kohlenstoff” zum Substanzanteil frei in der Bodenlösung:

$$Q_D = \frac{(k_{doc}) * doc}{1000} \quad (25)$$

Q_D: Verhältnis der Substanzmenge gebunden am DOC zu gelöst im Bodenwasser (-)
k_{doc}: Gleichgewichtskonstante für die Bindung an DOC [mL/g]
doc: Gehalt an gelöstem organischen Kohlenstoff [g/L]

Dieses zusätzliche Gleichgewicht muss natürlich bei der Berechnung der Stoffanteile in den einzelnen Phasen (siehe die Gleichungen 22 bis 24) berücksichtigt werden:

$$f_B = \frac{Q_B}{1 + Q_B + Q_L + Q_D} \quad (26)$$

$$f_L = \frac{Q_L}{1 + Q_B + Q_L + Q_D} \quad (27)$$

$$f_W = \frac{1}{1 + Q_B + Q_L + Q_D} \quad (28)$$

$$f_D = \frac{1}{1 + Q_B + Q_L + Q_D} \quad (29)$$

f_B : Anteil der Substanz sorbiert an der Bodenmatrix (-)
f_L : Anteil der Substanz in der Bodenluft (-)
f_W : Anteil der Substanz im Bodenwasser (-)
f_D : Anteil der Substanz gebunden an Huminstoffen (-)

4.3 Überprüfung der Erweiterungen mit experimentellen Daten

Trotz der Komplexität des Computerprogramms PELMO stellen die verschiedenen zusätzlichen Annahmen in PELMO noch starke Vereinfachungen der in der Realität stattfindenden Verlagerungsprozesse dar. Das modifizierte Programm sollte daher in jedem Fall mit experimentellen Daten verglichen werden. Dazu wurden Ergebnisse des in unserem Institut durchgeführten Vorhabens „Belastung aquatischer Systeme durch Dränagewasser“ (FKZ 126 05 089) [25]verwendet.

In jenem Vorhaben wurde das Dränagewasser mehrerer landwirtschaftlich genutzter Flächen auf Pflanzenschutzmittelrückstände hin untersucht (Die schnelle Stoffverlagerung über das Makroporensytem ist bei Vorhandensein von Dränagen begünstigt.). Die Simulationsrechnungen wurden exemplarisch für den Standort A (Welver-Borgeln, Soester Börde in Nordrhein-Westfalen) durchgeführt. Bei dem Boden handelt es sich um einen Lößboden mit einem hohen Schluff- und Tonanteil (Oberboden: 2,4 % Sand; 80,4 % Schluff; 17,2 % Ton; 1.0 % org. Kohlenstoff). In dem Vorhaben wurde die Permeabilität mit 14,4 mm/Tag abgeschätzt. Die langjährigen mittleren Jahresniederschläge in der Nähe des Versuchsstandortes bei Soest betragen 732 mm (Meßstelle Bad Sassendorf, 1951-1980, Deutscher Wetterdienst).

Da nicht bekannt war, zu welchem Anteil sich das Perkolat auf Grundwasserneubildung und Dränagenspeisung verteilte, wurde bei allen folgenden Vergleichen der Stoffeintrag in das Dränagesystem (experimenteller Wert) mit dem gesamten Perkolat (berechneter Wert) verglichen. Dies kann prinzipiell zu einer Überschätzung der Dränageeinträge durch die PELMO-Simulationen führen.

Die Darstellung der Simulationsergebnisse erfolgt als Zeitachsen-Graphiken und wird den experimentellen Daten in entsprechender Auftragung gegenübergestellt.

Die verwendeten Daten zu Verlagerung und Abbau der Wirkstoffe stammen aus dem Forschungsbericht. Dort wurden sie aber nicht an den Versuchsböden experimentell bestimmt, sondern aus Literaturangaben zusammengestellt. Sie sind in der Tabelle 5 zusammengestellt.

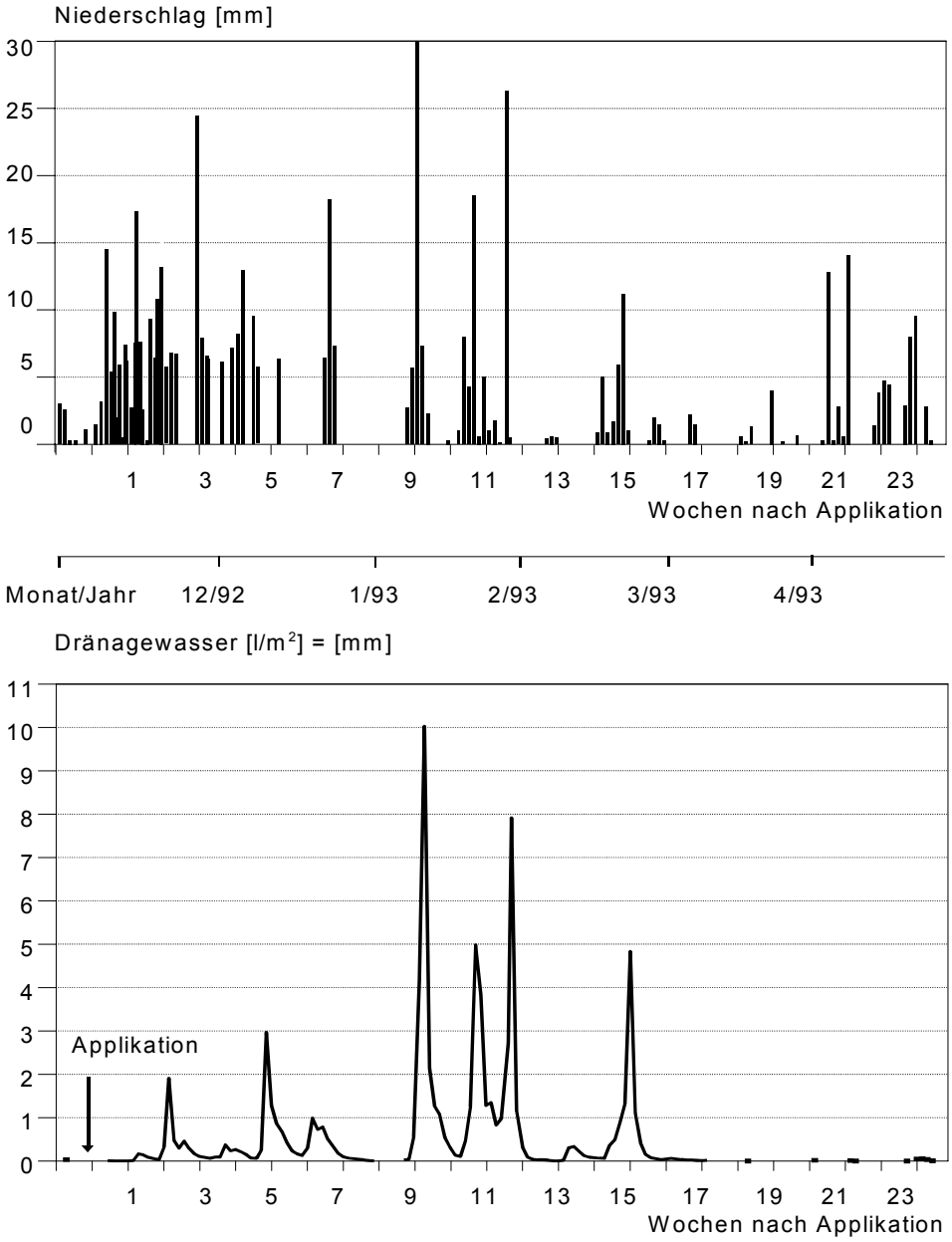
Tabelle 5: Verwendete Daten zu Verlagerung und Abbau der Wirkstoffe

Wirkstoff	KOC (L/kg)	DT50 (d)
Bentazon	63	28
Chlortoluron	190	30
Isoproturon	130	18
Metolachlor	261	30
MCPA	132	23
Pendimethalin	4010	90

Im folgenden werden experimentelle und berechnete Ergebnisse für die einzelnen Versuchsperioden und Wirkstoffe zusammengestellt und kurz diskutiert.

Die einheitliche Darstellung der experimentellen und simulierten Ergebnisse ist nicht möglich. Die experimentellen Ergebnisse wurden direkt dem Forschungsbericht (Kördel et al. (1996), [25]) entnommen, die berechneten Ergebnisse wurden mit dem Ausgabeprogramm von PELMO erzeugt und sind daher in englischer Sprache beschriftet.

4.3.1 Versuchsperiode 1992/1993



Abbildng 4: Experimentelle Ergebnisse zum Wasserhaushalt (1992/93)

aus: Kördel et al., (1996) [25]

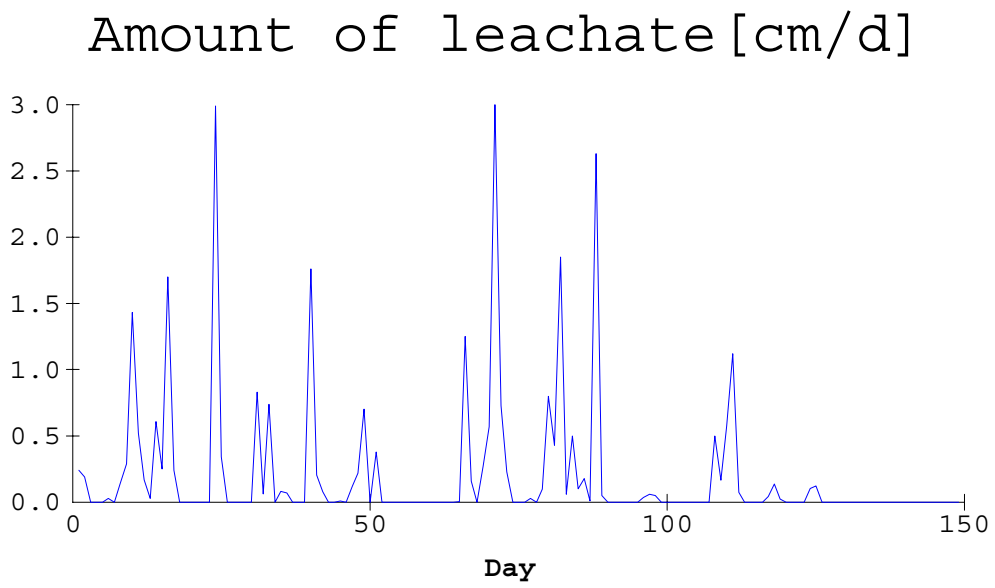


Abbildung 5: Niederschlagsdaten für die PELMO-Simulation (1992/93), *Programmausgabe*

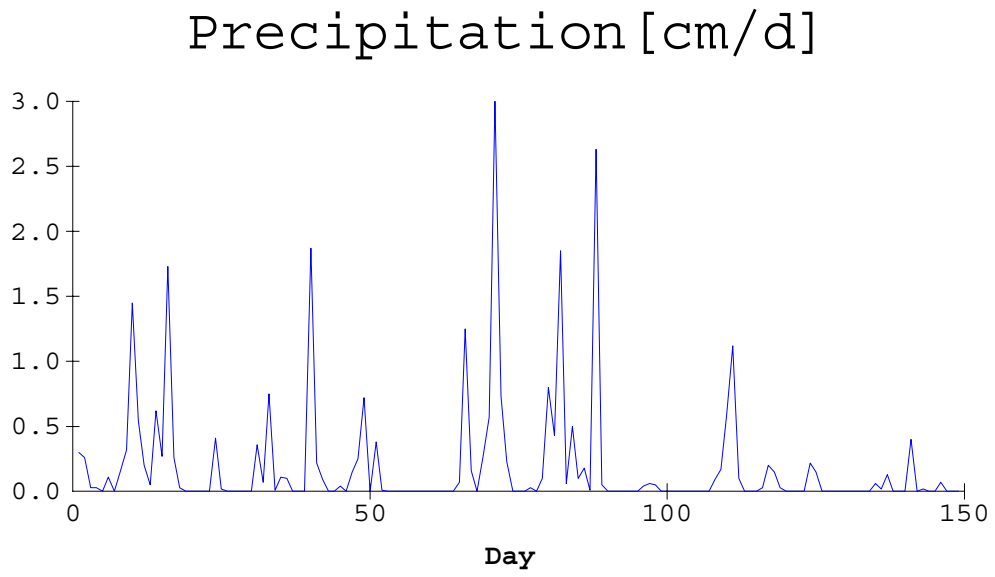


Abbildung 6: Simuliertes Sickerwasser (PELMO-Simulation, 1992/93) , *Programmausgabe*

Die mit PELMO berechneten Perkolatflüsse (Abbildung 6) liegen im Vergleich zum gemessenen Dränagefluss (Abbildng 4) zu Beginn des Winters deutlich zu hoch. Doch auch am Ende der Versuchsperiode entspricht das von PELMO berechnete Sickerwasser nicht dem Abfluss über die Dränage. Das berechnete Perkolat liegt um den Faktor 2 bis 3 oberhalb des Dränageaustrags. Die Ursache kann darin liegen, dass experimentell nicht die Grundwasserneubildung bestimmt werden konnte, und so eine Gleichsetzung von Perkolat und Dränageeintrag zu einer Überschätzung führen muss.

4.3.1.1 Wirkstoff Isoproturon

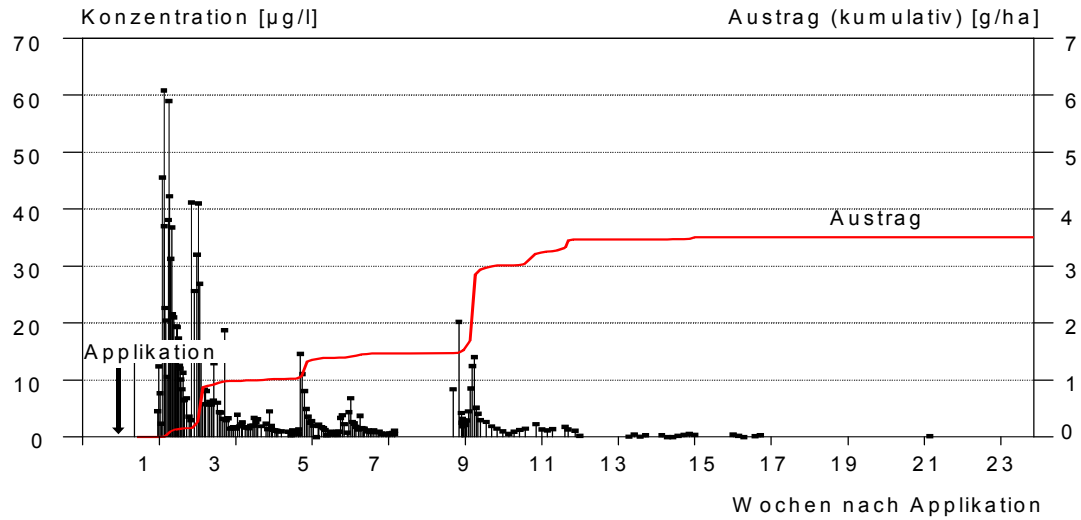


Abbildung 7: Experimenteller Wirkstoffaustrag (Isoproturon, 1992/93), *aus: Kördel et al., (1996) [25]*

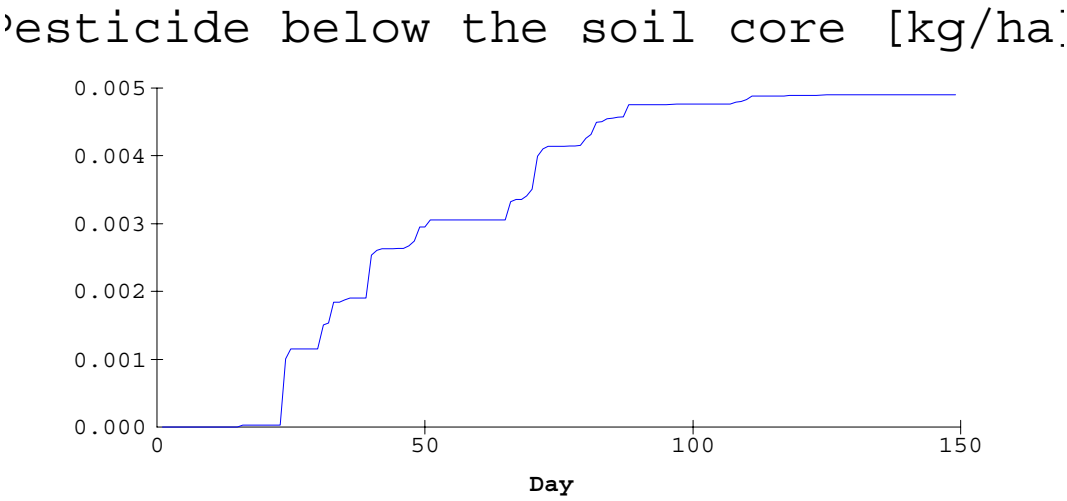


Abbildung 8: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, Isoproturon, 1992/93),

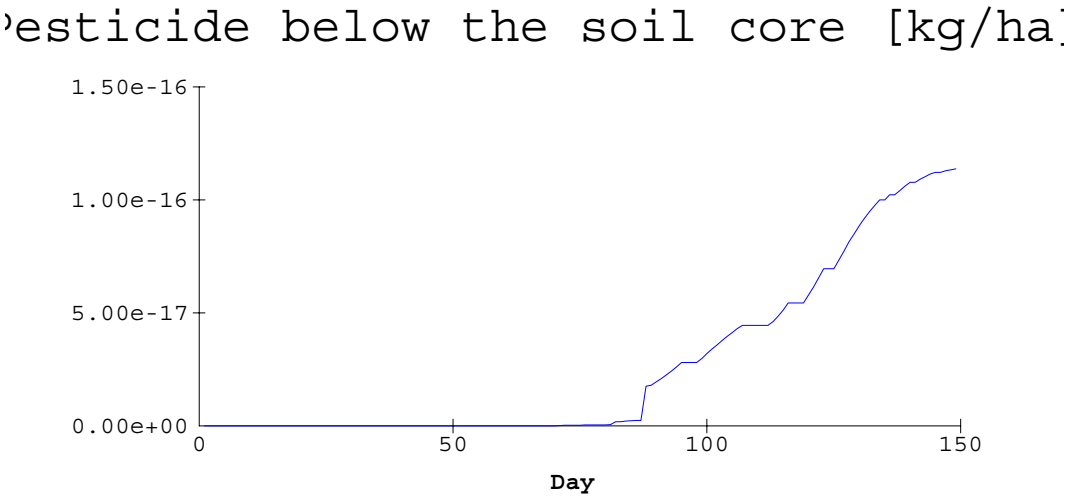


Abbildung 9: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, Isoproturon, 1992/93)

4.3.1.2 Wirkstoff Pendimethalin

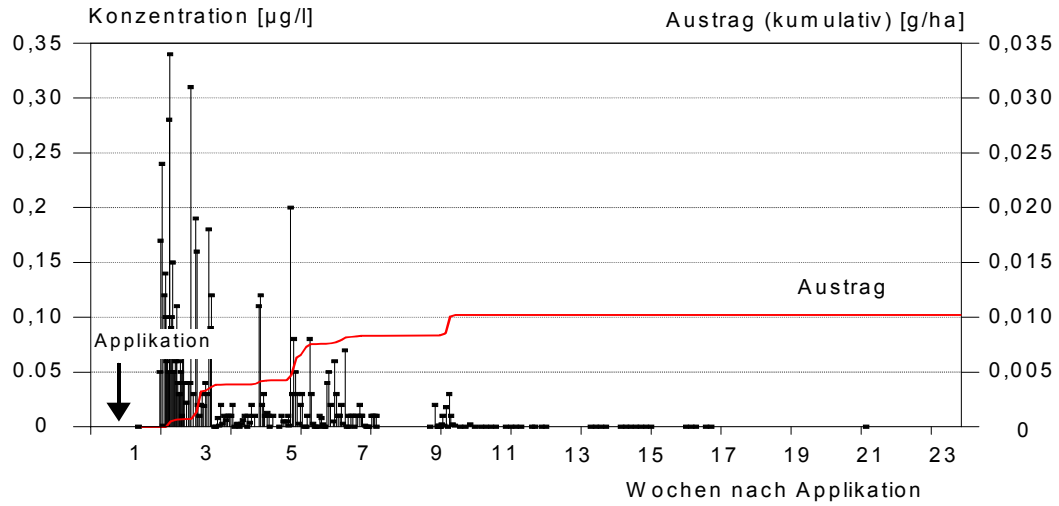


Abbildung 10: Experimenteller Wirkstoffaustrag (Pendimethalin, 1992/93)
aus: Kördel et al., (1996) [25]

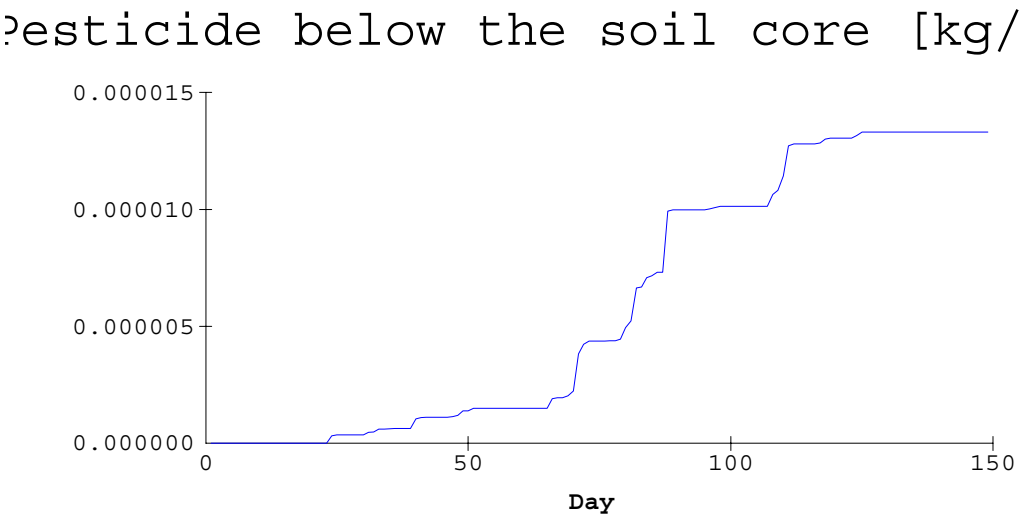


Abbildung 11: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, Pendimethalin, 1992/93)

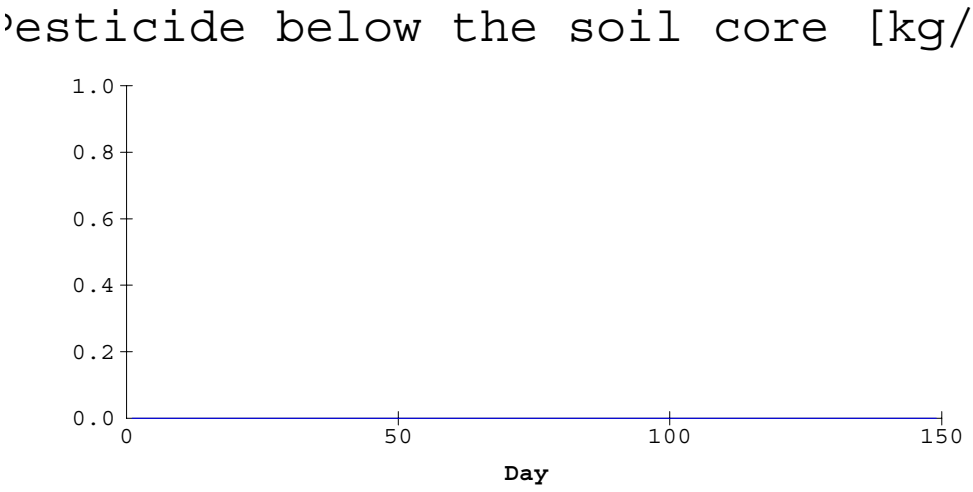


Abbildung 12: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, Pendimethalin, 1992/93)

Die simulierten Stoffausträge sowohl von Isoproturon als auch von Pendimethalin können sehr gut mit den experimentellen Dränageeinträgen verglichen werden. Der zeitliche Ablauf der Einträge ist zwar in Simulation und Experiment nicht immer identisch, jedoch stimmen die kumulierten Einträge sehr gut überein.

Die Einträge sind erwartungsgemäß kurz nach der Applikation im November deutlich höher als zu späteren Zeitpunkten. Dies lässt sich als Folge eines schnellen Stofftransportes in Makroporen mit entsprechend geringer Wechselwirkung zwischen PSM und Bodenmatrix interpretieren. Kommt es zu späteren Zeitpunkten, z.B. im Januar, zu einem Makroporenfluss, so ist die Konzentration des PSM im Makroporenwasser offenbar in höherem Maße durch substanz- und bodenspezifische Verteilungsgleichgewichte limitiert.

Für beide Pflanzenschutzmittel kann die PELMO-Version ohne die Erweiterung des schnellen Stofftransport die experimentellen Ergebnisse nicht darstellen (Abweichungen zwischen experimentellen und berechneten Einträge um mehr als 10 Größenordnungen.).

4.3.2 Versuchsperiode Frühjahr/Sommer 1993

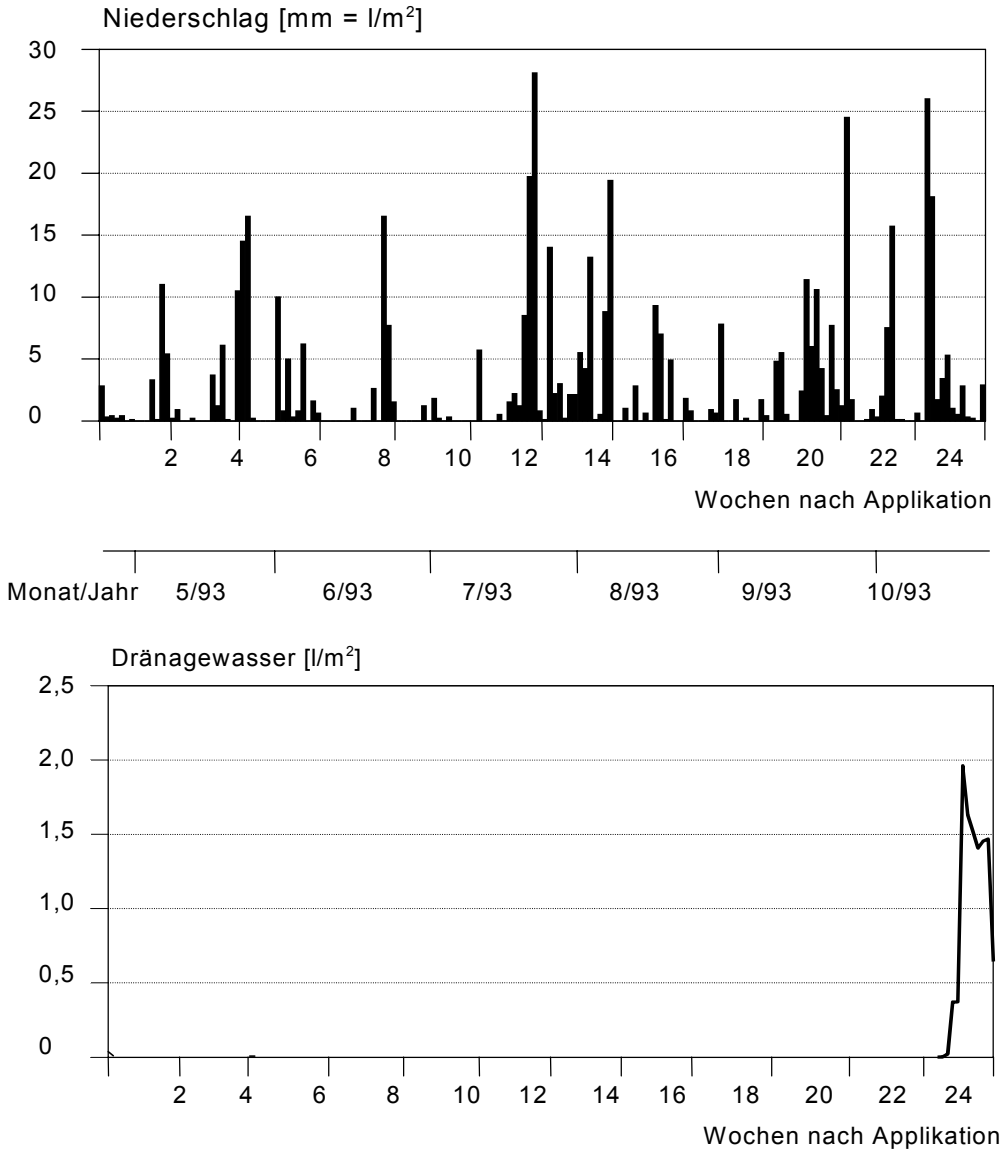


Abbildung 13: Experimentelle Ergebnisse zum Wasserhaushalt (1993)

aus: Kördel et al., (1996) [25]

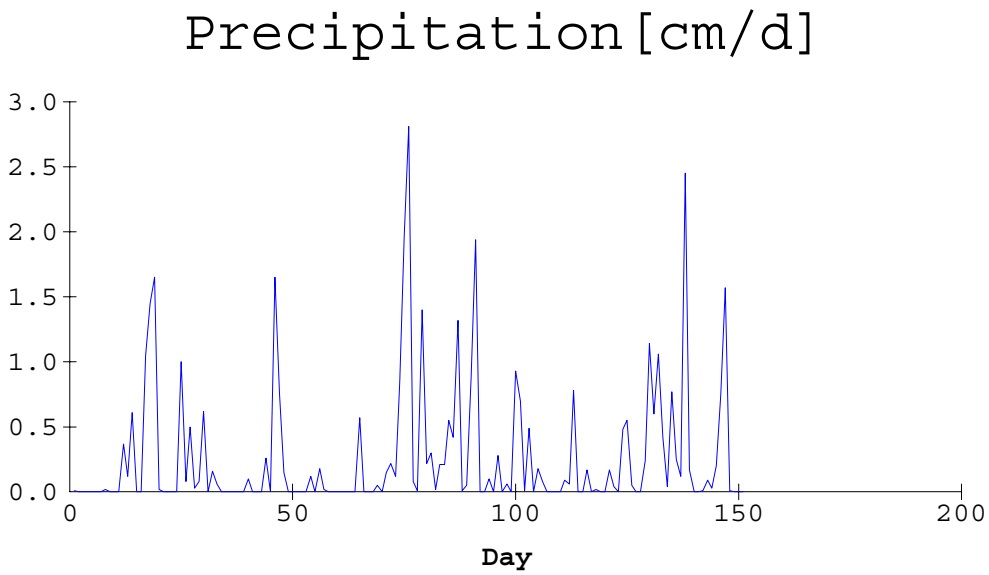


Abbildung 14: Niederschlagsdaten für die PELMO-Simulation (1993), *Programmausgabe*

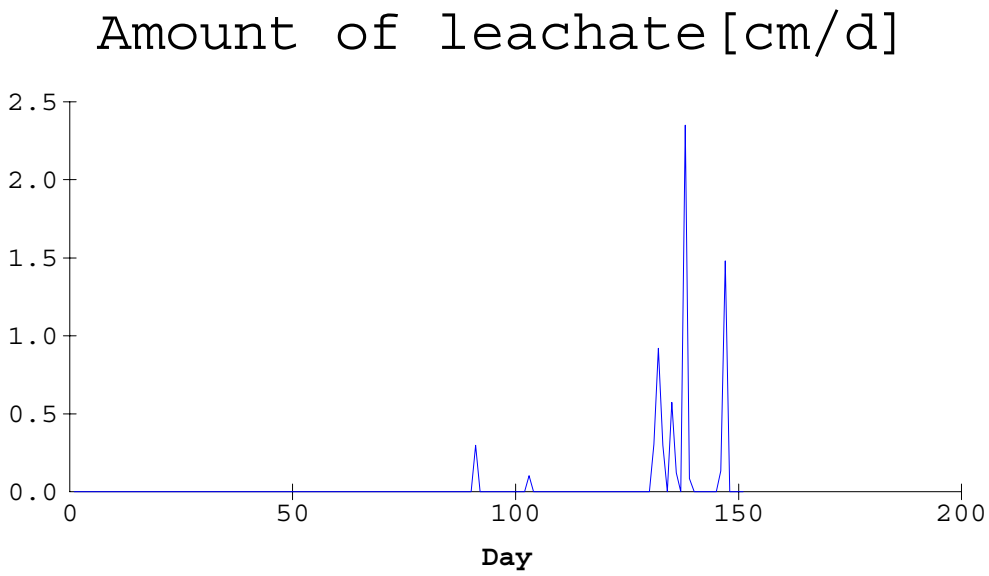


Abbildung 15: Simuliertes Sickerwasser (PELMO-Simulation, 1993),

Das Sommerhalbjahr 1993 ohne Dränagefluss wird meist richtig vorhergesagt, jedoch wird nach etwa 14 Wochen (entspricht ca. 100 Tage in der Abbildung 15) ein Sickerwasserereignis vorhergesagt, dass experimentell nicht stattgefunden hatte.

4.3.2.1 Wirkstoff Bentazon

In der Dränage wurde während der Versuchsperiode keiner der applizierten Wrkstoffe ausgetragen.

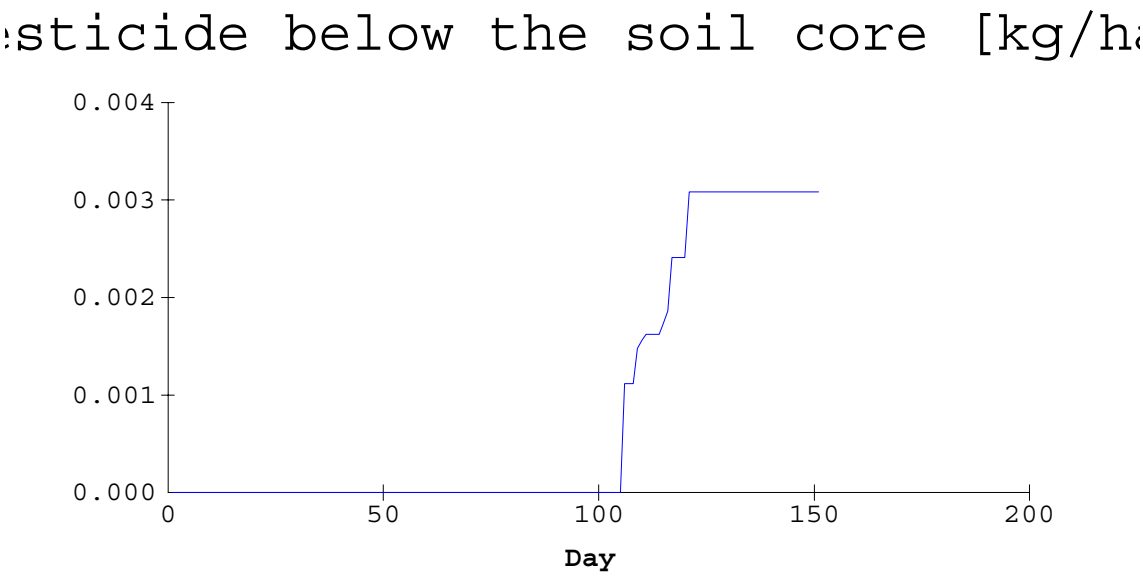


Abbildung 16: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, Bentazon, 1993)

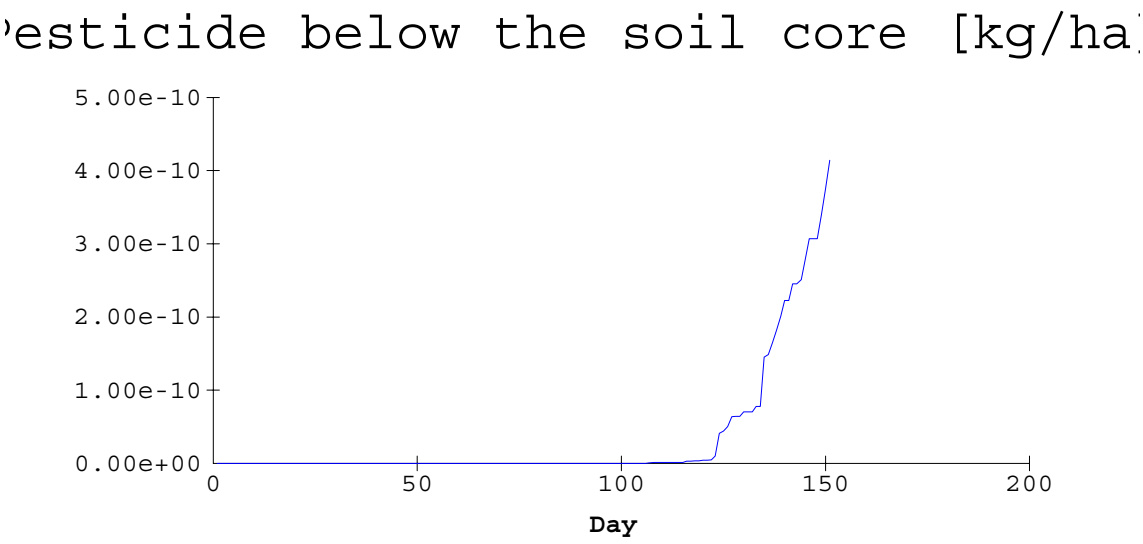


Abbildung 17: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, Bentazon, 1993)

4.3.2.2 Wirkstoff MCPA

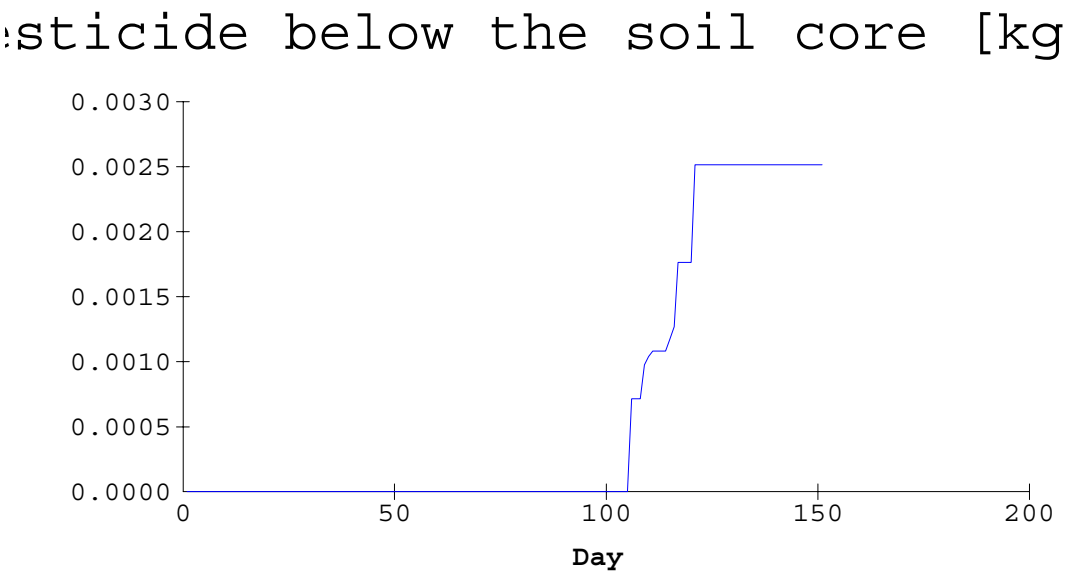


Abbildung 18: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, MCPA, 1993)

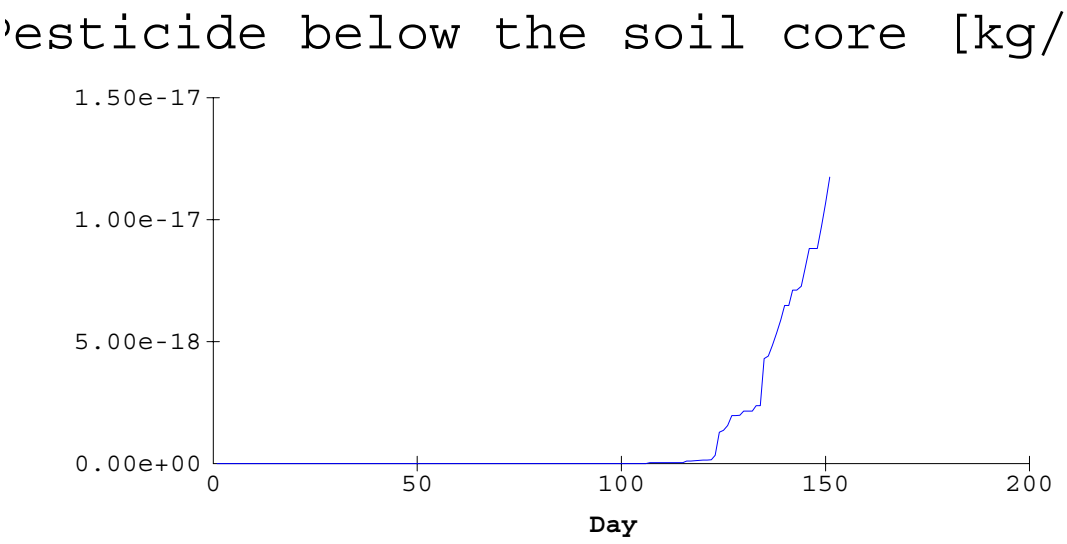


Abbildung 19: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, MCPA, 1993)

Die Ergebnisse der PELMO-Simulation (Erweiterung) können aufgrund des zusätzlichen Sickerwasserereignisses nach etwa 100 Tagen nicht mit dem Experiment übereinstimmen. In diesem Fall ist die ursprüngliche PELMO-Version näher am Experiment. Doch ist diese Übereinstimmung eher zufällig. Das entsprechende Sickerwasserereignis nach 100 Tagen wurde auch durch die ursprüngliche Version simuliert. Jedoch hat dies aufgrund des Fehlens eines schnellen Stofftransports keine Auswirkungen auf die Stoffverlagerung.

4.3.3 Versuchsperiode 1993/1994

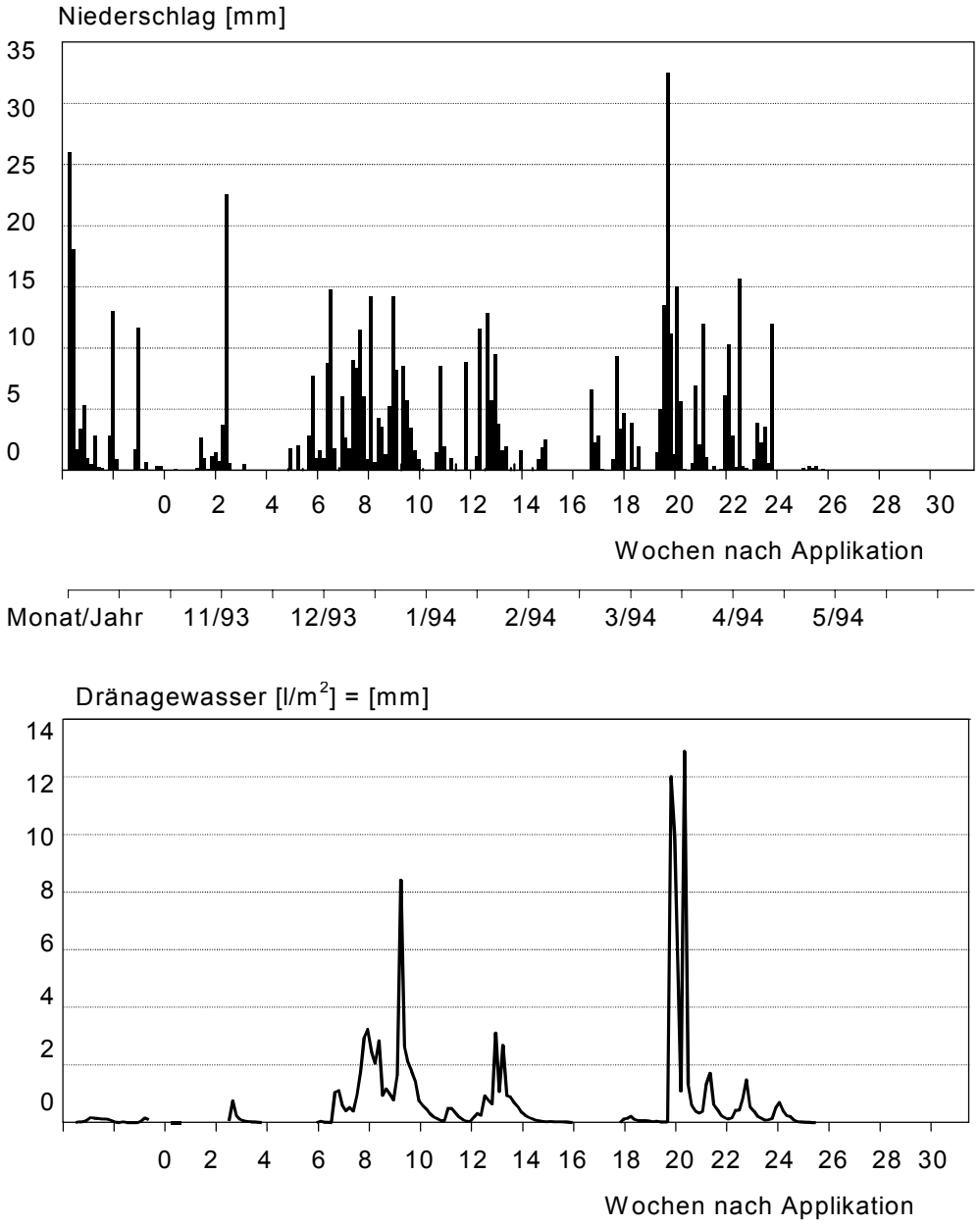


Abbildung 20: Experimentelle Ergebnisse zum Wasserhaushalt (1993/94)
aus: Kördel et al., (1996) [25]

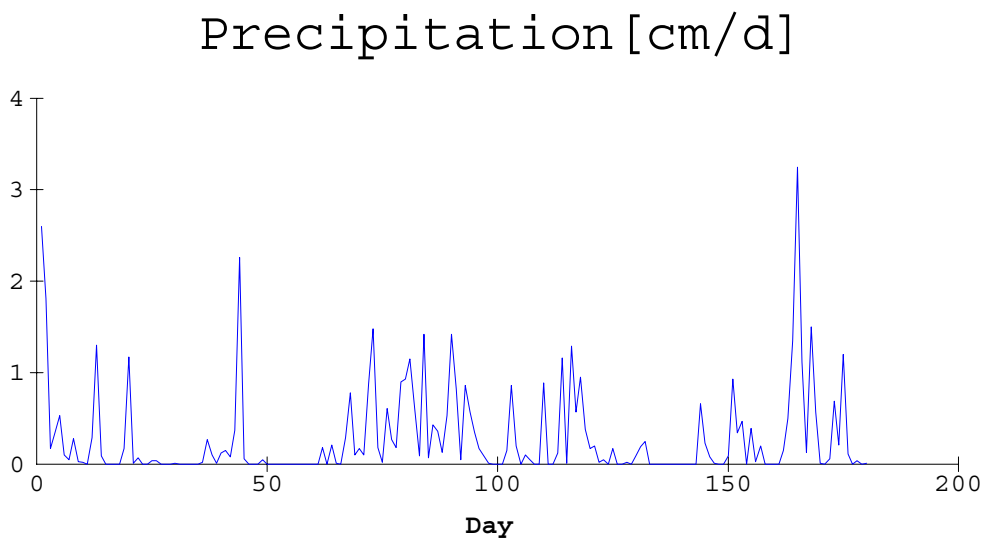


Abbildung 21: Niederschlagsdaten für die PELMO-Simulation (1993/94)

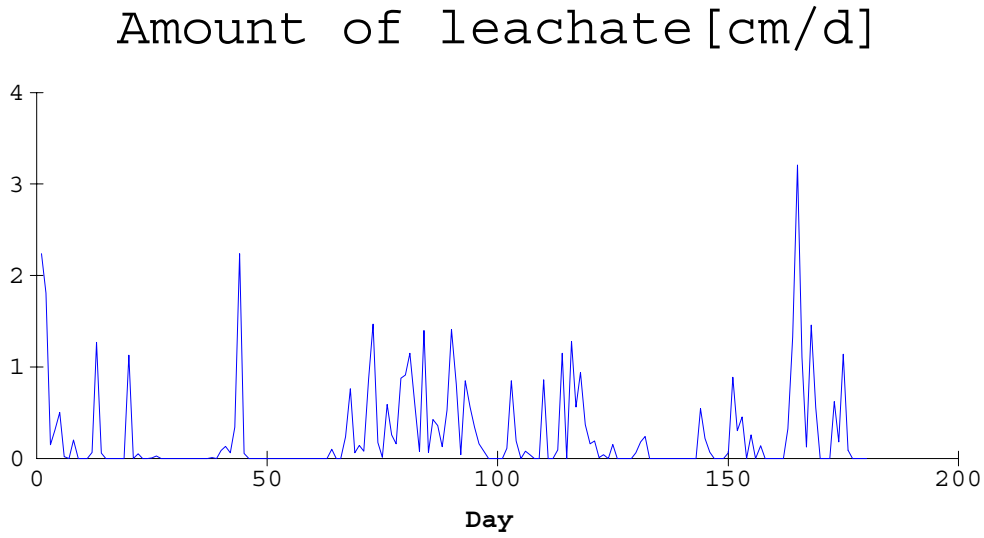


Abbildung 22: Simuliertes Sickerwasser (PELMO-Simulation, 1993/94)

Wie bereits für die vorhergehende Winterperiode stimmen die berechneten Perkolatmengen nicht mit den Dränageeinträgen überein. Die Spitzenwerte werden etwa um einen Faktor 2 zu hoch berechnet. Allerdings können Abweichungen zwischen den experimentellen und den berechneten Werten durch die nicht bestimmte Grundwasserneubildungsrate verursacht sein.

4.3.3.1 Wirkstoff Isoproturon

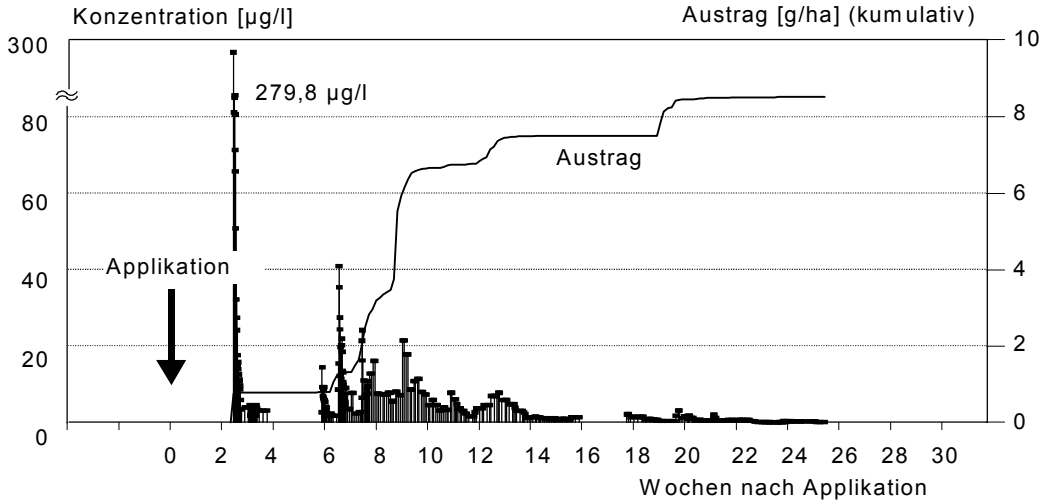


Abbildung 23: Experimenteller Wirkstoffaustrag (Isoproturon, 1993/94)
aus: Kördel et al., (1996) [25]

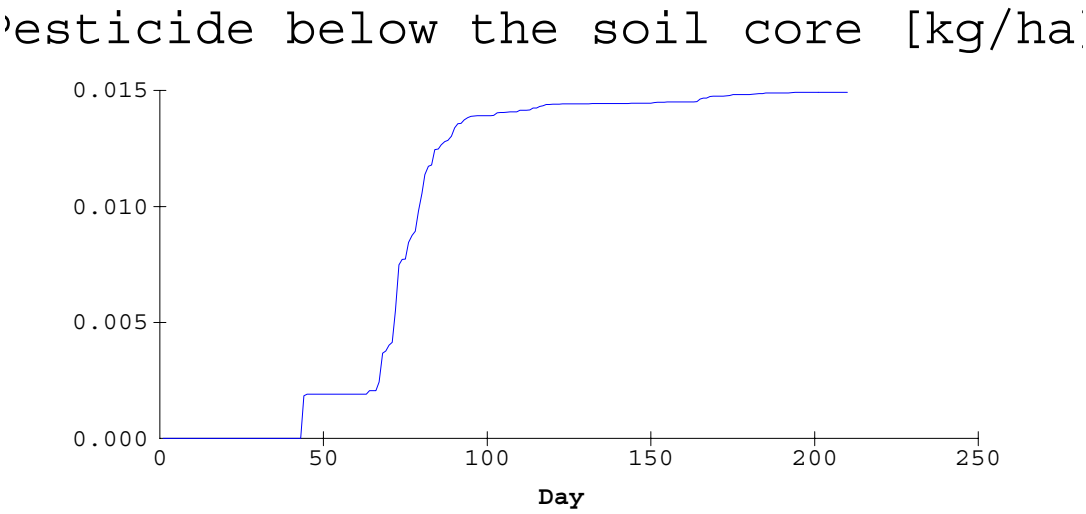


Abbildung 24: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, Isoproturon, 1993/94)

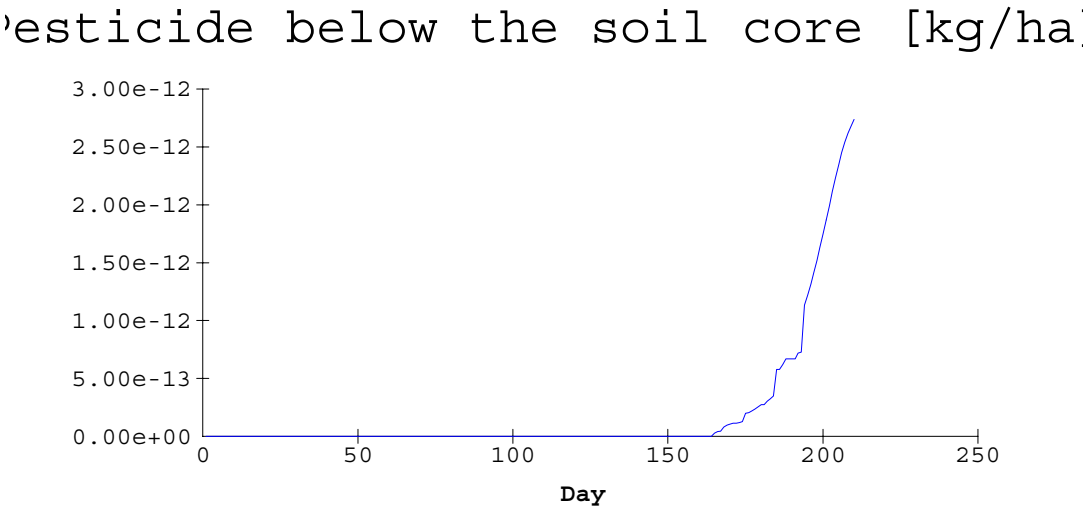


Abbildung 25: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, Isoproturon, 1993/94)

4.3.3.2 Wirkstoff Chlortoluron

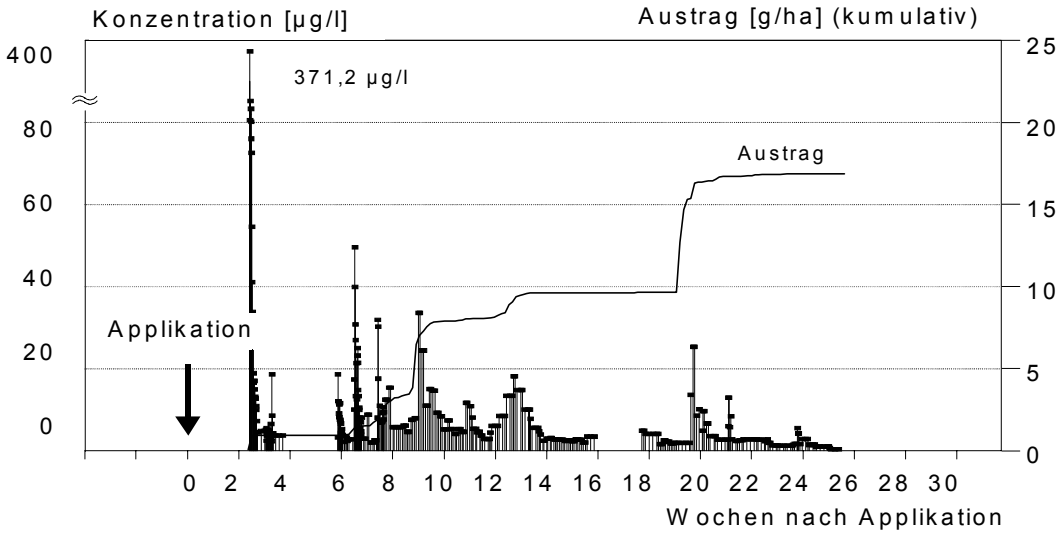


Abbildung 26: Experimenteller Wirkstoffaustrag (Chlortoluron, 1993/94)
aus: Kördel et al., (1996) [25]

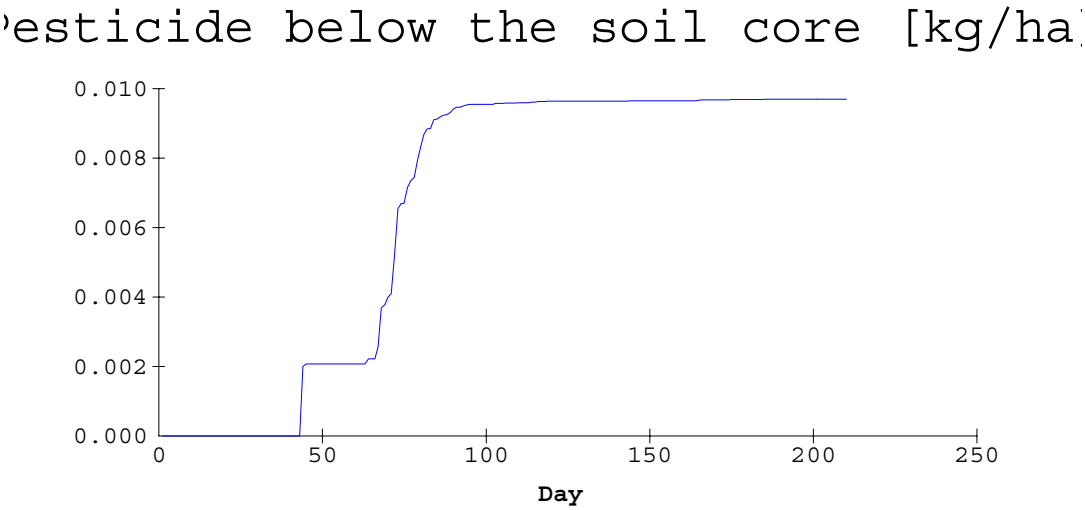


Abbildung 27: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, Chlortoluron, 1993/94)

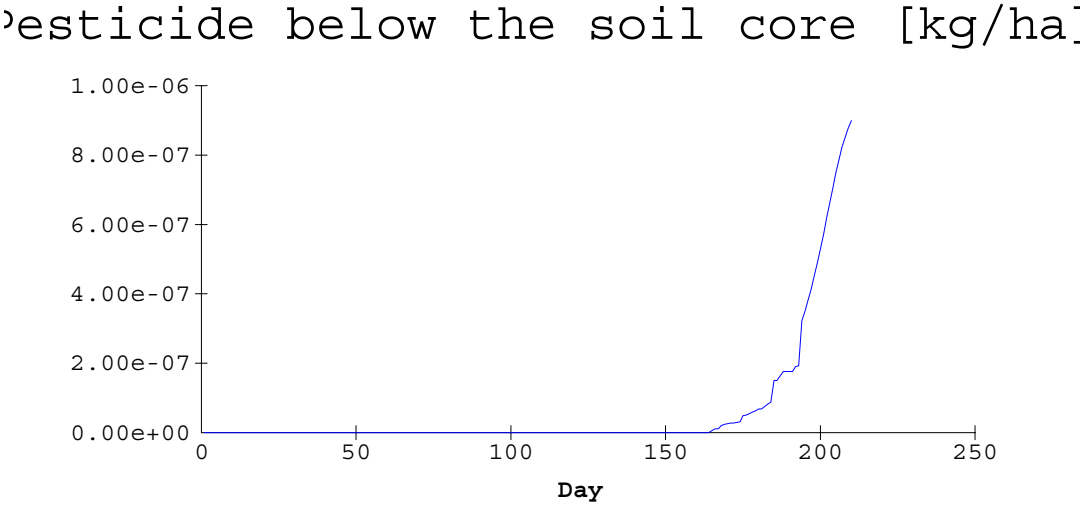


Abbildung 28: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, Chlortoluron, 1993/94)

Die errechneten Pflanzenschutzmittelmengen im Perkolat stimmen qualitativ recht gut mit den experimentellen Einträgen in das Dränagesystem überein. Allerdings werden beide Wirkstoffe etwa um einen Faktor 2 zu hoch berechnet.

Ein interessantes Ergebnis ist das Verhältnis der Einträge von Isoproturon und Chlortoluron. Es wird in Simulation und Experiment jeweils umgekehrt berechnet. Dies macht die Grenzen der Überprüfung deutlich. Die Sorptionskonstanten und Abbauraten sind keine rein stofflichen Parameter, sondern variieren in Abhängigkeit des jeweiligen Bodens. Bodenspezifische DT50- oder KOC-Werte waren jedoch nicht bekannt. Aufgrund der Zusammenstellung in der Tabelle 1 sollte Chlortoluron stärker am Boden sorbiert werden als Isoproturon. Dies wurde auch so berechnet. Im Experiment wurde jedoch das umgekehrte Verhalten beobachtet. Die Ergebnisse zeigen daher, dass es auf der Basis allgemeiner Angaben zu Sorption und Abbau nicht möglich ist, einen detaillierten Vergleich der Prozesse in Experiment und Simulation durchzuführen. Allenfalls können die Modellrechungen qualitativ auf ihre Sinnhaftigkeit überprüft werden.

Das nicht veränderte Programm PELMO 2.01 ist auch für diese Winterperiode nicht in der Lage, das Verhalten der Stoffe auf dem Versuchsfeld vorherzusagen. Erneut werden keine messbaren Stoffeinträge berechnet.

4.3.4 Versuchsperioden Frühjahr/Sommer 1994 und Herbst/Winter 1994/95

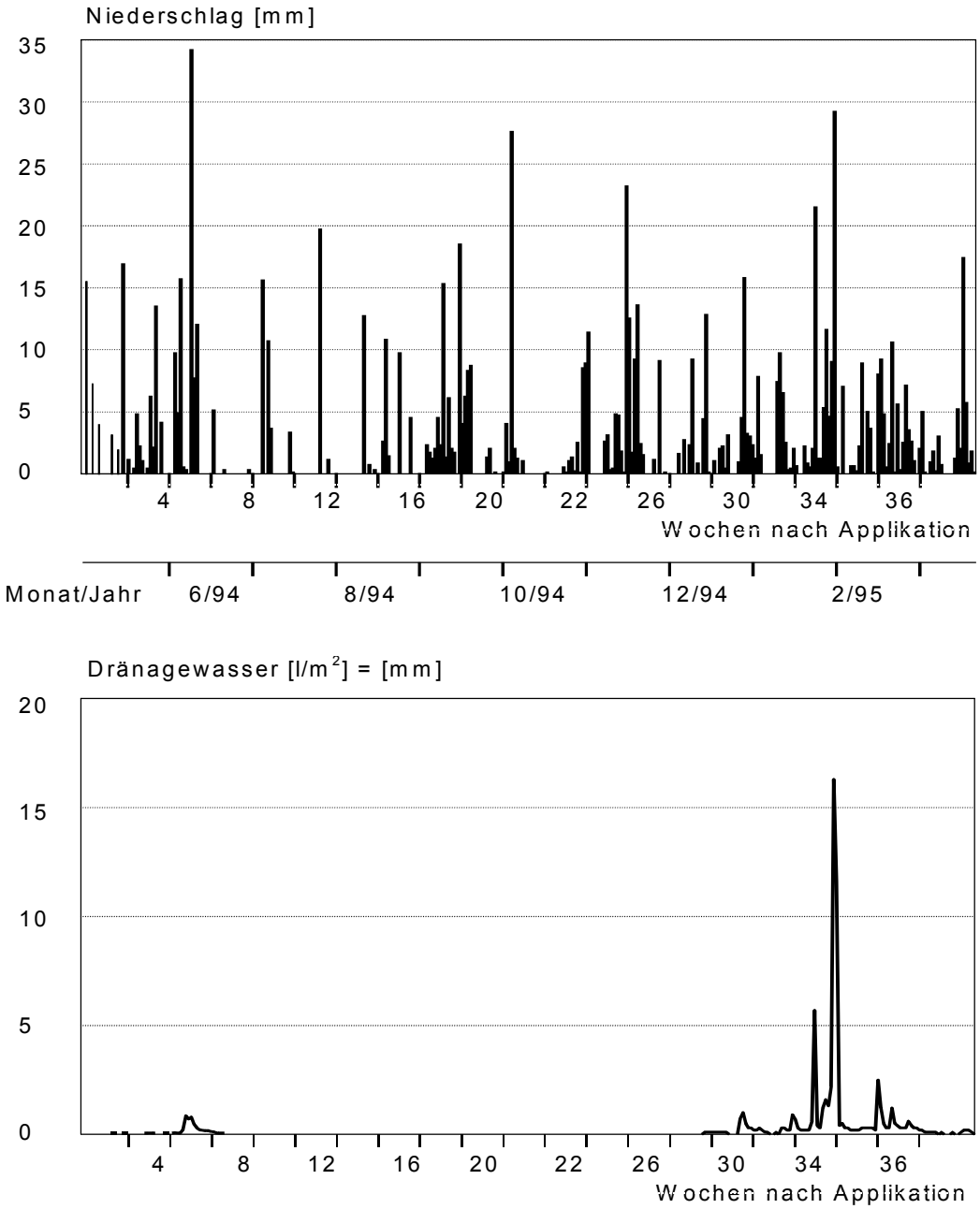


Abbildung 29: Experimentelle Ergebnisse zum Wasserhaushalt (1994/95)

aus: Kördel et al., (1996) [25]

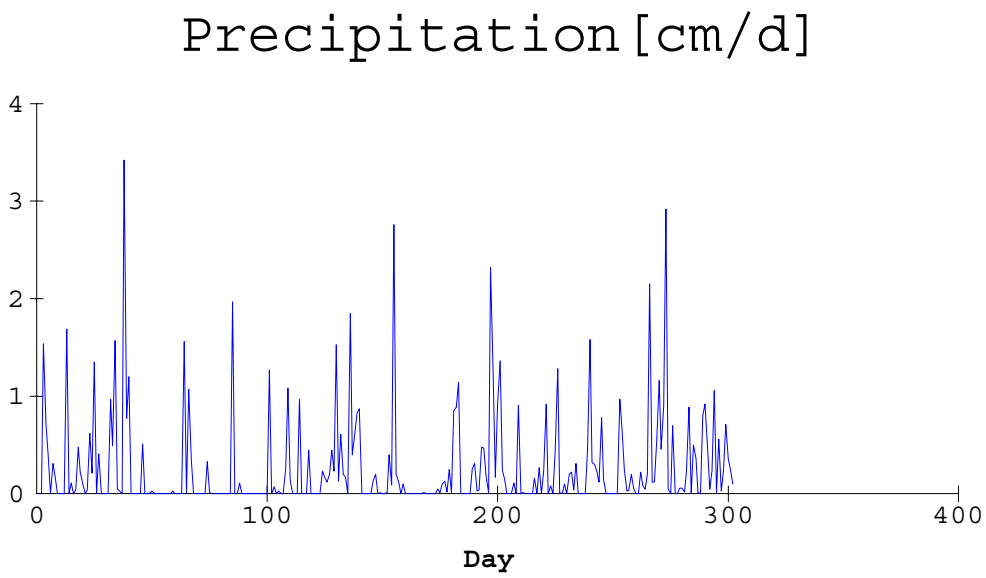


Abbildung 30: Niederschlagsdaten für die PELMO-Simulation (1994/95)

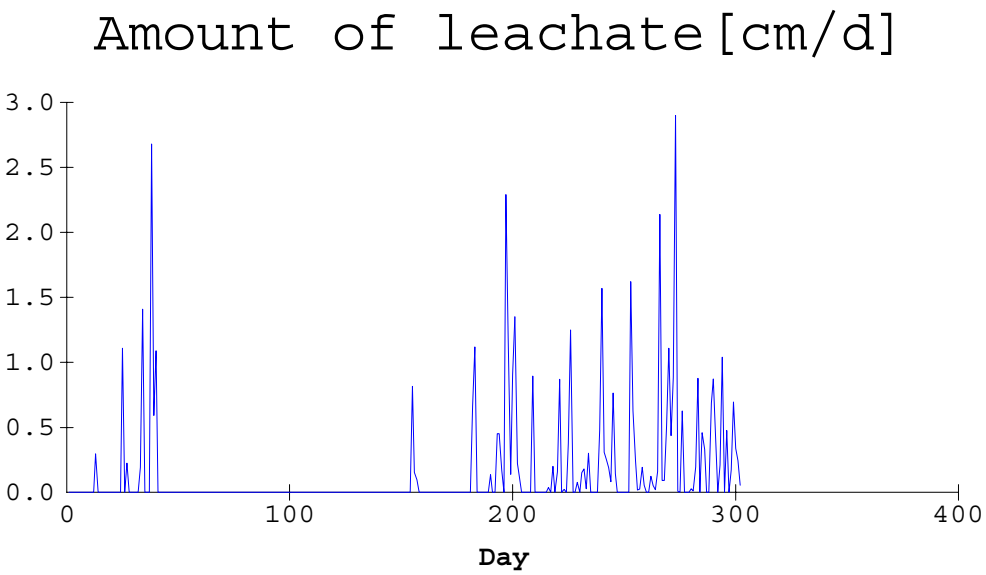


Abbildung 31: Simuliertes Sickerwasser (PELMO-Simulation, 1994/95)

Der Dränagefluss und der errechnete Perkolatfluss zeigen keine gute Übereinstimmung. Erneut werden im Sommerhalbjahr (zu Beginn der Versuchsperiode) mehrere Sickerwasserereignisse simuliert, die im Experiment nicht (oder nur mit geringen Wassermengen) beobachtet wurden. Aber auch in der Winterperiode werden mehrere Sickerwassereignisse ab September berechnet, die experimentell nicht aufgetreten sind (erste nennenswerte Dränageflüsse im Experiment ab Januar).

4.3.4.1 Wirkstoff Metolachlor

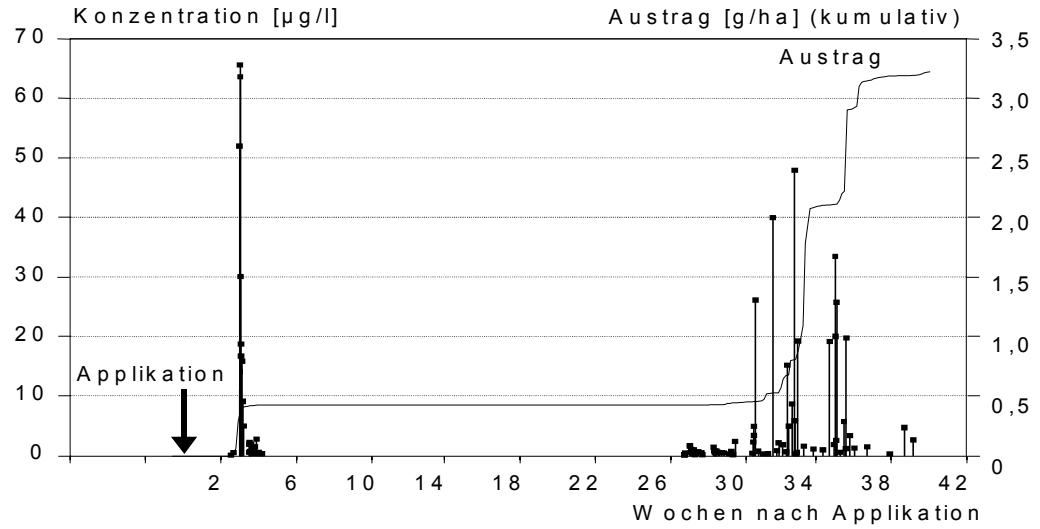


Abbildung 32: Experimenteller Wirkstoffaustrag (1994/95, Metolachlor)
aus: Kördel et al., (1996) [25]

esticide below the soil core [kg/ha

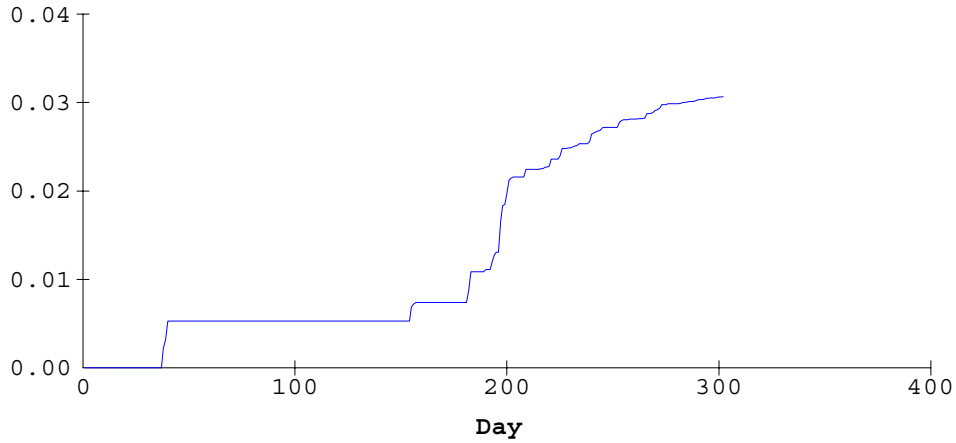


Abbildung 33: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO-Erweiterung, 1994/95, Metolachlor)

esticide below the soil core [kg/ha

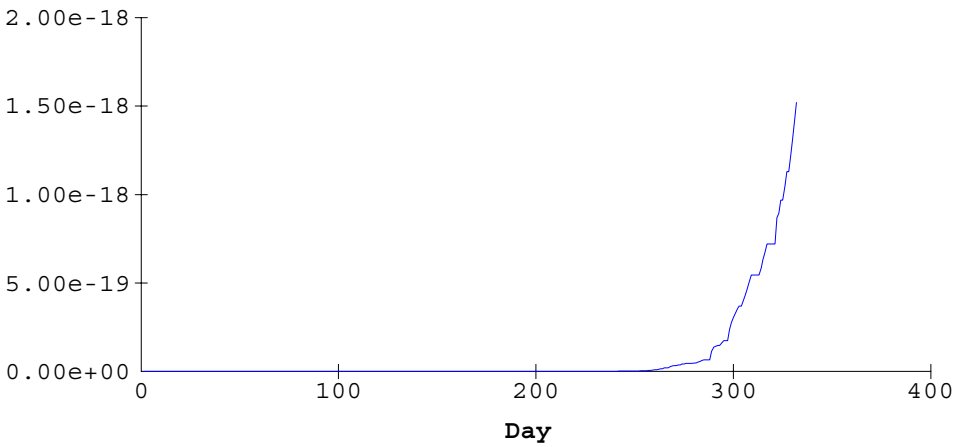


Abbildung 34: Kumulativer Wirkstoffaustrag (PELMO 2.01, 1994/95, Metolachlor)

Die bereits beschriebenen Abweichungen zwischen experimentellem Dränagefluss und berechnetem Perkolatfluss führen natürlich ebenfalls zu Abweichungen bei der Berechnung des Transports von Metolachlor. Die Einträge von Metolachlor im Sommer werden (bedingt durch das Überschätzen des Dränageflusses in dieser Jahreszeit) um den Faktor 10 zu hoch berechnet. Die Gesamteinträge von Metolachlor (bedingt durch mehrere nicht experimentell aufgetretene Perkolatflüsse ab Oktober) werden ebenfalls etwa um den Faktor 10 zu hoch simuliert.

Wie in allen vorhergehenden Beispielen werden durch das Modell PELMO 2.01 keine Stoffeinträge in das Dränagesystem berechnet.

4.3.5 Zusammenfassung der Ergebnisse

In der Tabelle 6 sind die experimentellen und berechneten Ergebnisse zu den verschiedenen Wirkstoffen und Versuchsperioden noch einmal zusammengestellt. Es zeigt sich, dass die Computerberechnungen (PELMO-Erweiterung) meist etwas zu hoch ausfallen. Dabei darf jedoch nicht vergessen werden, dass experimentell nicht der Perkolatfluss, sondern der Dränagefluss bestimmt worden ist. Der experimentelle Perkolatfluss muss in jedem Fall höher als der Dränagefluss sein. Vergleicht man die Erweiterung von PELMO mit der ursprünglichen Version, so wird deutlich, dass das experimentelle Verhalten mit den Ergänzungen erheblich besser simuliert werden kann.

Tabelle 6: Kumulierte Stoffeinträge in Dränage (exp) und Perkolat (PELMO-Simulation)

Versuchsperiode	Wirkstoff	Dränage (g/ha)	PELMO-Erweiterung (g/ha)	PELMO 2.01 (g/ha)	MACRO* (g/ha)
Winter 1992/93	Isoproturon	3,5	4,5	0	16
Winter 1992/19	Pendimethalin	0,010	0,013	0	2,2
Sommer 1993	Bentazon	0	3,0	0	28
Sommer 1993	MCPA	0	2,5	0	7,4
Winter 1993/94	Isoproturon	8,2	14,0	0	57
Winter 1993/94	Chlortoluron	17,0	9,5	0	45
Sommer 1994	Metolachlor	0,5	5	0	24
Winter 1994/95	Metolachlor	2,8	25	0	26

(* Die MACRO-Ergebnisse sind Kördel et al., 1996 *[25]* entnommen)

Der Vergleich mit den Ergebnissen des im Rahmen der EU-Zulassung eingesetzten Computerprogramms MACRO zeigt, dass MACRO generell höhere Austräge berechnet als PELMO. Die Ursache für die Abweichungen ist zum Teil allerdings darauf zurückzuführen, dass MACRO – wie auch PELMO – den gesamten Perkolatfluss simuliert hat, der in jedem Fall größer ist, als der Dränageabfluss, der im Experiment bestimmt wurde.

Aufgrund der Ergebnisse dieser Analyse wurde die PELMO-Erweiterung für die weiteren Arbeiten in dem Vorhaben eingesetzt.

5 Die Definition neuer Versickerungsszenarien in MCPELMO 2.0

5.1 Einführung

In der bisherigen Version von *MCPELMO (*Version 1.0) wurden insgesamt 13 Szenarien definiert. Sie entstanden durch Kombination einer Karte mit 9 Klimaregionen und einer Karte mit der Verbreitung von 5 wichtigen Bodenarten. Jede dieser 13 Versickerungsszenarien ist jeweils durch eine Klimaregion und einem dort vorherrschenden Boden gekennzeichnet. Eine Kurzbeschreibung dieser Szenarien findet man in diesem Bericht in der Tabelle 3, Abbildung 3 zeigt ihre geografische Verteilung.

Weitere Informationen zu *MCPELMO 1.0* sind im Abschlussbericht [13] zusammengestellt, in dem bereits auf zukünftige Erweiterungs- und Verbesserungsmöglichkeiten hingewiesen wird. So mussten die Bodenszenarien auf schmaler Datenbasis abgeschätzt werden, eine geografische Verteilung der Böden war nicht verfügbar. Im Bericht wird empfohlen, die vom geografischen Bundesamt in Hannover herausgegebene Bodenübersichtskarte im Maßstab 1:100 000 als Basis für eine Erneuerung der Bodenszenarien einzusetzen. Es handelt sich bei dieser Karte um die erste gesamtdeutsche Bodenkarte. In ihr sind etwa 90 Bodenprofile (bis in ca. 1 m Tiefe) beschrieben und karthografisch erfasst. Im Rahmen dieses Vorhabens wurden daher neue Bodenszenarien auf der Basis der Bodenübersichtskarte eingebaut. Die Szenarien orientieren sich an den Ergebnissen des Forschungsvorhabens des Umweltbundesamts 126 05 113 (Entwicklung von Kriterien und Verfahren zum Vergleich und zur Übertragbarkeit regionaler Umweltbedingungen innerhalb der EU-Mitgliedsstaaten) [26].

Als Datengrundlage für die Klimadaten wurden die Tageswerte der 30-jährigen Messreihen von 9 für die Fläche der Bundesrepublik repräsentativen Wetterstationen verwendet, die bereits im Rahmen des F + E - Vorhabens "Erweiterung von Expositionsmodellen auf der Basis von statistischen Umweltparametern" [13] für die Entwicklung des Computerprogramms *MCPELMO 1.0* benutzt worden sind.

5.2 Die Definition der Applikationsfolge und der Simulationsdauer

Vor allem für Stoffe, die aufgrund ihrer Eigenschaften (schwache Sorption) nur eine kurze Verweildauer im Boden aufweisen, ist der Zeitpunkt der Aufbringung des Reststoffs von Bedeutung. In dieser Studie werden Sickerwasserkonzentrationen für jeweils drei Anwendungszeitpunkte berechnet, um den jahreszeitlichen Einfluss zu berücksichtigen. Es werden regelmäßige Aufbringungen im Mai (Frühjahr), im Juli (Sommer) sowie im Herbst

(November) simuliert. Eine Aufbringung im Winter bleibt aufgrund der Praxisferne unberücksichtigt. Die Simulationsdauer wurde für alle Berechnungen auf 1000 Jahre festgelegt (zusätzlich eine 15jährige “warm up” Periode zu Beginn jeder Simulation, die für die Berechnung von Mittelwerten und Standardabweichungen nicht berücksichtigt wurde). Die lange Simulationsdauer soll gewährleisten, dass auch für länger im Boden verweilende Stoffe eine sinnvolle Berechnung der Standardabweichung der jährlichen Konzentrationen im Sickerwasser möglich ist.

5.3 Die Definition der Bodenszenarien

Als Datengrundlage für die Charakterisierung der Böden in der Bundesrepublik Deutschland wurde im Rahmen dieser Arbeit die Karte der Bodenregionen der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) verwendet, die mit einer unterschiedlichen Anzahl von Leitprofilen für die verschiedenen Bodenregionen auch in digitaler Form vorlag. Die Bodenregionen-Karte der Bundesrepublik Deutschland umfasst 12 Bodenregionen, deren Leitböden aus der Bodenübersichtskarte der Bundesrepublik Deutschland im Maßstab 1 : 1.000.000 von 1995 mit 72 Bodeneinheiten (BÜK 1000) abgeleitet sind. Weiterhin ist die Aufteilung der Bodenregionen aus den Grenzen der geografischen Großlandschaften der Bundesrepublik entstanden [27].

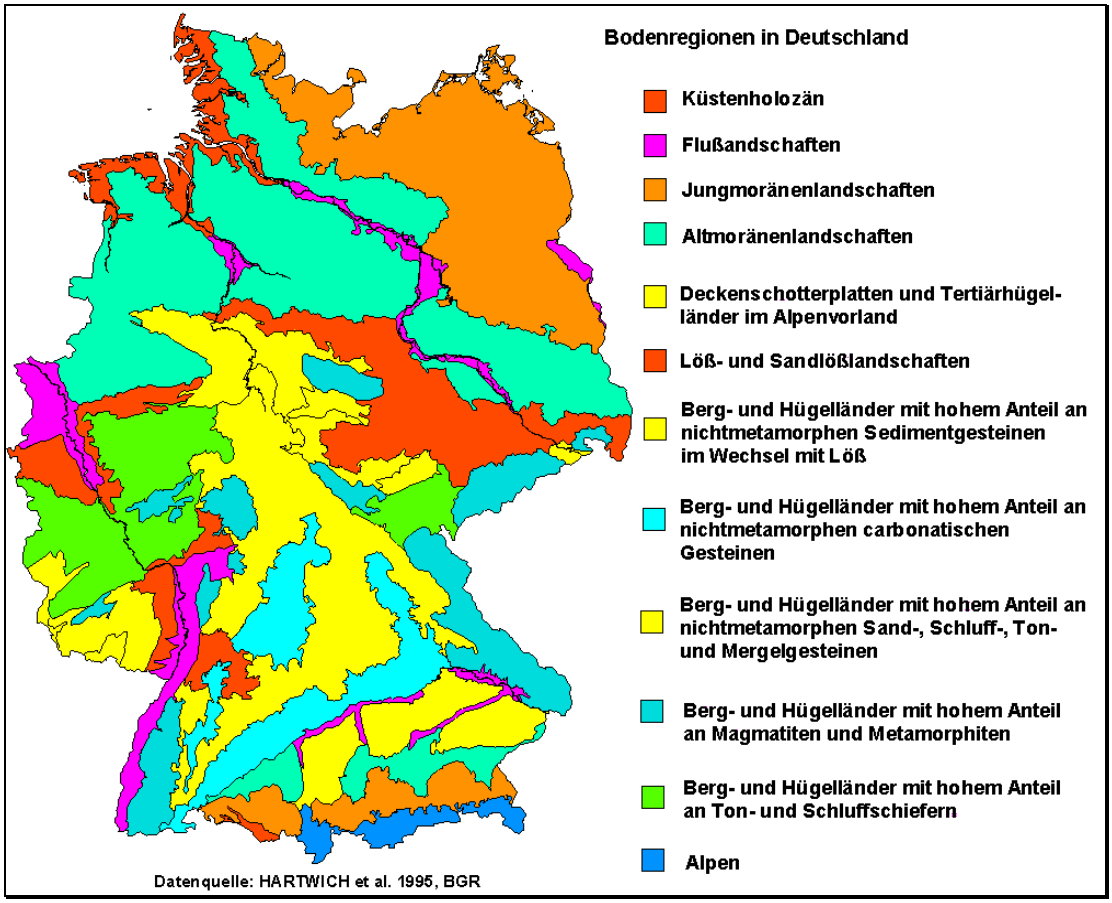


Abbildung 35: Bodenregionen in Deutschland nach der BÜK1000

Diese Datensätze der Leitprofile der Bodenregionen umfassen deren flächenmäßigen Anteil mit einer kurzen Charakterisierung, deren Bodenhorizonte, Tiefe, Bodenartenbezeichnung, Humusanteil, Kohlenstoffanteil, nutzbarer Feldkapazität und Feldkapazität. Ergänzt wurde bei den Bodenarten die prozentuale Zusammensetzung von Ton, Schluff und Lehm und deren Mittelwert.

Im folgenden werden die 12 Bodenregionen kurz erläutert. Alle Parameterwerte der Leitprofile in den einzelnen Bodenregionen sind zu jeweils einem gemittelten Bodenprofil zusammengefasst worden. Dabei wurden die Bodenprofile der Bodenregionen nach Flächenanteil und Mächtigkeit der Horizonte (Tiefe) gewichtet. Als Kriterien wurden bei der Zusammenfassung u.a. die Genese, die Horizontabfolgen und die Entwicklungstiefen der einzelnen Profile herangezogen. Das Ergebnis ist ein synthetisches Bodenprofil für jede Region, welches einen (nach Flächenanteilen und Mächtigkeit der Horizonte gewichtete) Mittelwert aller in den einzelnen Regionen vorkommenden Bodentypen darstellt. Man muss es als synthetisch bezeichnen, da die berechneten Horizontabfolgen in der ihnen zugewiesenen naturräumlichen Lage in dieser Form nicht auftreten. Weitere Informationen

zu der Verarbeitung der Bodenregionen findet man im Forschungsbericht des Umweltbundesamts 126 05 113 [26].

In den folgenden Tabellen sind für alle Bodenszenarien die wichtigsten Eigenschaften zusammengefasst. Der organische Kohlenstoffgehalt ist jeweils mit OC, die Feldkapazität mit FC und die nutzbare Feldkapazität mit nFK bezeichnet.

Bodenregion 1: Küstenholozän

Die in der Bodenregion 1 am häufigsten vorkommenden Bodentypen sind Wattböden, Kalkmarsche und Kleimarsche. Die Flächenanteile mit Moorböden sind bei allen Bodenregionen aus der Gewichtung herausgefallen, da sie keineff landwirtschaftliche Nutzfläche darstellen und durch ihren hohen Kohlenstoffgehalt das Ergebnis der Gewichtung und insbesondere anschließender Simulationen verfälschen würden.

Tabelle 7: Eigenschaften des Bodenszenarios 1

Horizont	Tiefe [cm]	Sand (%)	Schluff (%)	Ton (%)	OC (%)	Humus (%)	FK (Vol.%)	nFK (Vol.%)
A	22,58	27,47	51,50	21,03	3,05	4,37	38,26	22,60
B	14,27	32,87	52,88	14,25	0,89	1,50	31,25	19,53
C	50,32	43,13	47,81	9,07	0,30	0,80	29,37	21,38
D	31,29	56,77	27,38	15,85	1,19	1,73	31,29	16,26

Bodenregion 2: (Überregionale) Flusslandschaften

Zu denen am häufigsten vorkommenden Böden der breiten Flusstäler, welche auch Terrassen und Niederungen mit einschließen, gehören Auenboden/Gley, (Gley-) Parabraunerde und Braunerde. Weitere Bodeneinheiten der Bodenregion sind Auenregosol aus sandigen Flusssedimenten, Bänder-Parabraunerde aus Sandlöß und Tschernosem-Parabraunerde aus Löß.

Tabelle 8: Eigenschaften des Bodenszenarios 2

Horizont	Tiefe [cm]	Sand (%)	Schluff (%)	Ton (%)	OC (%)	Humus (%)	FK (Vol.%)	nFK (Vol.%)
A	17,37	23,44	59,15	17,40	2,77	4,60	41,15	26,71
B	44,56	32,50	53,21	14,29	1,88	3,23	32,78	21,62
C	19,01	50,48	34,43	15,09	1,44	2,18	30,55	18,01
D	46,95	21,31	54,15	24,54	0,32	0,44	37,26	20,11
E	16,01	53,46	34,08	12,46	0,10	0,13	28,25	18,13

Bodenregion 3: Jungmoränenlandschaften

Die Böden der Bodenregionen 3 und 4 setzen sich aus den Böden des wellig-hügeligen Flachlandes und der Hügelländer zusammen. Weitere vorkommende Bodentypen sind Fahlerde aus sandigen Deckschichten über Geschiebelehm, Braunerde-Podsol aus trockenen, nährstoffarmen Sanden, Gley-Podsol aus sandigen Flussablagerungen, Gley-Pseudogley aus lehmig-sandigen Geschiebemergel, Gley aus sandig-lehmigen Sedimenten der Urstromtäler und Niederungen.

Tabelle 9: Eigenschaften des Bodenszenarios 3

Horizont	Tiefe [cm]	Sand (%)	Schluff (%)	Ton (%)	OC (%)	Humus (%)	FK (Vol.%)	nFK (Vol.%)
A	37,21	68,85	19,61	11,54	1,31	2,29	30,75	18,47
B	40,52	64,56	21,25	14,19	0,27	0,45	27,50	14,03
C	31,60	80,58	10,55	8,87	0,05	0,05	23,88	12,59
D	42,02	59,15	27,86	12,99	0,05	0,05	26,72	15,55

Bodenregion 4: Altmoränenlandschaften

Der wesentliche Bodentyp dieser Region ist der Gley-Podsol aus sandigen Flussablagerungen besonders in Nordwest-Deutschland oft flachgründig durch Ortsgestein im Unterboden. Weitere vorkommenden Bodentypen sind podsolige Pseudogley-Braunerde aus Geschiebedecksand und -lehm, Eisenhumus-Podsol aus nährstoffarmen Sanden, Gley aus sandig-lehmigen Sedimenten dar Urstromtäler, Braunerde aus nährstoffreichen Sanden sowie die Bänder-Parabraunerde aus Sandlöß

Tabelle 10: Eigenschaften des Bodenszenarios 4

Horizont	Tiefe [cm]	Sand (%)	Schluff (%)	Ton (%)	OC (%)	Humus (%)	FK (Vol.%)	nFK (Vol.%)
A	29,93	76,10	16,53	7,37	1,75	2,90	26,54	17,64
B	43,66	72,04	18,03	9,93	0,37	0,62	25,03	15,00
C	47,12	84,15	10,41	5,45	0,05	0,05	20,14	12,53
D	32,07	66,15	21,40	12,46	0,05	0,05	25,87	14,49

Bodenregion 5: Deckenschotterplatten und Tertiärhügelländer im Alpenvorland

Der vorherrschende Bodentyp ist die Parambraunerde aus lößvermischten Tertiärablagerungen oder geringmächtigen Lößlehm. Weiterhin kommen in der Region Braunerden aus quarzitischen Sandsteinen und Konglomeraten sowie Parabraunerden aus sandig-lehmigen Deckschichten auf eiszeitlichen Schotterplatten vor.

Tabelle 11: Eigenschaften des Bodenszenarios 5

Horizont	Tiefe [cm]	Sand (%)	Schluff (%)	Ton (%)	OC (%)	Humus (%)	FK (Vol.%)	nFK (Vol.%)
A	25,00	25,86	59,49	14,65	1,91	2,94	39,45	22,73
B	14,44	19,27	60,23	20,50	0,49	0,94	35,91	23,49
C	49,03	10,42	62,29	27,30	0,05	0,05	37,34	17,42
D	23,31	30,70	50,94	18,36	0,05	0,05	32,48	18,32

Bodenregion 6: Löß- und Sandlößlandschaften

Die Leitböden dieser Bodenregion liegen vorwiegend alle in den Lößgebieten der Bundesrepublik. Die Tschernosem-Parabraunerde oder der Parabraunerde-Tschernosem aus Löß oder Lößlehm ist ein tiefgründiger, brauner bis dunkelgraubrauner Boden, der lehmig-schluffig bis schluffig ist. Weitere Bodentypen sind Tschernosem aus Löß, Bänder-Parabraunerde aus Sandlöß, Pseudogley aus Löß, Braunerden-Tschernosem aus Löß, Pseudogley-Tschernosem aus Löß.

Tabelle 12: Eigenschaften des Bodenszenarios 6

Horizont	Tiefe [cm]	Sand (%)	Schluff (%)	Ton (%)	OC (%)	Humus (%)	FK (Vol.%)	nFK (Vol.%)
A	42,47	11,56	71,90	16,54	1,21	2,16	39,20	24,35
B	52,97	9,30	69,68	21,02	0,39	0,62	36,25	20,52
C	12,17	21,10	63,26	15,63	0,05	0,05	34,80	21,43
D	46,08	18,51	64,79	16,69	0,05	0,05	35,32	22,42

Bodenregion 7: Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an nichtmetamorphen Sedimentgesteinen im Wechsel mit Löß

Neben der Fahlerde treten als weitere Hauptbodentypen Rendzina und Braunerde-Pelosol auf.

Tabelle 13: Eigenschaften des Bodenszenarios 7

Horizont	Tiefe [cm]	Sand (%)	Schluff (%)	Ton (%)	OC (%)	Humus (%)	FK (Vol.%)	nFK (Vol.%)
A	28,25	20,17	51,64	28,19	3,14	4,82	44,04	22,10
B	44,90	14,27	51,39	34,34	0,26	0,40	38,90	17,36
C	29,82	31,86	35,31	32,83	0,05	0,05	39,04	15,17

Bodenregion 8: Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an nichtmetamorphen carbonatischen Gesteinen

Auch hier tritt als dominierender Bodentyp die bereits erwähnten Fahlerde und die Rendzina auf. Daneben ist die Braunerde-Terra Fusca mit flächenmäßig hohem Anteil vertreten. Weitere Bodeneinheiten bilden Braunerde-Pelosol aus Verwitterungsprodukten von Mergel- und Tongestein, sowie Pseudogley aus Löß.

Tabelle 14: Eigenschaften des Bodenszenarios 8

Horizont	Tiefe [cm]	Sand (%)	Schluff (%)	Ton (%)	OC (%)	Humus (%)	FK (Vol.%)	nFK (Vol.%)
A	20,86	17,40	51,28	31,32	5,01	7,94	47,01	23,14
B	26,86	9,73	55,25	35,02	1,10	1,76	42,75	18,15
C	35,43	11,37	16,57	72,06	0,83	1,37	51,60	12,04
D	13,45	12,63	30,64	56,73	0,05	0,05	44,82	14,33

Bodenregion 9: Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an nichtmetamorphen Sand-, Schluff-, Ton- und Mergelgesteinen

Einen besonders hohen Flächenanteil haben der schon in der Bodenregion 7 erwähnte Braunerde-Pelosol, außerdem Braunerde und Braunerde-Podsol. Weitere Bodeneinheiten bilden Fahlerde aus Löß, Pseudogley-Braunerde aus lößvermischten Verwitterungsprodukten, Rendzina aus Verwitterungsprodukten von Kalk-, Mergel- und Dolomitgesteinen und Braunerde-Pelosol aus lößvermischten Verwitterungsmaterialien unterschiedlicher Gesteine.

Tabelle 15: Eigenschaften des Bodenszenarios 9

Horizont	Tiefe [cm]	Sand (%)	Schluff (%)	Ton (%)	OC (%)	Humus (%)	FK (Vol.%)	nFK (Vol.%)
A	20,77	40,71	34,44	24,85	3,02	4,18	40,99	21,94
B	36,64	36,08	26,61	37,31	0,49	0,73	36,58	14,53
C	43,26	54,40	24,47	21,13	0,05	0,05	31,69	15,87

Bodenregion 10: Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an Magmatiten und Metamorphiten

Vorherrschend ist eine mittelgründige Braunerde aus sauren magmatischen und metamorphen Gesteinen ist ein lehmig-sandiger bis lehmiger, auch häufig steinig-grusiger Boden, der zum Teil stark versauert ist. Eine Fahlerde aus Löß und eine Braunerde aus basischen und intermediären magmatischen Gesteinen, sowie eine aus lößvermischten Verwitterungsprodukten saurer bis intermediärer Gesteine stellen weitere Bodentypen für die Region dar.

Tabelle 16: Eigenschaften des Bodenszenarios 10

Horizont	Tiefe [cm]	Sand (%)	Schluff (%)	Ton (%)	OC (%)	Humus (%)	FK (Vol.%)	nFK (Vol.%)
A	14,00	38,11	44,25	17,65	3,96	5,90	41,03	26,13
B	48,98	49,08	32,15	18,77	0,29	0,54	31,55	16,62
C	28,17	54,90	31,82	13,28	0,05	0,05	28,03	16,54
D	43,80	28,66	41,25	30,09	0,05	0,05	27,67	13,65

Bodenregion 11: Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an Ton- und Schluffschiefern

Der in dieser Region wichtigste Bodentyp ist die Braunerde aus lößvermischten Verwitterungsprodukten von Schluff- und Tongesteinen, die fast 50 % der Fläche in der Region 11 abdeckt. Desweiteren befinden sich in der Region eine Fahlerde aus Löß und eine Parabraunerde aus Lößlehm über unterschiedlichen Gesteinen.

Tabelle 17: Eigenschaften des Bodenszenarios 11

Horizont	Tiefe [cm]	Sand (%)	Schluff (%)	Ton (%)	OC (%)	Humus (%)	FK (Vol.%)	nFK (Vol.%)
A	12,77	35,84	47,63	16,53	3,26	4,73	40,70	25,10
B	6,71	50,93	36,04	13,02	1,50	2,67	34,15	21,66
C	44,96	29,61	44,19	26,20	0,25	0,68	36,72	15,71
D	68,43	36,80	35,77	27,43	0,05	0,05	30,03	14,55

Bodenregion 12: Alpen

In der Alpenregion hat eine Pseudogley-Pararendzina aus Verwitterungsprodukten von Kalk- und Dolomitgesteinen den flächenmäßig größten Anteil. Rohböden (Syrosem) aus Kalk- und Dolomitgesteinen und Auenböden aus lehmig-tonigen Flusssedimenten bilden in der Alpenregion weitere, in der Auswertung ebenfals berücksichtigte Bodeneinheiten.

Tabelle 18: Eigenschaften des Bodenszenarios 12

Horizont	Tiefe [cm]	Sand (%)	Schluff (%)	Ton (%)	OC (%)	Humus (%)	FK (Vol.%)	nFK (Vol.%)
A	18,40	38,88	31,26	29,86	3,45	6,22	43,49	20,75
B	18,34	32,67	40,41	26,92	1,22	2,19	37,34	17,61
C	21,05	24,68	30,40	44,91	0,05	0,05	45,01	13,20
D	34,97	31,96	34,49	33,55	0,37	0,53	36,82	14,82
E	1,07	15,50	33,00	51,50	0,60	1,00	47,00	12,00

Mangels spezifischen Datenmaterials wurde für alle Bodenszenrien der DOC-Gehalt (Dissolved Organic Carbon), mit dem der Transport von Substanzen gebunden an Huminstoffen modelliert wird, auf 50 mg/L gesetzt.

Wie bereits in Kapitel 4.1 (Seite 34) erläutert, wurde ein neuer Bodenparameter in PELMO eingeführt, mit dem der schneller Transport im Boden gesteuert wird, die effektive gesättigte Wasserleitfähigkeit. Sie wurde nach folgender Gleichung aus den Bodendaten abgeschätzt:

$Log(K_s) = 2.81 + (2.6 * Log(\Theta_s - \Theta_{330})$ (30)

K_s: effektive gesättigte Wasserleitfähigkeit (cm/d)

Θ_{330}: Wassergehalt des Bodens bei einer Tension von 330 hPa (m^3/m^3)

Θ_s: Wassergehalt des Bodens bei Wassersättigung (m^3/m^3)

Bei dem Eingabeparameter “effektive gesättigte Wasserleitfähigkeit” wird berücksichtigt, dass das Niederschlagsereignis normalerweise nicht gleichmäßig über die 24 Stunden eines Tages verteilt ist. In PELMO werden aber alle Prozesse aufgrund der täglichen Auflösung des Programms gemittelt. In der Realität kann es trotz einer nominal höheren Wasserleitfähigkeit als der mittleren Niederschlagsrate daher zu einer schnellen Versickerung über Makroporen kommen, wenn kurzfristig die aktuelle Niederschlagsrate höher ist als die gesättigte Wasserleitfähigkeit. Zur Berücksichtigung dieses Problems wurde die effektive gesättigte Wasserleitfähigkeit auf ein Prozent der gesättigten Wasserleitfähigkeit berechnet nach Scheinost [28] gesetzt.
Die für die Simulation eingesetzten Wasserleitfähigkeiten sind in der Tabelle 19 für alle Bodenszenarien zusammengestellt.

Tabelle 19: effektive gesättigte Wasserleitfähigkeiten der Bodenszenarien

Nr.	Name	eff. ges. Wasser-leitfähigkeit (cm/d)
1	Küstenholozän	1,33
2	Flusslandschaften	1,19
3	Jungmoränenlandschaften	3,25
4	Altmoränenlandschaften	4,48
5	Deckenschotterplatten und Tertiärhügelländer im Alpenvorland	1,79
6	Löß- und Sandlößlandschaften	1,36
7	Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an nichtmetamorphen Sedimentgesteinen im Wechsel mit Löß	0,29
8	Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an nichtmetamorphen carbonatischen Gesteinen	$5,1\ 10^{-06}$
9	Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an nichtmetamorphen Sand-, Schluff-, Ton- und Mergelgesteinen	0,50
10	Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an Magmatiten und Metamorphiten	0,25
11	Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an Ton- und Schluffschiefern	1,09
12	Alpen	$1,0\ 10^{-05}$

5.4 Die Klimastationen

Als Datengrundlage wurden die Tageswerte der 30-jährigen Meßreihen von 9 für die Fläche der Bundesrepublik repräsentativen Wetterstationen verwendet, die bereits im Rahmen des F + E - Vorhabens "Erweiterung von Expositionsmodellen auf der Basis von statistischen Umweltparametern" [13] für die Entwicklung des Computerprogramms *MCPELMO 1.0* benutzt worden sind. Die Meßreihen beginnen jeweils am 1. Januar 1961 und enden am 31. Dezember 1990. Eine Ausnahmen bilden die Daten der Klimastation Bad Marienberg, welche erst ab dem 1. Dezember 1962 aufgezeichnet wurden.

Tabelle 20: Klimaregionen Deutschlands mit mit repräsentativen Klimastationen

Nr.	Klimaregion	Repräsentativer Standort
1	Nordseeküste / Schleswig-Holstein	Schleswig
2	Ostseeküste von Mecklenburg-Vorpommern	Teterow
3	Norddeutsches Flachland: Westlicher Teil / Münsterland / Nördlicher Niederrhein	Hamburg
4	Norddeutsches Flachland: Südöstlicher Teil / Brandenburg / Altmark / Fläming / Lausitz	Berlin
5	Klima im Regenschatten der Mittelgebirge: Gebiet Magdeburg / Halle / Erfurt	Magdeburg
6	Klima im Rheintal: Südlicher Niederrhein / Rheinhessen / Wetterau / Oberrhein / Kraichgau	Frankfurt/Main
7	Klima der nördlichen Mittelgebirge: Rheinisches Schiefergebirge / Harz / Thüringer Wald / Erzgebirge / Vogelsberg / Spessart / Rhön	Bad Marienberg
8	Klima der südlichen Mittelgebirge: Weiteres Alpenvorland / Odenwald / Franken / Fränkische und Schwäbische Alp	Nürnberg
9	Alpen und unmittelbar angrenzendes Alpenvorland / Schwarzwald / Bayerischer Wald / Oberpfälzer Wald / Fichtelgebirge	Oberstdorf

Die Lage der Klimastationen wurde so ausgewählt, dass jede Station eine Klimaregion der Bundesrepublik Deutschland repräsentiert. Die Grundlage der Klimaregionen bildet die Topographie und die daraus resultierenden Naturgroßräume der Bundesrepublik. Dabei wird unterschieden zwischen Küstenregionen, Flachland, Senkungsgebiete, Mittelgebirge und Alpenraum.

Tabelle 21: jährliche Niederschläge [mm] für die neun repräsentativen Standorte

Nr.	Repräsentativer Standort	mittlerer Niederschlag	Standard-abweichung	minimaler Niederschlag	maximaler Niederschlag
1	Schleswig	926,2	145,5	591,6	1189,3
2	Teterow	544,0	88,5	386,0	732,2
3	Hamburg	770,3	113,1	540,2	998,4
4	Berlin	583,8	102,5	384,1	788,0
5	Magdeburg	494,0	110,1	302,9	694,8
6	Frankfurt/Main	657,8	152,5	367,6	1053,4
7	Bad Marienberg	1168,7	244,5	752,2	1636,0
8	Nürnberg	644,2	117,9	400,1	908,6
9	Oberstdorf	1908,4	515,7	1438,8	2460,3

Die Monate Mai, Juli und November, in denen bei den Simulationen eine Aufbringung des Reststoffs erfolgt, sind für die berechneten Sickerwasserkonzentration besonders wichtig. Die monatlichen Niederschläge für diese drei Monate sind deshalb in den folgenden drei Tabellen gesondert zusammengestellt.

Tabelle 22: Mai-Niederschläge [mm] für die neun repräsentativen Standorte

Nr,	Repräsentativer Standort	mittlerer Niederschlag	Standard-abweichung	minimaler Niederschlag	maximaler Niederschlag
1	Schleswig	92,1	44	14,6	185,9
2	Teterow	66,3	37,1	12,6	141,8
3	Hamburg	81,9	39,8	5,1	169,2
4	Berlin	52,3	29,1	6,7	120,7
5	Magdeburg	48,1	28,2	7,6	119,9
6	Frankfurt/Main	63	33,7	14	143,7
7	Bad Marienberg	96,2	56,8	25,6	247,7
8	Nürnberg	68,6	34,9	1,5	142,8
9	Oberstdorf	215	71,2	39,9	321,7

Tabelle 23: Juli-Niederschläge [mm] für die neun repräsentativen Standorte

Nr,	Repräsentativer Standort	mittlerer Niederschlag	Standard-abweichung	minimaler Niederschlag	maximaler Niederschlag
1	Schleswig	61,4	33,9	4,6	130,5
2	Teterow	48,9	26,7	9,7	127
3	Hamburg	57,3	28,1	7,7	121,5
4	Berlin	56	30,4	3,8	123,5
5	Magdeburg	46,6	22,9	3,9	112,8
6	Frankfurt/Main	61,3	33,3	16,3	157,7
7	Bad Marienberg	83,6	43,4	26	207,4
8	Nürnberg	64,3	33,2	12	150,8
9	Oberstdorf	151,9	54,4	71,4	280,3

Tabelle 24: November-Niederschläge [mm] für die neun repräsentativen Standorte

Nr,	Repräsentativer Standort	mittlerer Niederschlag	Standard-abweichung	minimaler Niederschlag	maximaler Niederschlag
1	Schleswig	104,9	52,8	18,7	277,2
2	Teterow	45,2	17,6	16	94,9
3	Hamburg	71,1	32,1	18,7	136,5
4	Berlin	49,3	19	10,6	88,9
5	Magdeburg	38,2	17,3	8,7	83,4
6	Frankfurt/Main	59,4	29	6,6	134,6
7	Bad Marienberg	114,8	44,3	29,6	243
8	Nürnberg	44,2	16,1	6,1	75,2
9	Oberstdorf	133,6	69,3	17,2	290,6

5.5 Die Definition der Versickerungsregionen

Auf der Grundlage der bereits vorgestellten Karte der Bodenregionen Deutschlands und den daraus entwickelten, synthetischen Bodenprofilen sind neue Versickerungsszenarien unter Verwendung der neun Klimastationen (siehe Tabelle 20) definiert worden. Diese Stationen in Verbindung mit der Karte der Bodenregionen (siehe Tabelle 25) führt zu der folgenden Karte der 22 Boden-Klimaregionen in Deutschland, die gleichzeitig eine Karte der Versickerungsregionen ist.

Tabelle 25: Definition der Sickerwasserszenarien von *MCPELMO 2.0*

Nr.	Versickerungsregion	Bodenregion	Klimastandort
1	Küstenholozän	1	Hamburg
2	Flusslandschaften (Nördlicher Teil)	2	Hamburg
3	Flusslandschaften (Östlicher Teil)	2	Magdeburg
4	Flusslandschaften (Westlicher Teil)	2	Frankfurt/Main
5	Flusslandschaften (Südlicher Teil)	2	Nürnberg
6	Jungmoränenlandschaften (Nördlicher Teil)	3	Schleswig
7	Jungmoränenlandschaften (Nordöstlicher Teil)	3	Teterow
8	Jungmoränenlandschaften (Südöstlicher Teil)	3	Berlin
9	Jungmoränenlandschaften (Südlicher Teil)	3	Nürnberg
10	Altmoränenlandschaften (Nördlicher Teil)	4	Hamburg
11	Altmoränenlandschaften (Östlicher Teil)	4	Berlin
12	Altmoränenlandschaften (Südlicher Teil)	4	Nürnberg
13	Deckenschotterplatten und Tertiärhügelländer im Alpenvorland	5	Nürnberg
14	Löß- und Sandlößlandschaften (Nördlicher Teil)	6	Magdeburg
15	Löß- und Sandlößlandschaften (Südlicher Teil)	6	Frankfurt/Main
16	Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an nichtmetamorphen Sedimentgesteinen im Wechsel mit Löß	7	Bad Marienberg
17	Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an nichtmetamorphen carbonatischen Gesteinen	8	Nürnberg
18	Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an nichtmetamorphen Sand-, Schluff-, Ton- und Mergelgesteinen (Nördlicher Teil)	9	Bad Marienberg
19	Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an nichtmetamorphen Sand-, Schluff-, Ton- und Mergelgesteinen (Südlicher Teil)	9	Nürnberg
20	Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an Magmatiten und Metamorphiten	10	Bad Marienberg
21	Berg- und Hügelländer mit hohem Anteil an Ton- und Schluffschiefern	11	Bad Marienberg
22	Alpen	12	Oberstdorf

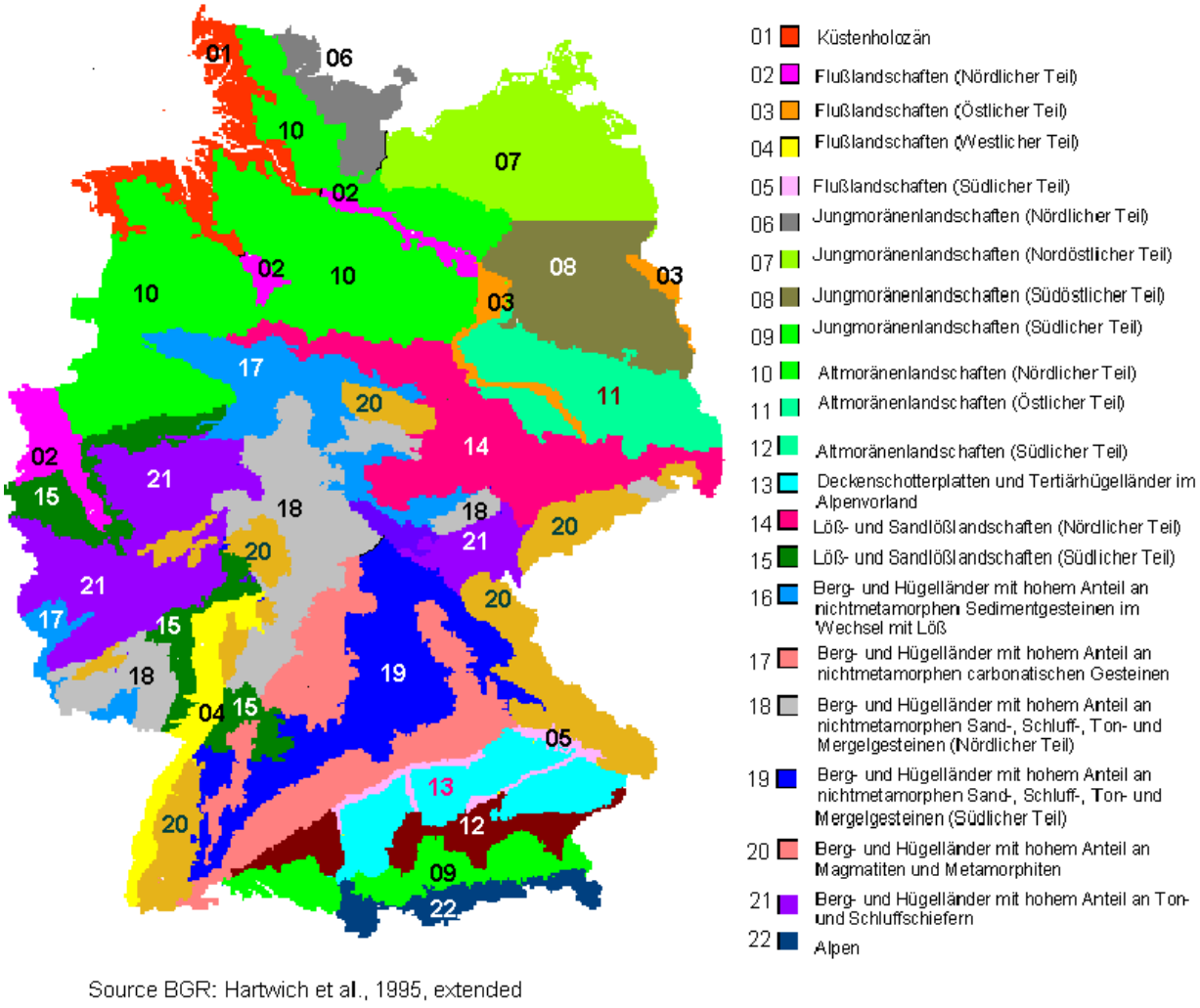


Abbildung 36: Karte der Boden-Klima-Regionen der Bundesrepublik Deutschland (*MCPELMO 2.0)*

Wie im Kapitel 4.1 beschrieben, ist das Verhältnis von chromatographischem zu präferentiellem Transport im Boden eine Funktion der täglichen Niederschlagsmenge (siehe die Tabelle 20 und folgende) und der effektiven gesättigten Wasserleitfähigkeit des jeweiligen Szenarios (Tabelle 19). In der Übersicht in Tabelle 26 ist für jedes Sickerwasserszenario basierend auf den dreißigjährlgen Klimaaufzeichnungen angegeben, wie hoch der Anteil des schnellen Flusses im Vergleich zum chromatographischem Fluss ist. Außerdem ist die Anzahl der Regenereignisse, die zu präferentiellen Fluss führen, aufgeführt.

Gruppiert man die Szenarien hinsichtlich der Bedeutung des schnellen Stofftransports, so findet man bei den Szenarien 6 bis 12 den geringsten Anteil an präferentiellem Fluss (Anteil des präferentieller Flusses unter 2 %). Eine zweite Gruppe von Szenarien weist einen Anteil

des präferentiellen Flusses von bis etwa 10 % auf (1 bis 5, 14 bis 15). Die Szenarien 16 bis 22 sind ausgesprochene „Makroporenszenarien“ mit Anteilen am schnellen Stofftransport oberhalb von 20 %. In dieser Gruppe ragen die Szenarien 17 und 22 heraus, weil mit ihnen aufgrund der extrem geringen effektiven Wasserleitfähigkeit des Bodens ausschließlich präferentieller Stofftransport simuliert wird.

Die Tabelle basiert auf eine Analyse der täglichen Niederschlagsraten und gibt daher keine Auskunft über die Frage, bis in welche Bodentiefe das Wasser den Stoff transportiert. Ist der Boden in der Simulation bis zur Feldkapazität gefüllt, wird das Wasser (und damit auch die gelösten Substanzanteile) in tiefere Horizonte transportiert. Ist der Boden dagegen relativ trocken, so ist der Transport eventuell nach wenigen Zentimetern beendet.

Tabelle 26: Bedeutung des präferentiellen Flusses in den Sickerwasserszenarien

Nr.	mittlerer Niederschlag (mm/Jahr)	mittlere Anzahl von Regentagen (1/Jahr)	pot. Regenereignisse mit Makro-porenfluss (%)	Anteil des chromatographischen Flusses (%)	Anteil des Makroporen-flusses (%)
1	770,3	201,7	5,0	91,5	8,5
2	770,3	201,7	6,6	89,4	10,6
3	493,9	174,6	3,9	90,2	9,8
4	657,4	168,2	7,1	86,9	13,1
5	644,0	174,9	6,5	88,5	11,5
6	926,2	211,6	0,5	98,6	1,4
7	544,0	177,7	0,3	98,8	1,2
8	583,7	176,6	0,4	98,1	1,9
9	644,0	174,9	0,4	99,2	0,8
10	770,3	201,7	0,1	99,6	0,4
11	583,7	176,6	0,1	99,0	1,0
12	644,0	174,9	0,1	99,7	0,3
13	644,0	174,9	2,4	95,3	4,7
14	493,9	174,6	2,9	92,3	7,7
15	657,4	168,2	5,2	89,6	10,4
16	1173,5	212,9	51,9	36,4	63,6
17	644,0	174,9	100,0	0,0	100,0
18	1173,5	212,9	36,6	53,0	47,0
19	644,0	174,9	23,5	64,0	36,0
20	1173,5	212,9	54,9	32,5	67,5
21	1173,5	212,9	15,5	79,0	21,0
22	1830,9	198,4	100,0	0,0	100,0

5.6 Die Flächenrepräsentanz der verschiedenen Sickerwasserszenarien

Die 12 Bodenregionen der Bodenübersichtiskarte weisen völlig unterschiedliche Flächenrepräsentanzen auf. Da die Zuordnung der Sickerwasserszenarien maßgeblich auf den Bodenregionen basieren, sind die Flächen, die sie repräsentieren, ebenfalls unterschiedlich groß. In der Tabelle 27 sind in der 2. Spalte die prozentualen Flächenanteile der verschiedenen Sickerwasserszenarien zusammengestellt. Die Prozentangaben in der dritten Spalte dieser Tabelle beziehen sich auf den landwirtschaftlich genutzten Flächenanteil in der Bundesrepublik Deutschland. Die Werte basieren auf einer Überlagerung der Bodenübersichtskarte mit Daten zur Bodenbedeckung des statistischen Bundesamtes [29, 30]. Die Aufstellung verdeutlicht, dass das Sickerwasserszenario 10 (Altmoränenlandschaften, nördlicher Teil) repräsentativ für etwa 15 % der Fläche der Bundesrepublik ist. Da diese Region stark landwirtschaftlich geprägt ist, erhöht sich die Flächenrepräsentanz auf 20 %, wenn lediglich die landwirtschaftliche Fläche der Bundesrepublik für die Analyse herangezogen wird. Umgekehrt ist dieser Einfluss dagegen bei dem Szenario 22 (Alpen). Die geringe Repräsentanz von 1.25 % (bezogen auf die Gesamtfläche) veringert sich auf 0.39 %, wenn nur die Flächen mit landwirtschaftlicher Nutzung in Deutschland berücksichtigt werden. Dies ist nicht verwunderlich, wenn man bedenkt, dass der Waldanteil in dieser Region relativ hoch ist. Da die Angaben in der dritten Spalte der Tabelle 27 auf die gesamte landwirtschaftliche Nutzung (neben Ackerbau auch Wiesen, Weiden, Obst- und Weinbau) bezogen sind, muss die Repräsentanz von Szenario 22 weiter abnehmen, wenn nur die rein ackerbauliche Nutzung berücksichtigt wird. Die Analyse in der vierten Spalte weist diesem Szenario bei einer rein ackerbaulichen Nutzung sogar gar keine Bedeutung mehr zu.

Mit dem Programm *MCPELMO 2.0* können weitere Analysen spezieller landwirtschaftlicher Nutzungsformen durchgeführt werden (siehe Anhang 3, ab Seite 26)

Tabelle 27: Flächenrepräsentanz der Sickerwasserszenarien

Nr	bezogen auf die Gesamtfläche (%)	bezogen auf eine allgemein landwirtschaftliche Nutzung (%)	bezogen auf eine rein ackerbauliche Nutzung (%)
1	1,67	2,19	0,88
2	1,93	2,14	2,35
3	0,89	1,1	1,28
4	1,78	1,53	1,52
5	0,7	0,83	0,76
6	1,61	2,15	2,51
7	6,11	7,29	9,16
8	4,88	3,75	4,38
9	2,58	2,64	0,35
10	16,56	19,85	19,38
11	4,31	3,57	4,40
12	2,16	2,27	1,64
13	3,75	4,6	4,30
14	6,69	8,87	12,29
15	3,72	4,12	4,70
16	4,57	4,84	6,14
17	6,06	5,99	6,25
18	6,98	5,25	5,58
19	6,66	5,87	4,78
20	6,23	4,79	3,19
21	8,92	5,97	4,15
22	1,25	0,39	0,00
	100,00	100,00	100,00

6 Die Durchführung von Simulationsrechnungen auf der Stufe 2 mit dem erweiterten Computermodell

6.1 Substanzabhängige Eingabedaten

MCPELMO 2.0 ist in der Lage, innerhalb von Sekundenbruchteilen Abschätzungen der Versickerungsneigung unter Berücksichtigung von Klimaschwankungen durchzuführen. Das Programm greift dazu auf die eine Datenbank zurück, in der die Ergebnisse einer großen Anzahl ausführlicher PELMO-Simulationen gespeichert ist. Diese Methodik ist mit gewissen Fehlern verbunden, weil bei der Berechnung die mittleren Sickerwasserkonzentrationen und deren Schwankungsbreite mit Hilfe der aktuellen Substanzdaten interpoliert werden müssen. Zur Einschätzung des damit verbundenen Fehlers wurden für eine Reihe von Stoffen ausführliche Monte-Carlo Simulationen mit dem erweiterten Computermodell PELMO durchgeführt. Die Ergebnisse werden später mit den Ergebnissen von MCPELMO 2.0 verglichen. Die verwendeten Stoffe (Vorschlag des Umweltbundesamts) sind in der Tabelle 28 zusammengestellt.

Tabelle 28: Für die Simulationen der Stufe 2 verwendete Stoffliste

Substanz	CAS-No.
2,4,4'-Trichlorbiphenyl (PCB 28)	7012-37-5
2,2',5,5'-Tetrachlorbiphenyl (PCB 52)	35693-99-3
2,2',4,5,5'-Pentachlorbiphenyl (PCB 101)	37680-73-2
2,2',3,4,4',5-Hexachlorbiphenyl (PCB 138)	35065-28-2
2,2',4,4',5,5'-Hexachlorbiphenyl (PCB 153)	35065-27-1
2,2',3,4,4',5,5'-Heptachlorbiphenyl (PCB 180)	35065-29-3
Benzo(a)pyren	50-32-8
Tributylzinnoxid	56-35-9
Nonylphenol	25154-52-3
Di-(2-ethylhexyl)phthalate (DEHP)	117-81-7
Chlorparaffine	63449-39-8
Decabromdiphenylether	1163-19-5
Moschusduftstoff HHCB	1222-05-5
Moschusduftstoff AHTN	1506-02-1
Bromocyclen	1715-40-8
gamma-Hexachlorcyclohexan (Lindan)	58-89-9
Mineralölkohlenwasserstoffe	

Im folgenden werden einige Informationen zu den Eingabedaten für die Berechnungen gegeben. Zunächst musste die Liste etwas modifziert werden, weil mit PELMO prinzipiell nur reine Stoffe und keine Stoffgemische modelliert werden können. Für die Mineralölkohlenwasserstoffe wurden daher einige wichtige Vertreter für die Simulation eingesetzt. Dazu ist mittlere Zusammensetzung von Ottokraftstoffen in der Tabelle 29 aufgeführt.

Tabelle 29: Wichtige Bestandteile von Ottokraftstoff [31]

Substanz	CAS-Nr.	Typ	Normalbenzin	Super
Hexan	110-54-3	C6	11 %	13 %
Heptane	142-82-5	C7	2 %	6 %
Octan	540-84-1	C8	36 %	16 %
Benzene	71-43-2	C6	2 %	3 %
Xylol	108-38-3	C8	5 %	13 %

Dieselkraftstoff besteht aus höherkettigen Verbindungen. Allgemein haben n-Alkane die beste und aromatische Verbindungen die schlechteste Zündwilligkeit. Daher treten im Diesel die n-Alkane deutlicher hervor (46 %). Das Maximum liegt im Bereich der C12 bis C16 n-Alkane. Exemplarisch wurde daher die Substanz Tetradecan ($C_{14}H_{30}$, CAS-Nr. 629-59-4)) für die Simulationen ausgewählt.

Die notwendigen Eingabedaten der PCB sind bereits im Rahmen der Stufe 1 Simulationen bestimmt worden. (siehe Anhang 1 zu diesem Vorhaben). Da keine zusätzlichen Daten zu Sorption, Abbau oder Verflüchtigung verfügbar waren, wurden die dort zusammengestellten Werte auch für die Simulationen im Rahmen der Stufe 2 übernommen. Zu Tributylzinnoxid liegt ein ausführlicher BUA-Bericht vor [34]. Es wurde daher diese Substanz als Stellvertreter für die Tributylzinnverbindungen gewählt. Nonylphenol, DEHP, Decabromdiphenylether, die beiden Moschusdufstoffe HHCB und AHTN sowie Bromocyclen waren nicht in der UBA-Liste mit den 383 Stoffen (Stufe 1) aufgeführt. Es wurden daher die benötigten Stoffdaten im Rahmen einer Literatursuche zusammengestellt. Dabei wurde für den Fall, dass keine experimentellen Daten verfügbar waren, auf QSAR-Methoden zurückgegriffen. Die Daten zu Lindan wurden durch weitere Angaben ergänzt. Die Ergebnisse sind in der Tabelle 30 zusammengestellt.

Tabelle 30: Verwendete stoffabhängige Eingabedaten für die Simulationen im Rahmen der Stufe 2

Substanz	CAS-No.	M [g/mol]	log Pow	DT50 [d]	Henry [J/mol]	Koc [L/kg]
2,4,4'-Trichlorbiphenyl (PCB 28)	7012-37-5	257,55		147	20,7	51300
2,2',5,5'-Tetrachlorbiphenyl (PCB 52)	35693-99-3	291,99		254	20,7	173800,1
2,2',4,5,5'-Pentachlorbiphenyl (PCB 101)	37680-73-2	326,44		439	9,30	562300
2,2',3,4,4',5-Hexachlorbiphenyl (PCB 138)	35065-28-2	360,88		757	2,17	1862100
2,2',4,4',5,5'-Hexachlorbiphenyl (PCB 153)	35065-27-1	360,88		757	2,38	1862100
2,2',3,4,4',5,5'-Heptachlorbiphenyl (PCB 180)	35065-29-3	395,33		1308	1,03	6309600
Benzo(a)pyren	50-32-8	252,3	6,04[32]	1440[32]	0,362	62000 [33]**
Tributylzinnoxid	56-35-9	596,07	3,2 [34]	140 d[34]	0,02 [34]	2390[34]*
Nonylphenol	25154-52-3	220,34l	4,48[35]	13 d [36]	11^{++}	3380 [33]**
Di-(2-ethylhexyl)phthalate (DEHP)	117-81-7	390,57		30 d [37]	1,52	240000
Chlorparaffine	63449-39-8	711,2	11,6[32]	42000[32]	24 [32]	10^7[32]
Decabromdiphenylether	1163-19-5	959,2	6,27 [38]	7115 d [23]$^{\#}$	1,21□10^{-3} $^{+}$	151000 [33]**
Moschusduftstoff HHCB	1222-05-5	258,40	6,26 [39]	119 d [23]$^{\#}$	13,4 $^{+}$	93450 [33]**
Moschusduftstoff AHTN	1506-02-1	258,40	6,35 [39]	122 d [23] $^{\#}$	4,28 $^{+}$	112610 [33]**
Bromocyclen	1715-40-8	393,75	6,13 [39]	1906 d [23] $^{\#}$	8,5 $^{+}$	73330 [33]**
gamma-Hexachlorcyclohexan (Lindan)	58-89-9	290,85	3,85[32]	1825[32]	4,72 10^{-02}	1070[32]
n-Hexane	110-54-3			12	186000	149 [32]
n-Heptane	142-82-5			13 [32]]	206100 [32]	275 [32]
n-Octane	111-65-9			8 [32]	326600[32]	507 [32]
iso-Octane	540-84-1			36 [32]	305000 [32]	276 [32]
Benzene	71-43-2			64	573	166 [32]
m-Xylene	108-38-3			31	742	434 [32]
n-Tetradecan	629-59-4	198,40	7,2	11 [23] $^{+}$	1,67 10^6 $^{+}$	539500 [33]**

Erläuterungen zu der Tabelle 28

*: Mittelwert von Sedimentuntersuchungen

**: Berechnet aus dem LOGPOW

#: Berechnet unter Verwendung von Gleichung (1)

+: Berechnet nach der “Bond-Methode” von HENRYWIN [40]

++: Berechnet aus Wasserlöslichkeit (6 mg/L) und Dampfdruck (0.3 Pa) [41]

Wenn in der Tabelle 30 keine Quellenangaben gemacht werden, so sind die Angaben dem Anhang 1 dieses Vorhabens entnommen.

Für alle Stoffe bzw. Stoffgehalte liegen mittlere Gehalte im Klärschlamm vor. Die Gehalte wurden für die Simulationen in mittlere jährliche Auftragsraten umgerechnet. Dabei wurde von einer mittleren Klärschlammausbringung von 1.67 Tonnen TS / Jahr (entspricht 5 Tonnen TS / 3 Jahre) pro Hektar ausgegangen. Die Klärschlammkonzentrationen können dann wie folgt in Auftragsraten umgerechnet werden:

$$\text{Rate (kg/ha)} = \text{Konz (mg/kg)} * 1.67\ 10^{-3} \qquad (31)$$

Die resultierenden Raten sind in der Tabelle 31 zusammengestellt. Bei den Mineralölkohlenwasserstoffen wurde eine mittlere Konzentration von 3000 mg/kg TS angenommen. Die einzelnen Bestandteile wurden entsprechend den Angaben in der Tabelle 1 berücksichigt. Das bedeutet, dass angenommen wurde, dass der Gehalt von 3000 mg/kg (= 5 kg/ha in drei Jahren) im Klärschlamm durch Diesel oder Ottokraftstoff verursacht wurde.

Tabelle 31: Mittlere Auftragsmengen für die PELMO Simulationen (Stufe 2)

Nr.	Substanz	Konz (mg/kg TS)	järliche. Auftragsrate (kg/ha)
1	2,4,4'-Trichlorbiphenyl	0,016	$2{,}67\ 10^{-05}$
2	2,2',5,5'-Tetrachlorbiphenyl	0,017	$2{,}84\ 10^{-05}$
3	2,2',4,5,5'-Pentachlorbiphenyl	0,02	$3{,}34\ 10^{-05}$
4	2,2',3,4,4',5-Hexachlorbiphenyl	0,037	$6{,}18\ 10^{-05}$
5	2,2',4,4',5,5'-Hexachlorbiphenyl	0,038	$6{,}35\ 10^{-05}$
6	2,2',3,4,4',5,5'-Heptachlorbiphenyl	0,026	$4{,}34\ 10^{-05}$
7	Benzo(a)pyren	0,51	$8{,}52\ 10^{-04}$
8	Tributylzinnoxid	0,51	$8{,}52\ 10^{-04}$
9	Nonylphenol	51	8,52 10-02
10	Di-(2-ethylhexyl)phthalate (DEHP)	4612	7,70
11	Chlorparaffine	65	0,11
12	Decabromdiphenylether	6,62	$1{,}11\ 10^{-02}$
13	Moschusduftstoff HHCB	15,93	$2{,}66\ 10^{-02}$
14	Moschusduftstoff AHTN	15,45	$2{,}58\ 10^{-02}$
15	Bromocyclen	0,113	$1{,}89\ 10^{-04}$
16	gamma-Hexachlorcyclohexan	0,01	$1{,}67\ 10^{-05}$
17	n-Hexane	3000 mg/kg * 13 % (Super)	0,65
18	n-Heptane	3000 mg/kg * 6 % (Super)	0,30
19	n-Octane	3000 mg/kg * 36 % (Normal)*	1,8
10	iso-Octane	3000 mg/kg * 36 % (Normal)	1,8
21	Benzene	3000 mg/kg * 3 % (Super)	0,15
22	m-Xylene	3000 mg/kg * 13 % (Super)	0,65
23	n-Tetradecan	3000 mg/kg * 46 % (Diesel)	2,3

6.2 Ergebnisse der Stufe 2 Simulationsrechnungen

Es wurden Simulationen mit allen 22 Versickerungszenarien für die drei Anwendungszeitpunkte Mai, Juli und November durchgeführt . In den folgenden 3 Tabellen sind die Mittelwerte der Sickerwasserkonzentrationen für alle Stoffe getrennt nach Anwendungszeitpunkt zusammengestellt.

Tabelle 32: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Mai (geom. Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L) (1. Teil)

Nr.	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00031
2	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00006	0,00000	0,00003	0,00014
3	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00001	0,00000	0,00000	0,00008
4	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00007	0,00000	0,00001	0,00016
5	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00005	0,00000	0,00001	0,00011
6	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,87585
7	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,01510
8	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,02109
9	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,07720
10	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,32059
11	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,01734
12	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,06238
13	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00004	0,00001	0,00007	0,02370
14	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00002	0,00000	0,00000	0,00005
15	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00024
16	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00118	0,00382	0,00071	0,01092	0,00986
17	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00149	0,00194	0,00028	0,00074	0,01722
18	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00032	0,00084	0,00012	0,00172	0,03857
19	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00016	0,00031	0,00001	0,00003	0,00217
20	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00071	0,00182	0,00238	0,01874	0,03764
21	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00010	0,00025	0,00002	0,00044	0,81488
22	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00145	0,00403	0,00377	0,01837	0,00742

Fortsetzung Tabelle 32: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Mai (geom. Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L)

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
2	0,00077	0,00001	0,00001	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
3	0,00054	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
4	0,00109	0,00001	0,00001	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00003	0,00000
5	0,00074	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
6	0,02013	0,00000	0,00000	0,00000	0,00013	0,00001	0,00000	0,00001	0,00003	0,00002	0,00000	0,00000
7	0,00027	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00001	0,00000	0,00000	0,00002	0,00005	0,00001	0,00000
8	0,00029	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00001	0,00000	0,00000	0,00003	0,00006	0,00002	0,00000
9	0,00096	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00001	0,00000	0,00000	0,00002	0,00003	0,00001	0,00000
10	0,00544	0,00000	0,00000	0,00000	0,00006	0,00001	0,00000	0,00001	0,00003	0,00005	0,00001	0,00000
11	0,00031	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00001	0,00000	0,00001	0,00003	0,00013	0,00005	0,00000
12	0,00096	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00001	0,00000	0,00001	0,00003	0,00007	0,00002	0,00000
13	0,00069	0,00001	0,00001	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
14	0,00043	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
15	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
16	0,04007	0,00053	0,00103	0,00002	0,00023	0,00031	0,00016	0,00021	0,00465	0,00011	0,00013	0,00000
17	0,08488	0,00015	0,00019	0,00006	0,00097	0,00026	0,00012	0,00016	0,01240	0,00034	0,00059	0,00000
18	0,00953	0,00014	0,00021	0,00001	0,00011	0,00001	0,00000	0,00000	0,00003	0,00003	0,00005	0,00000
19	0,00661	0,00002	0,00003	0,00001	0,00011	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000
20	0,02321	0,00060	0,00079	0,00002	0,00026	0,00138	0,00056	0,00331	0,01092	0,00111	0,00195	0,00001
21	0,02794	0,00005	0,00007	0,00000	0,00014	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00001	0,00000	0,00000
22	0,07109	0,00089	0,00116	0,00004	0,00036	0,85537	0,21347	0,56975	1,60386	0,33805	0,53517	0,00003

Tabelle 33: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Juli (geom. Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L) (1. Teil)

Nr.	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00031
2	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00007	0,00000	0,00003	0,00014
3	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00001	0,00000	0,00000	0,00008
4	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00006	0,00000	0,00000	0,00016
5	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00004	0,00000	0,00000	0,00010
6	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,94843
7	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,01503
8	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,02096
9	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,07684
10	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,31991
11	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,01725
12	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,06212
13	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00002	0,00000	0,00000	0,02343
14	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00001	0,00000	0,00000	0,00005
15	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00024
16	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00121	0,00435	0,00032	0,00928	0,00989
17	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00153	0,00228	0,00002	0,00035	0,01725
18	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00033	0,00096	0,00007	0,00177	0,03857
19	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00016	0,00031	0,00000	0,00001	0,00217
20	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00072	0,00204	0,00118	0,01669	0,03763
21	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00010	0,00028	0,00002	0,00047	0,81409
22	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00145	0,00394	0,00089	0,01158	0,00741

Fortsetzung Tabelle 33: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Juli (geom. Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L)

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
2	0,00077	0,00001	0,00001	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
3	0,00053	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
4	0,00109	0,00000	0,00001	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
5	0,00073	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
6	0,02176	0,00000	0,00000	0,00000	0,00014	0,00002	0,00001	0,00001	0,00005	0,00002	0,00000	0,00000
7	0,00027	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00003	0,00001	0,00003	0,00010	0,00027	0,00009	0,00000
8	0,00029	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00003	0,00001	0,00003	0,00012	0,00040	0,00016	0,00001
9	0,00095	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00003	0,00001	0,00002	0,00010	0,00016	0,00004	0,00000
10	0,00543	0,00000	0,00000	0,00000	0,00006	0,00002	0,00001	0,00003	0,00007	0,00010	0,00001	0,00000
11	0,00031	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00004	0,00002	0,00004	0,00010	0,00061	0,00032	0,00003
12	0,00095	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00003	0,00001	0,00004	0,00009	0,00028	0,00009	0,00001
13	0,00068	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00003	0,00001	0,00001	0,00037	0,00002	0,00001	0,00000
14	0,00042	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000
15	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000
16	0,04028	0,00057	0,00119	0,00002	0,00025	0,00008	0,00005	0,00006	0,00110	0,00002	0,00003	0,00000
17	0,08526	0,00017	0,00023	0,00006	0,00101	0,00001	0,00001	0,00001	0,00041	0,00001	0,00001	0,00000
18	0,00958	0,00017	0,00025	0,00001	0,00012	0,00001	0,00001	0,00001	0,00012	0,00007	0,00004	0,00000
19	0,00662	0,00002	0,00003	0,00001	0,00011	0,00001	0,00000	0,00001	0,00004	0,00006	0,00001	0,00000
20	0,02328	0,00069	0,00089	0,00002	0,00027	0,00149	0,00059	0,00286	0,00975	0,00110	0,00087	0,00001
21	0,02798	0,00006	0,00008	0,00000	0,00015	0,00011	0,00004	0,00005	0,00096	0,00006	0,00002	0,00000
22	0,07109	0,00079	0,00110	0,00004	0,00035	0,00370	0,00102	0,00098	0,03571	0,00132	0,00183	0,00000

Tabelle 34: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im November (geom. Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L) (1. Teil)

Nr.	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00031
2	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00009	0,00001	0,00012	0,00015
3	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00001	0,00000	0,00000	0,00007
4	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00008	0,00000	0,00001	0,00016
5	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00007	0,00000	0,00001	0,00011
6	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,94315
7	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,01501
8	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,01575
9	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,09144
10	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,35742
11	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,01357
12	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,07338
13	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00005	0,00000	0,00004	0,03074
14	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00001	0,00000	0,00000	0,00004
15	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00034
16	0,00001	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00127	0,00732	0,00161	0,06649	0,01107
17	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00151	0,00434	0,00085	0,00690	0,01589
18	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00035	0,00148	0,00063	0,01234	0,04249
19	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00019	0,00064	0,00001	0,00015	0,00284
20	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00076	0,00300	0,00621	0,10270	0,04023
21	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00010	0,00042	0,00015	0,00308	0,84230
22	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00148	0,00545	0,00312	0,04805	0,00743

Fortsetzung Tabelle 34: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im November (Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L)

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
2	0,00076	0,00001	0,00002	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
3	0,00040	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
4	0,00105	0,00001	0,00001	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
5	0,00074	0,00000	0,00001	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
6	0,02175	0,00000	0,00000	0,00000	0,00014	0,00001	0,00000	0,00001	0,00003	0,00002	0,00000	0,00000
7	0,00030	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00001	0,00001	0,00001	0,00003	0,00003	0,00000	0,00000
8	0,00028	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00001	0,00001	0,00001	0,00003	0,00004	0,00000	0,00000
9	0,00117	0,00000	0,00000	0,00000	0,00004	0,00002	0,00001	0,00002	0,00004	0,00002	0,00000	0,00000
10	0,00600	0,00000	0,00000	0,00000	0,00007	0,00002	0,00001	0,00002	0,00004	0,00004	0,00000	0,00000
11	0,00029	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00002	0,00001	0,00003	0,00005	0,00009	0,00000	0,00000
12	0,00114	0,00000	0,00000	0,00000	0,00004	0,00003	0,00001	0,00003	0,00006	0,00006	0,00000	0,00000
13	0,00083	0,00000	0,00001	0,00000	0,00003	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
14	0,00027	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
15	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
16	0,04087	0,00147	0,00225	0,00003	0,00032	0,00448	0,00181	0,00264	0,05875	0,00075	0,00000	0,00011
17	0,07572	0,00048	0,00050	0,00008	0,00113	0,00007	0,00004	0,00005	0,00080	0,00014	0,00000	0,00003
18	0,00995	0,00034	0,00043	0,00001	0,00013	0,00003	0,00001	0,00001	0,00014	0,00007	0,00000	0,00008
19	0,00733	0,00005	0,00006	0,00001	0,00014	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
20	0,02380	0,00126	0,00143	0,00003	0,00029	0,00694	0,00282	0,01814	0,04798	0,00382	0,00002	0,00204
21	0,02757	0,00012	0,00014	0,00000	0,00015	0,00002	0,00001	0,00001	0,00020	0,00001	0,00000	0,00001
22	0,07084	0,00116	0,00158	0,00004	0,00037	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00070

Tabelle 35: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Mai (90. Perz. der Sickerwasserkonz. (µg/L]) (1. Teil)

Nr,	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,33410
2	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00009	0,00001	0,00006	0,00056
3	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00003	0,00000	0,00000	0,00014
4	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00004	0,00011	0,00001	0,00003	0,00020
5	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00007	0,00001	0,00002	0,00016
6	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	7,08920
7	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	8,26490
8	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	8,43340
9	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	8,23260
10	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	7,89800
11	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	8,97030
12	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	8,89400
13	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00012	0,00006	0,00030	0,00001
14	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00004	0,00006	0,00000	0,00000	0,00012
15	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,38879
16	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00122	0,00432	0,00238	0,01503	0,14208
17	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00315	0,00392	0,00093	0,00152	0,02172
18	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00035	0,00093	0,00034	0,00238	0,79012
19	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00044	0,00051	0,00002	0,00006	0,03926
20	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00076	0,00199	0,00473	0,02330	0,46023
21	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00012	0,00029	0,00007	0,00065	3,99830
22	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00154	0,00451	0,00468	0,02246	0,00786

Fortsetzung Tabelle 35: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Mai (90. Perz. der Sickerwasserkonz. (µg/L])

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	0,00007	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000
2	0,00097	0,00001	0,00001	0,00000	0,00002	0,00001	0,00000	0,00000	0,00001	0,00003	0,00006	0,00000
3	0,00092	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
4	0,00114	0,00001	0,00001	0,00000	0,00002	0,00003	0,00001	0,00001	0,00015	0,00524	0,00497	0,00000
5	0,00097	0,00001	0,00001	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
6	0,08916	0,00000	0,00000	0,00000	0,00025	0,00001	0,00000	0,00001	0,00004	0,00004	0,00001	0,00000
7	0,00847	0,00000	0,00000	0,00000	0,00006	0,00001	0,00000	0,00001	0,00004	0,00010	0,00003	0,00000
8	0,00774	0,00000	0,00000	0,00000	0,00006	0,00001	0,00001	0,00001	0,00005	0,00016	0,00004	0,00000
9	0,01398	0,00000	0,00000	0,00000	0,00009	0,00001	0,00000	0,00001	0,00003	0,00006	0,00001	0,00000
10	0,04504	0,00000	0,00000	0,00000	0,00015	0,00002	0,00001	0,00002	0,00004	0,00008	0,00002	0,00000
11	0,01065	0,00000	0,00000	0,00000	0,00006	0,00002	0,00001	0,00002	0,00006	0,00032	0,00012	0,00000
12	0,01783	0,00000	0,00000	0,00000	0,00009	0,00002	0,00001	0,00002	0,00004	0,00013	0,00004	0,00000
13	0,00191	0,00002	0,00002	0,00000	0,00005	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000
14	0,00102	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
15	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
16	0,04189	0,00063	0,00114	0,00002	0,00026	0,12263	0,03187	0,04269	0,76394	0,02807	0,04796	0,00000
17	0,10192	0,00025	0,00032	0,00010	0,00181	0,30852	0,06690	0,13685	3,23291	0,27424	0,42746	0,00000
18	0,01001	0,00016	0,00024	0,00001	0,00012	0,00022	0,00006	0,00005	0,00176	0,00318	0,00588	0,00000
19	0,00945	0,00004	0,00005	0,00001	0,00016	0,00001	0,00000	0,00000	0,00002	0,00018	0,00015	0,00000
20	0,02586	0,00066	0,00083	0,00002	0,00028	0,22594	0,06376	0,21575	0,50304	0,04386	0,06967	0,00003
21	0,04982	0,00006	0,00009	0,00000	0,00018	0,00002	0,00001	0,00001	0,00017	0,00006	0,00006	0,00000
22	0,06919	0,00097	0,00125	0,00004	0,00041	1,06441	0,26418	0,73192	1,99142	0,42696	0,65923	0,00003

Tabelle 36: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Juli (90. Perz. der Sickerwasserkonz. (µg/L]) (1. Teil)

Nr.	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,33410
2	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00010	0,00003	0,00007	0,00056
3	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00002	0,00000	0,00000	0,00014
4	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00004	0,00008	0,00000	0,00001	0,00020
5	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00005	0,00000	0,00000	0,00016
6	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	7,08920
7	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	8,26490
8	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	8,43340
9	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	8,23260
10	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	7,89800
11	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	8,97030
12	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	8,89400
13	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00006	0,00000	0,00001	0,00001
14	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00004	0,00002	0,00000	0,00000	0,00012
15	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,38879
16	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00125	0,00485	0,00363	0,01364	0,14208
17	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00323	0,00465	0,00024	0,00069	0,02172
18	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00035	0,00105	0,00056	0,00257	0,79012
19	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00044	0,00051	0,00001	0,00002	0,03926
20	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00077	0,00221	0,00598	0,02172	0,46023
21	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00012	0,00034	0,00014	0,00071	3,99830
22	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00154	0,00441	0,00280	0,01510	0,00786

Fortsetzung Tabelle 36: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Juli (90. Perz. der Sickerwasserkonz. (µg/L])

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	0,00200	0,00005	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000
2	0,00011	0,00076	0,00002	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000
3	0,00015	0,00102	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
4	0,00019	0,00122	0,00001	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
5	0,00010	0,00081	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00001	0,00000
6	7,43300	0,09698	0,00000	0,00000	0,00028	0,00004	0,00002	0,00005	0,00012	0,00007	0,00001	0,00000
7	2,31320	0,00812	0,00000	0,00000	0,00006	0,00012	0,00005	0,00012	0,00038	0,00114	0,00046	0,00003
8	3,51890	0,00715	0,00000	0,00000	0,00006	0,00017	0,00007	0,00017	0,00059	0,00189	0,00079	0,00004
9	6,69340	0,01481	0,00000	0,00000	0,00009	0,00009	0,00004	0,00009	0,00031	0,00054	0,00021	0,00001
10	7,93430	0,04689	0,00000	0,00000	0,00016	0,00007	0,00003	0,00008	0,00019	0,00032	0,00009	0,00001
11	2,80800	0,00939	0,00000	0,00000	0,00006	0,00016	0,00007	0,00019	0,00043	0,00262	0,00148	0,00014
12	6,19840	0,01858	0,00000	0,00000	0,00009	0,00010	0,00004	0,00012	0,00026	0,00082	0,00041	0,00005
13	2,39340	0,00198	0,00001	0,00000	0,00005	0,00024	0,00007	0,00005	0,00216	0,00027	0,00011	0,00000
14	0,00011	0,00122	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00018	0,00000	0,00000	0,00000
15	0,00570	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00016	0,00000	0,00000	0,00000
16	0,00758	0,04146	0,00131	0,00002	0,00028	0,03948	0,01280	0,01796	0,49259	0,00369	0,01110	0,00000
17	0,02315	0,10660	0,00038	0,00010	0,00191	0,00137	0,00045	0,00055	0,05186	0,00074	0,00139	0,00000
18	0,32395	0,01031	0,00027	0,00001	0,00012	0,00048	0,00011	0,00011	0,00302	0,00474	0,00360	0,00000
19	0,00185	0,00938	0,00005	0,00001	0,00016	0,00014	0,00004	0,00006	0,00076	0,00236	0,00045	0,00000
20	0,17269	0,02482	0,00094	0,00002	0,00029	0,08727	0,02564	0,08699	0,25271	0,02852	0,03290	0,00003
21	4,07760	0,05163	0,00010	0,00000	0,00018	0,00181	0,00053	0,00066	0,00771	0,00128	0,00089	0,00000
22	0,00789	0,07591	0,00120	0,00004	0,00041	0,25433	0,07572	0,19537	0,65085	0,08926	0,21259	0,00002

Tabelle 37: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im November (90. Perz. der Sickerwasserkonz. (µg/L]) (1. Teil)

Nr.	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,01075
2	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00012	0,00003	0,00019	0,00013
3	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00002	0,00000	0,00000	0,00016
4	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00004	0,00011	0,00000	0,00003	0,00019
5	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00004	0,00009	0,00000	0,00002	0,00014
6	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	7,43390
7	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	5,04640
8	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	7,40970
9	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	9,27050
10	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	8,45850
11	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	6,45620
12	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	9,27880
13	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00015	0,00000	0,00013	3,79030
14	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00003	0,00003	0,00000	0,00000	0,00013
15	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,04178
16	0,00001	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00132	0,00798	0,00441	0,08030	0,02158
17	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00496	0,01568	0,00369	0,02715	0,02259
18	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00038	0,00160	0,00126	0,01420	0,50537
19	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00067	0,00161	0,00002	0,00042	0,00507
20	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00081	0,00324	0,00959	0,11121	0,25958
21	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00013	0,00048	0,00036	0,00366	3,91210
22	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00157	0,00600	0,00431	0,05730	0,00759

Fortsetzung Tabelle 37: Ergebnisse der Stufe 2 Simulationen für regelmäßige Anwendungen im November (90. Perz. der Sickerwasserkonz. (µg/L])

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	0,00006	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000
2	0,00068	0,00002	0,00002	0,00000	0,00002	0,00001	0,00000	0,00000	0,00002	0,00005	0,00000	0,00000
3	0,00093	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
4	0,00104	0,00001	0,00001	0,00000	0,00002	0,00001	0,00000	0,00000	0,00001	0,00013	0,00000	0,00000
5	0,00087	0,00001	0,00001	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
6	0,09734	0,00000	0,00000	0,00000	0,00029	0,00001	0,00000	0,00001	0,00003	0,00004	0,00000	0,00000
7	0,01223	0,00000	0,00000	0,00000	0,00009	0,00002	0,00001	0,00003	0,00007	0,00009	0,00000	0,00000
8	0,01052	0,00000	0,00000	0,00000	0,00010	0,00003	0,00001	0,00004	0,00010	0,00016	0,00000	0,00000
9	0,01886	0,00000	0,00000	0,00000	0,00012	0,00003	0,00001	0,00004	0,00008	0,00006	0,00000	0,00000
10	0,05026	0,00000	0,00000	0,00000	0,00018	0,00003	0,00001	0,00003	0,00006	0,00007	0,00000	0,00000
11	0,01362	0,00000	0,00000	0,00000	0,00009	0,00006	0,00002	0,00008	0,00015	0,00037	0,00000	0,00000
12	0,02298	0,00000	0,00000	0,00000	0,00012	0,00005	0,00002	0,00007	0,00011	0,00014	0,00000	0,00000
13	0,00250	0,00001	0,00002	0,00000	0,00007	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000
14	0,00134	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000	0,00002	0,00000	0,00000	0,00000
15	0,00001	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
16	0,04162	0,00161	0,00240	0,00003	0,00035	0,89312	0,20947	0,28728	1,61570	0,23219	0,00000	0,00017
17	0,10456	0,00124	0,00132	0,00017	0,00332	0,05034	0,01325	0,02314	0,76006	0,02154	0,00000	0,00007
18	0,01041	0,00037	0,00045	0,00001	0,00014	0,00222	0,00040	0,00044	0,00790	0,01223	0,00000	0,00011
19	0,01134	0,00012	0,00015	0,00001	0,00029	0,00000	0,00000	0,00000	0,00001	0,00015	0,00000	0,00000
20	0,02538	0,00133	0,00150	0,00003	0,00032	0,94597	0,23357	0,49920	1,14453	0,12533	0,00005	0,00239
21	0,05028	0,00013	0,00015	0,00000	0,00018	0,00126	0,00038	0,00047	0,00792	0,00027	0,00000	0,00001
22	0,06992	0,00124	0,00170	0,00004	0,00042	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00100

Da eine Interpretation der Ergebnisse allein auf der Basis der umfangreichen Tabellen schwierig erscheint, werden im folgenden einige Ergebnisse der Simulationsrechnungen grafisch dargestellt und kurz diskutiert.

Auf den folgenden drei Abbildungen ist der Einfluss unterschiedlicher Aufbringungszeiten auf die mittlere Sickerwasserkonzentration zu sehen.

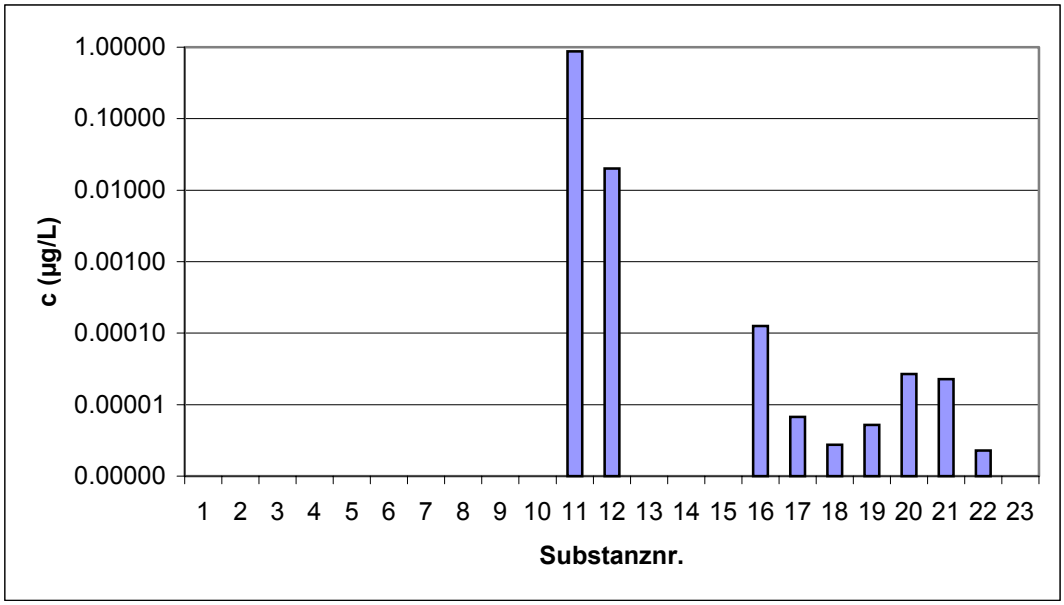


Abbildung 37: Berechnete geom. Mittel aller Stoffe für das Szenario 6
(Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im Mai)

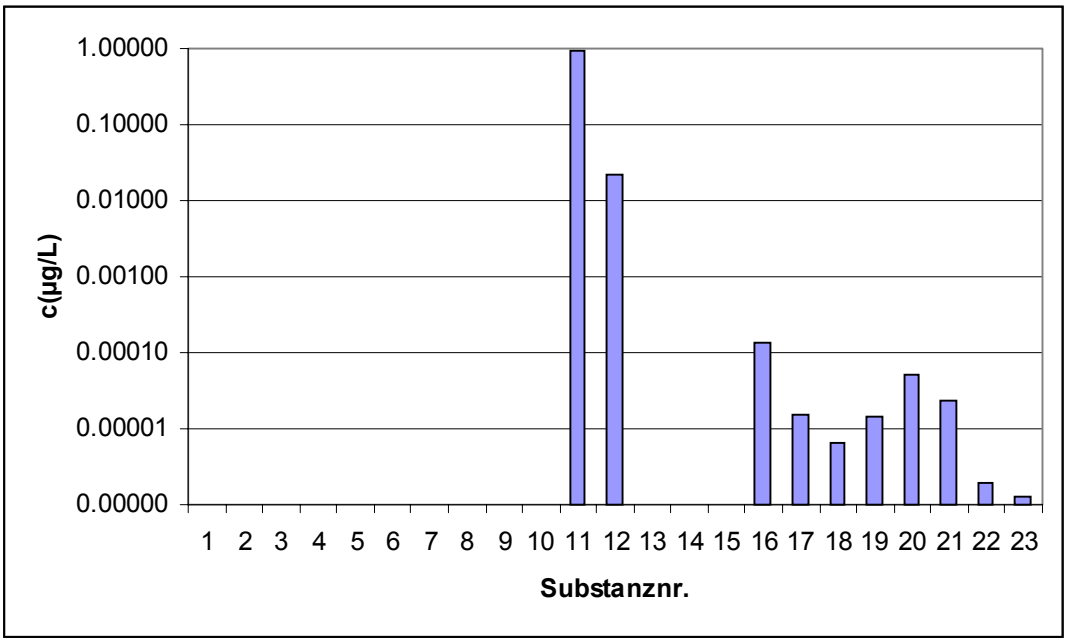


Abbildung 38: Berechnete geom. Mittel aller Stoffe für das Szenario 6
(Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im Juli)

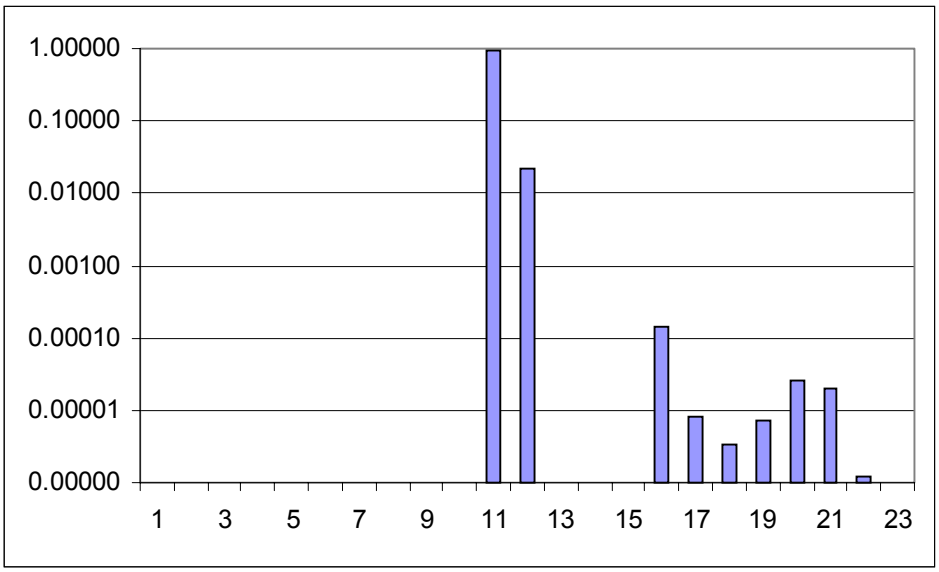


Abbildung 39: Berechnete geom. Mittel aller Stoffe für das Szenario 6
(Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im November)

Dazu wurde beispielhaft das Szenario 6 verwendet. Aufgrund der Boden- und Klimaverhältnisse spielt der präferentielle Fluss bei diesem Szenario keine Rolle. Außerdem werden dort, wie die Tabellen verdeutlichen, die höchsten Sickerwasserkonzentrationen für diesen Typ des Transports im Boden berechnet.
Wie die Abbildungen verdeutlichen, ist der jahreszeitliche Einfluss relativ gering. Unabhängig von dem Zeitpunkt der Aufbringung des Reststoffs auf den Acker, wird stets ein ähnliches Konzentrationsspektrum berechnet. Für die beiden Stoffe 11 und 12 (Chlorparaffine und Decabromdiphenylether) werden die höchsten Konzentrationen berechnet. Der Verlauf der Simulationen zeigte allerdings auch, dass die berechneten Konzentrationen aufgrund der sehr starken Sorption erst nach mehreren hundert Jahren auftraten. Die Simulationen deuten darauf hin, dass diese Substanzen aufgrund der geringen Abbaubarkeit über viele Jahrzehnte im Boden akkumuliert werden können. Insgesamt liegen die geometrischen Mittelwerte aller übrigen Substanzen der Liste bei dem Szenario 6 um mehrere Größenordnungen unter den Ergebnissen zu den Chlorparaffinen und Decabromdiphenylether.

Das Verhalten der 23 Stoffe bei dem Szenario 17 (ausschließlich schneller Stofftransport) ist dagegen völlig unterschiedlich.

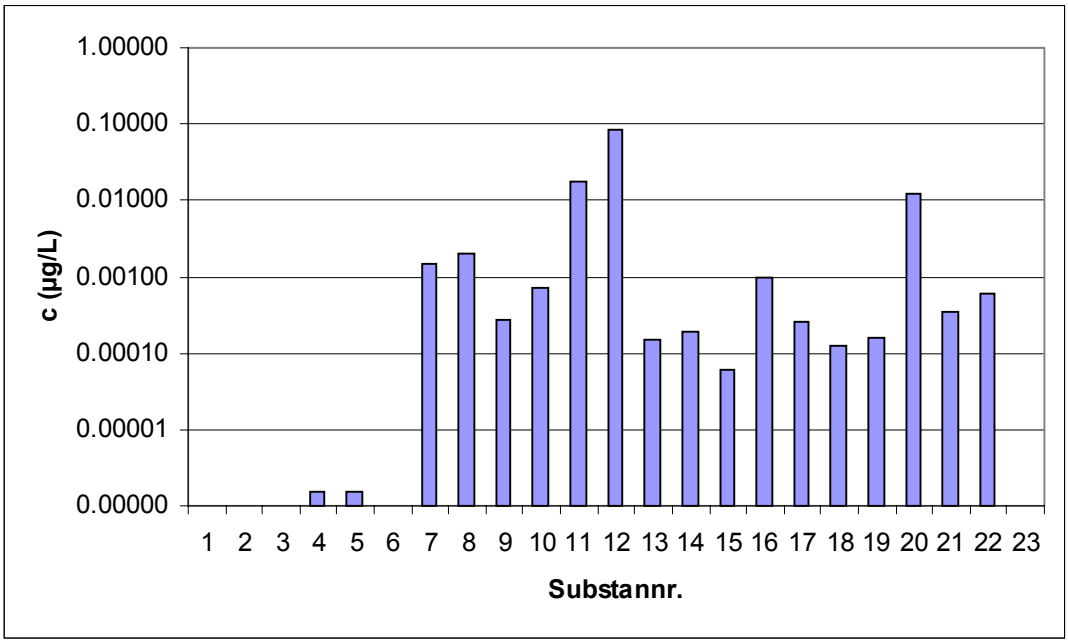


Abbildung 40: Berechnete geom. Mittel aller Stoffe für das Szenario 17
(Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im Mai)

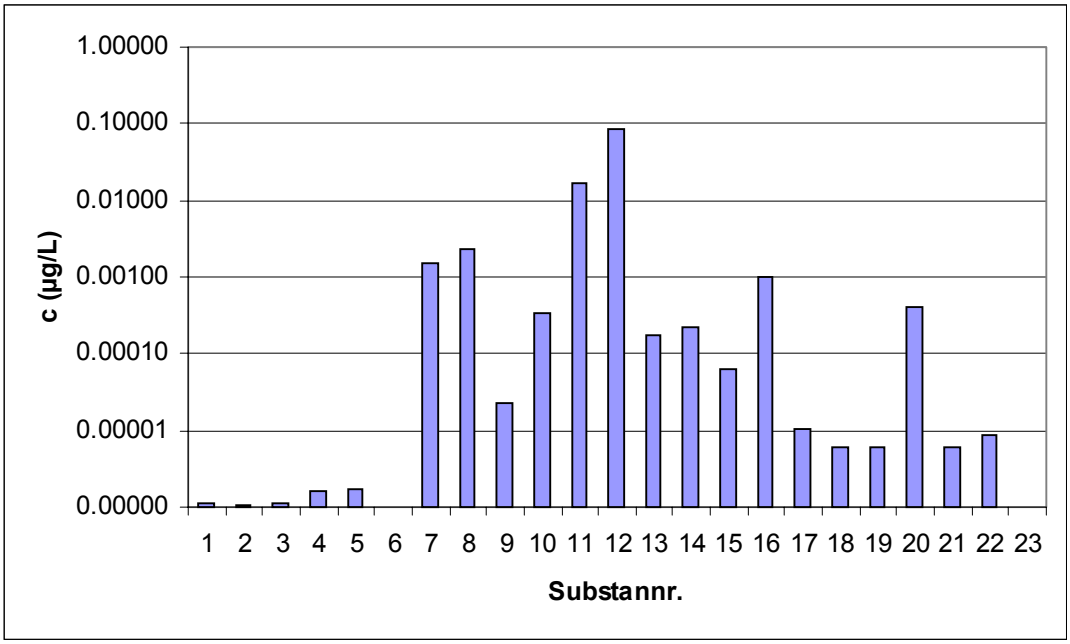


Abbildung 41: Berechnete geom. Mittel aller Stoffe für das Szenario 17
(Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im Juli)

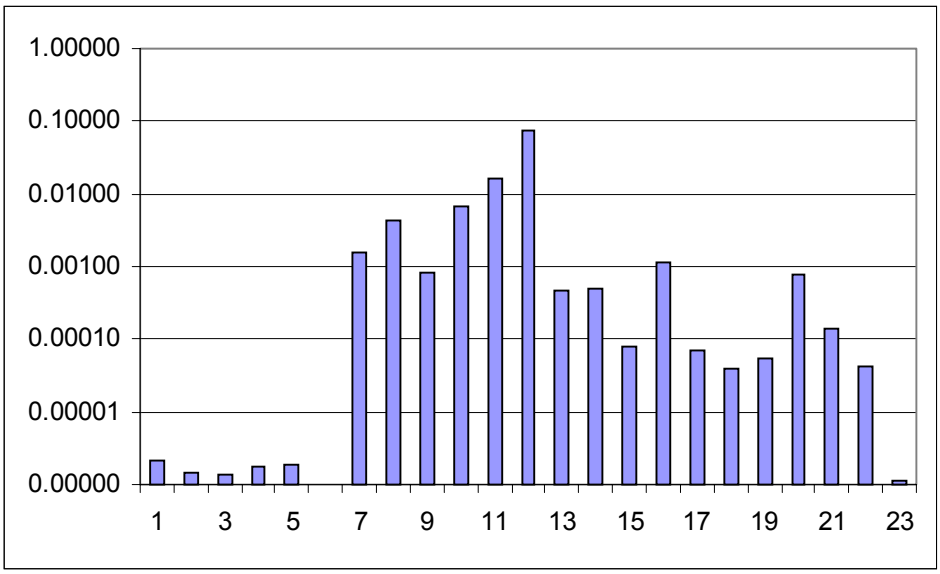


Abbildung 42: Berechnete geom. Mittel aller Stoffe für das Szenario 17 (Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im November)

Zunächst werden mit Ausnahme des Stoffes 6 (2,2',3,4,4',5,5'-Heptachlorbiphenyl) für alle Substanzen mindestens bei einer Variation mittlere Konzentrationen oberhalb von 10^{-6} µg/L berechnet. Durch den schnellen Stofftransport durch Makroporen können also Stoffe in tiefere Bodenschichten transportiert werden, die unter den Bedingungen des chromatographischen Flusses nicht mobil sind. Der Vergleich der Konzentrationsspektren mit den Ergebnissen für das Szenario 6 zeigt außerdem, dass die Bandbreite der berechneten Sickerwasserkonzentrationen deutlich geringer ist, als im ersten Beispiel. So unterscheiden sich die Sickerwasserkonzentrationen der Substanz 11 (Chlorparaffine) und Substanz 22 (m-Xylene) beim Szenario 6 (Mai) um den Faktor 386 000, beim Szenario 17 (Mai) dagegen nur um den Faktor 30. Die stoffspezifischen Eigenschaften treten bei dem schnellen Stofftransport also offensichtlich in den Hintergrund. Deutlich wird dies auch beim Vergleich der Ergebnisse unterschiedliche Aufbringungsmonate. Während für das Szenario 6 keine ausgeprägte Sensitivität dieses Faktors festgestellt werden konnte, so können sich bei dem Szenario 17 die Sickerwasserkonzentrationen um bis zu zwei Größenordnungen verändern, wenn der Reststoff zu einem anderen Zeitpunkt auf das Feld gelangt (zum Beispiel für die Substanz 22 bei einer Mai- und einer Juli-Aufbringung).

Zur Diskussion der berechneten extremen Sickerwasserkonzentrationen sind in den beiden folgenden Abbildungen die Ergebnisse der 90. Perzentilen der Konzentrationen für die bereits zuvor diskutierten Szenarien 6 und 17 dargestellt.

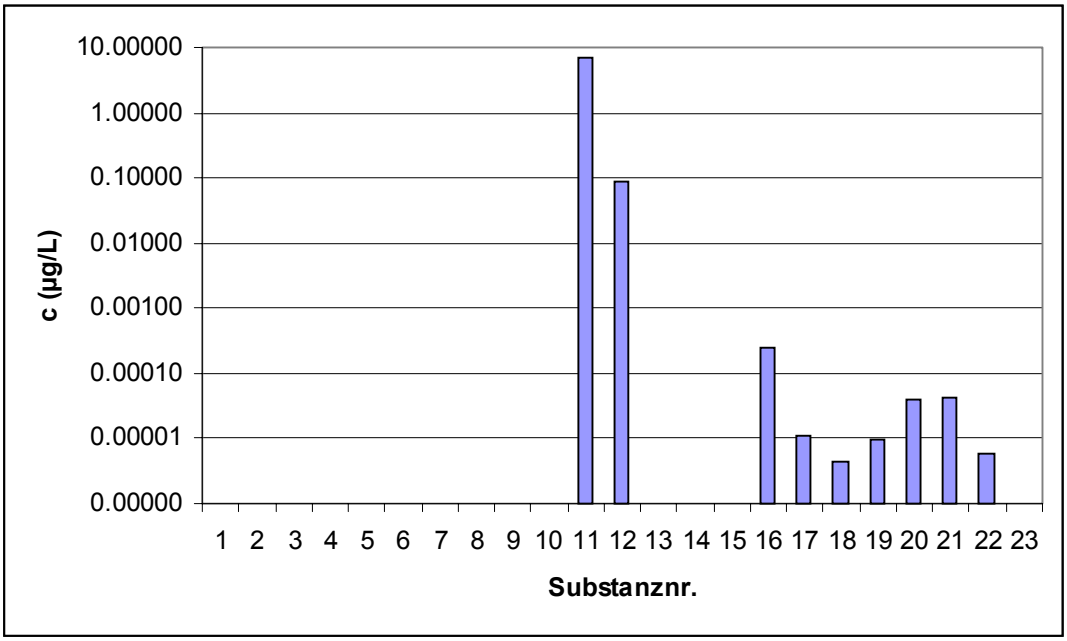


Abbildung 43: Berechnete 90. Perzentilen aller Stoffe für das Szenario 6
(Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im Mai)

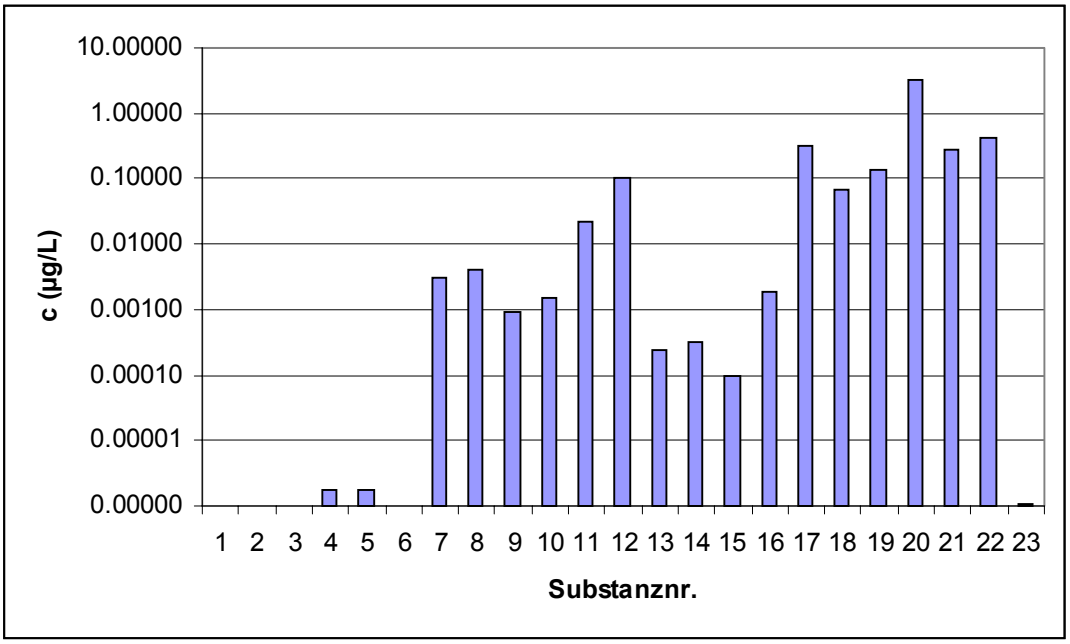


Abbildung 44: Berechnete 90. Perzentilen aller Stoffe für das Szenario 17
(Stufe 2, Aufbringung des Reststoffs im Mai)

Während das Konzentrationsspektrum des 90. Perzentils sich für das Szenario 6 (Abbildung 43) qualitativ kaum von dem Spektrum der mittleren Konzentrationen (Abbildung 37) unterscheidet, wird für das Szenario 17 eine völlig unterschiedliche Verteilung der Sickerwasserkonzentration beim 90. Perzentil (im Vergleich mit den entsprechenden

mittleren Konzentrationen) berechnet (*vergleiche* Abbildung 40 mit Abbildung 44). Deutlich unterschiedliche Standardabweichungen der berechneten Konzentrationen bei den verschiedenen Stoffen der Liste sind für dieses Phänomen verantwortlich. Während im Szenario 6 alle Stoffe mit vergleichbaren Schwankungen berechnet werden, führen die Klimaschwankungen bei dem Szenario 17 je nach Substanz zu völlig verschiedenen Konzentrationsänderungen. Vor allem die Sickerwasserkonzentrationen der Mineralölkohlenwasserstoffe (Stoffe 17 – 22) mit ihren mittleren Sorptionskonstanten reagieren sehr sensitiv auf Klimavariationen. Im Vergleich dazu ist der Einfluss der Klimavariationen auf die Sickerwasserkonzentration der Chlorparaffine (extrem starke Sorption) eher gering.

Im folgenden werden weitere stoffspezifische Aspekte der berechneten Sickerwasserkonzentrationen an einigen Beispielsubstanzen diskutiert.

In den beiden folgenden Abbildungen sind zunächst die Ergebnisse zu Benzol (Ausbringung des Reststoffs im Mai) dargestellt. Wesentliche Einträge konnten nur für die Szenarien 17 und 22 berechnet werden. Der schnelle Stofftransport dominiert bei diesen beiden Szenarien, weil die effektiven gesättigten Wasserleitfähigkeiten dieser Bodenprofile extrem niedrig sind (Szenario 17: 5.1 10^{-6} cm/d und Szenario 22: 1.0 10^{-5} cm/d). Überraschend ist das Verhältnis der mittleren Konzentration und des 90. Perzentils in den beiden Szenarien völlig unterschiedlich. Während bei dem Szenario 22 mittlere und extreme Konzentrationen sehr ähnlich sind, wird bei dem Szenario 17 ein extremes Verhältnis von (geometrischem) Mittelwerte zum 90. Perzentil berechnet. Die Erklärung für dieses unterschiedliche Verhalten ist den Klimabedingungen der Szenarien zu suchen. Repräsentativ für das Szenario 22 ist der Standort Oberstdorf mit einer mittleren jährlichen Niederschlagssumme von etwa 1900 mm (Minimum: 1400 mm/Jahr). Unabhängig von gewissen auftretenden Schwankungen findet ständig ein starker Wassertransport nach unten statt. Das Klima von Nürnberg (repräsentativ für das Szenario 17) ist dagegen geprägt durch trockene Jahre (Minimum 400 mm/Jahr) im Wechsel mit sehr feuchten Perioden (Maximum 900 mm/Jahr). So ist zu erklären, dass extreme Sickerwasserkonzentrationen für diesen Standort berechnet werden, obwohl die geometrischen Mittelwerte der Konzentrationen nur sehr gering sind.

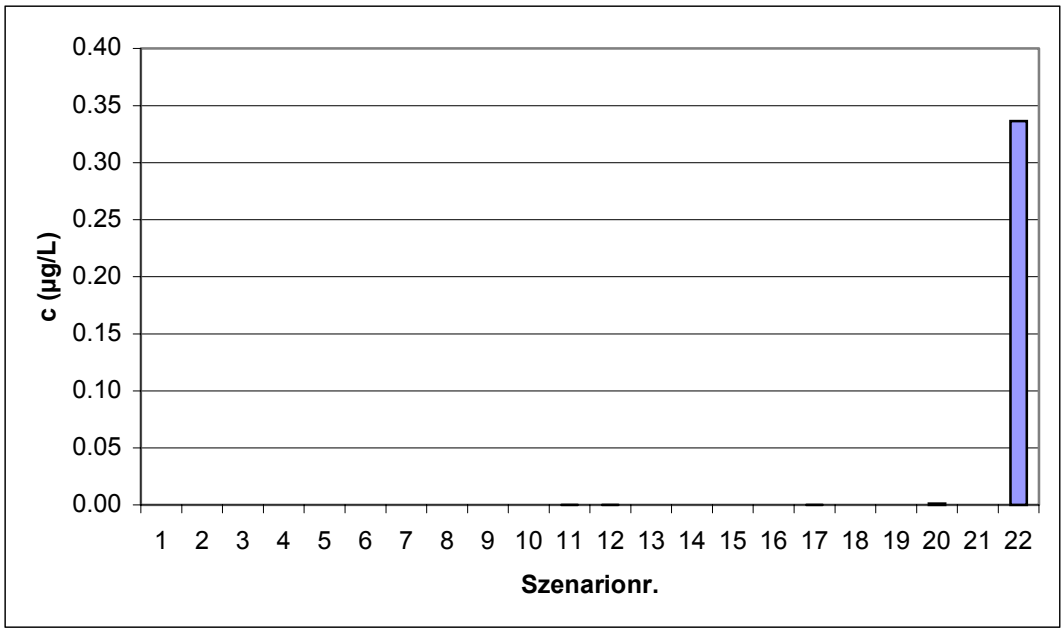


Abbildung 45: Berechnete geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Benzol (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im Mai)

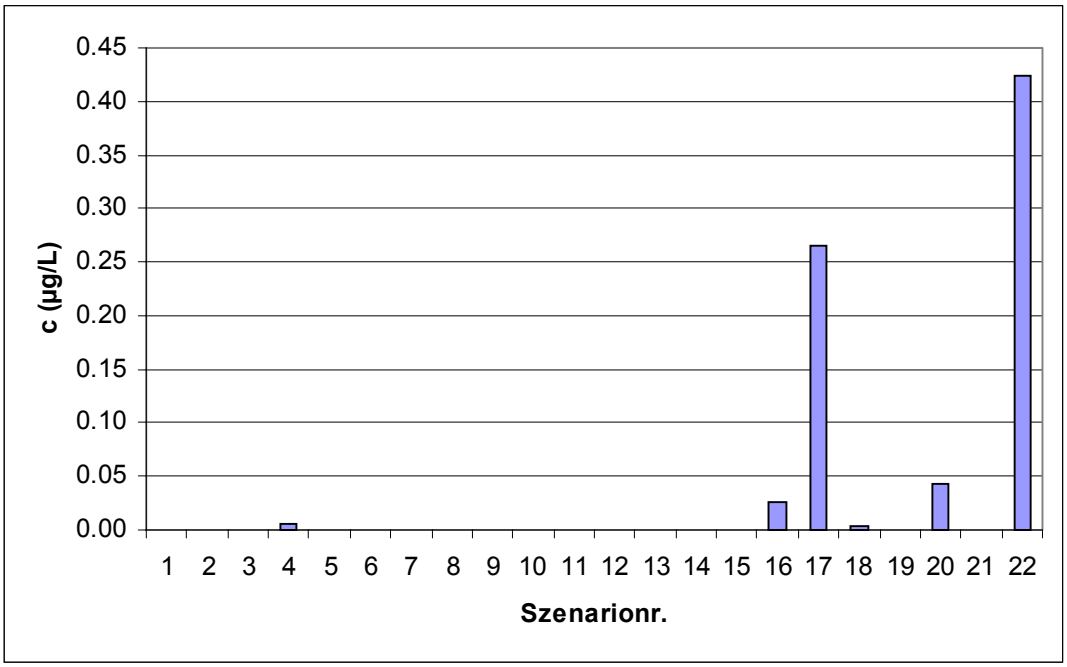


Abbildung 46: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Benzol (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im Mai)

Die beiden folgenden Abbildungen werden die Ergebnisse zu Lindan, einem Pflanzenschutzmittel zusammengefasst (Ausbringung des Reststoffs im Juli). Das Spektrum der Konzentrationen stellt sich völlig anders dar als bei Benzol, denn es werden für eine größere Anzahl von Szenarien ähnliche Konzentrationen berechnet. Die Ursache ist in den

völlig unterschiedlichen physikalisch-chemischen Eigenschaften von Lindan zu suchen. Benzol hat aufgrund seines hohen Dampfdrucks und seiner (im Vergleich zu Lindan) kurzen Halbwertszeit keine lange Verweildauer im Boden. Die Sickerwasserkonzentrationen dieser Substanz sind daher das Ergebnis eines schnellen Stofftransports im Boden. Lindan dagegen sorbiert stärker an der Bodenmatrix (KOC: 1070 L/kg) und wird deutlich schlechter abgebaut (DT50: 1825 d). Unter diesen Bedingungen kann es auch über den langsamen, chromatographischen Transport in tiefere Bodenschichten gelangen. Dieser Stofftransport dominiert aufgrund der hohen effektiven Wasserleitfähigkeiten bei den Szenarien 6 bis 12.

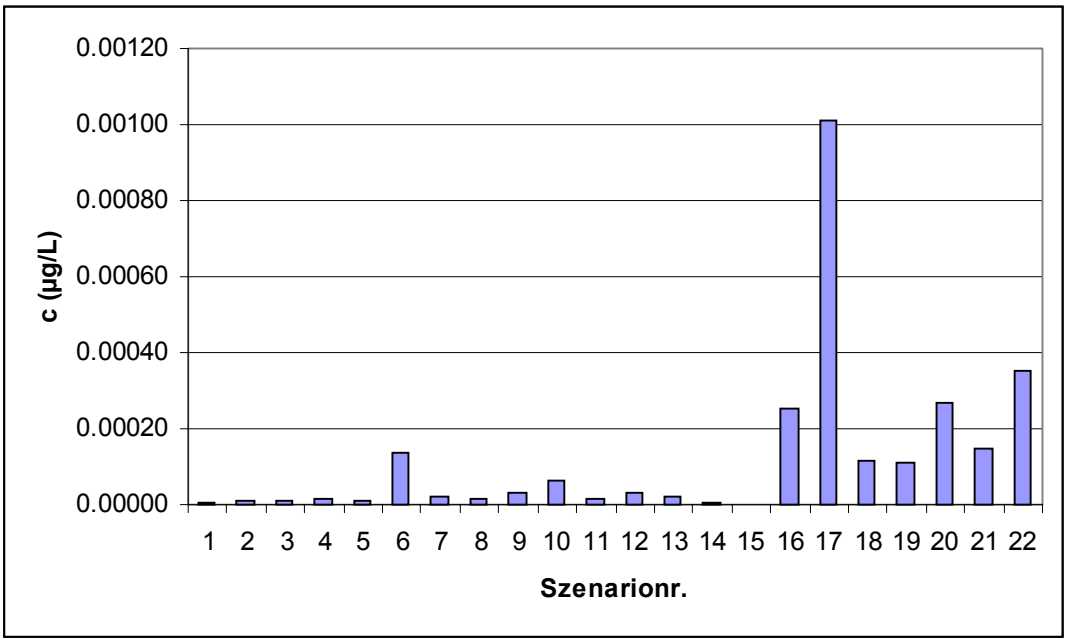


Abbildung 47: Berechnete geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Lindan (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im Juli)

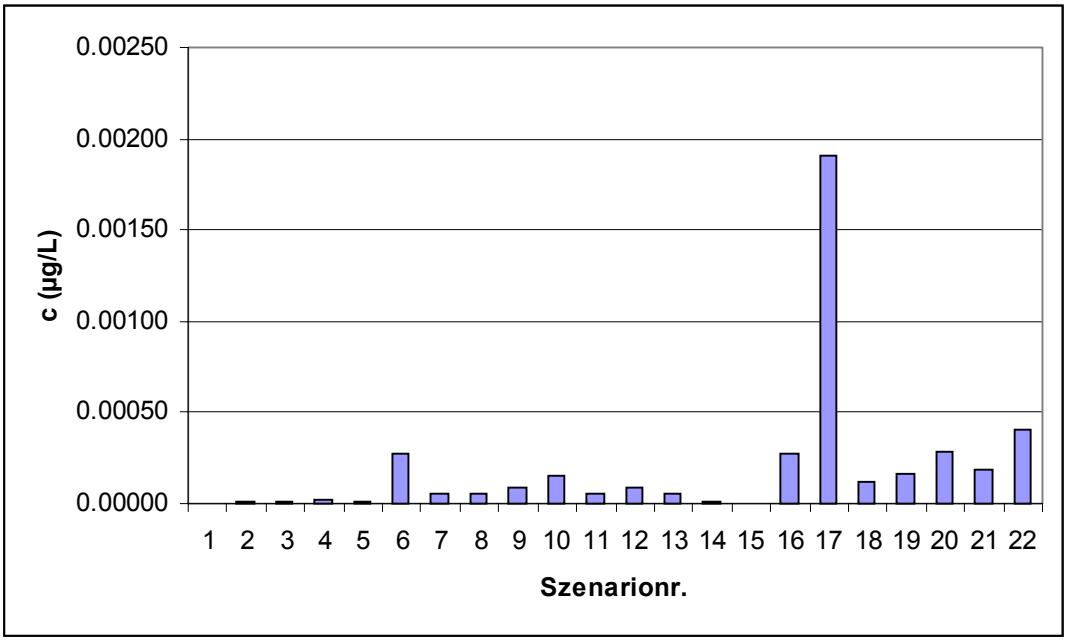


Abbildung 48: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Lindan (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im Juli)

Die beiden folgenden Abbildungen stellen die Ergebnisse zu Tributylzinnoxid dar (Ausbringung des Reststoffs im November). Die für das Verhalten im Boden entscheidenden Eigenschaften dieser Substanz liegen zwischen den beiden vorher diskutierten Substanzen Benzol und Lindan. Dies bestätigt auch das Spektrum der Sickerwasserkonzentrationen. Wie bei Lindan werden hohe Konzentrationen für die Szenarien 16 bis 22 berechnet, jedoch keine Einträge bei den Szenarien 6 bis 12, bei denen der (langsame) chromatographische Stofftransport (Szenarien 6- 12) dominiert.

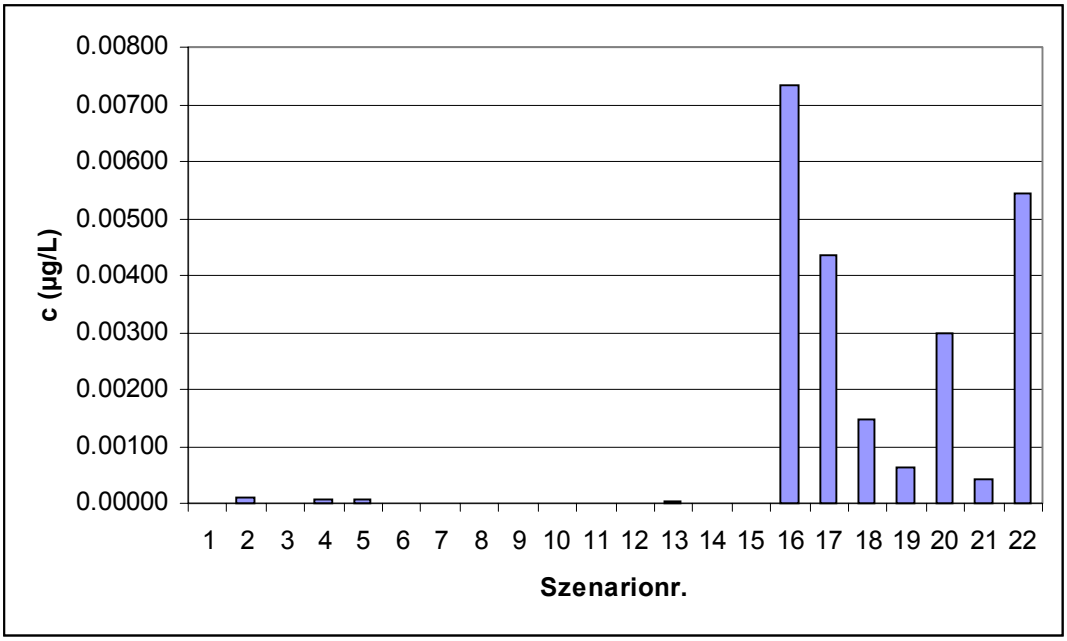


Abbildung 49: Berechnetes geom. Mittel Sickerwasserkonzentration von Tributylzinnoxid (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im November)

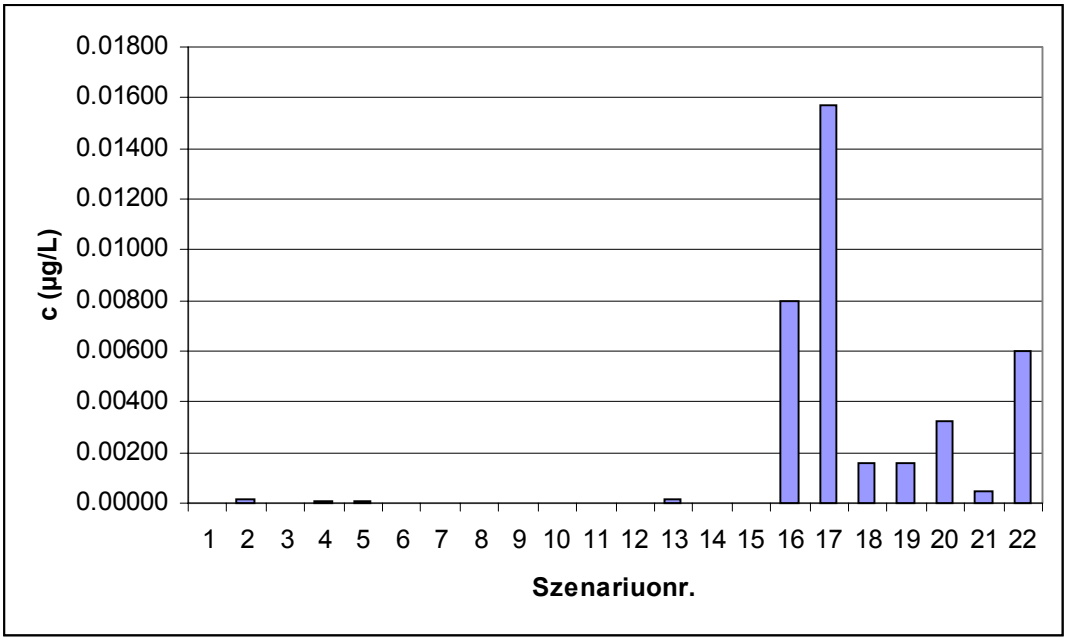


Abbildung 50: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Tributylzinnoxid (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im November)

In den folgenden beiden Abbildungen sind die Ergebnisse zu Decabromdiphenylether bei einer regelmäßigen Ausbringung des Reststoffs im Mai dargestellt. Es fällt auf, dass die geometrischen Mittelwerte der Sickerwasserkonzentrationen für die Szenarien 6 bis12 im Vergleich mit den entsprechenden Konzentrationen für die Szenarien 16 bis 22 sehr

unterschiedlich, die 90. Perzentilen dieser beiden Szenariogruppen dagegen sehr ähnlich ausfallen.

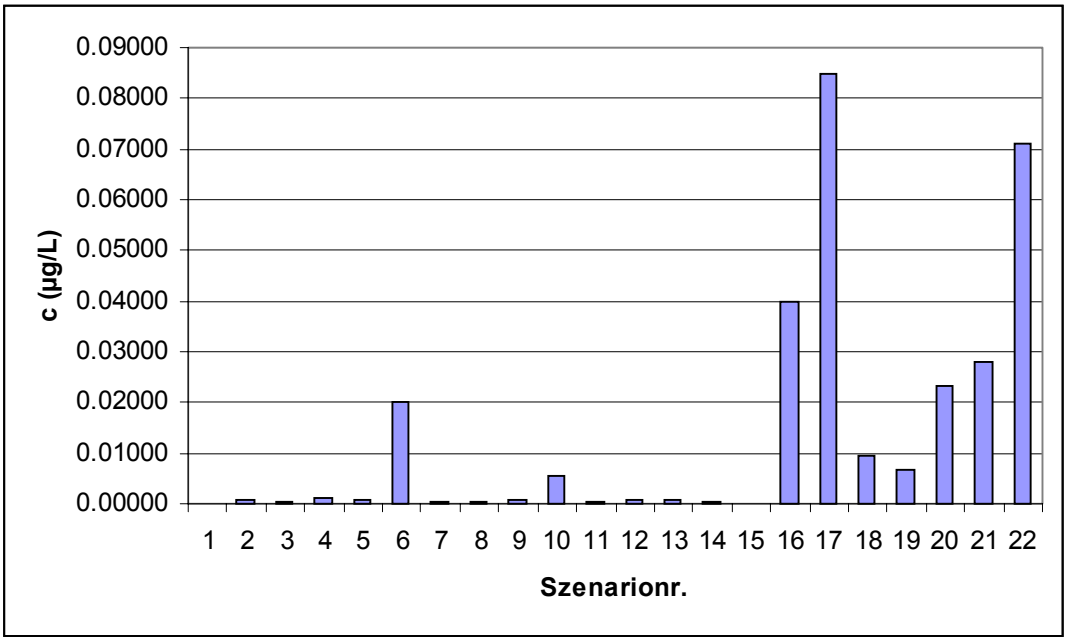


Abbildung 51: Berechnetes geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im Mai)

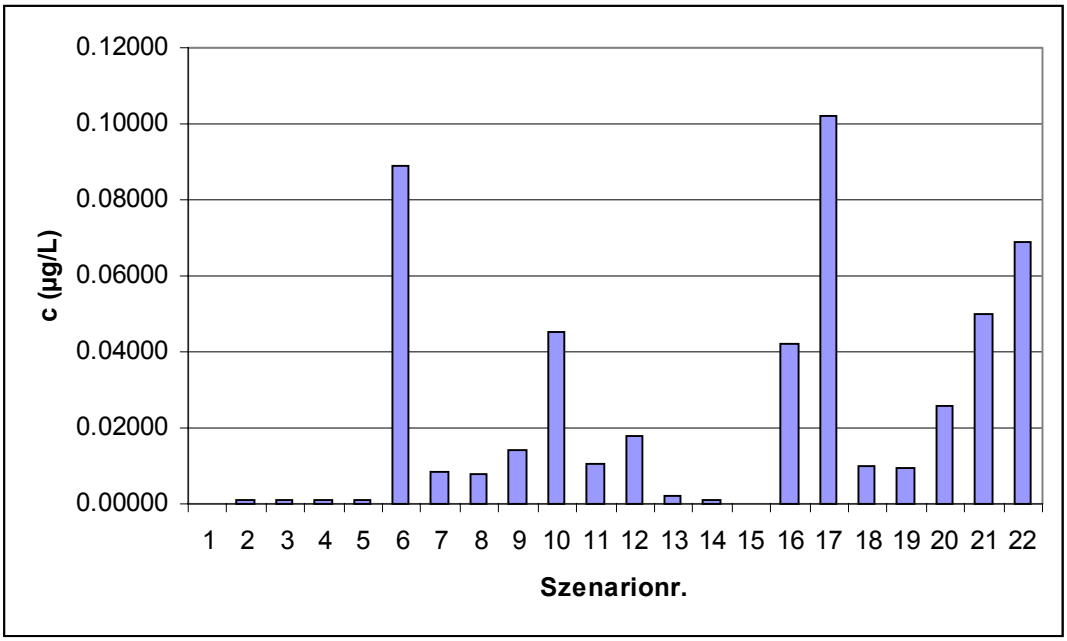


Abbildung 52: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im Mai)

Die Ursache ist in der extremen Sorptionskonstante zu suchen (KOC: 150000 L/kg), die dazu führt, dass die Substanz über sehr lange Zeiträume im Boden verbleibt. Ein Abbau wird durch die hohe Persistenz verhindert (DT50: ca. 20 Jahre).

Wie bereits erwähnt, spielt bei den Szenarien 6 bis 12 der schnelle Stofftransport über Makroporen keine große Rolle, die Substanz wird daher nur sehr langsam in tiefere Bodenschichten transportiert (benötigte Zeit ca. 400 bis 500 Jahre). Bei einer Gesamtsimulationszeit von 1000 Jahren wird dadurch ein sehr kleines geometrisches Mittel der Sickerwasserkonzentration berechnet. Für das 90. Perzentil ist die lange Phase ohne Durchbruch der Substanz unerheblich, und es werden dort vergleichbare Konzentrationen berechnet, wie bei den Szenarien 16 bis 22. Durch den schnellen Stofftransport, der in jenen Szenarien dominiert, werden allerdings nach (relativ) kurzer Zeit bereits geringe Substanzmengen in tiefere Bodenschichten transportiert, die für die in der Abbildung dargestellten geometrischen Mittelwerte verantwortlich sind.

Als letztes Beispiel werden die Ergebnisse der gleichen Substanz Decabromdiphenylether bei einer anderen Ausbringungszeit für den Reststoff (November) zusammengestellt. Die Abbildungen machen deutlich, dass für diese Substanz sehr ähnliche Konzentrationsspektren für beide Zeitpunkte berechnet werden. Bei den extremen Stoffeigenschaften dieser Substanz (sehr starke Persistenz und sehr starke Sorption) und der damit verbundenen geringen Mobilität ist offensichtlich der ursprüngliche Ausbringungszeitpunkt des Reststoffs unerheblich.

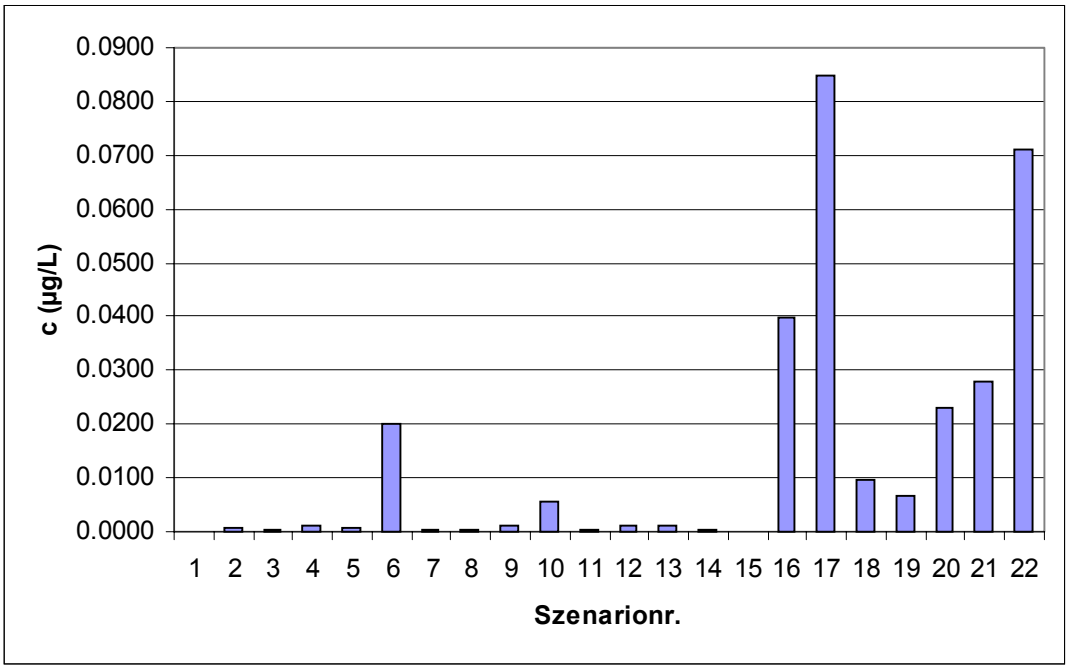


Abbildung 53: Berechnetes geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im November)

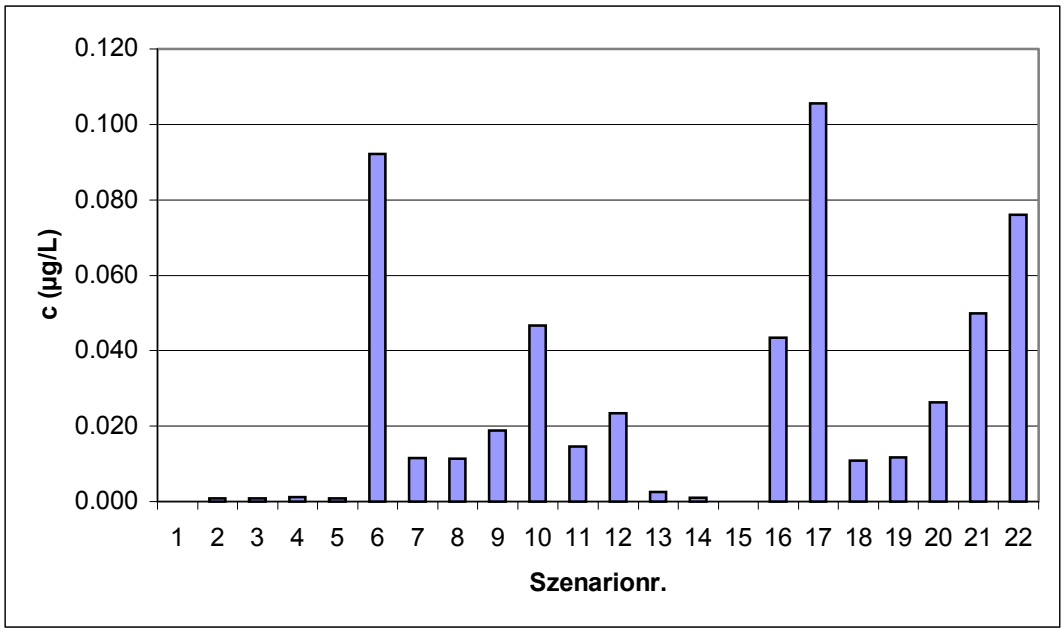


Abbildung 54: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (Stufe 2, Ausbringung des Reststoffs im November)

In Abhängigkeit von den Sorptionseigenschaften der Substanz und dem Versickerungsszenario, wird bei regelmäßiger Applikation das Konzentrationsplateau erst nach vielen Jahren erreicht. Ein exakter Zeitpunkt für das Auftreten des stationäeren Zustands kann nicht angegeben werden, weil das Klima in jedem Jahr variiert wurde. Um dennoch einen groben Anhaltspunkt für die Zeit bis zum Erreichen der mittleren Sickerwasserkonzentrationen anzugeben, ist in der folgenden Tabelle das erstmalige Überschreiten der mittleren jährlichen Sickerwasserkonzentration des letzten (also 1000.) Simulationsjahres für alle Substanzen und alle Szenarien dargestellt.

Die Analyse macht den starken Einfluss der Sorption deutlich. Während für die Mineralölkohlenwasserstoffe mit ihrem relativ geringen Sorptionsvermögen bereits nach wenigen Jahren ein quasi stationärer Zustand auftritt, bei dem die Konzentrationen nur noch um den Mittelwert schwanken, so wird für die Substanzen mit sehr hohen Sorptionskonstanten (z.B. Chorparaffine) dieser Zustand erst nach Hunderten von Jahren erreicht.

Wenn in der Tabelle keine Zahlenangabe aufgeführt ist, so bedeutet dies, dass auch nach 1000 Simulationsjahren noch kein Eintrag im Sickerwasser berechnet werden konnte.

Tabelle 38: Simulationsjahr, in dem zum ersten Mal die jährliche Sickerwasserkonzentration des letzten Simulationsjahres überschritten wurde (regelmäßige Anwendung im Mai)

Nr.	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	-	-	134	247	247	248	249	22	-	-	1000
2	3	10	16	21	21	26	21	1	1	1	1000
3	93	117	159	188	188	198	196	70	71	68	271
4	157	152	57	56	56	59	58	158	1	9	142
5	30	98	149	98	98	88	88	15	1	19	152
6	-	138	120	172	172	200	193	231	-	-	561
7	-	-	-	265	266	343	338	60	-	-	1000
8	-	-	-	282	282	392	377	240	-	-	968
9	-	-	-	348	349	385	381	171	-	-	1000
10	-	-	163	214	214	251	246	32	-	-	591
11	-	-	-	313	313	456	436	219	-	-	969
12	-	-	-	357	355	400	397	188	-	-	1000
13	4	10	17	20	20	25	4	1	1	4	74
14	172	196	203	228	228	250	229	58	71	53	301
15	-	-	-	-	-	-	317	-	-	-	994
16	48	44	4	17	17	22	16	6	1	48	977
17	40	158	164	167	167	171	166	115	113	59	429
18	158	28	29	40	40	43	42	9	3	158	947
19	324	174	97	93	93	94	87	27	4	492	1000
20	47	2	15	20	19	63	62	6	3	48	946
21	9	12	15	42	42	178	43	1	4	8	630
22	41	15	41	41	41	41	41	23	2	2	189

Fortsetzung Tabelle 38: Simulationsjahr, in dem zum ersten Mal die jährliche Sickerwasserkonzentration des letzten Simulationsjahres überschritten wurde (regelmäßige Anwendung im Mai)

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	943	-	-	257	139	6	6	3	6	1	7	1
2	53	7	9	16	1	3	6	6	6	6	6	1
3	227	91	92	196	88	2	2	6	1	22	22	67
4	134	152	148	61	38	3	3	1	1	33	32	1
5	98	133	148	81	20	7	7	1	26	4	7	7
6	282	-	-	206	64	2	2	2	2	2	3	3
7	677	-	-	373	106	1	1	1	1	1	1	1
8	956	-	-	426	240	1	1	1	1	1	1	1
9	664	-	-	400	99	2	2	2	2	1	1	1
10	421	-	-	262	70	3	3	3	11	1	1	1
11	752	-	-	476	207	1	1	1	1	1	1	1
12	632	-	-	422	186	2	2	2	2	1	1	1
13	74	10	12	18	74	1	1	5	1	88	17	1
14	274	159	160	229	40	6	2	6	1	6	9	309
15	799	-	-	382	99	1	1	37	9	3	4	-
16	63	45	3	2	2	1	1	1	1	1	1	1
17	393	155	156	566	2	3	3	3	3	3	3	91
18	289	40	4	44	18	1	1	1	1	1	1	1
19	505	322	172	97	26	2	2	2	2	1	1	1
20	240	2	1	96	7	1	1	1	1	1	1	1
21	629	10	10	97	43	2	2	1	1	1	1	1
22	189	8	5	41	1	12	12	11	1	1	12	2

6.3 Zusammenfassung und Bewertung der Simulationsergebnisse

Die Ergebnisse dieses Kapitels machen die große Komplexität des Transports von Stoffen im Boden unter den unterschiedlichen Klima- und Bodenbedingungen deutlich.

Vergleicht man zunächst die 22 Versickerungsszenarien untereinander, so kann das Szenario 6 mit einer Repräsentanz von etwa 2 % der landwirtschaftlichen Nutzfläche in Deutschland als *worst case* Situation für den chromatographischen Stofftransport angesehen werden. Die höchsten Sickerwasserkonzentrationen bei den vom präferentiellen Fluss dominierten Szenarien werden bei dem extremen Makroporenszenario 17 (Flächenanteil etwa 6 % der landwirtschaftlichen Nutzfläche in Deutschland) berechnet. Die Konzentrationen, die dagegen für das Szenario 10 berechnet werden, welches die höchste Flächenrepräsentanz aller Szenarien aufweist (20 % der landwirtschaftlichen Nutzfläche, kein präferentieller Fluss), sind etwa halb so groß, wie die entsprechenden Ergebnisse für das *worst case* Szenario 6.

Die Ergebnisse machten außerdem deutlich, dass das Spektrum der Sickerwasserkonzentrationen bei den verschiedenen Szenarien bei einer Substanz um mehr als 4 Größenordnungen schwanken kann.

Vergleicht man die 23 untersuchten Substanzen hinsichtlich ihres Versickerungspotenzials, so werden für die Chlorparaffine und Decabromdiphenylether die höchsten Werte berechnet. Allerdings sind dies gleichzeitig auch die Substanzen mit den höchsten Sorptionskonstanten und der damit verbundenen geringsten Mobilität. Erst nach mehreren hundert Reststoffaufbringungen werden für diese Substanzen nennenswerte Konzentrationen im Sickerwasser berechnet. Da eine experimentelle Überprüfung der Ergebnisse unter diesen Bedingungen völlig ausgeschlossen ist, dürfen diese Prognosen nicht überbewertet werden.

Für die verschiedenen Bestandteile der Mineralölkohlenwasserstoffe werden ebenfalls relativ hohe Konzentrationen berechnet. Dies gilt unabhängig davon, ob bei den Szenarien der chromatographische oder der schnelle Stofftransport dominiert. Die mittleren Konzentrationen liegen allerdings stets unterhalb von 0.01 µg/L.

Dagegen konnten Sickerwasserkonzentrationen für Benzo(a)pyren, Tributylzinnoxid, Nonylphenol und Di-(2-ethylhexyl)phthalate (DEHP) nur über den schnellen Stofftransport im Boden berechnet werden. Aufgrund der stoffinhärenten Eigenschaften (vor allem Sorption und Abbaubarkeit) ist für diese Stoffgruppe keine Verlagerung allein aufgrund des chromatographischen Stofftransports zu erwarten.

Für die in dieser Stoffliste berücksichtigten PCB konnten weder unter den Bedingungen des chromatographischen noch unter denen des präferentiellen Stofftransports Sickerwasserkonzentrationen berechnet werden.

7 Das Programm MCPELMO 2.0 zur Berechnung möglicher Grundwassereinträge

7.1 Allgemeines

Der Einsatz eines Modells zur Abschätzung der Grundwassergefährdung durch organische Stoffe aus Reststoffen hängt ganz entscheidend davon, ob es gelingt, die komplizierte Berechnung der Gefährdung anwenderfreundlich zu gestalten. Dies wurde zum einen durch die Zusammenstellung einer großen Zahl von Nomogrammen versucht, mit der Anwender die Methode manuell durchführen bzw. verfolgen kann. Zusätzlich wurde ein Computermodell entwickelt (*MCPELMO 2.0*), mit dem eine anwenderfreundliche Berechnung des Gefährdungspotenzials für beliebige Inhaltsstoffe von Reststoffen möglich ist. Das vorliegende Programm verwendet Elemente des Computerprogramms *MCPELMO 1.0*, das im Rahmen des Forschungvorhabens 106 02 89 entwickelt wurde. Es ist allerdings komplett überarbeitet worden und weist einen völlig neuen Satz von Versickerungsszenarien auf, die den Leitprofilen der Bodenübersichtskarte der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe entnommen wurden. Das Programm ist als echte *MS-Windows*-Anwendung konzipiert und wurde mit Hilfe von *Visual Basic 4.0* programmiert. Ausgehend von den 22 in diesem Vorhaben entwickelten Versickerungsszenarien können mit Hilfe von *MCPELMO 2.0* Abschätzungen für beliebige Schadstoffe durchgeführt werden. Sie basieren auf Ergebnissen des Computerprogramms PELMO, das offiziell zur Berechnung des Versickerungspotenzials von Pflanzenschutzmitteln eingesetzt wird und am Fraunhofer-Institut für Umweltchemie und Ökotoxikologie entwickelt wurde. Neben den zu erwartenden Mittelwerten berechnet *MCPELMO 2.0* auch Schwankungsbreiten für die verschiedenen Szenarien. *MCPELMO 2.0* führt allerdings keine eigenen Simulationen durch, sondern es wird basierend auf den Ergebnissen dieses Vorhabens die wahrscheinliche Streuung situationsbezogen abgeschätzt. Da es sich bei *MCPELMO 2.0* um eine echte *MS-Windows*-Anwendung handelt, sind direkte interaktive Eingabemöglichkeiten in den Ablauf des Programms möglich; sämtliche Eingabedaten können mit dem Programm bearbeitet und in einer kleinen Datenbank gespeichert werden. Es können Simulationen sowohl für einzelne Schadstoffe als auch für komplette Listen durchgeführt werden. Die Ergebnisse des Programms werden – wie die wichtigsten Eingabedaten – sowohl in tabellarischer Form als auch mit Hilfe von Diagrammen zusammengestellt. Zusätzlich ist eine geografische Darstellung möglicher Belastungen mit und ohne Berücksichtigung landwirtschaftlicher Nutzflächen in Deutschland möglich. Alle Ergebnisse können direkt über einen Drucker ausgegeben werden oder alternativ über die Zwischenablage von *MS-Windows* in anderen

Anwendungen (Textverarbeitungssysteme, Grafikprogramme) genutzt beziehungsweise individuell formatiert werden.
Das Programm *MCPELMO 2.0* wurde mit einer englischen Benutzeroberfläche versehen. Eine Benutzeranleitung zu diesem Programm findet man in Anhang 3.

7.2 Die Berechnungsmethodik

Im Unterschied zu den ausführlichen Simulationen, die in Kapitel 6 vorgestellt wurden, werden bei dem Programm *MCPELMO 2.0* die Konzentrationen im Sickerwasser mit Hilfe von Interpolationen basierend auf einer großen Anzahl vorher durchgeführter PELMO-Simulationen berechnet. Diese zuvor durchgeführten Rechnungen entsprechen in ihrer Genauigkeit den ausführlichen Simulationen der Stufe 2 (Simulationszeit pro Simulation 1000 Jahren unter Berücksichtigung der lokalen Klimaschwankungen). Sie wurden für alle 22 Szenarien mit jeweils drei Ausbringungszeitpunkten (Mai, Juli und November) durchgeführt. Die Simulationen folgten dabei hinsichtlich der übrigen Simulationsbedingungen einem festen Schema, das für jede Variation des Szenarios (Versickerungsregion und Ausbringungszeitpunkt) identisch war.

7.2.1 Umfang der ausführlichen Simulationsrechnungen

Konzentration des Chemikalie im Reststoff

Für alle Simulationen wurde von der gleichen Konzentration der Chemikalie im Reststoff ausgegangen (600 mg/kg). Dies entspricht einer Rate von 1 kg/ha, wenn jedes Jahr 1.6 Tonnen des Reststoffs auf die landwirtschaftliche Nutzfläche ausgebracht werden.

Sorptionskonstanten und Abbauraten

Für jedes Szenario (Boden-Klimabedingung mit 3 Ausbringungszeitpunkten) wurden die Sickerwasserkonzentrationen und ihre Schwankungen für alle Kombinationen von je 9 verschiedenen Sorptionskonstanten und 9 Halbwertszeiten als Stützwerte für die spätere Interpolation des “Konzentrationsfaktors” berechnet. Im einzelnen fanden folgende KOC- und DT50-Werte Berücksichtigung:

- Sorptionskonstante bezogen auf organischen Kohlenstoffgehalt im Boden (L/kg):
  1, 10, 30, 60, 100, 200, 300, 500 und 5000
- Halbwertszeit im Boden DT50 (d):
  1, 5, 10, 20, 30, 50, 100, 200, 2000

Für jedes Szenario (Applikationszeitpunkt und Versickerungsszenario) wurden also insgesamt 81 Kombinationen von Sorptions- und Abbaukonstante berücksichtigt.
Bei diesen Simulationen blieb eine Verflüchtigung aus dem Boden unberücksichtigt (Henry-Konstante = 0).
Für alle Simulationen wurden anschließend die geometrische Standardabweichung und der geometrische Mittelwert berechnet.

Henry-Konstante

Zur Berücksichtigung des Einflusses der Henry-Konstante für die Verflüchtigung aus dem Boden wurden Simulationen mit geringerer Simulationsdauer (25 Jahre unter Vernachlässigung der ersten 15 Versuchsjahre) durchgeführt. Bei diesen Simulationen wurden für alle Kombinationen aus Versickerungsszenario und Ausbringungszeitpunkt die Parameter KOC-Wert, DT50 und Henry-Konstante zur späteren Bestimmung des „Henryfaktors“ wie folgt variiert:

- Sorptionskonstante bezogen auf organischen Kohlenstoffgehalt im Boden (L/kg):
  1, 10, 30, 60, 100, 200, 300, 500
- Halbwertszeit im Boden DT50 (d):
  1, 5, 10, 20, 30, 50, 100, 200
- Henry-Konstante (-):
  0,1 10^{-6},1 10^{-4},1 10^{-3},1 10^{-2},01,1,10

Insgesamt ergaben sich also für jede Situation (Sickerwasserszenario und Ausbringungszeitpunkt) 8 * 8 * 8 = 512 Simulationen. Die bei diesen Simulationen berechneten mittleren Konzentrationen im Sickerwasser (Simulationsjahre 16 bis 25) wurden dann jeweils auf das Ergebnis der entsprechenden Kombination aus Sorption und Halbwertszeit und einer Henry-Konstante = 0 bezogen. Die so erhaltenen Verhältniszahlen dienten als Basis für eine Abschätzung des vom Boden in die Luft verflüchtigten Substanzanteils.

Berücksichtigung extremer Substanzen hinsichtlich Sorption und Abbau

Zwar deckt das Simulationsraster mit KOC-Werten bis 5000 und Halbwertszeiten bis 2000 Tage bereits einen großen Teil der zu erwartenden physikalisch-chemischen Eigenschaften der Stoffe ab, jedoch soll gewährleistet sein, dass auch Stoffe mit extremeren Eigenschaften hinsichtlich Sorption und Persistenz mit dem Computerprogramm simuliert werden können. Daher wurden für jedes Szenario zwei Simulationen durchgeführt, die die Basis für eine

zusätzliche Interpolation (ev. auch Extrapolation) dieser Substanzen darstellen sollen. Konkret wurden für diese Situation folgende Substanzeigenschaften modelliert:

- KOC: 10^7 L/kg, DT50: 2000 Tage, Henry-Konstante = 0
- KOC: 5000 L/kg, DT50: 40000 Tage, Henry-Konstante = 0

Da bei derart langlebigen und stark zur Bodensorption neigenden Substanzen der ursprüngliche Ausbringungszeitpunkt für den Reststoff nur eine untergeordnete Rolle spielt, wurden die Simulationen nur für den Simulationszeitpunkt Mai durchgeführt.

7.2.2 Erläuterungen zur Interpolation

Normalerweise werden natürlich die Stoffe, die mit *MCPELMO 2.0* berechnet werden sollen, nicht die gleichen physikalisch-chemischen Eigenschaften bzw. Bodenkonzentrationen aufweisen, wie die soeben beschriebenen Simulationen. Daher wird zunächst auf der Basis des aktuellen KOC-Werts und der aktuellen Halbwertszeit DT50 der "Konzentrationsfaktor KF" (Der Logarithmus der mittleren Sickerwasserkonzentration für die Standardkonzentration im Reststoff) bestimmt. Konzentrationsfaktoren liegen für 81 Stützwerte pro Szenario vor und werden für die aktuellen Substanzen durch lineare Interpolation abgeschätzt. In gleicher Weise wird der aktuelle "Henryfaktor HF" aus den vorher beschriebenen 512 Stützwerten durch lineare Interpolation unter Berücksichtigung von Henry-Konstante, Sorptionskonstante und Halbwertszeit abgeschätzt. Schließlich wird eine lineare Korrektur zur Berücksichtigung der tatsächlichen Rate der Substanz, die jährlich auf die landwirtschaftliche Nutzfläche gelangt, vorgenommen. Sie wird nach folgender Gleichung berechnet:

$$R_S = c * R_R / 1000.0 \quad (32)$$

R_S: jährliche Menge der Substanz, die mit dem Reststoff ausgebracht wird [kg/(ha Jahr)]
c_S: Konzentration der Substanz im Reststoff [mg/kg]
R_R: jährliche Aufbringungsrate für den Reststoff [t/(ha Jahr)]

Die anschließende Berechnung der mittleren jährlichen Sickerwasserkonzentration erfolgt unter Berücksichtigung der drei Parameter Konzentrationsfaktor, Henryfaktor und Eintragsrate nach der folgenden Gleichung:

$$c_{SW} = R_s * HF * 10^{KF} \quad (33)$$

c_{SW}: mittlere jährliche Sickerwasserkonzentration der Substanz [µg/L]
R_S: jährliche Menge der Substanz, die mit dem Reststoff ausgebracht wird [kg/(ha Jahr)]
HF: Henryfaktor [-]
KF: Konzentrationsfaktor [-]

Zur Berücksichtigung der Schwankungsbreite wird zusätzlich die Standardabweichung des Konzentrationsfaktors aus entsprechenden Tabellen interpoliert (Im Anhang 2 als "Schwankungsfaktor S" bezeichnet). Mit Hilfe dieses Faktors und einer für jede Perzentile charakteristischen Zahl wird dann das Perzentil der jährlichen Sickerwasserkonzentration nach folgender Gleichung berechnet:.

$$c_{SWP} = c_{SW} * 10^{(S * P)} \quad (34)$$

c_{SW}: mittlere jährliche Sickerwasserkonzentration der Substanz [µg/L]
c_{SWP}: Perzentil der jährlichen Sickerwasserkonzentration der Substanz [µg/L]
S: Schwankungsfaktor[-]
P: Perzentilenfaktor.

In der folgenden Tabelle sind die von MCPELMO verwendeten Perzentilenfaktoren zusammengestellt:

Tabelle 39: Perzentilenfaktoren für einige Perzentilen

Perzentil	Perzentilenfaktor
50	0
75	0.67448975
80	0.84162123
85	1.03643339
90	1.28155157
95	1.64485363
99	2.32634787

Die Berechnung extremer Substanzen hinsichtlich Sorption und Abbau

Für Substanzen, die einen höheren KOC-Wert aufweisen als 5000 L/kg oder deren Halbwertszeit oberhalb von 2000 Tage liegt (maximalen Werte der berechneten Tabellenwerte) wird der Grenzwert der Sorption und des Abbaus verwendet (also KOC = 5000 L/kg bzw. DT50 = 2000 d).

Für den Fall, dass sowohl Halbwertszeit als auch die Sorption oberhalb der maximalen Tabellenwerte liegen, wird eine szenarioabhängige zweistufige lineare Interpolation des Konzentrationsfaktors auf der Basis von Simulationsergebnissen durchgeführt. Dazu werden zusätzliche Simulationsrechnungen verwendet, die bei einem KOC von 10 000 000 L/kg und einer DT50 von 2000 Tagen bzw. bei einem KOC von 5000 L/kg und einer Halbwertszeit von 40 000 Tagen durchgeführt wurden.

Zunächst wird dabei die extreme Sorption berücksichtigt. Unter Verwendung der tatsächlichen Sorptionskonstante der Substanz wird linear zwischen dem KOC von 5000 L/kg und dem KOC von 10^7 L/kg interpoliert. Die Halbwertszeit wird dabei zunächst auf 2000 Tage gesetzt. Danach wird der Einfluss der Halbwertszeit berücksichtigt, indem unter Verwendung der Halbwertszeit der Substanz zwischen der Halbwertszeit von 2000 Tagen und 40 000 Tagen linear interpoliert wird. Eine Verflüchtigungskorrektur findet aufgrund der größeren Unsicherheit bei diesen Stoffen grundsätzlich nicht statt.

Da auch die Verflüchtigung der weniger persistenten Stoffe (Halbwertszeit kürzer als 2000 Tage) oberhalb von einem KOC-Wert von 5000 L/kg, extrapoliert werden muss, ist ihre Abschätzung mit einem erhöhten Fehler verbunden. Im Sinne einer konservativen Abschätzung sollte daher der Pfad Verflüchtigung für Stoffe ab einem KOC von 10000 L/kg nicht berücksichtigt werden. Dies kann dadurch erfolgen, dass der Wert der Henrykonstante auf „0“ gesetzt wird.

8 Die Berechnung von Sickerwasserkonzentrationen mit *MCPELMO 2.0*

Im folgenden werden die Ergebnisse des Simulationsprogramms MCPELMO vorgestellt. Wie bereits erläutert, ist *MCPELMO 2.0* in der Lage, innerhalb von Sekundenbruchteilen Abschätzungen der Versickerungsneigung unter Berücksichtigung von Klimaschwankungen durchzuführen. Diese Methodik ist allerdings mit zustäzlichen Fehlern verbunden, weil auf die Durchführung einer aktuellen PELMO-Simulation verzichtet wird. Es werden im folgenden Ergebnisse mit der gleichen Stoffliste vorgestellt, die bereits in Kapitel 6.1 verwendet wurde (siehe Tabelle 28). Ein direkter Vergleich mit den ausführlichen Simulationsrechnungen der Stufe 2 ist also leicht möglich. Weitere Informationen zu den physikalisch-chemischen Daten der Substanzen findet man in Kapitel 6.2.

8.1 Ergebnisübersicht

In den folgenden Tabellen sind alle Ergebnisse der *MCPELMO 2.0* zusammengestellt.

Tabelle 40: Ergebnisse der *MCPELMO 2.0*- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Mai (Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L) (1. Teil)

Nr.	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0.0001	0	0.001	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0.0001	0.0002	0	0.0008	0
5	0	0	0	0	0	0	0.0001	0.0001	0	0.0014	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0001
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	0	0	0	0	0	0	0.0001	0.0001	0	0.0033	0
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0002
16	0	0	0	0	0	0	0.0014	0.005	0.0019	0.4452	0.0001
17	0	0	0	0	0	0.0001	0.0046	0.0049	0.0004	0.1035	0.0001
18	0	0	0	0	0	0	0.0004	0.0014	0.0003	0.067	0
19	0	0	0	0	0	0	0.0004	0.0008	0	0.0036	0
20	0	0	0	0	0	0	0.001	0.0032	0.0026	0.3317	0
21	0	0	0	0	0	0	0.0002	0.0004	0	0.0118	0
22	0	0	0	0	0	0.0001	0.0037	0.007	0.0057	0.8319	0.0001

Fortsetzung Tabelle 40: Ergebnisse der *MCPELMO 2.0*- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Mai (Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L)

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	0	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
2	0.0011	0	0	0	0.0001	0.0001	0	0	0.0022	0.0043	0.0018	0
3	0.0003	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0.001	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
5	0.0007	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
6	0.0061	0	0	0	0.0003	0	0	0	0	0.0001	0	0
7	0.0001	0	0	0	0.0002	0	0	0	0	0.0001	0	0
8	0.0001	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0.0001	0	0
9	0.0003	0	0	0	0.0002	0	0	0	0	0.0003	0	0
10	0.0018	0	0	0	0.0002	0	0	0	0	0.0005	0	0
11	0.0001	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0.0001	0	0
12	0.0003	0	0	0	0.0002	0	0	0	0	0.0003	0	0
13	0.0018	0	0	0	0.0005	0	0	0	0	0	0	0
14	0.0005	0	0	0	0.0001	0.0005	0.0001	0	0.0222	0.0001	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	0.0178	0.0021	0.0034	0.0001	0.0003	0.1644	0.0649	0.162	0.623	0.009	0.1007	0.0058
17	0.0316	0.0013	0.0023	0.0004	0.001	0.1107	0.0239	0.0243	0.6198	0.1446	0.1113	0.0004
18	0.0073	0.0004	0.0006	0	0.0002	0.0062	0.0013	0.001	0.035	0.0063	0.0231	0
19	0.0061	0	0.0001	0	0.0004	0	0	0	0	0	0	0
20	0.0126	0.0007	0.0011	0.0001	0.0004	0.06	0.0242	0.0975	0.1739	0.006	0.0414	0.0089
21	0.0138	0	0.0001	0	0.0003	0	0	0	0	0.0001	0.0002	0
22	0.0175	0.0043	0.006	0.0003	0.0004	1.5688	0.3437	0.7356	2.4737	0.4475	0.5723	0.0172

Tabelle 41: Ergebnisse der *MCPELMO 2.0*- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Juli (Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L) (1. Teil)

Nr.	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0.0001	0.0001	0	0.0046	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0	0.0001	0	0.0002	0
5	0	0	0	0	0	0	0	0.0001	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0001
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0002
16	0	0	0	0	0	0	0.0013	0.0056	0.0003	0.2458	0.0001
17	0	0	0	0	0	0	0.0007	0.0047	0	0.0015	0.0001
18	0	0	0	0	0	0	0.0004	0.0016	0	0.0407	0
19	0	0	0	0	0	0	0	0.0006	0	0.0001	0
20	0	0	0	0	0	0	0.0011	0.0037	0.0007	0.2387	0
21	0	0	0	0	0	0	0.0003	0.0005	0	0.0116	0
22	0	0	0	0	0	0.0001	0.0024	0.0063	0.0017	0.3317	0.0001

Fortsetzung Tabelle 41: Ergebnisse der *MCPELMO 2.0*- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Juli (Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L)

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	0	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
2	0.0011	0.0001	0.0001	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
3	0.0003	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0.001	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
5	0.0007	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0.0061	0	0	0	0.0003	0	0	0	0	0.0006	0	0
7	0.0001	0	0	0	0.0002	0	0	0	0	0.0001	0	0
8	0.0001	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0.0001	0	0
9	0.0003	0	0	0	0.0002	0	0	0	0	0.0003	0	0
10	0.0018	0	0	0	0.0002	0	0	0	0	0.0009	0	0
11	0.0001	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0.0001	0	0
12	0.0003	0	0	0	0.0002	0	0	0	0	0.0003	0	0
13	0.0018	0	0	0	0.0002	0	0	0	0.0018	0.0001	0	0
14	0.0005	0	0	0	0.0001	0	0	0	0.0052	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	0.0178	0.0005	0.0013	0	0.0004	0	0	0	0	0.0001	0.0004	0
17	0.0316	0	0	0	0.0008	0	0	0	0	0	0	0
18	0.0073	0.0001	0.0002	0	0.0003	0.0001	0	0	0.0013	0.0004	0.0001	0
19	0.0061	0	0	0	0.0003	0.3171	0.0639	0.0412	0.0528	0.0023	0.0002	0
20	0.0126	0.0003	0.0007	0	0.0004	0.0044	0.0007	0.0004	0.0269	0.0072	0.0021	0.0001
21	0.0138	0	0	0	0.0003	0.0002	0	0	0.0034	0.0007	0	0
22	0.0175	0.0016	0.0021	0.0001	0.0003	0.377	0.0883	0.1419	0.7926	0.1475	0.185	0.005

Tabelle 42: Ergebnisse der *MCPELMO 2.0*- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im November (Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L) (1. Teil)

Nr.	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0.0001	0.0002	0	0.004	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0.0001	0.0002	0	0.0011	0
5	0	0	0	0	0	0	0	0.0001	0	0.0001	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0001
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	0	0	0	0	0	0	0	0.0001	0	0	0
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0002
16	0	0	0	0	0	0	0.0018	0.0114	0.0034	0.7883	0.0001
17	0	0	0	0	0	0.0001	0.0061	0.0131	0.0011	0.3838	0.0001
18	0	0	0	0	0	0	0.0007	0.003	0.0002	0.1394	0
19	0	0	0	0	0	0	0.0005	0.0016	0	0.0177	0
20	0	0	0	0	0	0	0.0018	0.0062	0.0038	0.798	0
21	0	0	0	0	0	0	0.0004	0.0009	0	0.0441	0
22	0	0	0	0	0	0.0001	0.003	0.0095	0.0012	0.7145	0.0001

Fortsetzung Tabelle 42: Ergebnisse der *MCPELMO 2.0*- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Nov. (Mittelwerte im Sickerwasser in µg/L)

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	0	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
2	0.0011	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
3	0.0003	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0.001	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
5	0.0007	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
6	0.0061	0	0	0	0.0003	0	0	0	0.0001	0	0	0
7	0.0001	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0.0002	0	0
8	0.0001	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0.0002	0	0
9	0.0003	0	0	0	0.0002	0	0	0	0	0.0005	0	0
10	0.0018	0	0	0	0.0003	0	0	0	0	0.0003	0	0
11	0.0001	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0.0002	0	0
12	0.0003	0	0	0	0.0002	0	0	0	0	0.0007	0	0
13	0.0018	0	0	0	0.0003	0	0	0	0	0	0	0
14	0.0005	0	0	0	0.0002	0	0	0	0.001	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	0.0178	0.0021	0.0025	0.0001	0.0005	0.6022	0.1477	0.3139	1.0891	0.188	0.291	0.0119
17	0.0316	0.0007	0.0018	0.0001	0.0013	0.0974	0.0102	0.0055	0.0817	0.0316	0.0088	0.0001
18	0.0073	0.0001	0.0002	0	0.0003	0.0038	0.0007	0.0011	0.0058	0.0047	0.0051	0
19	0.0061	0.0001	0.0003	0	0.0004	0.0005	0.0001	0.0001	0.0004	0.0005	0.0008	0
20	0.0126	0.0008	0.0013	0	0.0005	0.3233	0.0765	0.2112	0.4798	0.0802	0.1136	0.0157
21	0.0138	0	0.0001	0	0.0004	0	0	0	0	0	0	0
22	0.0175	0.0005	0.0015	0	0.0004	0	0	0	0	0	0	0

Tabelle 43: Ergebnisse der *MCPELMO 2.0*- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Mai (90. Perz. der Sickerwasserkonz. in µg/L) (1. Teil)

Nr.	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0.0002	0	0.0026	0.0001
3	0	0	0	0	0	0	0	0.0001	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0.0001	0.0003	0	0.002	0
5	0	0	0	0	0	0	0.0002	0.0002	0	0.0038	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0006
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0013
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0071
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0007
13	0	0	0	0	0	0	0.0004	0.0004	0	0.0234	0
14	0	0	0	0	0	0	0	0.0002	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0564
16	0	0	0	0	0	0	0.0016	0.0067	0.005	0.7505	0.0001
17	0	0	0	0.0002	0.0002	0.0006	0.0222	0.0216	0.002	0.3186	0.0002
18	0	0	0	0	0	0	0.0004	0.0019	0.0008	0.1088	0.0001
19	0	0	0	0	0	0	0.0018	0.0028	0	0.0091	0
20	0	0	0	0	0	0	0.0011	0.0037	0.0056	0.4996	0
21	0	0	0	0	0	0	0.0003	0.0006	0.0001	0.02	0.0001
22	0	0	0	0.0001	0	0.0001	0.0042	0.0083	0.0078	1.0338	0.0001

Fortsetzung Tabelle 43: Ergebnisse der *MCPELMO 2.0*- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Mai (90. Perz. der Sickerwasserkonz.[µg/L])

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	0.0006	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0.0001	0	0
2	0.0033	0	0	0	0.0001	0.0134	0.0019	0.0011	0.018	0.0248	0.0141	0
3	0.0018	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0.0026	0	0	0	0.0001	0	0	0	0.0002	0.0002	0	0
5	0.0024	0	0.0001	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
6	0.2574	0	0	0	0.0003	0	0	0	0.0001	0.0001	0	0
7	0.0119	0	0	0	0.0018	0	0	0	0	0.0003	0	0
8	0.0103	0	0	0.0001	0.0026	0	0	0	0	0.0004	0	0
9	0.0225	0	0	0	0.0007	0	0	0	0	0.0009	0	0
10	0.1378	0	0	0	0.0003	0	0	0	0	0.001	0	0
11	0.0199	0	0	0.0002	0.0025	0	0	0	0	0.0004	0	0
12	0.0415	0	0	0	0.0007	0	0	0	0	0.0008	0	0
13	0.0105	0	0.0001	0	0.003	0	0	0	0	0	0	0
14	0.024	0	0	0	0.0009	0.0938	0.0137	0.0003	0.8367	0.0025	0.0007	0
15	0.0009	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	0.0217	0.0025	0.004	0.0001	0.0004	0.9655	0.288	0.7696	1.735	0.0238	0.2555	0.0137
17	0.1303	0.0046	0.0084	0.0023	0.0056	2.2047	0.3202	0.3587	4.0186	0.9205	0.6673	0.0013
18	0.0105	0.0004	0.0007	0	0.0003	0.0389	0.0063	0.0058	0.0808	0.0125	0.0524	0.0001
19	0.032	0.0001	0.0002	0	0.0016	0	0	0	0	0	0	0
20	0.0155	0.0008	0.0012	0.0001	0.0004	0.2053	0.0786	0.329	0.3476	0.01	0.0837	0.0162
21	0.0383	0	0.0001	0	0.0004	0	0	0	0.0001	0.0001	0.0005	0
22	0.0193	0.0049	0.0068	0.0003	0.0005	1.9535	0.4365	1.0375	3.1097	0.554	0.7347	0.0236

Tabelle 44: Ergebnisse der *MCPELMO 2.0*- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Juli (90. Perz. der Sickerwasserkonz. in µg/L) (1. Teil)

Nr.	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0.0002	0	0.0026	0.0001
3	0	0	0	0	0	0	0	0.0001	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0.0001	0.0003	0	0.002	0
5	0	0	0	0	0	0	0.0002	0.0002	0	0.0038	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0006
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0013
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0071
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0007
13	0	0	0	0	0	0	0.0004	0.0004	0	0.0234	0
14	0	0	0	0	0	0	0	0.0002	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0564
16	0	0	0	0	0	0	0.0016	0.0067	0.005	0.7505	0.0001
17	0	0	0	0.0002	0.0002	0.0006	0.0222	0.0216	0.002	0.3186	0.0002
18	0	0	0	0	0	0	0.0004	0.0019	0.0008	0.1088	0.0001
19	0	0	0	0	0	0	0.0018	0.0028	0	0.0091	0
20	0	0	0	0	0	0	0.0011	0.0037	0.0056	0.4996	0
21	0	0	0	0	0	0	0.0003	0.0006	0.0001	0.02	0.0001
22	0	0	0	0.0001	0	0.0001	0.0042	0.0083	0.0078	1.0338	0.0001

Fortsetzung Tabelle 44: Ergebnisse der *MCPELMO 2.0*- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Juli (90. Perz. der Sickerwasserkonz. [µg/L])

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	0.0006	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0.0001	0	0
2	0.0033	0	0	0	0.0001	0.0134	0.0019	0.0011	0.018	0.0248	0.0141	0
3	0.0018	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0.0026	0	0	0	0.0001	0	0	0	0.0002	0.0002	0	0
5	0.0024	0	0.0001	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
6	0.2574	0	0	0	0.0003	0	0	0	0.0001	0.0001	0	0
7	0.0119	0	0	0	0.0018	0	0	0	0	0.0003	0	0
8	0.0103	0	0	0.0001	0.0026	0	0	0	0	0.0004	0	0
9	0.0225	0	0	0	0.0007	0	0	0	0	0.0009	0	0
10	0.1378	0	0	0	0.0003	0	0	0	0	0.001	0	0
11	0.0199	0	0	0.0002	0.0025	0	0	0	0	0.0004	0	0
12	0.0415	0	0	0	0.0007	0	0	0	0	0.0008	0	0
13	0.0105	0	0.0001	0	0.003	0	0	0	0	0	0	0
14	0.024	0	0	0	0.0009	0.0938	0.0137	0.0003	0.8367	0.0025	0.0007	0
15	0.0009	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	0.0217	0.0025	0.004	0.0001	0.0004	0.9655	0.288	0.7696	1.735	0.0238	0.2555	0.0137
17	0.1303	0.0046	0.0084	0.0023	0.0056	2.2047	0.3202	0.3587	4.0186	0.9205	0.6673	0.0013
18	0.0105	0.0004	0.0007	0	0.0003	0.0389	0.0063	0.0058	0.0808	0.0125	0.0524	0.0001
19	0.032	0.0001	0.0002	0	0.0016	0	0	0	0	0	0	0
20	0.0155	0.0008	0.0012	0.0001	0.0004	0.2053	0.0786	0.329	0.3476	0.01	0.0837	0.0162
21	0.0383	0	0.0001	0	0.0004	0	0	0	0.0001	0.0001	0.0005	0
22	0.0193	0.0049	0.0068	0.0003	0.0005	1.9535	0.4365	1.0375	3.1097	0.554	0.7347	0.0236

Tabelle 45: Ergebnisse der *MCPELMO 2.0*- Simulationen für regelmäßige Anwendungen im Nov. (90. Perz. der Sickerwasserkonz. [µg/L]) (1. Teil)

Nr.	7012-37-5	35693-99-3	37680-73-2	35065-28-2	35065-27-1	35065-29-3	50-32-8	56-35-9	25154-52-3	117-81-7	63449-39-8
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	0.0002	0	0.0026	0.0001
3	0	0	0	0	0	0	0	0.0001	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	0.0001	0.0003	0	0.002	0
5	0	0	0	0	0	0	0.0002	0.0002	0	0.0038	0
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0006
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0013
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0071
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0007
13	0	0	0	0	0	0	0.0004	0.0004	0	0.0234	0
14	0	0	0	0	0	0	0	0.0002	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0564
16	0	0	0	0	0	0	0.0016	0.0067	0.005	0.7505	0.0001
17	0	0	0	0.0002	0.0002	0.0006	0.0222	0.0216	0.002	0.3186	0.0002
18	0	0	0	0	0	0	0.0004	0.0019	0.0008	0.1088	0.0001
19	0	0	0	0	0	0	0.0018	0.0028	0	0.0091	0
20	0	0	0	0	0	0	0.0011	0.0037	0.0056	0.4996	0
21	0	0	0	0	0	0	0.0003	0.0006	0.0001	0.02	0.0001
22	0	0	0	0.0001	0	0.0001	0.0042	0.0083	0.0078	1.0338	0.0001

Fortsetzung Tabelle 45: Ergebnisse der *MCPELMO 2.0*- Simulationen für regelmäßige Anwendungen, Nov. (90. Perz. der Sickerwasserkonz. [µg/L])

Nr.	1163-19-5	1222-05-5	1506-02-1	1715-40-8	58-89-9	110-54-3	142-82-5	111-65-9	540-84-1	71-43-2	108-38-3	629-59-4
1	0.0006	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0.0001	0	0
2	0.0033	0	0	0	0.0001	0.0134	0.0019	0.0011	0.018	0.0248	0.0141	0
3	0.0018	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0.0026	0	0	0	0.0001	0	0	0	0.0002	0.0002	0	0
5	0.0024	0	0.0001	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0
6	0.2574	0	0	0	0.0003	0	0	0	0.0001	0.0001	0	0
7	0.0119	0	0	0	0.0018	0	0	0	0	0.0003	0	0
8	0.0103	0	0	0.0001	0.0026	0	0	0	0	0.0004	0	0
9	0.0225	0	0	0	0.0007	0	0	0	0	0.0009	0	0
10	0.1378	0	0	0	0.0003	0	0	0	0	0.001	0	0
11	0.0199	0	0	0.0002	0.0025	0	0	0	0	0.0004	0	0
12	0.0415	0	0	0	0.0007	0	0	0	0	0.0008	0	0
13	0.0105	0	0.0001	0	0.003	0	0	0	0	0	0	0
14	0.024	0	0	0	0.0009	0.0938	0.0137	0.0003	0.8367	0.0025	0.0007	0
15	0.0009	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	0.0217	0.0025	0.004	0.0001	0.0004	0.9655	0.288	0.7696	1.735	0.0238	0.2555	0.0137
17	0.1303	0.0046	0.0084	0.0023	0.0056	2.2047	0.3202	0.3587	4.0186	0.9205	0.6673	0.0013
18	0.0105	0.0004	0.0007	0	0.0003	0.0389	0.0063	0.0058	0.0808	0.0125	0.0524	0.0001
19	0.032	0.0001	0.0002	0	0.0016	0	0	0	0	0	0	0
20	0.0155	0.0008	0.0012	0.0001	0.0004	0.2053	0.0786	0.329	0.3476	0.01	0.0837	0.0162
21	0.0383	0	0.0001	0	0.0004	0	0	0	0.0001	0.0001	0.0005	0
22	0.0193	0.0049	0.0068	0.0003	0.0005	1.9535	0.4365	1.0375	3.1097	0.554	0.7347	0.0236

8.2 Diskussion einzelner Ergebnisse der Simulationen

Im folgenden werden einige Ergebnisse der Simulationen diskutiert und mit den ausführlichen Simulationen der Stufe 2 (siehe Kapitel 6.2, ab Seite 82) verglichen. Die grafischen Darstellungen orientieren sich an den Beispielen im Kapitel 6.2. Die Abbildungen sind in englischer Sprache beschriftet, weil sie direkt mit *MCPELMO 2.0* erstellt worden sind. Abbildung 55 zeigt die Ergebnisse der Simulation für Benzol (geometrische Mittel der Sickerwasserkonzentrationen bei einer Ausbringung des Reststoffs im Mai). Sie stimmen für diese Substanz sehr gut mit den entsprechenden Simulationsergebnissen der Stufe 2 überein (siehe Abbildung 45). Auch in der *MCPELMO 2.0* Simulation zeigen die Szenarien mit den geringsten Wasserleitfähigkeiten (Szenario 17 und Szenario 22) die höchsten Konzentrationen. Die Höhe des Eintrags wird für das Szenario 22 (im Vergleich mit der genauen Simulation) ausgezeichnet abgeschätzt. Das Szenario 17 wird allerdings von *MCPELMO 2.0* im Vergleich mit der PELMO-Simulation über 1000 Jahre zu hoch berechnet. Dieser Trend verstärkt sich, wenn die entsprechenden Extremfälle (90. Perzentil, siehe Abbildung 46 und Abbildung 56) verglichen werden (Stufe 2: 0.26 µg/L, *MCPELMO 2.0*: 0.9µg/L).

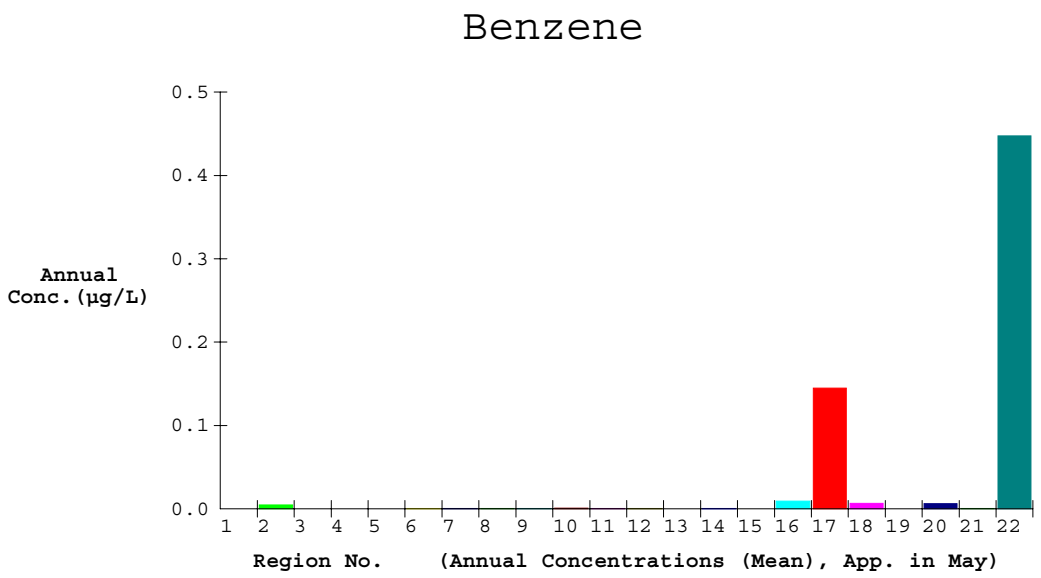


Abbildung 55: Berechnete geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Benzol (*MCPELMO 2.0*, Ausbringung des Reststoffs im Mai)

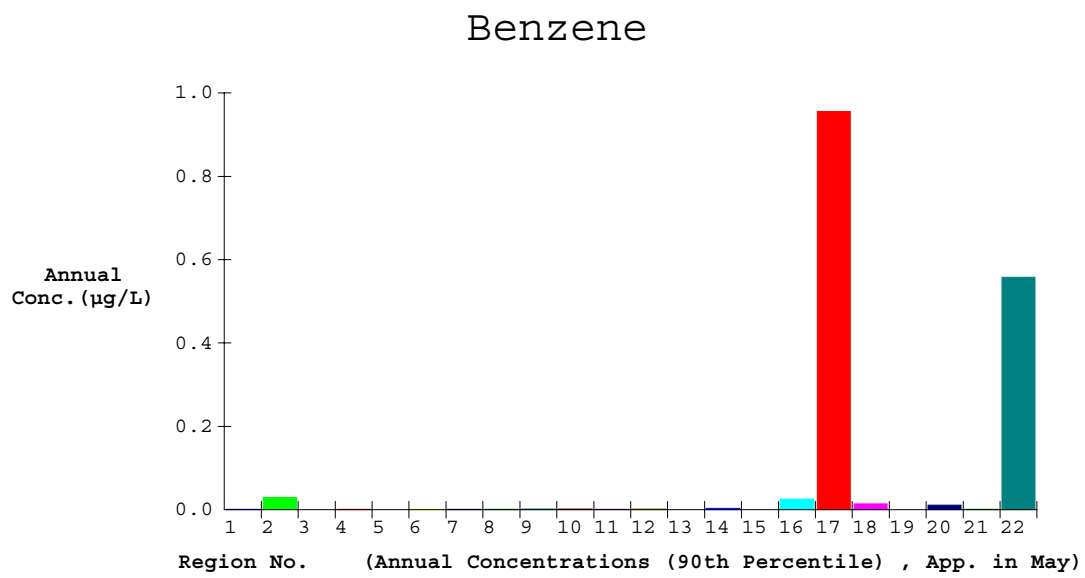


Abbildung 56: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Benzol (*MCPELMO 2.0*, Ausbringung des Reststoffs im Mai)

In den beiden folgenden Abbildungen werden die Ergebnisse zu Lindan (Ausbringung des Reststoffs im Juli), einem Pflanzenschutzmittel, zusammengefasst. Wie auch in den entsprechenden Ergebnissen der ausführlichen Simulationen über 1000 Jahre (siehe die Abbildung 47 und die Abbildung 48) stellt sich das Spektrum der Konzentrationen für diese Substanz völlig anders dar, da für eine größere Anzahl von Szenarien ähnliche Konzentrationen berechnet werden. Die Ursache wurde bereits in Kapitel 6.2 diskutiert.
Bei dieser Substanz fällt außerdem auf, dass die Konzentrationen für die Szenarien 6 bis 12, deren Böden sich durch hohe Wasserleitfähigkeiten auszeichnen, deutlich überschätzt werden, während die Szenarien mit Bodenarten, die geringe Wasserleitfähigkeiten aufweisen (Szenarien 16 bis 22), relativ besser simuliert werden. Eine Ursache könnte die zu geringe Abschätzung des Stoffeinteils sein, der aufgrund des Dampfdrucks von Lindan aus dem Boden in die Luft gelangt. Aufgrund der Dominanz des langsameren chromatographischen Stofftransports bei den Szenarien 6 bis 12 verbleibt die Substanz eine längere Zeit in der Nähe der Bodenoberfläche als bei den Szenarien 16 bis 22.

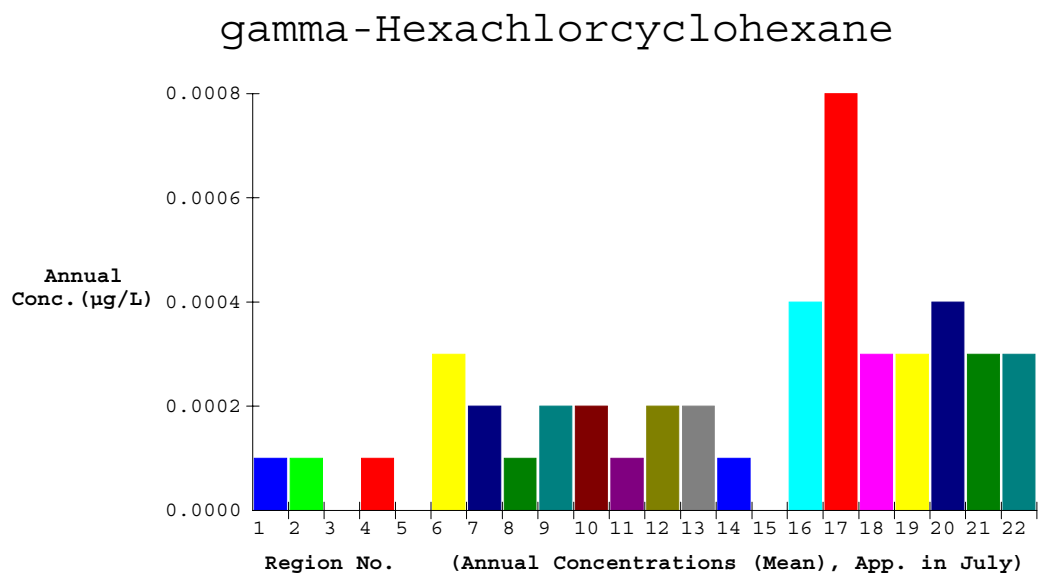


Abbildung 57: Berechnete geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Lindan (*MCPELMO 2.0*, Ausbringung des Reststoffs im Juli)

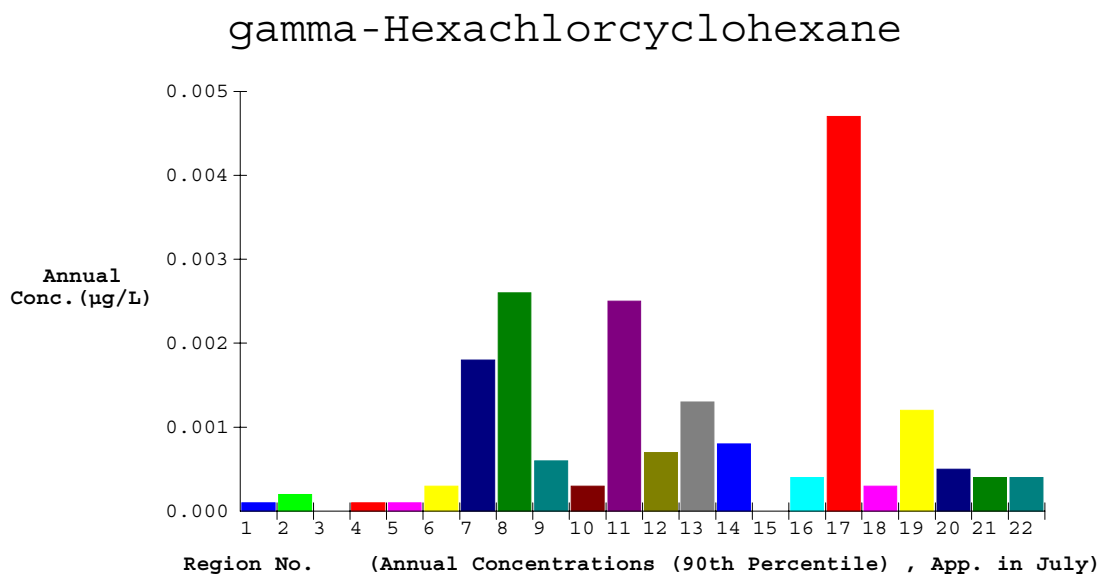


Abbildung 58: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Lindan (*MCPELMO 2.0*, Ausbringung des Reststoffs im Juli)

Die beiden folgenden Abbildungen stellen die Ergebnisse zu Tributylzinnoxid dar. Die mittleren Ergebnisse entsprechen qualitativ den Ergebnissen der ausführlichen Stufe 2 Simulationen (siehe die Abbildung 49), allerdings werden die Konzentrationen um einen Faktor 3 zu hoch berechnet. Diese Überschätzung setzt sich bei den 90. Perzentilen fort. Wie bereits bei den vorherigen Beispielen fallen die Ergebnisse für das Szenario 17 aus der Reihe; im Vergleich mit den ausführlichen Simulationen (Abbildung 50) ist der Fehler hier

deutlich höher. Die wahrscheinlichste Ursache ist auch hier der Einfluss der Henry-Konstante: Die Verflüchtigung wird - wie bereits erläutert - basiernd auf einer verkürzten Simulationszeit von 15 Jahren durchgeführt, während die Berücksichtigung der Verflüchtigung bei den ausführlichen Simulationen einen Zeitraum von 1000 Jahren umfasst.

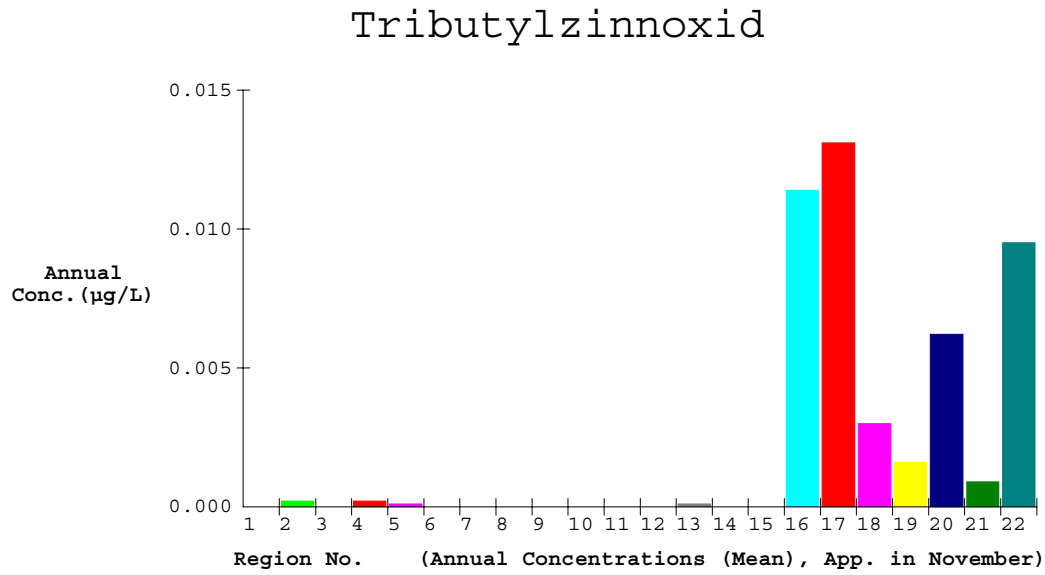


Abbildung 59: Berechnetes geom. Mittel Sickerwasserkonzentration von Tributylzinnoxid (*MCPELMO 2.0*, Ausbringung des Reststoffs im November)

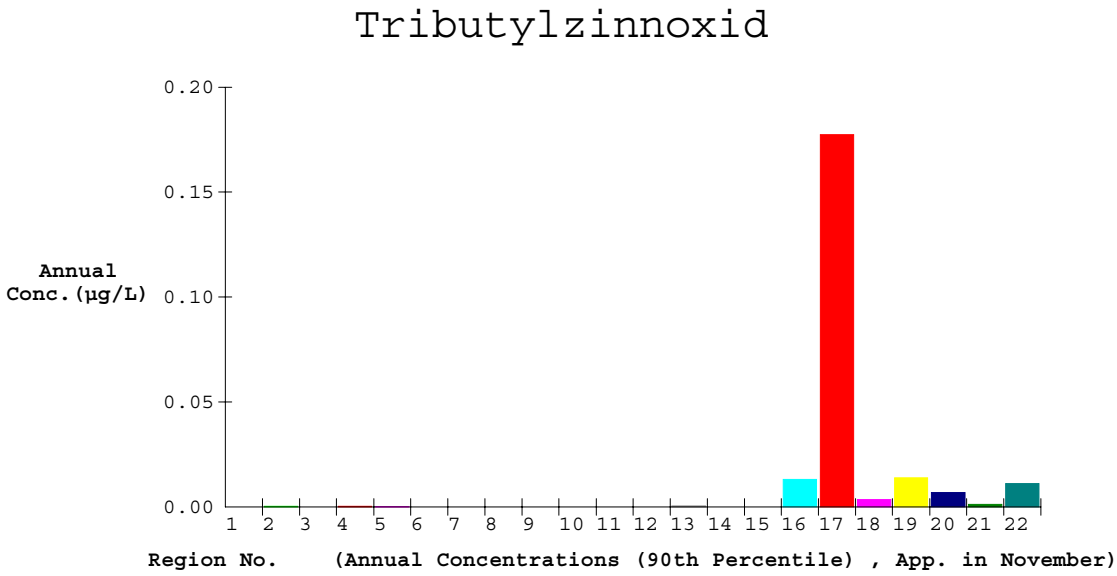


Abbildung 60: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Tributylzinnoxid (*MCPELMO 2.0*, Ausbringung des Reststoffs im November)

Die abschließenden Abbildungen beschreiben das Verhalten von Decabromdiphenylether. Als einzige von den hier ausführlich diskutierten Substanzen waren aufgrund der extremen Eigenschaften zu Sorption (KOC: 150 000 L/kg) und Persistenz (DT50 ca. 20 Jahre) zusätzliche Extrapolationen notwendig, um die Konzentrationen abzuschätzen.

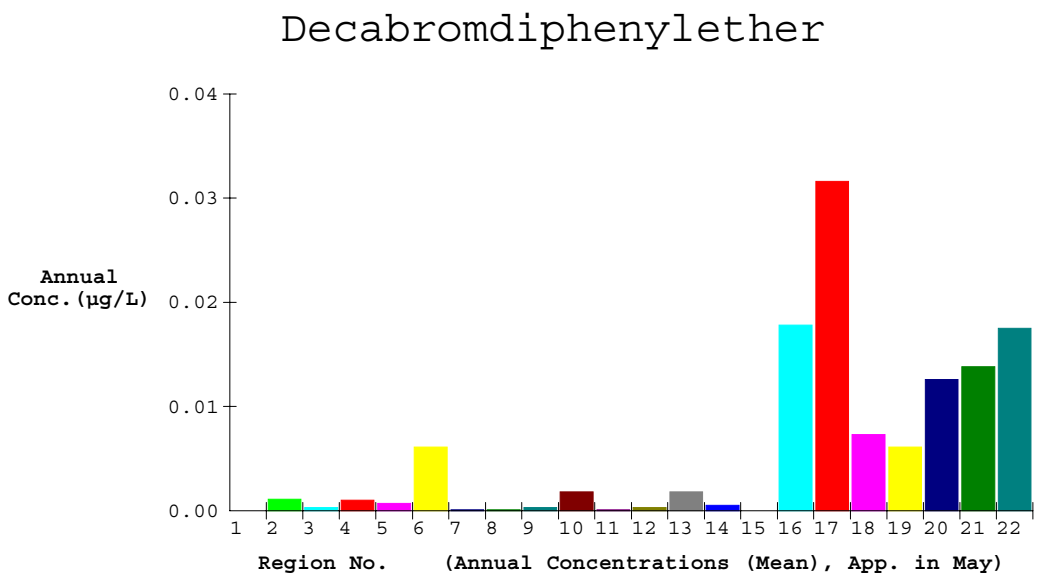


Abbildung 61: Berechnetes geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (*MCPELMO 2.0*, Ausbringung des Reststoffs im Mai)

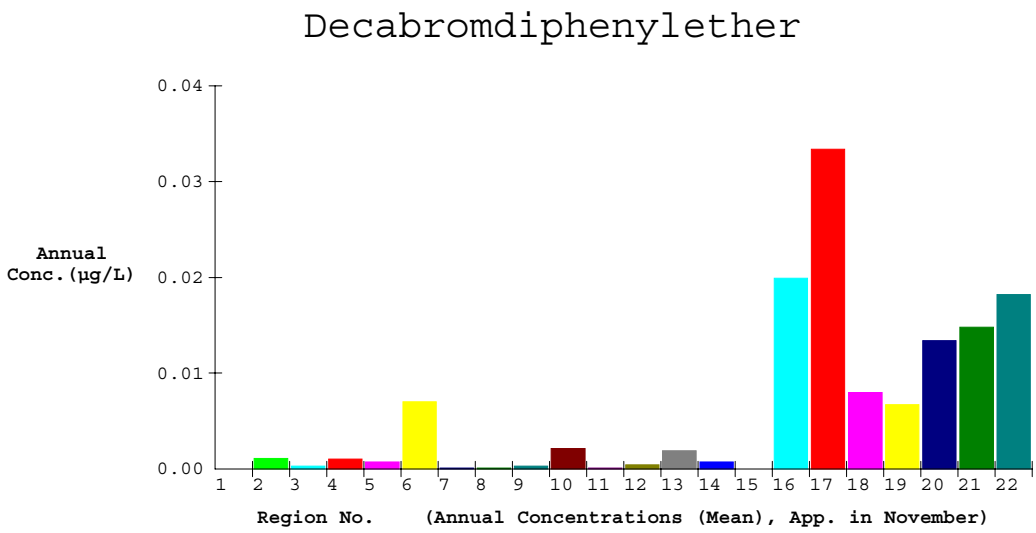


Abbildung 62: Berechnetes geom. Mittel der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (*MCPELMO 2.0*, Ausbringung des Reststoffs im November)

Die Ergebnisse sowohl für die Mai- als auch die Novemberausbringung stimmen bei dieser Substanz für die mittleren Konzentrationen qualitativ sehr gut überein, liegen allerdings etwa einen Faktor 2 bis 3 unter den Ergebnissen der ausführlichen Simulationsrechnungen. Die 90. Perzentilen dagegen werden tendenziell etwas überschätzt.

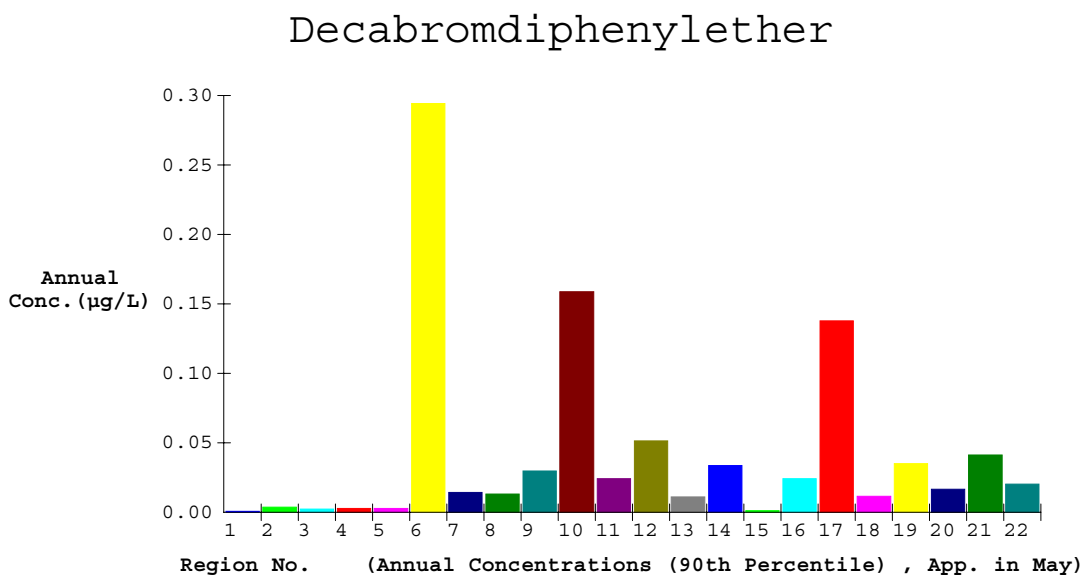


Abbildung 63: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (*MCPELMO 2.0*, Ausbringung des Reststoffs im Mai)

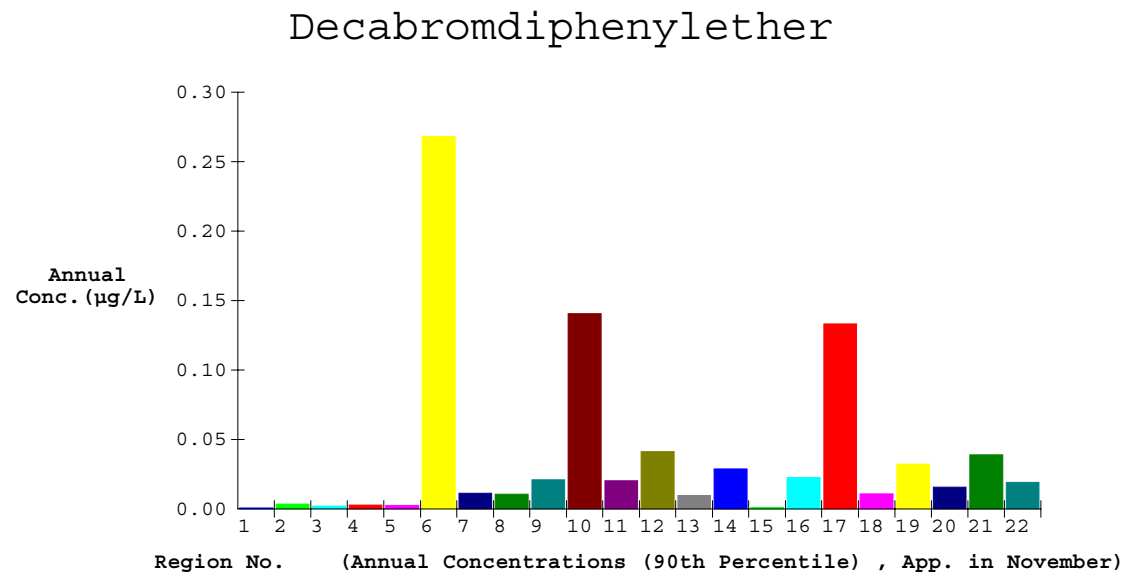


Abbildung 64: Berechnetes 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration von Decabromdiphenylether (*MCPELMO 2.0*, Ausbringung des Reststoffs im November)

8.3 Analyse der Abweichungen der Simulationen mit MCPELMO 2.0

In diesem Kaptiel werden die Abweichungen der *MCPELMO 2.0*-Simulationen von den entsprechenden Simulationen der Stufe 2 diskutiert. Da die Darstellung von Konzentrationen bei *MCPELMO 2.0* auf 4 Stellen nach dem Komma begrenzt ist, wurden für diesen Vergleich die Konzentrationen unterhalb von 0.0001 µg/L bei den ausführlichen Simulationen auf 0 gesetzt. Anschließend wurde jeweils das Verhältnis der Ergebnisse der ausführlichen Simulation und der *MCPELMO 2.0* Abschätzung gebildet und in Klassen aufsummiert. In der Abbildung 65 sind die Ergebnisse dieser Analyse für die Mai-Anwendungen dargestellt. Die Situation stellt sich allerdings für die anderen Ausbringungszeiten vergleichbar dar. In 74 % der Fälle stimmen beide Modelle überein. In den übrigen Fällen werden die Konzentrationen durch *MCPELMO 2.0* im Vergleich mit den ausführlichen Simulationen überschätzt. Fehler oberhalb eines Faktor 50 kommen in 5 % der Simulationen vor.

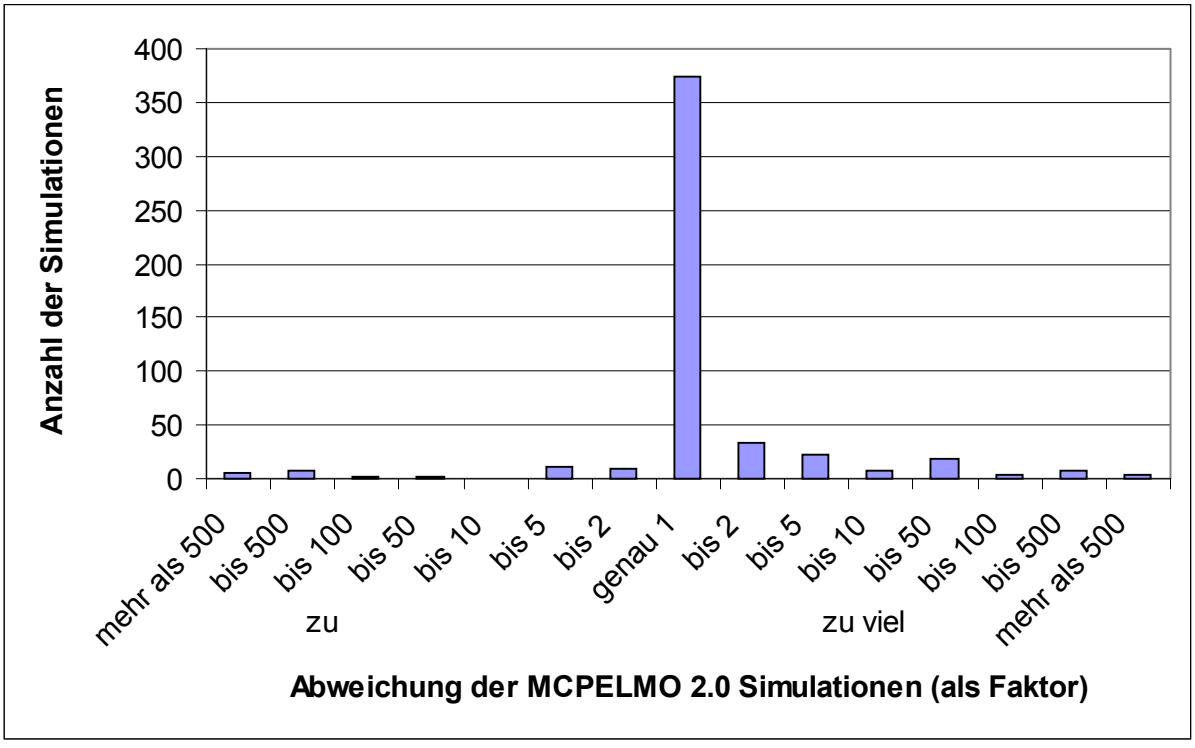


Abbildung 65: Vergleich der *MCPELMO 2.0* – Simulationen mit den Ergebnissen der Stufe 2 (geometrische Mittelwerte, alle Substanzen der Liste)

Diese Fehler sind zu einem großen Teil verursacht durch Abweichungen zwischen ausführlichen Simulationen und *MCPELMO 2.0* bei zwei Stoffen: Decabromdiphenylether und den Chlorparaffinen; die Konzentrationen dieser Stoffe konnten mit *MCPELMO 2.0* aufgrund ihrer extremen Sorptions- und Abbaueigenschaften nur mit Hilfe einer zusätzlichen Abschätzung berechnet werden. Diese Abschätzung führt zwangsläufig zu weiteren Fehlern.

In der Abbildung 66 sind die Verhältnisse der Konzentrationen für eine reduzierte Liste mit 21 Substanzen dargestellt (ohne Stoffe mit höheren KOC-Werten als 5000 L/kg und längeren Halbwertszeiten als 2000 Tage).

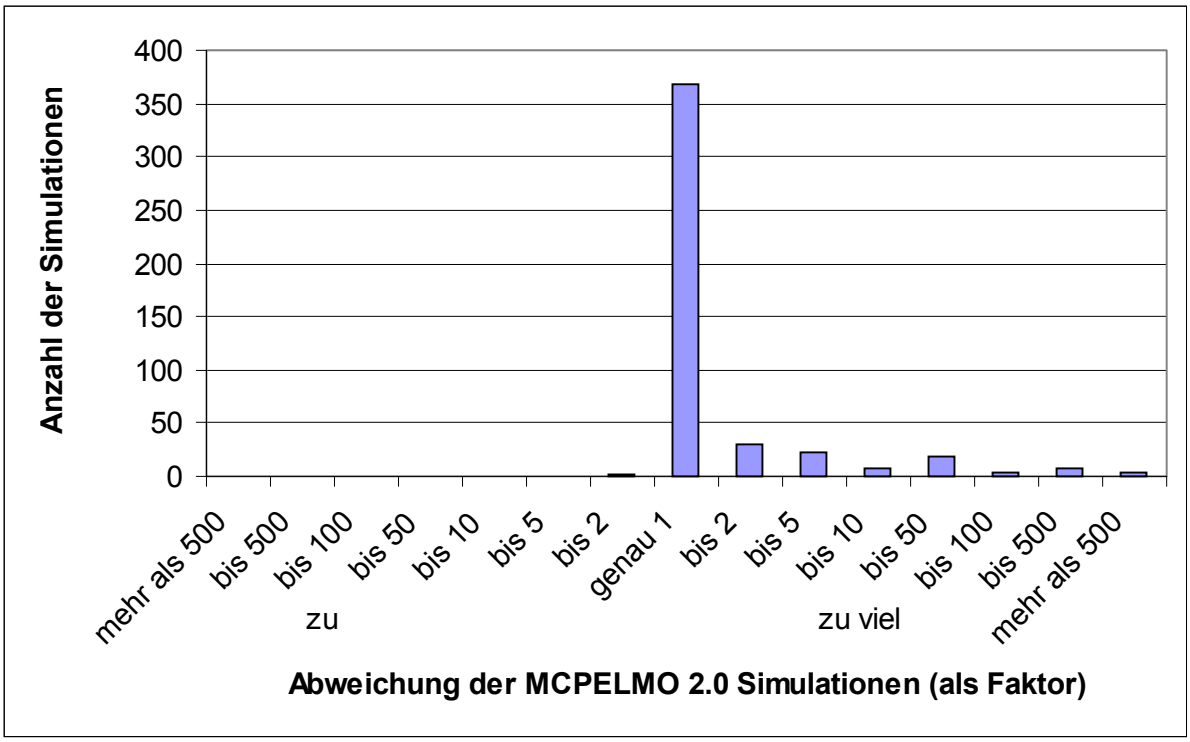


Abbildung 66: Vergleich der *MCPELMO 2.0* – Simulationen mit den Ergebnissen der Stufe 2 (geometrische Mittelwerte, ohne Decabromdiphenylether und Chlorparaffine)

In dieser reduzierten Liste werden 80 % (vorher 74 %) der Konzentration exakt berechnet. Fehler oberhalb eines Faktors 50 treten in 3 % der Simulationen auf. In keinem Fall lag das Ergebnis der ausführlichen Simulation höher als die Abschätzung.

Die beiden folgenden Abbildungen zeigen die Abweichungen der *MCPELMO 2.0* – Simulationen von den ausführlichen Simulationen der Stufe 2 bei den extremen Konzentrationen (90. Perzentil). Da hier ein weiterer interpolierter Parameter in die Berechnung eingegangen ist, sind hier größere Fehler als bei den Mittelwerten zu erwarten.

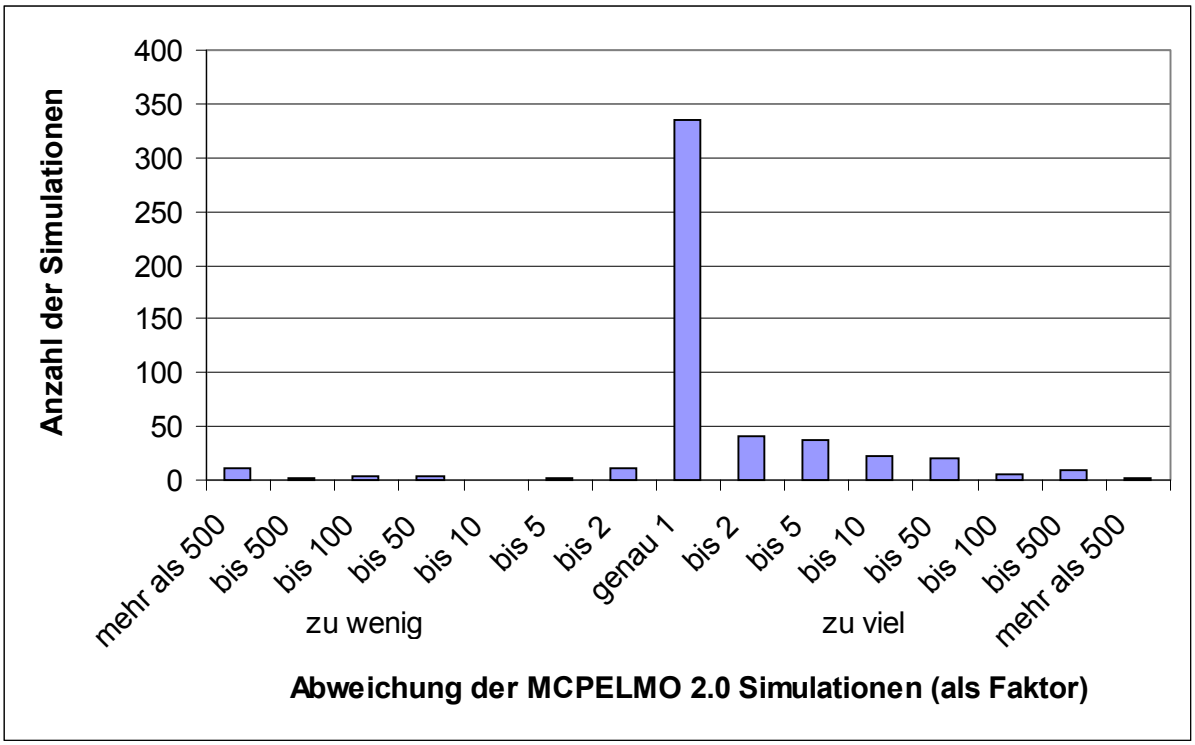


Abbildung 67: Vergleich der *MCPELMO 2.0* – Simulationen mit den Ergebnissen der Stufe 2 (90. Perzentil der Sickerwasserkonzentrationen, alle Substanzen der Liste)

In der Tat ist der Anteil der exakt übereinstimmenden Ergebnissen etwas niedriger (66 %), mit 6.5 % ist der Anteil der Simulationen mit einem Fehler oberhalb von 50 jedoch nur unwesentlich höher. Die größten Fehler treten erwartungsgemäß bei den beiden „extremen“ Substanzen Decabromdiphenylether und den Chrorparaffinen auf, die nur mit Hilfe einer zusätzlichen Näherung berechnet werden konnten. In der Abbildung 68, in der die Ergebnisse dieser beiden Stoffe nicht berücksichtigt wurden, ist dies deutlich zu erkennen: der Anteil der Ergebnisse mit Abweichungen oberhalb eines Faktors 50 sinkt von 6.5 % auf 4 %, gleichzeitig steigt der Anteil der exakt berechneten Ergebnisse von 66 auf 72 %.

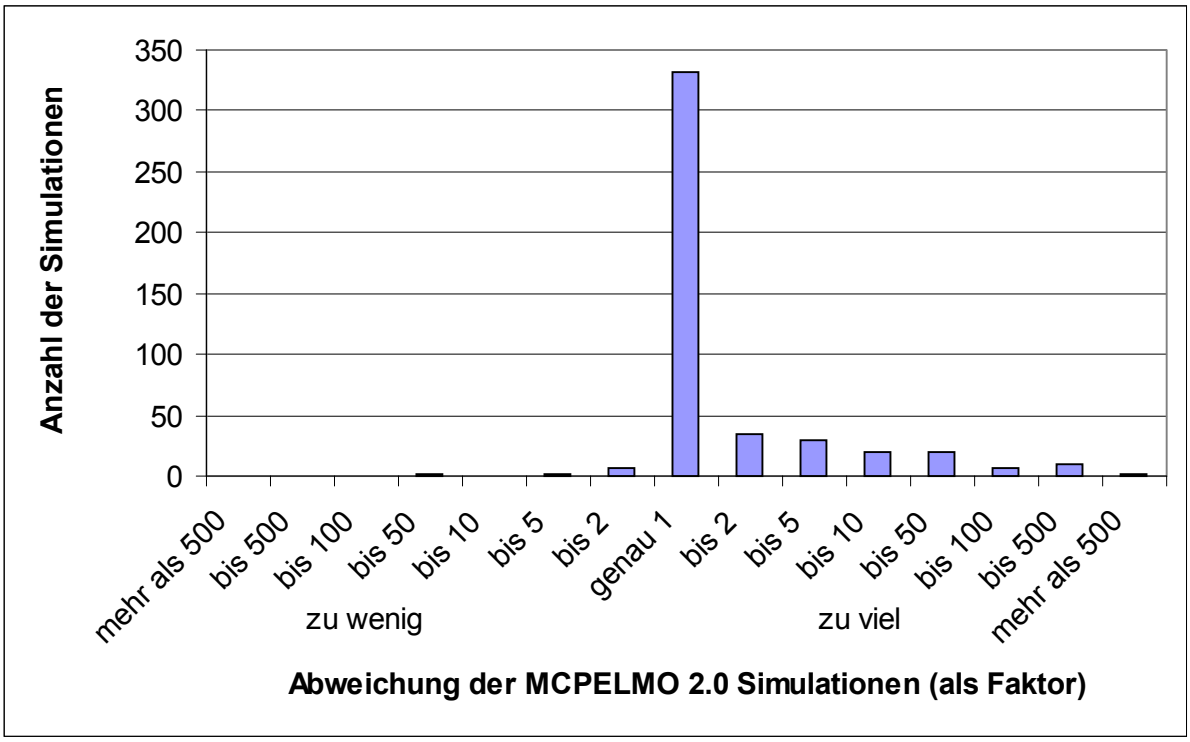


Abbildung 68: Vergleich der *MCPELMO 2.0* – Simulationen mit den Ergebnissen der Stufe 2 (90. Perzentil der Sickerwasserkonz., ohne Decabromdiphenylether und Chlorparaffine)

Die Analyse zeigt insgesamt, dass *MCPELMO 2.0* in der Lage ist, sinnvolle Konzentrationen im Sickerwasser für die meisten Substanzen abzuschätzen. Wie der unsymmetrische Verlauf der Histogramme verdeutlicht, kann davon ausgegangen werden, dass die Abschätzung im Vergleich mit einer ausführlichen Simulation konservativ ist, das heißt, dass *MCPELMO 2.0* die Konzentrationen tendenziell über- und nicht unterschätzt. Extreme Substanzen hinsichtlich Sorption (KOC: >5000 L/kg) bzw. Abbau (DT50>2000 Tage) werden mit größeren Fehlern abgeschätzt. In diesem Fall können auch Unterschätzungen des ausführlichen Ergebnisses auftreten.

9 Zusammenfassung und Bewertung der Ergebnisse

Ziel des Vorhabens war es, das deterministische Versickerungsmodell PELMO um zusätzliche Transportprozesse zu erweitern und das erweiterte Modell in das stochastische Abschätzmodell *MCPELMO 2.0* einzubauen. Parallel zu der Modellentwicklung sollten Nomogramme auf der Basis der Algorithmen des zu entwickelnden Computerprogramms *MCPELMO 2.0* erstellt werden, mit denen ebenfalls Sickerwasserkonzentrationen abgeschätzt werden können.

Zur Festlegung einer Stoffliste wurden außerdem Screening-Rechnungen mit 383 Substanzen unter Verwendung des im Rahmen eines früheren Forschungsvorhabens entwickelten Computerprogramms *MCPELMO 1.0* durchgeführt. Basierend auf diesen Simulationen wurde eine reduzierte Liste bestehend aus 23 Substanzen definiert, mit denen die Neuentwicklung getestet wurde.

Bisher war das Computerprogramm PELMO lediglich in die Lage, die “chromatographische” Verlagerung von Stoffen im Boden basierend auf der Einstellung von Sorptions-Gleichgewichten zu modellieren. Außerdem war ein Transport nur in der reinen Wasserphase vorgesehen. Es wurden im Rahmen dieser Forschungsvorhabens zwei zusätzliche Transportprozesse eingebaut:

- Das ursprüngliche Computerprogramm PELMO berechnet die Konzentrationsverteilung im Boden zur Zeit auf der Basis eines Drei-Phasen-Gleichgewichts, in dem die Stoffe entweder sorbiert an der Bodenmatrix, gelöst im Bodenwasser oder gasförmig in der Bodenluft vorliegen können. Im Rahmen dieses Vorhabens wurde das Gleichgewicht um eine weitere Phase “kolloid gelöste Huminstoffe im Bodenwasser” erweitert. Mit dieser Erweiterung wurde auf experimentelle Untersuchungen reagiert, die nachwiesen, dass nichtpolare organische Substanzen, die gewöhnlich ausgezeichnete Sorptionseigenschaften aufweisen, unter bestimmten Bedingungen gebunden an bewegliche Huminstoffe in tiefere Bodenschichten transportiert werden können. Eine detaillierte Bewertung der Ergebnisse konnte mangels experimentellen Datenmaterials nicht vorgenommen werden. Weitere Transportprozesse, wie eine Verlagerung von Substanzen in der reinen Stoffphase (z.B. bei Unfällen) oder gebunden an beweglichen Bodenbestandteilen (z.B. Tonpartikeln) sind allerdings auch weiterhin nicht modellierbar.
- Es wurde der vor allem bei schluffigen oder tonigen Böden beobachtete schnelle Transport von der Oberfläche in tiefere Bodenschichten, der ohne die Einstellung von Sorptionsgleichgewichten erfolgt, neu in das Programm aufgenommen. Die Erweiterung wurde mit experimentellen Ergebnissen zu Dränage-Einträgen, bei denen ein entsprechender schneller Transport beobachtet werden konnte, verglichen. Der Vergleich

zeigte, dass die Computerberechnungen meist etwas zu hoch ausfallen (*konservative Abschätzung*). Der Vergleich der Erweiterung von PELMO mit der ursprünglichen Version, machte allerdings deutlich, dass das experimentelle Verhalten mit dem erweiterten Modell im Vergleich zu der ursprünglichen Version erheblich besser beschrieben werden kann. Der Vergleich mit dem Computerprogramm MACRO, das im Rahmen der europäischen Pflanzenschutzmittelzulassung verwendet wird, zeigt, dass die PELMO-Erweiterung vergleichbare Ergebnisse wie MACRO berechnet.

In der bisherigen Version von *MCPELMO (*Version 1.0) waren insgesamt 13 Szenarien definiert. Sie entstanden durch Kombination einer Karte mit 9 Klimaregionen und einer Karte mit der Verbreitung von 5 wichtigen Bodenarten. Jede dieser 13 Versickerungsszenarien war jeweils durch eine Klimaregion und einem dort vorherrschenden Boden gekennzeichnet. Diese Grundlage wurde im Rahmen dieses Vorhabens erheblich ausgeweitet. Als Datengrundlage für die Charakterisierung der Böden in der Bundesrepublik Deutschland wurde die Karte der Bodenregionen der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) verwendet, die mit einer unterschiedlichen Anzahl von Leitprofilen für die verschiedenen Bodenregionen auch in digitaler Form vorlag. Die Karte der Bodenregionen der Bundesrepublik Deutschland umfasst 12 Regionen, deren Leitböden aus der Bodenübersichtskarte der Bundesrepublik Deutschland im Maßstab 1 : 1.000.000 von 1995 mit 72 Bodeneinheiten (BÜK 1000) abgeleitet sind. Dabei wurden die Bodenprofile der Bodenregionen nach Flächenanteil und Mächtigkeit der Horizonte (Tiefe) gewichtet. Als Kriterien wurden bei der Zusammenfassung u.a. die Genese, die Horizontabfolgen und die Entwicklungstiefen der einzelnen Profile herangezogen.
Auf der Grundlage der Bodenregionen Deutschlands und den daraus entwickelten, synthetischen Bodenprofilen sind neue Versickerungsszenarien unter Verwendung von neun Klimastationen definiert worden, von denen tägliche Daten zu Temperatur und Niederschlag über einen Zeitraum von 30 Jahren vorlagen. Diese Stationen in Verbindung mit der Karte der Bodenregionen führten zu 22 Boden-Klimaregionen in Deutschland, die im Rahmen des Vorhabens für alle weiteren Analysen verwendet wurden.

Basierend auf den Erweiterungen des PELMO sowie den 22 Versickerungsregionen wurde eine neue Methode entwickelt, um mittlere und extreme Sickerwasserkonzentrationen (Perzentilen) abschätzen zu können. Bei diesem Verfahren ist eine Bestimmung von substanzabhängigen Konzentrationen mit Hilfe von Nomogrammen möglich. Zusätzlich wurde ein Computermodell entwickelt (*MCPELMO 2.0*), mit dem eine anwenderfreundliche Berechnung des Gefährdungspotenzials für beliebige Inhaltsstoffe von Reststoffen möglich wird. Das Verfahren basiert auf einer großen Zahl bereits durchgeführter PELMO-

Simulationen. Die Konzentration der aktuellen Substanz wird dann durch Interpolation von Ergebnissen vorheriger Simulationen ermittelt. Simulationen wurden durchgeführt für drei Anwendungszeitpunkte für den Reststoff (Mai, Juli und November) mit Sorptionskonstanten bis 5000 L/kg (bezogen auf den organischen Kohlenstoffgehalt im Boden), Halbwertszeiten im Boden bis 2000 Tage und (dimensionslose) Henry-Konstanten bis maximal 10. Im Vergleich zu einer Simulation mit dem Computerprogramm PELMO ist der Rechenzeitbedarf für die Abschätzmethode um mehrere Größenordnungen geringer.

Das Verfahren wurde mit Hilfe einer Stoffliste von 23 Substanzen getestet. Zur Festlegung dieser Beispielsubstanzen wurde zunächst mit dem Computerprogramm *MCPELMO 1.0* (das zu Beginn des Vorhabens bereits vorlag) das Versickerungspotenzial einer größeren Zahl von Stoffen (383) bestimmt (siehe Anhang 1). Bei der Bewertung der Ergebnisse dieser Simulationen zur Festlegung der reduzierten Stoffliste ergab sich die Schwierigkeit, dass ohne eine realistische Ausgangskonzentration im Boden bzw. eine realistische Konzentration der Substanzen in Reststoffen nur das der Substanz inhärente Versickerungspotenzial nicht aber realistische Konzentrationen im Sickerwasser abgeschätzt werden konnte. Zur Festlegung der in diesem Vorhaben genauer modellierten Stoffe (siehe Tabelle 46) mussten daher auch die Ergebnisse anderer Studien herangezogen werden.
Es zeigte sich bei der Zusammenstellung der Stoffliste, dass viele Subtanzen höhere Sorptionskonstanten und eine größere Persistenz aufwiesen, als die bisher zur Validierung des Programms meist verwendeten Pflanzenschutzmittel. Eine Überprüfung der Modellannahmen unter Verwendung entsprechender lipophiler Substanzen z.B. durch Verwendung von Ergebnissen des zur Zeit laufenden Verbundprojekts des Bundesforschungsministeriums zur Beeinflussung der Grundwasserqualität bei der langfristigen Anwendung von Bioabfall, Kompost und Klärschlamm.

Tabelle 46: In diesem Vorhaben verwendete Stoffliste und ihre Ausgangskonzentrationen

Substanz	CAS-No.	Konz (mg/kg TS)
2,4,4'-Trichlorbiphenyl	7012-37-5	0,016
2,2',5,5'-Tetrachlorbiphenyl	35693-99-3	0,017
2,2',4,5,5'-Pentachlorbiphenyl	37680-73-2	0,02
2,2',3,4,4',5-Hexachlorbiphenyl	35065-28-2	0,037
2,2',4,4',5,5'-Hexachlorbiphenyl	35065-27-1	0,038
2,2',3,4,4',5,5'-Heptachlorbiphenyl	35065-29-3	0,026
Benzo(a)pyren	50-32-8	0,51
Tributylzinnoxid	56-35-9	0,51
Nonylphenol	25154-52-3	51
Di-(2-ethylhexyl)phthalate (DEHP)	117-81-7	4612
Chlorparaffine	63449-39-8	65
Decabromdiphenylether	1163-19-5	6,62
Moschusduftstoff HHCB	1222-05-5	15,93
Moschusduftstoff AHTN	1506-02-1	15,45
Bromocyclen	1715-40-8	0,113
gamma-Hexachlorcyclohexan	58-89-9	0,01
n-Hexane	110-54-3	390
n-Heptane	142-82-5	180
n-Octane	111-65-9	1080
iso-Octane	540-84-1	1080
Benzene	71-43-2	90
m-Xylene	108-38-3	390
n-Tetradecan	629-59-4	1380

Die Sickerwasserkonzentrationen der Stoffe dieser Liste wurden zunächst mit dem erweiterten Computermodell PELMO berechnet (siehe Kapitel 6, ab Seite 78).

Die Ergebnisse zeigten, dass das Spektrum der Sickerwasserkonzentrationen bei den verschiedenen Szenarien bei einer Substanz um mehr als 4 Größenordnungen schwanken kann. Für das Szenario 6 wurden dabei die höchsten Konzentrationen der vom chromatographischen Transport dominierten Szenarien berechnet. Es kann mit einer Repräsentanz von etwa 2 % der landwirtschaftlichen Nutzfläche als *worst case* Situation angesehen werden. Noch höhere Konzentrationen werden zum Teil für die vom

präferentiellen Fluss dominierten Szenarien (z.B. Szenario 17, Flächenanteil etwa 6 % der landwirtschaftlichen Nutzfläche in Deutschland) berechnet.

Das Spektrum der Konzentrationen in den 22 Szenarien wird allerdings auch von den physikalisch-chemischen Eigenschaften der Substanzen beeinflusst. So wurde deutlich, dass mit Zunahme der Sorptionsstärke und der Persistenz im Boden die Dominanz des schnellen Stofftransports als Ursache für den Stofftransport im Sickerwasser abnahm. Für die Substanzen mit den höchsten Sorptionskonstanten wurden daher vergleichbare Einträge in sandigen wie schluffigen Böden gefunden. Der Einfluss der stoffinhärenten Parameter auf das Ergebnis wurde auch dadurch deutlich, dass für die in dieser Stoffliste berücksichtigten PCB weder unter den Bedingungen des chromatographischen noch unter denen des präferentiellen Stofftransports Sickerwasserkonzentrationen berechnet werden konnten. Für die Mineralölkohlenwasserstoffbestandteile, die sich durch eine mäßige bis starke Sorption im Boden auszeichnen, konnte ein Stofftransport nur durch präferentiellen Fluss simuliert werden, unter den Bedingungen des chromatographischen Transports wurden keine erhöhten Sickerwasserkonzentrationen berechnet.

Zur Beurteilung des zusätzlichen Fehlers, der durch die Verwendung der neuen Abschätzmethode (*MCPELMO 2.0)* anstelle der ausführlichen PELMO-Simulation entstehen kann, wurde die Sickerwasserkonzentrationen für die gleichen Stoffe auch mit *MCPELMO 2.0* bestimmt.

Für die mittleren Konzentrationen stimmten in 74 % der Fälle beide Verfahren überein. In den übrigen Fällen wurden die Konzentrationen durch *MCPELMO 2.0* im Vergleich mit den ausführlichen Simulationen überschätzt. Fehler oberhalb eines Faktor 50 kamen in 5 % der Simulationen vor. Der Vergleich der berechneten extremen Konzentrationen (beispielhaft untersucht wurde das 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentrationen) zeigte geringfügig höhere Abweichungen, die darauf zurückzuführen sind, dass in diesem Fall ein weiterer interpolierter Parameter in die Berechnung eingegangen ist. Der Anteil der exakt übereinstimmenden Ergebnissen sank auf 66 %, der Anteil der Simulationen mit einem Fehler oberhalb von 50 erhöhte sich auf 6.5 %.

Die größten Fehler traten (erwartungsgemäß) bei den beiden hinsichtlich Sorption und Abbau “extremen” Substanzen Decabromdiphenylether und den Chlorparaffinen auf, die nur mit Hilfe einer zusätzlichen Näherung berechnet werden konnten, weil ihre Sorptionskonstanten und Abbauraten jenseits des Eigenschafts-Fensters liegen, das durch Interpolation vorheriger Simulationen zugänglich ist. Eine Simulation dieser beiden Stoffe war daher nur durch zusätzliche Extrapolationen möglich.

Erwartungsgemäß stieg daher der Anteil der exakt berechneten Ergebnisse von 66 auf 72 %, wenn in der Statistik die Ergebnisse dieser beiden Substanzen unberücksichtigt blieben.

Die Analyse zeigt insgesamt, dass *MCPELMO 2.0* in der Lage ist, sinnvolle Konzentrationen im Sickerwasser für die meisten Substanzen abzuschätzen. Darüber hinaus kann davon ausgegangen werden, dass die Abschätzung im Vergleich mit einer ausführlichen Simulation konservativ ist, das heißt, dass *MCPELMO 2.0* die Konzentrationen tendenziell über- und nicht unterschätzt. Geringere Konzentrationen als bei den ausführlichen PELMO-Simulationen traten nur bei Substanzen mit KOC-Werten oberhalb von 5000 L/kg bzw. Halbwertszeiten oberhalb von 2000 Tagen auf.

10 Glossar

Abbaurate: Parameter, der zur Beschreibung der Geschwindigkeit von Abbauprozessen verwendet wird. Die Dimensionen von Abbauraten hängen von der Kinetik des Abbauprozesses ab. In dieser Studie wird für alle Stoffe von einem Abbau nach erster Ordnung ausgegangen. In diesem Fall ist die Dimension der Abbaurate 1/Zeit, und sie kann leicht in entsprechende Halbwertszeiten umgerechnet werden.

Bioabbau (Biodegradation): Abbau von Fremdstoffen im Boden mit Hilfe von Mikroorganismen. Sie bauen diese zu Kohlendioxid, Wasser und eigener Biomasse ab. Der vollständige Abbau kann durch Tests nachgewiesen werden.

Biodegradation, linear / non linear: Zwei qualitative Parameter zur Abschätzung des Bioabbaus verwendet im Computerprogramm Biowin v3.63 von Meyland und Howard [23]. Bei dem Parameter *linear Biodegradation* wird der Bioabbau durch eine lineare Verknüpfung verschiedener Molekülfragmente abgeschätzt, während bei dem Parameter *non-linear biodegradation* eine logistische Gleichung zur Berechnung verwendet wird. Für beide Parameter gilt, dass ein Wert oberhalb von 0.5 auf einen schnellen Bioabbau hindeutet.

Biodegradation, primary / ultimate: Zwei Parameter zur Abschätzung des Bioabbaus, die im Computerprogramm Biowin v3.63 von Meyland und Howard [23] verwendet werden. Bei dem Parameter *primary Biodegradation* wird die erste Stufe der Metabolisierung einer Chemikalie abgeschätzt, während der Parameter *ultimate biodegradation* den vollständigen Abbau eines Stoffs beschreibt. Da für den Parameter *primary Biodegradation* stets günstigere Werte als für den *ultimate biodegradation* berechnet werden, wurde im Rahmen dieser Studie im Sinn einer konservativen Abschätzung der Parameter *ultimate biodegradation* verwendet.

DOC: Im Porenwasser des Bodens sind häufig organische Stoffe (meist Huminsäuren) aus dem Bodenkörper gelöst, die zusammenfassend als „gelöster organischer Kohlenstoff“ (DOC = Dissolved Organic Carbon) bezeichnet werden. Chemikalien, die normalerweise stark an die Bodenmatrix sorbieren, können mit Hilfe von Huminsäuren als Träger in das Bodenwasser gelangen und dadurch in tiefere Bodenschichten transportiert werden.

DT50: Unter der DT50 (DT50 = Disappearance Time for 50 %) versteht man die Zeit, die vergeht, bis die Konzentration eines Stoffs im Boden halbiert wird. Es spielt dabei keine

Rolle, wodurch der Reduktionsprozess ausgelöst wird (Bioabbau, chemischer Abbau, Bildung gebundener Rückstände).

Feldkapazität: Wassergehalt des Bodens nach einer Niederschlagsperiode, in der Regel . bei einer Wasserspannung von pF 1.8 bis 2.5. Die Feldkapazität ist ein wichtiger Eingabeparameter für das Computerprogramm PELMO. Überschreitet der Wassergehalt im Boden die Feldkapazität, so setzt in einer PELMO-Simulation die Versickerung von Wasser (und seinen gelösten Stoffen) im Boden ein.

Feldkapazität, nutzbare: Differenz der Bodenfeuchten bei Feldkapazität und Welkepunkt. Die nutzbare Feldkapazität ist ein Maß für den pflanzenverfügbaren Wasseranteil im Boden.

Halbwertszeit: Zeit, die für eine Halbierung der Konzentration im Boden durch chemischen oder biologischen Abbau benötigt wird. Feste Halbwertszeiten unabhängig von der Ausgangskonzentration können nur bei einer Kinetik von 1. Ordnung angegeben werden. Die Halbwertszeit eines Stoffes ist ein wichtiger Parameter für das Simulationsprogramm PELMO. Da die Kinetik eines definierten Abbauprozesses im Boden häufig nicht bekannt ist, wird anstelle der Halbwertszeit meist die DT50 für Simulationen verwendet.

Henryfaktor: Linearer Korrekturfaktor, der in dieser Studie zur Beschreibung der Volatilität einer Substanz verwendet wird. Er ist ein Summenparameter für den Anteil der Verflüchtigung eines Stoffes aus dem Boden in Abhängigkeit von Boden- und Klimabedingungen.

Henry-Konstante: Gleichgewichtskonstante, die das Konzentrationsverhältnis einer Substanz in den Phasen Wasser und Luft beschreibt. Sie wird häufig näherungsweise aus der Wasserlöslichkeit, dem Dampfdruck und der molaren Masse berechnet.

Huminstoffe: Huminstoffe sind hochmolekulare organische Verbindungen, die durch Abbau von Pflanzenrückständen entstehen. Sie weisen eine große spezifische Oberfläche auf und können Wasser und andere Moleküle sowie Ionen reversibel anlagern.

Huminsäuren: Huminsäuren sind die Huminstoffe, die aus dem alkalischen Bodenextrakt durch starke Säuren wieder ausgefällt werden.

hydraulische Leitfähigkeit: Wassermenge, die je Zeiteinheit durch eine gegebene Fläche (Fließquerschnitt) perkoliert. Sie wird meist in $cm^3\ cm^{-2}\ s^{-1}$ angegeben und kann aus der Bodenart abgeschätzt werden.

hydraulische Leitfähigkeit, effektive: In dieser Studie eingeführte Größe, die zur Berechnung des Verhältnisses der Wasserflüsse durch Mikro- und Makroporen nach Starkregenereignissen mit Hilfe des täglichen Niederschlagswertes verwendet wird. Bei der effektiven hydraulischen Leitfähigkeit wird berücksichtigt, dass der tägliche Niederschlag nicht gleichmäßig über alle Stunden eines Tages fällt.

hydraulische Leitfähigkeit, gesättigte: Die Wasserleitfähigkeit ist stark vom Wassergehalt des Bodens abhängig. Die Entwässerung eines Teiles der Poren vemindert die Wasserleitfähigkeit. Die gesättigte hydraulische Leitfähigkeit stellt daher das Maximum der hydraulischen Leitfähigkeit dar.

Humusgehalt des Bodens: In und auf dem Mineralboden befindliche abgestorbene pflanzliche und tierische Stoffe, sowie deren organische Umwandlungsprodukte. Er wird als Anteil an der gesamten Bodenmasse angegeben.

KOC: Sorptionskonstante eines Stoffs bezogen auf den organischen Kohlenstoff im Boden.

Kohlenstoffgehalt, organischer: Humusgehalt des Bodens multipliziert mit dem Anteil des org. Kohlenstoff im Humus.

Konzentrationsfaktor: Faktor, der in dieser Studie zur Berechnung von Sickerwasserkonzentrationen verwendet wird. Er fasst den Einfluss von Sorptions- und Abbauprozessen im Boden in Abhängigkeit von Klima- und Bodeneigenschaften eines Szenarios zusammen.

Makroporen (*auch Sekundärporen)*: Im Gegensatz zu den körnungsbedingten Mikroporen werden spaltförmige Schrumpfungsrisse oder unregelmäßige Hohlräume (z.B. Regenwurmkanäle) als Makroporen bezeichnet. Diese Poren zeichnen sich oft durch stark ausgeprägte Kontinuität und ihre im Vergleich zu den Primärporen bedeutende Größe (> 60 µm) aus.

Mikroporen (*auch Primärporen*): Böden bestehen aus Körnern verschiedener Größe und Form, die ein gegebenes Volumen mit ihrer Masse nie vollständig ausfüllen. Die

verschiedenen Ausfüllungsgrade kann man durch den Anteil an Hohlräumen (= Poren) beschreiben. Unter Mikoporen versteht man diese körnungsbedingten Poren. Sie weisen normalerweise einen Durchmesser unterhalb von 50 µm auf.

Nomogramm: Eine Form des multiplen Kurvendiagramms, dessen Abszissen so nebeneinander oder übereinander angebracht sind, dass die einander entsprechenden Werte der einen Skala denen der jeweils anderen Skala oder Skalen genau zugeordnet sind.

Organische Substanz im Boden: *siehe* Humusgehalt des Bodens

Perzentilenfaktor: Korrekturfaktor, mit der in dieser Studie in Abhängigkeit von einer vorgegebenen Perzentile und dem Schwankungsfaktor die der Perzentile entsprechende Sickerwasserkonzentration einer Substanz berechnet werden kann.

präferentieller Fluss (*preferential flow*): Schneller Wassertransport durch Risse, Spalten oder Makroporen im Boden. Im Bodenwasser gelöste Substanzen können durch den präferentiellen Fluss in kurzer Zeit in tiefere Schichten verlagert werden, ohne dass es im Oberboden zu einer Sorption an die Bodenmatrix gekommen ist.

QSAR-Methode: (QSAR = Quantitative Structure Activity Relationship) Abschätzmethode, bei der aus der chemischen Struktur einer Substanz physikalisch-chemische oder auch biologische Eigenschaften berechnet werden. In dieser Studie wurden QSAR-Methoden zur Berechnung des Bioabbaus und der Sorptionskonstante eingesetzt.

Schwankungsfaktor: Korrekturfaktor, der in dieser Studie zur Beschreibung des Einflusses von Klimaschwankungen auf die Sickerwasserkonzentrationen einer Substanz verwendet wird.

Sorptionskonstante im Boden: Gleichgewichtskonstante, die das Konzentrationsverhältnis einer Substanz zwischen den Phasen Bodenmatrix (Bodenkörper) und Bodenwasser beschreibt. Sie wird häufig auf den Gehalt an organischen Kohlenstoff im Boden normiert (KOC).

Welkepunkt: Wassergehalt des Bodens in ausgeprägten Trockenperioden, normalerweise bei einer Wasserspannung von pF 4.2. Die Restfeuchte im Boden ist für eine Pflanze nicht nutzbar (daher der Name). Der Welkepunkt ist ein wichtiger Eingabeparameter für das

Computerprogramm PELMO. Er ist der minimale Wassergehalt, der in einer PELMO-Simulation auftreten kann.

11 Literatur

1 M. Bonazountas und J. M. Wagner (1984): SESOIL - A Seasonal Soil Compartment Model, U.S.EPA Report No. 68-01-6271, Athens, Georgia.

2 R. F. Carsel, C. N. Smith, L. A. Mulkey, J. D. Dean, P. Jowise (1984): Users Manual for the Pesticide Root Zone Model (PRZM), U.S.-EPA Report No. 600/3-84-109, Athens, Georgia.

3 M. Klein (1993): PELMO: Pesticide Leaching Model - Version 1.5 Benutzerhandbuch. Fraunhofer-Institut für Umweltchemie und Ökotoxikologie, D-5948 Schmallenberg.

4 O. Fränzle, I. Bruhm, K.-U. Grünberg, K. Jensen-Huß, D. Kuhnt, G. Kuhnt, K. Mich, F. Müller, E.-W. Reiche (1989): Darstellung der Vorhersagemöglichkeiten der Bodenbelastung durch Umweltchemikalien, UBA-Forschungsbericht FKZ 106 05 026, Berlin.

5 A.M.A. van der Linden und J. J. T. I. Boesten (1989): Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Miliurhygiene Bilthoven, Raportnummer 728800003, Bilthoven, The Netherlands.

6 R. J. Wagenet, J. L. Hutson (1989): LEACHM - Leaching Estimation and Chemistry Model, Center for Environmental Research, Cornell University, Ithaca, NY 14853.

7 M. Klein und W. Klein (1997): Compendium of simulation models for the environmental exposure assessment of plant protection products, Fraunhofer IRBVerlag, Stuttgart.

8 D. Aderhold, H. Nordmeyer (1995). Leaching of herbicides in soil macropores as a possible reason for groundwater contamination. In: Pesticide movement to water, A. Walker et al.(eds.) BCPC-monograph no. 62, 217-228, Farnham, UK.

9 L. Bergström(1996): Model predictions and field measurements of chlorsulfuron leaching under non-steady-state flow conditions. Pestic. Sci., 48, 37-45.

10 K. P. Beven Germann (1982): Macropores and Water Flow in Soils. Water Resource Res. **18**, 1311.

11 N. J. Jarvis(1994): The MACRO Model (Version 3.1) Technical Description and Sample Simulation, Department of soil science. Reports and Dissertations, Swedish University of Pesticide Sciences, Uppsala.

12 P. H. Nicholls, D.G.M. Hall, A. Walker, R. Allen, S.W. Bailey, A.M. Blair, C.D. Brown, P. Günther, C.R. Leake (1995): Use of the pesticide leaching model (PLM) to simulate pesticide movement through macroporous soils. Pesticide movement to

water. Proceedings of a symposium held at the University of Warwick, Coventry, UK, on 3-5 April 1995, BCPC Monograph No. 62, 187-192.

13 M. Klein (1996): Erweiterung von Expositionsmodellen auf der Basis von statistischen Umweltparametern. Umweltbundesamt UBA-Bericht 106 02 089, Berlin.

14 M. Klein (1997): Statistical distribution of pesticide concentrations in leachate - results of a Monte-Carlo analysis performed with PELMO, Chemosphere, 35, 379-389.

15 Klein, M. (1999):Monte-Carlo Analysis Using Pesticide Fate Models, J. Pesticide Sci. 24, 55-59.

16 J. R. Williams, H. D. Berndt (1977): Sediment Yield Prediction on Watershed Hydrology. Transactions of the American Society of Agricultural Engineers, 20, 1100-04.

17 A. Walker (1978): Simulation of the persistence of eight soil-applied herbicides, Weed Research, 18, 305-313

18 A. Walker und A. Barnes (1981): Simulation of herbicides in soils: a Revised Computer Model, Pestic. Sci., 12, 123-132.

19 W.R. Hamon (1961): J. of the Hydraulics Div. ASCE, 81(HY3), 107-120.

20 W. Haude (1952): Zur Möglichkeit nachträglicher Bestimmung der Wasserbeanspruchung durch die Luft und ihrer Nachprüfung an Hand von Tropfversuchen und Abflussmessungen. *Ber. Dtsch. Wetterd. US-Zone* x, 27-34.

21 M Müller. und W. Kördel (1996): Comparison of Screening Methods for the Estimation of Adsorption Coefficients on Soil, Chemosphere 32, 2493-2504.

22 W. J. Lyman, W. F Reehl, D. H.Rosenblatt (1981) Handbook of Chemical Property Estimation Methods, McGraw-Hill Book Company, New York.

23 W. Meylan, P. Howard (1999): User's guide for Biowin, Syracuse Research Corporation, North Syracuse, NY.

24 R. P. Schwarzenbach und J. Westall (1981), Transport of Nonpolar Organic Compounds from surface water to groundwater., Env.Sci.&T. 15, 1360.

25 W. Kördel, I. Rönnefahrt, U. Traub-Eberhard, M. Klein und P. Dreher (1996): Belastung aquatischer Ökosysteme durch Dränagewasser, Umweltbundesamt FKZ 126 05 089, Berlin

26 H. Knoche, M. Klein, P. Lepper und M. Herrchen (1998): Entwicklung von Kriterien und Verfahren zum Vergleich und zur Übertragbarkeit regionaler Umweltbedingungen innerhalb der EU-Mitgliedsstaaten, FKZ 126 05 113, Umweltbundesamt Berlin.

27 R. Hartwich, J. Behrens, W. Eckelmann, G. Haase, A. Richter, G. Roeschmann und R. Schmidt (1995): Bodenübersichtskarte der Bundesrepublik Deutschland

1 : 1.000.000. Karte mit Erläuterungen, Textlegende und Leitprofilen. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover.

28 A. Scheinost (1994): Pedotransfer-Funktionen zum Wasser- und Stoffhaushalt einer Bodenlandschaft. Diss. TU München.

29 Statistisches Bundesamt (1996): Daten zur Bodenbedeckung für die neuen Länder und Berlin. CD-ROM.

30 Statistisches Bundesamt (1997): Daten zur Bodenbedeckung für die Bundesrepublik Deutschland. CD-ROM.

31 C. Schewe, H. Kerndorff und S. Kühn: Mineralölkohlenwasserstoffe als Grundwasserkontaminanten, Stuttgart 1996.

32 M. Herrchen, M. Klein und H. Rüdel: Mobilität, Transfer und Abbauverhalten von Schadstoffen aus militärischen Altlasten, FKZ 297 728 30, Umweltbundesamt Berlin., Januar 1999.

33 Anonymous (1996): Technical Guidance Document in support of Commission Directive 93/67/EEC on risk assessment for new notified substances and Commission Regulation (EC) no 1488/94 on risk assessment for exisiting substances, Part III. ISBN 92-827-8011-2, Luxembourg.

34 BUA-Stoffbericht (Beratergremium für Umweltrelvante Altstoffe d Ges. dt. Chemiker, 1989): Tributylzinnoxid. BUA-Stoffbericht 36. VCH, Weinheim.

35 M. Ahel, W. Giger (1993). Partitioning of alkylphenols and alkylphenol polyethoxylates between water and organic solvents. Chemosphere, 26(8), 1471-1478.

36 M. Trocmé, J. Tarradellas, J-C. Védy (1988). Biotoxicity and persistence of nonylphenol during incubation in a compost-sandstone mixture. Biol. Fertility Soils, 5, 299-303.

37 D. Kollotzek, E. Hartmann, W. Kassner, J. Kurrle, E. Lemmert-Schmitt und A. Beck (1998): Technische, analytische, organisatorische und rechtliche Maßnahmen zur Verminderung der Klärschlammbelastung mit relevanten organischen Schadstoffen, UBA-Texte 35/98, Umweltbundesamt Berlin.

38 J. A. MacGregor and W. B. Nixon (1997). Decabromodiphenyl oxide (DBDPO): Determination of n-octanol/water partition coefficient. Wildlife International Ltd., 1997.

39 Meylan, W., P. Howard (1999): User's guide for KOWWIN, version 1.60, Syracuse Research Corporation, North Syracuse, NY.

40 W. Meylan, P. Howard (1999): User's guide for HENRYWIN, Syracuse Research Corporation, North Syracuse, NY.

41 F. Roy (1990). Determination of the water solubility of 4-nonylphenol. Weston Inc. Report prepared for Chemical Manufacturers Association. Study No. 90-042.

Umweltforschungsplan
des Bundesministeriums für Umwelt,
Naturschutz und Reaktorsicherheit
Gewässergüte und Wasserwirtschaft

Förderkennzeichen (UFOPLAN) 297 23 663

Anwendung von Modellen zur Abschätzung der Grundwassergefährdung durch organische Stoffe aus Reststoffen

von

Dr. Michael Klein

Anhang 1

Ergebnisse der Simulationen mit MCPELMO 1.0

Fraunhofer-Institut
für Umweltchemie und Ökotoxikologie
57392 Schmallenberg
Institutsleiter:
Prof. Dr. W. Klein

IM AUFTRAG
DES UMWELTBUNDESAMTES

Schmallenberg, 31. August 2000

Inhaltsverzeichnis

Erläuterungen zu den Tabellen ***3***

Eingabedaten für MCPELMO 1.0 (Stufe 1) ***5***

Ergebnisse der Simulationen mit MCPELMO 1.0 (Stufe 1) ***25***

Erläuterungen zu den Tabellen

Tabelle 1 (Seite 7 bis 26)

Die in den Tabellenüberschriften verwendeten Abkürzungen haben folgende Bedeutung:

M: Molare Masse

C: Wasserlöslichkeit

P: Dampfdruck

KOC: Sorptionskonstante am Boden bezogen auf den Gehalt an organischem Kohlenstoff (L/kg)

Biodegradation (Bioabbau):

Abbauraten waren für die Stoffe der Liste nicht bekannt. Mit Hilfe von quantitativen Struktur-Wirkungsbeziehungen wurde deshalb die Abbaurate nach verschiedenen Methoden abgeschätzt. Die Angaben zum Bioabbau wurden mit dem Computerprogramm Biowin v3.63 (Meylan, W., P. Howard (1999): User's guide for Biowin, Syracuse Research Corporation, North Syracuse, NY.) abgeschätzt.

Die einzelnen Spalten zum Bioabbau haben folgende Bedeutung

Linear und Non-Linear Biodegradation: Ein Wert oberhalb von 0.5 bedeutet schneller Bioabbau („FAST")

Ultimate und Primary Biodegradation: Die Zahlenangaben haben folgende Bedeutung:

5.00 Abbau innerhalb von Stunden

4.00 Abbau innerhalb von Tagen

3.00 Abbau innerhalb von Wochen

2.00 Abbau innerhalb von Monaten

1.00 Abbau innerhalb von Jahren

Tabelle 2 (Seite 25 bis 44)

Die in der Tabelle 2 aufgeführten Sickerwasserkonzentrationen der Stoffe (Spalten 7 und 8) wurden auf der Basis des Szenarios „Westliche Podsol-Region“ durchgeführt. In früheren Untersuchungen (siehe Klein, 1996) zeigte es sich, dass bei diesem das Szenario aufgrund des leichten Bodens und der Niederschlagsverhältnisse im Vergleich mit anderen Regionen relativ hohe Konzentrationen berechnet werden (*realistic worst case scenario).* Die Tabelle enthält neben der mittleren Konzentration im Sickerwasser zusätzlich auch das 90. Perzentil der Konzentrationen unter Berücksichtigung der Klimaschwankungen.

Bei der Interpretation der Ergebnisse muß berücksichtigt werden, dass von einer jährlichen Rate von 1 kg/ha unabhängig von der Substanz ausgegangen werden mußte, weil die Ausgangskonzentration der Stoffe im Klärschlamm nicht bekannt war
In der Tabelle sind die Stoffe hinsichtlich ihres Versickerungspotenzials (Bezug: 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentration) geordnet.

Tabelle 1: Eingabedaten für MCPELMO1.0 verwendet für die Simulationen im Rahmen der Stufe 1

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
1	71-55-6	1,1,1-Trichlorethane	0.1659	0.0021	2.1727	3.2000	2,27	133	1,3	13300
2	79-34-5	1,1,2,2-Tetrachlorethane	0.2221	0.0011	2.1355	3.2031	1,87	168	2,9	660
3	75-34-3	1,1-Dichlorethane	0.4777	0.1089	2.6341	3.5037	1,53	99	5,1	31000
4	106-93-4	1,2-Dibromethane	0.5658	0.0002	2.8419	3.6475	1,73	188	4	1430
5	107-05-1	Allylchloride	0.5997	0.5173	2.8569	3.6367	1,66	77	3,6	50500
6	111-44-4	Bis(2-chloroethyl)ether	0.1093	0.0021	2.5281	3.4304	1,83	143	0,02	107
7	74-83-9	Bromethane	0.6562	0.0583	3.0183	3.7461	1,06	95	0,02	187
8	107-14-2	Chloracetonitril	0.9072	0.9912	2.7768	3.5730	1,08	76	0,02	
9	75-00-3	Chlorethane	0.6054	0.5597	2.8834	3.6540	1,38	65	100	230
10	74-87-3	Chlormethane	0.6121	0.6080	2.9144	3.6743	0,98	50	5	410000
11	156-59-2	cis-1,2-Dichlorethen	0.4786	0.1117	2.6386	3.5067	1,7	97	4	28000
12	75-71-8	Dichlordifluormethane	0.2833	0.0157	2.3735	3.3186	1,57	121	0,28	560000
13	75-09-2	Dichlormethane	0.4843	0.1298	2.6651	3.5240	1,19	85	20	45300
14	107-07-3	Ethylenchlorhydrin	0.7566	0.7559	3.0080	3.7604	1,08	81		658
15	76-13-1	FREON 113	-0.0437	0.0002	1.8413	2.9687	2,6	187	170	48300
16	156-60-5	trans-1,2-Dichlorethen	0.4786	0.1117	2.6386	3.5067	1,7	97	6,3	41000
17	75-69-4	Trifluormethane	0.1640	0.0020	2.1639	3.1943	1,83	137	1,1	91100
18	79-00-5	1,1,2-Trichlorethane	0.3499	0.0116	2.3848	3.3534	1,73			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
19	120-82-1	1,2,4-Trichlorethane	0.1139	0.0036	2.1784	3.0899	3,28			
20	95-50-1	1,2-Dichlorbenzene	0.3127	0.0427	2.4611	3.3050	2,76			
21	107-06-2	1,2-Dichlorethane	0.4777	0.1089	2.6341	3.5037	1,58			
22	540-59-0	1,2-Dichorethylene	0.4786	0.1117	2.6386	3.5067	1,7			
23	78-87-5	1,2-Dichloropropane	0.4710	0.0910	2.6031	3.4835	1,92			
24	541-73-1	1,3-Dichlorobenzene	0.3127	0.0427	2.4611	3.3050	2,76			
25	542-75-6	1,3-Dichloropropene	0.4719	0.0934	2.6076	3.4864	1,95			
26	106-46-7	1,4-Dichlorobenzene	0.3127	0.0427	2.4611	3.3050	2,76			
27	88-06-2	2,4,6-Trichlorophenol	0.2221	0.0072	2.1994	3.1065	2,81			
28	100-44-7	Benzylchloride	0.7040	0.7609	2.7683	3.5694	2,36	127		
29	75-25-2	Bromoform	0.4887	0.0000	2.7275	3.5892	1,55			
30	56-23-5	Carbontetrachloride	0.0448	0.0002	1.9544	3.0699	2,08			
31	108-90-7	Chlorobenzene	0.6396	0.7674	2.7658	3.5249	2,24			
32	67-66-3	Chloroform	0.3565	0.0141	2.4158	3.3737	1,33	119		
33	107-30-2	Chloromethylmethylether	0.2505	0.0318	2.8394	3.6212	1,19	81		
34	3018-12-0	Dichloracetonitril	0.7794	0.9157	2.5275	3.4227	1,17			
35	75-27-4	Dichlorobromoethane	0.4006	0.0006	2.5197	3.4455	1,4			
36	106-89-8	Epichlorohydrin	0.2447	0.0269	2.8129	3.6039	1,35	93		
37	87-68-3	Hexachloro-1,3-butadiene	-0.0449	0.0000	1.5838	2.8679	3,92	273		
38	77-47-4	Hexachlorocyclopentadiene	-0.2346	0.0000	1.3452	2.6971	3,85			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
39	127-18-4	Tetrachloroetylene	0.2230	0.0012	2.1400	3.2060	2,51			
40	79-01-6	Trichloroethylene	0.3508	0.0119	2.3893	3.3563	2,1			
41	593-60-2	Vinylbromide	0.6505	0.0496	2.9918	3.7288	1,33			
42	75-01-4	Vinylchloride	0.6064	0.5667	2.8879	3.6570	1,41			
43	98-88-4	Benzoylchloride	0.8087	0.9433	2.9105	3.6498	1,77			
44	94-36-0	Benzoylperoxide	0.8884	0.9596	2.7079	3.5080	2,8			
45	57-57-8	beta-Proplolactone	0.8874	0.9977	3.1801	3.9727	0,6	72		
46	91-59-8	beta-Naphthylamine	0.4456	0.2826	2.7478	3.5328	2,19			
47	92-52-4	Biphenyl	0.9303	0.9881	2.9024	3.6350	3,15			
48	103-23-1	Bis(2-ethylhexyl)adipate	1.1363	0.9999	3.2573	4.3091	5,24			
49	542-88-1	Bis(chloromethyl)ether	0.1227	0.0031	2.5901	3.4709	1,32	115		
50	141-32-2	Butylacrylate	0.9691	0.9992	3.3545	4.1608	2,16			
51	123-72-8	Butyraldehyde	0.9978	0.9999	3.0621	3.9403	1,45			
52	75-15-0	Carbondisulfide	0.7113	0.8730	3.0309	3.7379	2,03	76		
53	463-58-1	Carbonylsukfide	0.7189	0.8962	3.0664	3.7611	0,33			
54	302-17-0	Chloralhydrat	0.4682	0.0123	2.4219	3.4127	1,53			
55	7782-50-5	Chlorine	0.7138	0.8810	3.0425	3.7454	0,79	71		
56	126-99-8	Chloroprene	0.5940	0.4747	2.8303	3.6194	2,15			
57	1319-77-3	Cresol(mixed Isomers)	0.8665	0.9507	2.9417	3.6629	2,09	108	10	442
58	110-82-7	Cyclohexane	0.7075	0.8598	3.0132	3.7263	2,68			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
59	334-88-3	Diazomethane	0.7275	0.9177	3.1063	3.7871	2,06			
60	1464-53-5	Diepoxybutane	0.0118	0.0062	2.9916	3.7040	0,72	86		
61	111-42-2	Diethanolamine	1.1688	0.9923	3.3112	3.9982	0,13			
62	64-67-5	Diethylsulfate	0.6741	0.6941	2.8584	3.6253	1,61			
63	77-78-1	Dimethylsulfate	0.6875	0.7717	2.9204	3.6658	1,1	126		
64	79-44-7	Dimethylcarbamylchloride	0.6963	0.8148	2.9615	3.6926	0,65			
65	141-78-6	Essigsäureethylester	0.8798	0.9971	3.1447	3.9496	1,47			
66	140-88-5	Ethylacrylate	0.8741	0.9966	3.1181	3.9323	1,65			
67	541-41-3	Ethylchloroformate	0.6959	0.8127	2.9593	3.6912	1,35			
68	74-85-1	Ethylene	0.7342	0.9315	3.1372	3.8073	1,13			
69	107-21-1	Ethyleneglycol	1.0355	0.9874	3.3819	4.0171	0,4			
70	75-21-8	Ethylenoxide	0.3792	0.2599	3.0931	3.7744	0,99	44		
71	151-56-4	Ethylenelmine	0.8809	0.9709	3.1284	3.8289	0,87	43	10	27200
72	50-00-0	Formaldehyde	1.0179	0.9999	3.1551	4.0011	1,2	30		
73	680-31-9	Hexamethylphosphoramide	0.6622	0.6140	2.8032	3.5892	0,91			
74	302-01-2	Hydrazine	0.7323	0.9278	3.1284	3.8015	0,26	32		
75	74-90-8	Hydrogencyanide	0.7347	0.9324	3.1394	3.8087	0,66	27	10	139
76	123-31-9	Hydroquinone	0.9267	0.9631	3.0686	3.7683	1,56	110		
77	78-84-2	Isobutyraldehyde	0.9978	0.9999	3.0621	3.9403	1,4			
78	67-63-0	Isopropylalcohol	0.8777	0.9635	3.2263	3.8905	1,17			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
79	108-38-3	m-Xylene	0.8063	0.9343	2.8149	3.5575	2,6			
80	108-39-4	m-Cresol	0.8665	0.9507	2.9417	3.6629	2,09			
81	108-31-6	Maleicanhydride	0.7009	0.8343	2.9825	3.7063	1,86			
82	67-56-1	Methanol	0.8910	0.9752	3.2883	3.9310	0,69	32	10	12800
83	96-33-3	Methylacrylate	0.8807	0.9972	3.1491	3.9525	1,4			
84	78-93-3	Methylethylketone	0.7200	0.8223	3.0173	3.7215	1,16			
85	60-34-4	Methylhydrazine	0.7256	0.9133	3.0974	3.7813	0,5			
86	108-88-3	Toluene	0.8864	0.9833	2.9427	3.6512	2,16			
87	584-84-9	Toluene-2,4-diisocyanate	0.7193	0.7526	2.7394	3.5279	2,96	174		
88	91-08-7	Toluene-2,6-diisocyanate	0.7193	0.7526	2.7394	3.5279	2,96	174		
89	126-72-7	Tris(2,3-dibromopropyl)phosphate	0.4523	1.0000	1.9850	3.5189	3,2			
90	51-79-6	Urethane	0.7847	0.9401	2.9556	3.9128	1,01			
91	108-05-4	Vinylacetata	0.8807	0.9972	3.1491	3.9525	1,4	86		
92	1330-20-7	Xylene(mixed Isomeres)	0.8063	0.9343	2.8149	3.5575	2,6			
93	95-80-7	2,4-Diaminotoluene	0.2766	0.1231	2.5844	3.3862	1,1			
94	121-14-2	2,4-Dinitrotoluene	0.1054	0.0177	2.3826	3.2997	2,15	182	0,25	0,029
95	80-05-7	4,4'Isopropylidenephenol	0.6866	0.4653	2.5953	3.4443	2,91			
96	60-09-3	4-Aminoazobenzene	0.3062	0.0003	2.3500	3.4069	2,68			
97	92-87-5	Benzidine	0.1923	0.0316	2.5221	3.3652	2,02	184	0,02	
98	80-15-9	Cumene hydroperoxide	0.6192	0.7157	2.6727	3.4796	2,14	152	15	50

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
99	25376-45-8	Diaminotoluene (mixed Isom.)	0.2766	0.1231	2.5844	3.3862	1,1	122	10	
100	25321-14-6	Dinitrotoluene (mixed Isom.)	0.1054	0.0177	2.3826	3.2997	2,15	182	0,27	
101	98-83-9	Isopropylbenzene	0.8194	0.9581	2.9600	3.6821	2,89	118	0,02	267
102	101-68-8	Methylenebis (phenylisocyanate)	0.6831	0.5080	2.5713	3.4181	3,73			
103	4549-40-0	N-Nitrosomethylvinylamine	0.1821	0.1866	2.6238	3.7420	0,87			
104	100-75-4	N-Nitrosopiperidine	0.1687	0.1334	2.5618	3.7015	1,39			
105	528-29-0	o-Dinitrobenzene	0.0574	0.0122	2.4885	3.3884	1,87			
106	104-94-9	p-Anisidene	0.5871	0.8322	2.7339	3.6388	1,62	123	0,6	
107	100-25-4	p-Dinitrobenzene	0.0574	0.0122	2.4885	3.3884	1,87		0,02	
108	88-89-1	Picricacid	-0.1608	0.0010	2.2405	3.2317	1,82	229	13,1	0,0001
109	1120-71-4	Propanesulfone	0.6894	0.7815	2.9293	3.6715	0,87	122		
110	26471-62-5	Toluenediisocyanate (mixed Isom.)	0.7193	0.7526	2.7394	3.5279	2,96	174		
111	68-76-8	Triaziquone	0.0353	0.0004	1.8788	2.6057	1,29			
112	126-73-8	Tributylphosphate	1.2600	1.0000	3.6594	4.7361	3,01	266	4	
113	534-52-1	2-Methyl-4,6-dinitrophenol	0.2136	0.0343	2.4037	3.3163	2,16	198		
114	94-81-5	4-(4-Chlor-2-Methylphenoxy) buttersäure	0.7155	0.7711	2.7189	3.7466	2,74			
115	116-06-3	Aldicarb	0.4730	0.1953	2.5666	3.4198	1,73	190		
116	61-82-5	Amitrol	0.4738	0.4770	2.8784	3.6180	0,87			
117	1912-24-9	Atrazin	0.0045	0.0000	2.0002	3.0969	2,42			
118	25057-89-0	Bentazon	0.6332	0.4005	2.6682	3.5011	1,87			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
119	3766-60-7	Buluron	0.4524	0.0856	2.4695	3.3409	2,34			
120	133-06-2	Captan	0.0863	0.0002	1.8032	2.9588	1,95			
121	15545-48-9	Chlortoluron	0.5185	0.1900	2.4477	3.3070	2,3			
122	21725-46-2	Cyanazin	0.1156	0.0001	1.6504	2.8422	2,27			
123	298-03-3	Demeton(including Demeton-o,Demeton-s,Demeton-s-m	0.9385	1.0000	2.7820	3.9404	2,6			
124	6190-65-4	Desethylatrazin	0.0178	0.0000	2.0622	3.1374	1,93			
125	7313-54-4	Desisopropylatrazin	0.6737	0.6911	2.8563	3.6239	-0,38			
126	1918-00-9	Dicamba	0.5862	0.6247	2.3272	3.2830	2,1			
127	120-36-5	Dichlorprop	0.4754	0.1871	2.5730	3.6406	2,51			
128	581-42-0	2,6-Dimethylnaphthalin	0.7825	0.8748	2.7042	3.4853	3,09			
129	1912-24-9	2-Ethylamino-4-chlor-6-(2-propylamino)-1,3,5-triazin	0.0045	0.0000	2.0002	3.0969	2,42			
130	834-12-8	Ametryn	0.1814	0.0001	2.1810	3.2455	2,65			
131	2642-71-9	Azinphos-Ethyl	0.8971	1.0000	2.5897	3.8148	2,74	345		
132	86-50-0	Azinphos-Methyl	0.9104	1.0000	2.6517	3.8553	2,28	317		
133	156-62-7	Calciumcyanamide	0.7094	0.8666	3.0222	3.7322	1			
134	133-90-4	Chloramben	0.2277	0.0313	2.2836	3.1192	1,98			
135	1897-45-6	Chlorothalonil	0.5053	0.6127	1.6204	2.6723	2,81			
136	56-72-4	Coumaphos	0.9516	1.0000	2.5183	3.9181	3,19	363		

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
137	2303-16-4	Diallate	0.4757	0.0286	2.2090	3.4503	3,01			
138	298-04-4	Disulfolon	0.9309	1.0000	2.7465	3.9172	2,9	274		
139	96-45-7	Ethylenethiourea	0.9091	0.9859	2.9192	3.9058	0,86			
140	2164-17-2	Fluometuron	0.1166	0.0026	2.1731	3.2383	2,19			
141	608-73-1	Hexachlorocyclohexane	-0.0593	0.0000	1.5174	2.8245	3,09			
142	121-82-4	Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazin	0.6418	0.4637	2.7083	3.5273	1,41			
143	14816-18-3	Phoxim	1.0406	0.9946	2.4796	3.3571	3,15			
144	709-98-8	Propanil	0.4890	0.1934	2.2498	3.4078	2,44			
145	1698-60-8	Pyrazon	0.8126	0.7145	2.5826	3.4755	1,45			
146	961-11-5	Tetrachlovinphos	0.2286	1.0000	1.7512	3.1885	2,88			
147	50-29-3	1,1'-(2,2,2-Trichlorethyliden)-bis-(4-chlor-Benzol(DDT))	-0.2495	0.0000	1.1961	2.4818	4,28			
148	93-76-5	2,4,5-Trichlorphenoxyessigsäure	0.2833	0.0224	2.3213	3.4458	2,62			
149	94-75-7	2,4-Dichlorphenoxyessigsäure	0.4821	0.2193	2.6040	3.6608	2,32			
150	309-00-2	Aldrin	-0.6463	0.0000	0.7173	2.2573	4,26	365		
151	319-84-6	alpha-Hexachlorcyclohexan	-0.0593	0.0000	1.5174	2.8245	3,09			
152	319-85-7	beta-Hexachlorcyclohexan	-0.0593	0.0000	1.5174	2.8245	3,09			
153	63-25-2	Carbaryl	0.7313	0.7615	2.7078	3.7510	2,19			
154	57-74-9	Chlordane	-0.8905	0.0000	0.2718	1.9913	4,19	410		
155	6164-98-3	Chlordimeform	0.5262	0.2275	2.4831	3.3301	2,45			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
156	60-57-1	Dieldrin	-1.0013	0.0000	0.6733	2.2245	3,65			
157	88-85-7	Dinoseb	0.1936	0.0192	2.3107	3.2556	2,81	240		
158	72-20-8	Endrin	-1.0013	0.0000	0.6733	2.2245	3,65	381		
159	76-44-8	Heptachlor	-0.7617	0.0000	0.5256	2.1445	4,01			
160	1024-57-3	Heptachlorepoxid	-1.1167	0.0000	0.4815	2.1117	3,4			
161	118-74-1	Hexachlorbenzol	-0.4826	0.0000	1.3302	2.4448	3,84			
162	72-43-5	Methoxychlor	0.3834	0.0162	1.5126	2.9795	3,75			
163	1836-75-5	Nitrofen	0.0743	0.0049	1.9304	3.0759	3,12			
164	8001-35-2	Toxaphene	-0.8924	0.0000	0.2629	1.9855	4,28	414		
165	1746-01-6	2,3,7,8-Tetrachlordibenzo-p-dioxin	0.1284	0.0059	1.5450	2.8761	4,62	322	1,3E-08	1,5 E-07
166	3268-87-9	Octachlordibenzo-p-dioxin	-0.6669	0.0000	0.4141	2.0159	5,96	460	3,6E-10	2,8 E-07
167	40321-76-4	1,2,3,7,8-PentaCDD	-0.0704	0.0005	1.2623	2.6610	4,95			
168	95-63-6	1,2,4-Trimethylbenzene	0.8543	0.9541	2.7090	3.4687	3,04	120		
169	108-67-8	1,3,5-Trimethylbenzol	0.8543	0.9541	2.7090	3.4687	3,04	120	2,9	200
170	106-99-0	1,3-Butadiene	0.7218	0.9038	3.0796	3.7697	1,74	54		
171	90-12-0	1-Methylnaphthalin	0.7345	0.8273	2.8101	3.5740	3,11			
172	39156-41-7	2,4-Diaminoanisolesulfate	0.5332	0.4988	2.4840	3.4756	-1,5			
173	51-28-5	2,4-Dinitrophenol	0.1656	0.0238	2.5095	3.4050	1,92			
174	110-80-5	2-Ethoxyethanol	0.5160	0.3583	3.1513	3.8374	0,8			
175	90-43-7	2-Phenyphenol	0.9104	0.9644	2.9014	3.6467	2,73			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
176	109-86-4	2-Methoxyethanol	0.5227	0.4053	3.1823	3.8577	0,55			
177	91-57-6	2-Methylnaphthalin	0.7345	0.8273	2.8101	3.5740	3,11			
178	88-75-5	2-Nitrophenol	0.4921	0.3620	2.7785	3.5783	2,01			
179	79-46-9	2-Nitropropane	0.7051	0.8511	3.0023	3.7192	1,47			
180	99-08-1	3-Methylnitrobenzol	0.4319	0.2952	2.6517	3.4730	2,25			
181	99-99-0	4-Methylnitrobenzol	0.4319	0.2952	2.6517	3.4730	2,25			
182	100-02-7	4-Nitrophenol	0.4921	0.3620	2.7785	3.5783	2,01	139	10	600
183	99-59-2	5-Nitro-o-anisidine	0.2606	0.1756	2.4649	3.4655	1,83			
184	60-35-5	Acetamide	0.9296	0.9923	3.0144	3.9679	0,42			
185	67-64-1	Acetone	0.7267	0.8495	3.0483	3.7417	0,9			
186	75-05-8	Acetonitril	1.0350	0.9992	3.0261	3.7233	0,94			
187	107-02-8	Acrolein	1.0055	0.9999	3.0976	3.9635	1,12	56		
188	79-06-1	Acrylamide	0.9239	0.9909	2.9879	3.9506	0,6	71		
189	107-13-1	Acrylonitrile	1.0293	0.9990	2.9995	3.7060	1,13	54		
190	79-10-7	Acrylsäure	0.7859	0.9327	3.4045	4.1293	1,25			
191	107-18-6	Allylacohol	0.8786	0.9645	3.2308	3.8934	1,13	58	10	2400
192	134-32-7	Alpha-Naphthylamine	0.4456	0.2826	2.7478	3.5328	2,19			
193	7664-41-7	Ammonia	0.7394	0.9409	3.1615	3.8232	1,14	17		
194	7783-20-2	Ammoniumsulfate (silution)	0.6846	0.7563	2.9072	3.6571	1,27			
195	62-53-3	Aniline	0.5975	0.8290	2.8804	3.6099	1,58	93		

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
196	98-87-3	Benzalchloride	0.5762	0.2343	2.5190	3.4191	2,51	161		
197	55-21-0	Benzamide	1.0281	0.9969	2.8993	3.8833	1,4			
198	71-43-2	Benzene	1.0296	0.9999	2.4406	3.3922	1,71			
199	19408-74-3	1,2,3,7,8,9-HexaCDD	-0.2692	0.0000	0.9796	2.4460	5,29			
200	51207-31-9	2,3,7,8-Tetrachlordibenzofuran	-0.1278	0.0001	1.6966	2.7449	4,29	306	4,2E-07	0,000123
201	57117-41-6	1,2,3,7,8-PentaCDF	-0.3266	0.0000	1.4139	2.5299	4,63			
202	57117-31-4	2,3,4,7,8-PentaCDF	-0.3266	0.0000	1.4139	2.5299	4,63			
203	39001-02-0	OctaCDF	-0.9231	0.0000	0.5657	1.8848	5,63	444	1,4E-09	5E-10
204	122-66-7	1,2-Diphenylhydrazine	0.9160	0.9818	2.8360	3.5917	2,61			
205	123-91-1	1,4-Dioxane	0.0109	0.0061	2.9871	3.7011	0,85	88		
206	615-05-4	2,4-Diaminoanisole	0.3462	0.3731	2.5658	3.5088	0,86			
207	105-67-9	2,4-Dimethylphenol	0.9145	0.9657	2.8359	3.5741	2,38			
208	53-96-3	2-Acetylaminofluorescence	0.9061	0.9572	2.5767	3.6625	2,64			
209	119-93-7	3,3'-Dimethylbenzidine	0.2883	0.0650	2.3104	3.1876	2,59			
210	91-94-1	3,3'-Dichlorobenzidine	-0.2053	0.0002	1.9567	2.9351	2,69			
211	119-90-4	3,3'-Dimethoxybenzidine	0.4276	0.5553	2.2732	3.4328	2,1			
212	101-80-4	4,4'-Diaminodiphenylether	0.3166	0.1977	2.4286	3.4192	2,17			
213	101-61-1	4,4'-Methylenebis(N,N-dimethyl)benzenamine	0.2706	0.0113	2.0526	2.8362	3,29			
214	139-65-1	4,4'-Thiodianiline	0.1771	0.0203	2.4513	3.3189	2,3			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
215	92-67-1	4-Aminobiphenyl	0.5613	0.6219	2.7123	3.5001	2,5			
216	60-11-7	4-Dimethylaminoazobenzene	0.3213	0.0001	2.1681	3.1868	3,25			
217	92-93-3	4-Nitrobiphenyl	0.4758	0.3706	2.6114	3.4568	2,88			
218	79-11-8	Chloroacetic acid	0.6639	0.6123	3.1818	3.9964	1,2	95	815	100
219	90-94-8	Michler's Ketone	0.2161	0.0033	2.0740	2.8623	2,84			
220	86-30-6	N-Nitrosodiphenylamine	0.3849	0.6303	2.4200	3.5900	2,66			
221	51-75-2	Nitrogen mustard	0.2452	0.0058	2.2531	3.1334	1,82			
222	120-71-8	p-Cresidine	0.6351	0.8786	2.6281	3.5500	1,9			
223	156-10-5	p-Nitrosodiphenylamine	0.5475	0.5215	2.6482	3.4583	2,66			
224	91-22-5	Quinoline	0.6861	0.7640	2.9137	3.6614	2,13			
225	82-68-8	Quintozene	-0.6102	0.0000	1.3439	2.4866	3,64			
226	81-07-2	Saccharin	0.6603	0.6005	2.7944	3.5834	1,25			
227	62-73-7	Dichlorvos	0.7335	1.0000	2.5182	3.7931	1,37	221		
228	115-32-2	Dicofol	-0.4957	0.0000	1.0235	2.3738	3,82			
229	60-51-5	Dimethoat	1.1625	1.0000	2.7921	4.1878	1,22	229		
230	2813-95-8	Dinoseb-Avetat	0.2319	0.2043	2.3016	3.3842	2,58			
231	330-54-1	Diuron	0.2717	0.0130	2.2709	3.1808	2,34			
232	115-29-7	Endosulfan	-0.6663	0.0000	0.6245	2.1967	2,89	407		
233	122-14-5	Fenitrothion	0.6791	1.0000	2.4958	3.7362	2,64	227		
234	55-38-9	Fenthion	0.9837	1.0000	2.6630	3.8430	3,01			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
235	34123-59-6	Isoproturon	0.7040	0.6585	2.6684	3.4816	2,42			
236	58-89-9	Lindane	-0.0593	0.0000	1.5174	2.8245	3,09	291		
237	330-55-2	Linuron	0.2641	0.0104	2.2355	3.1577	2,46			
238	121-75-5	Malathion	1.2526	1.0000	2.9033	4.2944	2,17			
239	12427-38-2	Maneb	0.6464	0.4983	2.7299	3.5414	1,38			
240	94-74-6	MCPA	0.7289	0.8338	2.7809	3.7871	2,27			
241	93-65-2	Mecoprop	0.7222	0.8043	2.7499	3.7669	2,47			
242	67129-08-2	Metazachlor	0.8234	0.7422	2.2083	3.4148	2,21			
243	10265-92-6	Methamidophos	0.6804	0.7320	2.8873	3.6441	0,65	141		
244	298-00-0	Methylparathion	0.6311	1.0000	2.6017	3.8250	2,38	263		
245	51218-45-2	Metolachlor	0.4732	0.0789	2.1862	3.3963	2,61			
246	7786-34-7	Mevinphos	1.1290	1.0000	2.9978	4.2187	0,98	224		
247	1746-81-2	Monolinuron	0.4629	0.1136	2.5182	3.3727	2,15			
248	150-68-5	Monuron	0.4706	0.1385	2.5536	3.3958	2,04			
249	1113-02-6	Omethoate	1.1701	1.0000	2.8276	4.2109	0,39			
250	34622-58-7	Orbencarb	0.5219	0.1600	2.3762	3.5041	2,92			
251	301-12-2	Oxydemeton-methyl	0.9442	1.0000	2.8087	3.9578	0,61			
252	56-38-2	Parathion	0.6178	1.0000	2.5397	3.7845	2,84	291		
253	40487-42-1	Pendimethalin	-0.1209	0.0012	1.9537	2.9797	3,36			
254	7287-19-6	Prometryn	0.1747	0.0000	2.1500	3.2252	2,84			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
255	139-40-2	Propazin	-0.0022	0.0000	1.9692	3.0767	2,61			
256	55512-33-9	Pyridat	0.6213	0.3220	2.4756	3.4097	3,78			
257	7286-69-3	Sebutylazin	-0.0022	0.0000	1.9692	3.0767	2,65			
258	122-34-9	Simazin	0.0112	0.0000	2.0312	3.1172	2,22			
259	886-50-0	Terbutryn	-0.0093	0.0000	1.9379	3.0718	2,86			
260	5915-41-3	Terbutylazin	-0.1861	0.0000	1.7571	2.9233	2,63			
261	52-68-6	Trichlorfon	0.2656	0.0011	2.0586	3.1505	0,96			
262	1582-09-8	Trifluralin	-0.7478	0.0000	1.3513	2.5848	3,59			
263	50471-44-8	Vinclozolin	0.0626	0.0011	1.9416	2.9508	2,51			
264	12122-67-7	Zineb	0.6163	0.2877	2.5898	3.4499	0,2			
265	72-55-9	1,1'-Bis-(4-chlorphenyl)-2,2-dichlorethen	0.0085	0.0001	1.7368	2.8570	4,96			
266	117-81-7	Di-(2-ethylhexyl)phthalate	1.1268	0.9999	3.2132	4.2803	5,38	391	0,000029	0,0013
267	117-84-0	N-Dioctylphthalate	1.1268	0.9999	3.2132	4.2803	5,46	391		
268	131-11-3	Dimethylphthalate	1.0035	0.9998	3.0505	4.0255	1,88	194	2,4	130
269	84-66-2	Diethylphthalate	0.9901	0.9997	2.9885	3.9850	2,4	222	0,02	
270	84-74-2	di(n-butyl)phthalate	1.1803	1.0000	3.4612	4.4422	3,42	278	0,012	0,0053
271	85-44-9	Phthalatic anhydride	0.6770	0.7121	2.8718	3.6340	2,1	148	6	2000
272	85-68-7	Butylbenzylphthalate	1.1837	1.0000	3.1096	4.1289	3,54	312	0,02	
273	83-32-9	Acenaphthen	0.7835	0.8779	2.7087	3.4882	3,46	154	0,02	
274	120-12-7	Anthracene	0.9819	0.9995	2.2194	3.2478	3,62	178	0,02	

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
275	56-55-3	Benz(a)anthracene	-0.0184	0.0000	1.8953	2.8161	4,57	228	0,02	
276	50-32-8	Benzo(a)pyren	-0.0299	0.0000	1.8422	2.7815	5,05	252	0,02	
277	205-99-2	Benzo(b)fluoranthen	-0.0299	0.0000	1.8422	2.7815	5,05	252	0,02	
278	86-74-8	Carbazol	0.6679	0.6535	2.8297	3.6065	2,7	167	0,02	
279	218-01-9	Chrysen	-0.0184	0.0000	1.8953	2.8161	4,57	228	0,02	
280	53-70-3	Dibenz(a,h)anthracen	-0.0423	0.0000	1.7847	2.7439	5,53	278	0,02	
281	206-44-0	Fluoranthen	-0.0060	0.0000	1.9529	2.8537	4,09	202	0,02	1320
282	86-73-7	Fluoren	0.7231	0.7730	2.7570	3.5394	3,36	166	0,02	1320
283	91-20-3	Naphthalene	1.0057	0.9998	2.3300	3.3200	2,67	128	0,02	132
284	198-55-0	Perylen	-0.0299	0.0000	1.8422	2.7815	5,05	252	0,02	
285	85-01-8	Phenanthren	0.9819	0.9995	2.2194	3.2478	3,62	178	0,02	
286	129-00-0	Pyren	-0.0060	0.0000	1.9529	2.8537	4,09	202	0,02	1320
287	7012-37-5	2,4,4'-Trichlorbiphenyl (PCB 28)	0.0777	0.0012	2.0102	2.9801	4,71			
288	35693-99-3	2,2',5,5'-Tetrachlorbiphenyl (PCB 52)	-0.1211	0.0001	1.7275	2.7651	5,24			
289	37680-73-2	2,2',4,5,5'-Pentachlorbiphenyl (PCB 101)	-0.3200	0.0000	1.4448	2.5501	5,75			
290	35065-28-2	2,2',3,4,4',5-Hexachlorbiphenyl (PCB 138)	-0.5188	0.0000	1.1621	2.3350	6,27			
291	35065-27-1	2,2',4,4',5,5'-Hexachlorbiphenyl (PCB 153)	-0.5188	0.0000	1.1621	2.3350	6,27			
292	35065-29-3	2,2',3,4,4',5,5'-Heptachlorbiphenyl (PCB 180)	-0.7176	0.0000	0.8793	2.1200	6,8			
293	74-88-4	Methyliodide	0.6800	0.7297	2.8855	3.6430	1,39			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
294	108-10-1	Methylisobutylketon	0.7067	0.7565	2.9553	3.6810	1,62			
295	624-83-9	Methylisocyanate	0.7204	0.9001	3.0731	3.7654	1,43	57		
296	80-62-6	Methylmethacrylate	0.8741	0.9966	3.1181	3.9323	1,69			
297	1634-04-4	Methyl tert-butylether	0.1743	0.0324	2.7836	3.5574	1,76	88	51	26800
298	74-95-3	Methylenebromide	0.5724	0.0002	2.8729	3.6677	1,33			
299	121-69-7	N,N-Dimethylaniline	0.6127	0.7035	2.6986	3.3898	2,15			
300	71-36-3	N-Butylalcohol	0.9794	0.9927	3.4937	4.1393	1,46			
301	759-73-9	N-Nitro-N-ethylurea	0.6918	0.7934	2.9404	3.6788	1,01			
302	684-93-5	N-Nitro-N-methylurea	0.6985	0.8242	2.9714	3.6990	0,75			
303	924-16-3	N-Nitrosodi-n-butylamine	0.3646	0.7668	3.0610	4.1760	2,22			
304	621-64-7	N-Nitrosodi-n-propylurea	0.1611	0.1092	2.5263	3.6784	1,71			
305	62-75-9	N-Nitrosodiemthylamine	0.1878	0.2138	2.6503	3.7593	0,69	74		
306	55-18-5	N-Nitrosodiethylamine	0.1744	0.1544	2.5883	3.7189	1,2			
307	59-89-2	N-Nitrosomorpholine	-0.1796	0.0048	2.5488	3.6889	0,8			
308	139-13-9	Nitrilotriaceticacid	0.6694	0.5002	3.6158	4.4407	-0,96			
309	98-95-3	Nitrobenzene	0.5120	0.6344	2.7795	3.5666	1,96	123		
310	55-63-0	Nitroglycerine	0.6394	0.4462	2.6973	3.5201	1,81			
311	95-47-6	o-Xylol	0.8063	0.9343	2.8149	3.5575	2,6			
312	90-04-0	o-Anisidine	0.5871	0.8322	2.7339	3.6388	1,62			
313	134-29-2	o-Anisidinehydrochloride	0.8035	0.9521	2.7883	3.6946	0,35			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
314	95-48-7	o-Cresol	0.8665	0.9507	2.9417	3.6629	2,09	108		
315	95-53-4	o-Toluidine	0.5175	0.5392	2.7526	3.5162	1,86			
316	636-21-5	o-Toluidinehydrochloride	0.5175	0.5392	2.7526	3.5162	1,86			
317	57-11-4	Octadecansäure	0.7932	0.8109	3.2334	4.0919	5,15			
318	106-50-3	p-Phenylenediamine	0.2286	0.0878	2.6903	3.4750	0,82			
319	106-42-3	p-Xylol	0.8063	0.9343	2.8149	3.5575	2,6			
320	106-44-5	p-Cresol	0.8665	0.9507	2.9417	3.6629	2,09			
321	79-21-0	Peraceticacid	0.7113	0.8731	3.0311	3.7380	0,46	76	10	7900
322	108-95-2	Phenol	0.9466	0.9876	3.0696	3.7565	1,81	94		
323	75-44-5	Phosgene	0.7005	0.8326	2.9806	3.7050	0,65	99		
324	123-38-6	Propionaldehyde	1.0045	0.9999	3.0931	3.9606	1,19	58	340	34300
325	114-26-1	Propoxur	0.8594	0.9643	2.6319	3.8166	2,01			
326	115-07-1	Propylene	0.7275	0.9177	3.1062	3.7870	1,46			
327	75-56-9	Propyleneoxide	0.3725	0.2235	3.0621	3.7542	1,21	58		
328	75-55-8	Propylenelmine	0.8742	0.9647	3.0974	3.8086	1,09	57		
329	110-86-1	Pyridine	0.5553	0.5615	2.8102	3.7149	1,44			
330	78-92-2	sec-Butylalcohol	0.8710	0.9558	3.1953	3.8702	1,42			
331	100-42-5	Styrene (monomer)	0.8261	0.9654	2.9910	3.7024	2,44			
332	96-09-3	Sryreneoxide	0.4711	0.4188	2.9470	3.6695	1,85			
333	75-65-0	tert-Butylalcohol	0.5283	0.5580	2.8232	3.5874	1,4			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
334	62-55-5	Thioacetamide	0.9219	0.9904	2.9789	3.9448	0,59			
335	97-56-3	CI Solvent Yellow 3	0.2740	0.0001	2.1163	3.2245	3,25			
336	492-80-8	CI Solvent Yellow 34	0.2097	0.0053	2.0987	2.8860	2,57			
337	128-66-5	CI Vat Yellow 4	0.6030	0.0681	2.4197	3.3238	4,29			
338	120-80-9	Catechol	0.9267	0.9631	3.0686	3.7683	1,56	110	434	1300
339	98-82-8	Cumene	0.8731	0.9754	2.8807	3.6107	2,89			
340	111-46-6	Diethylenglykol	0.6671	0.5764	3.2759	3.9438	0,26			
341	120-58-1	Isosafrole	0.9342	0.9945	2.7245	3.7680	2,77			
342	106-51-4	Quinone	0.7097	0.6382	2.9153	3.6473	1,15			
343	94-59-7	Safrole	0.9888	0.9969	2.6497	3.6994	2,81			
344	75-35-4	Vinylidenchloride	0.4786	0.1117	2.6386	3.5067	1,82			
345	101-14-4	4,4-Methylenebis(2-chloroaniline)	-0.1573	0.0003	1.8508	2.8463	2,82	267		
346	510-15-6	Chlorobenzilate	0.2181	0.0361	1.9954	3.1234	3,09	325		
347	67-72-1	Hexachloroethane	-0.4014	0.0000	1.2127	2.5956	3,36	237		
348	87-86-5	Pentachlorophenol	-0.1755	0.0000	1.6340	2.6765	3,48	266		
349	634-66-2	1,2,3,4-Tetrachlorbenzol	-0.0849	0.0003	1.8957	2.8749	3,8	216	0,02	
350	634-90-2	1,2,3,5-Tetrachlorbenzol	-0.0849	0.0003	1.8957	2.8749	3,8	216		
351	87-61-6	1,2,3-Trichlorbenzol	0.1139	0.0036	2.1784	3.0899	3,28	181	0,02	
352	108-70-3	1,3,5-Trichlorbenzol	0.1139	0.0036	2.1784	3.0899	3,28	181	0,02	1300
353	78-88-6	2,3-Dichloropropene	0.4719	0.0934	2.6076	3.4864	2,06	111	2,15	7070

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
354	88-73-3	2-Chlornitrobenzol	0.1851	0.0229	2.4748	3.3467	2,3	158	0,02	1600
355	121-73-3	3-Chlornitrobenzol	0.1851	0.0229	2.4748	3.3467	2,3	158	0,02	1600
356	108-43-0	3-Chlorphenol	0.6197	0.5191	2.7649	3.5366	2,14	129		13
357	106-47-8	4-Chloranilin	0.2706	0.0615	2.5757	3.3900	1,91	128	0,02	2
358	100-00-5	4-Chlornitrobenzol	0.1851	0.0229	2.4748	3.3467	2,3	158	0,02	1600
359	106-48-9	4-Chlorphenol	0.6197	0.5191	2.7649	3.5366	2,14	129	27	100
360	57-14-7	1,1-Dimethylhydrazine	0.7189	0.8962	3.0664	3.7610	0,4	60	0,6	16400
361	75-07-0	Acetaldehyd	1.0112	0.9999	3.1241	3.9808	0,93	44	10	101000
362	106-97-8	Butan	0.8283	0.9825	3.3691	4.0329	1,97	58	0,061	242000
363	77-73-6	Dicyclopentadien	0.6846	0.7561	2.9070	3.6570	2,94	132	0,02	300
364	109-89-7	Diethylamine	0.8666	0.9561	3.0620	3.7855	1,44	73	10	25300
365	60-29-7	Diethylether	0.3649	0.1864	3.0267	3.7311	1,57	74	12	58700
366	124-40-3	Dimethylamine	0.8799	0.9701	3.1240	3.8260	0,93	45	10	
367	115-10-6	Dimethylether	0.3783	0.2545	3.0887	3.7715	1,06	46	70	504000
368	75-04-7	Ethylamine	0.8799	0.9701	3.1240	3.8260	0,94	45	0,6	42300
369	100-41-4	Ethylbenzene	0.8798	0.9797	2.9117	3.6309	2,55	106	0,17	1240
370	110-54-3	Hexan	0.8149	0.9741	3.3071	3.9925	2,76	86	0,02	16000
371	75-28-5	Isobutan	0.7199	0.8987	3.0707	3.7639	1,91	58	0,02	2160000
372	74-98-6	Propan	0.7266	0.9155	3.1017	3.7841	1,57	44	10	770000
373	4680-78-8	CI Acid Green 3	0.1172	0.0003	1.5798	2.5881	-0,64			

Nr.	CASNR	Substanz	Lin. Biodegr.	Non-Linear Biodegr.	Ulitmate Biodegr.	Primary Biodegr.	log(KOC) [L/kg]	M (g/mol)	C (mg/L)	P (Pa)
374	569-64-2	CI Basic Green 4	0.4966	0.0693	2.1600	3.0381	1,44			
375	989-38-8	CI Basic Red 1	0.8803	0.9574	2.1478	3.3942	1,39			
376	1937-37-7	CI Direct Black 38	-1.2341	0.0000	0.6257	2.3876	3,57			
377	2602-46-2	CI Direct Blue 6	-0.5351	0.0000	1.2392	2.6978	2,37			
378	16071-86-6	CI Direct Brown 95	0.1336	0.0000	1.0315	2.7249	-2,38			
379	2832-40-8	CI Disperse Yellow 3	0.7581	0.0077	2.2310	3.5830	3,09			
380	81-88-9	CI Food Red 15	0.4911	0.0268	1.9737	2.8764	1,98			
381	3761-53-3	CI Food Red 5	0.5021	0.0000	1.7438	3.0044	0,98			
382	3118-97-6	CI Solvent Orange 7	0.5993	0.0008	2.1948	3.2989	4,45			
383	842-07-9	CI Solvent Yellow 14	0.6314	0.0024	2.4285	3.4813	3,89			

Tabelle 2: Ergebnisse der MCPELMO 1.0, Szenario „Westliche Podsolregion“ (Alle Substanzen: jährliche Rate von 1 kg/ha)

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
378	16071-86-6	CI Direct Brown 95	0.00E+00	0.0	974.4	315.02	343.91
373	4680-78-8	CI Acid Green 3	0.00E+00	0.2	337.8	284.82	313.97
381	3761-53-3	CI Food Red 5	0.00E+00	9.5	246.0	249.24	278.21
111	68-76-8	Triaziquone	0.00E+00	19.5	189.5	207.41	235.47
261	52-68-6	Trichlorfon	1.76E-06	9.1	133.9	196.95	224.81
172	39156-41-7	2,4-Diaminoanisolesulfate	0.00E+00	0.0	58.9	144.84	170.40
377	2602-46-2	CI Direct Blue 6	0.00E+00	234.4	652.3	142.78	168.08
375	989-38-8	CI Basic Red 1	0.00E+00	24.5	112.7	139.90	164.78
374	569-64-2	CI Basic Green 4	0.00E+00	27.5	110.1	131.40	155.68
120	133-06-2	Captan	0.00E+00	89.1	219.3	118.41	141.82
264	12122-67-7	Zineb	0.00E+00	1.6	48.0	110.66	133.61
206	615-05-4	2,4-Diaminoanisole	0.00E+00	7.2	50.3	91.66	112.70
103	4549-40-0	N-Nitrosomethylvinylamine	0.00E+00	7.4	44.9	76.38	95.61
122	21725-46-2	Cyanazin	3.06E-07	186.2	294.7	74.80	93.77
380	81-88-9	CI Food Red 15	0.00E+00	95.5	157.8	73.74	92.47
93	95-80-7	2,4-Diaminotoluene	0.00E+00	12.6	48.5	73.65	92.44
99	25376-45-8	Diaminotoluene (mixed Isom,)	0.00E+00	12.6	48.5	73.65	92.44
307	59-89-2	N-Nitrosomorpholine	2.53E-03	6.3	51.9	72.17	91.10
318	106-50-3	p-Phenylenediamine	0.00E+00	6.6	39.5	67.30	85.30

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
54	302-17-0	Chloralhydrat	5.90E-04	33.9	66.4	67.53	84.56
313	134-29-2	o-Anisidinehydrochloride	0.00E+00	2.2	32.7	66.03	83.90
124	6190-65-4	Desethylatrazin	0.00E+00	85.1	133.0	64.40	81.79
125	7313-54-4	Desisopropylatrazin	0.00E+00	0.4	28.7	62.04	79.34
249	1113-02-6	Omethoate	0.00E+00	2.5	30.3	60.83	77.91
251	301-12-2	Oxydemeton-methyl	0.00E+00	4.1	31.4	58.08	74.73
73	680-31-9	Hexamethylphosphoramide	0.00E+00	8.1	31.8	53.08	67.81
108	88-89-1	Picricacid	0.00E+00	66.1	94.2	51.72	66.99
221	51-75-2	Nitrogen mustard	0.00E+00	66.1	92.0	49.17	64.00
145	1698-60-8	Pyrazon	0.00E+00	28.2	48.6	41.40	54.82
243	10265-92-6	Methamidophos	0.00E+00	4.5	27.0	39.32	52.60
64	79-44-7	Dimethylcarbamylchloride	0.00E+00	4.5	23.4	36.67	48.32
116	61-82-5	Amitrol	2.28E-08	7.4	27.5	33.16	45.11
184	60-35-5	Acetamide	4.56E-04	2.6	21.1	29.59	40.77
334	62-55-5	Thioacetamide	0.00E+00	3.9	22.6	29.41	40.50
188	79-06-1	Acrylamide	1.03E-04	4.0	22.2	28.81	39.77
139	96-45-7	Ethylenethiourea	0.00E+00	7.2	25.4	28.72	39.64
60	1464-53-5	Diepoxybutane	0.00E+00	5.2	22.1	28.60	38.48
323	75-44-5	Phosgene	0.00E+00	4.5	22.5	27.77	38.47
360	57-14-7	1,1-Dimethylhydrazine	0.00E+00	2.5	19.1	26.20	36.53

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
109	1120-71-4	Propanesulfone	0.00E+00	7.4	24.9	26.15	36.44
142	121-82-4	Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazin	0.00E+00	25.7	38.2	25.94	36.01
229	60-51-5	Dimethoat	1.09E-05	16.6	32.5	25.66	35.75
302	684-93-5	N-Nitro-N-methylurea	0.00E+00	5.6	22.9	24.77	34.71
239	12427-38-2	Maneb	0.00E+00	24.0	36.6	24.67	34.43
226	81-07-2	Saccharin	0.00E+00	17.8	32.3	23.95	33.58
258	122-34-9	Simazin	9.73E-05	166.0	141.2	21.39	30.38
134	133-90-4	Chloramben	4.00E-06	95.5	86.7	20.97	29.79
301	759-73-9	N-Nitro-N-ethylurea	0.00E+00	10.2	24.4	20.39	29.11
183	99-59-2	5-Nitro-o-anisidine	0.00E+00	67.6	61.1	19.85	28.25
74	302-01-2	Hydrazine	0.00E+00	1.8	16.9	19.20	26.71
85	60-34-4	Methylhydrazine	0.00E+00	3.2	18.0	18.51	25.84
246	7786-34-7	Mevinphos	0.00E+00	9.5	21.8	15.51	22.78
115	116-06-3	Aldicarb	1.49E-04	53.7	50.2	15.64	22.76
90	51-79-6	Urethane	2.25E-03	10.2	23.7	15.22	22.45
133	156-62-7	Calciumcyanamide	0.00E+00	10.0	20.8	12.59	18.89
105	528-29-0	o-Dinitrobenzene	0.00E+00	74.1	58.3	12.22	18.28
107	100-25-4	p-Dinitrobenzene	0.00E+00	74.1	58.3	12.22	18.28
194	7783-20-2	Ammoniumsulfate (silution)	0.00E+00	18.6	26.0	11.46	17.32
140	2164-17-2	Fluometuron	1.86E-04	154.9	107.3	10.97	16.68

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
211	119-90-4	3,3'-Dimethoxybenzidine	0.00E+00	125.9	88.5	10.77	16.40
106	104-94-9	p-Anisidene	0.00E+00	41.7	36.3	9.75	14.89
312	90-04-0	o-Anisidine	0.00E+00	41.7	36.3	9.75	14.89
361	75-07-0	Acetaldehyd	0.00E+00	8.5	17.1	9.37	14.49
305	62-75-9	N-Nitrosodiemthylamine	1.88E-01	4.9	42.7	9.34	13.90
340	111-46-6	Diethylenglykol	0.00E+00	1.8	12.7	8.32	13.05
197	55-21-0	Benzamide	0.00E+00	25.1	26.4	7.88	12.35
242	67129-08-2	Metazachlor	0.00E+00	162.2	100.3	7.77	12.23
173	51-28-5	2,4-Dinitrophenol	2.23E-03	83.2	56.0	7.76	12.19
126	1918-00-9	Dicamba	2.25E-04	125.9	79.7	7.27	11.53
104	100-75-4	N-Nitrosopiperidine	8.72E-02	24.5	50.6	6.83	10.81
67	541-41-3	Ethylchloroformate	0.00E+00	22.4	23.5	6.35	9.70
117	1912-24-9	Atrazin	5.46E-04	263.0	149.9	5.92	9.60
129	1912-24-9	2-Ethylamino-4-chlor-6-(2-propylamino)-1,3,5-triazin	5.46E-04	263.0	149.9	5.92	9.60
260	5915-41-3	Terbutylazin	3.84E-03	426.6	239.8	5.63	9.18
61	111-42-2	Diethanolamine	0.00E+00	1.3	11.9	5.37	8.32
306	55-18-5	N-Nitrosodiethylamine	3.75E-01	15.8	48.1	5.18	8.21
176	109-86-4	2-Methoxyethanol	3.41E-02	3.5	15.3	4.66	7.66
321	79-21-0	Peraceticacid	2.21E-01	2.9	20.4	4.55	7.31
263	50471-44-8	Vinclozolin	1.37E-03	323.6	167.9	4.08	6.88

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
174	110-80-5	2-Ethoxyethanol	4.86E-02	6.3	16.2	3.54	5.96
193	7664-41-7	Ammonia	0.00E+00	13.8	15.9	3.26	5.63
222	120-71-8	p-Cresidine	0.00E+00	79.4	44.6	3.24	5.56
100	25321-14-6	Dinitrotoluene (mixed Isom,)	0.00E+00	141.3	71.6	3.12	5.39
118	25057-89-0	Bentazon	2.25E-04	74.1	41.2	3.10	5.33
97	92-87-5	Benzidine	0.00E+00	104.7	54.7	2.91	5.06
218	79-11-8	Chloroacetic acid	0.00E+00	15.8	15.3	2.51	4.44
205	123-91-1	1,4-Dioxane	4.96E-01	7.1	22.3	2.46	4.23
310	55-63-0	Nitroglycerine	9.83E-03	64.6	39.0	2.28	4.08
94	121-14-2	2,4-Dinitrotoluene	1.34E-02	141.3	71.6	1.95	3.55
227	62-73-7	Dichlorvos	1.44E+00	23.4	55.1	1.76	3.13
248	150-68-5	Monuron	5.91E-05	109.6	51.5	1.69	3.11
212	101-80-4	4,4'-Diaminodiphenylether	0.00E+00	147.9	65.5	1.48	2.77
295	624-83-9	Methylisocyanate	0.00E+00	26.9	18.9	1.41	2.64
231	330-54-1	Diuron	5.21E-05	218.8	88.8	1.29	2.45
69	107-21-1	Ethyleneglycol	6.20E-03	2.5	10.4	1.35	2.35
304	621-64-7	N-Nitrosodi-n-propylurea	5.56E-01	51.3	54.2	1.24	2.30
255	139-40-2	Propazin	4.75E-04	407.4	159.2	1.20	2.29
325	114-26-1	Propoxur	1.48E-04	102.3	44.2	1.15	2.21
308	139-13-9	Nitrilotriaceticacid	0.00E+00	0.1	6.6	1.05	2.02

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
357	106-47-8	4-Chloranilin	1.20E-01	81.3	49.3	0.82	1.61
338	120-80-9	Catechol	3.24E-04	36.3	19.0	0.78	1.55
257	7286-69-3	Sebutylazin	0.00E+00	446.7	159.2	0.74	1.48
368	75-04-7	Ethylamine	1.27E+00	8.7	17.1	0.69	1.36
329	110-86-1	Pyridine	1.14E+00	27.5	31.3	0.66	1.32
247	1746-81-2	Monolinuron	4.75E-03	141.3	55.1	0.64	1.31
328	75-55-8	Propylenelmine	8.70E-01	12.3	18.0	0.62	1.24
333	75-65-0	tert-Butylalcohol	1.49E+00	25.1	30.6	0.56	1.13
232	115-29-7	Endosulfan	6.72E+00	776.2	2139.5	0.56	1.13
195	62-53-3	Aniline	2.09E-01	38.0	27.4	0.54	1.10
336	492-80-8	CI Solvent Yellow 34	0.00E+00	371.5	123.9	0.53	1.10
144	709-98-8	Propanil	0.00E+00	275.4	92.5	0.52	1.08
366	124-40-3	Dimethylamine	1.83E+00	8.5	17.1	0.52	1.05
210	91-94-1	3,3'-Dichlorobenzidine	0.00E+00	489.8	163.0	0.48	1.01
76	123-31-9	Hydroquinone	1.36E-04	36.3	19.0	0.46	0.88
113	534-52-1	2-Methyl-4,6-dinitrophenol	1.45E-01	144.5	68.7	0.41	0.86
237	330-55-2	Linuron	6.82E-03	288.4	95.1	0.39	0.84
186	75-05-8	Acetonitril	3.56E+00	8.7	20.6	0.38	0.80
146	961-11-5	Tetrachlovinphos	1.90E-04	758.6	242.5	0.36	0.77
191	107-18-6	Allylacohol	5.16E-01	13.5	13.9	0.36	0.77

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
135	1897-45-6	Chlorothalonil	2.07E-01	645.7	312.3	0.36	0.77
185	67-64-1	Acetone	4.10E+00	7.9	19.8	0.34	0.72
214	139-65-1	4,4'-Thiodianiline	0.00E+00	199.5	62.7	0.32	0.71
121	15545-48-9	Chlortoluron	1.49E-05	199.5	63.1	0.32	0.71
345	101-14-4	4,4-Methylenebis(2-chloroaniline)	0.00E+00	660.7	200.1	0.27	0.60
182	100-02-7	4-Nitrophenol	4.29E-05	102.3	33.3	0.23	0.52
315	95-53-4	o-Toluidine	2.28E-01	72.4	35.0	0.22	0.49
316	636-21-5	o-Toluidinehydrochloride	2.28E-01	72.4	35.0	0.22	0.49
14	107-07-3	Ethylenchlorhydrin	7.86E-02	12.0	21.4	0.22	0.45
355	121-73-3	3-Chlornitrobenzol	0.00E+00	199.5	59.9	0.19	0.43
72	50-00-0	Formaldehyde	3.48E-02	15.8	16.1	0.19	0.39
190	79-10-7	Acrylsäure	0.00E+00	17.8	9.9	0.16	0.39
98	80-15-9	Cumene hydroperoxide	0.00E+00	138.0	40.9	0.16	0.38
119	3766-60-7	Buluron	0.00E+00	218.8	60.5	0.10	0.25
245	51218-45-2	Metolachlor	9.30E-04	407.4	104.6	8.65E-02	0.22
327	75-56-9	Propyleneoxide	7.19E+00	16.2	19.3	7.50E-02	0.19
364	109-89-7	Diethylamine	2.63E+00	27.5	19.3	6.43E-02	0.16
324	123-38-6	Propionaldehyde	7.58E+00	15.5	18.1	6.08E-02	0.16
189	107-13-1	Acrylonitrile	1.43E+01	13.5	21.7	5.95E-02	0.15
130	834-12-8	Ametryn	2.47E-04	446.7	105.7	4.92E-02	0.13

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
153	63-25-2	Carbaryl	4.51E-04	154.9	38.2	4.89E-02	0.13
259	886-50-0	Terbutryn	1.19E-03	724.4	169.1	4.93E-02	0.13
330	78-92-2	sec-Butylalcohol	9.36E-01	26.3	14.9	4.78E-02	0.13
187	107-02-8	Acrolein	1.26E+01	13.2	18.0	3.94E-02	0.11
180	99-08-1	3-Methylnitrobenzol	0.00E+00	177.8	42.6	2.89E-02	8.15E-02
181	99-99-0	4-Methylnitrobenzol	0.00E+00	177.8	42.6	2.89E-02	8.15E-02
236	58-89-9	Lindane	3.62E-01	1230.3	381.1	2.82E-02	7.91E-02
149	94-75-7	2,4-Dichlorphenoxyessigsäure	0.00E+00	208.9	46.7	2.39E-02	6.88E-02
34	3018-12-0	Dichloracetonitril	3.92E-01	14.8	54.1	2.49E-02	6.06E-02
230	2813-95-8	Dinoseb-Avetat	1.04E-02	380.2	83.7	1.95E-02	5.72E-02
342	106-51-4	Quinone	4.95E+01	14.1	25.6	1.93E-02	5.68E-02
209	119-93-7	3,3'-Dimethylbenzidine	0.00E+00	389.0	82.3	1.76E-02	5.24E-02
268	131-11-3	Dimethylphthalate	1.08E-02	75.9	19.7	1.71E-02	5.10E-02
132	86-50-0	Azinphos-Methyl	1.55E-05	190.5	42.6	1.65E-02	4.94E-02
359	106-48-9	4-Chlorphenol	6.48E-02	138.0	34.2	1.62E-02	4.85E-02
322	108-95-2	Phenol	3.44E-02	64.6	19.0	1.57E-02	4.71E-02
81	108-31-6	Maleicanhydride	0.00E+00	72.4	22.5	1.79E-02	4.48E-02
178	88-75-5	2-Nitrophenol	9.76E-01	102.3	33.3	1.42E-02	4.30E-02
356	108-43-0	3-Chlorphenol	8.40E-02	138.0	34.2	1.34E-02	4.09E-02
179	79-46-9	2-Nitropropane	1.23E+01	29.5	21.6	1.17E-02	3.63E-02

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
309	98-95-3	Nitrobenzene	2.48E+00	91.2	33.3	1.13E-02	3.51E-02
271	85-44-9	Phthalatic anhydride	0.00E+00	125.9	27.8	9.19E-03	2.94E-02
141	608-73-1	Hexachlorocyclohexane	7.83E-01	1230.3	381.1	9.12E-03	2.90E-02
151	319-84-6	alpha-Hexachlorcyclohexan	7.83E-01	1230.3	381.1	9.12E-03	2.90E-02
152	319-85-7	beta-Hexachlorcyclohexan	7.83E-01	1230.3	381.1	9.12E-03	2.90E-02
332	96-09-3	Sryreneoxide	1.63E+00	70.8	24.1	8.36E-03	2.68E-02
192	134-32-7	Alpha-Naphthylamine	4.79E-02	154.9	35.4	8.26E-03	2.66E-02
148	93-76-5	2,4,5-Trichlorphenoxyessigsäure	0.00E+00	416.9	80.6	7.11E-03	2.33E-02
155	6164-98-3	Chlordimeform	3.56E-02	281.8	59.0	6.50E-03	2.15E-02
219	90-94-8	Michler's Ketone	0.00E+00	691.8	130.0	5.82E-03	1.94E-02
298	74-95-3	Methylenebromide	8.49E+01	21.4	27.8	5.62E-03	1.89E-02
244	298-00-0	Methylparathion	1.03E-02	239.9	46.9	5.31E-03	1.80E-02
294	108-10-1	Methylisobutylketon	1.43E+01	41.7	23.7	4.62E-03	1.58E-02
367	115-10-6	Dimethylether	1.35E+02	11.5	18.3	3.39E-03	1.21E-02
8	107-14-2	Chloracetonitril	1.12E+00	12.0	33.4	2.92E-03	8.49E-03
240	94-74-6	MCPA	1.37E-04	186.2	33.2	2.16E-03	8.07E-03
49	542-88-1	Bis(chloromethyl)ether	2.13E+01	20.9	47.9	2.39E-03	7.06E-03
63	77-78-1	Dimethylsulfate	4.13E-01	12.6	25.3	2.27E-03	6.75E-03
354	88-73-3	2-Chlornitrobenzol	4.60E+00	199.5	59.9	1.60E-03	6.14E-03
2	79-34-5	1,1,2,2-Tetrachlorethane	3.79E+01	74.1	115.4	1.66E-03	5.06E-03

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
358	100-00-5	4-Chlornitrobenzol	5.62E+00	199.5	59.9	1.24E-03	4.92E-03
196	98-87-3	Benzalchloride	0.00E+00	323.6	55.0	1.23E-03	4.89E-03
238	121-75-5	Malathion	1.06E-03	147.9	26.2	1.22E-03	4.84E-03
198	71-43-2	Benzene	5.73E+02	51.3	64.0	1.22E-03	4.82E-03
254	7287-19-6	Prometryn	1.36E-03	691.8	112.2	1.12E-03	4.50E-03
297	1634-04-4	Methyl tert-butylether	6.07E+01	57.5	33.0	1.10E-03	4.41E-03
32	67-66-3	Chloroform	3.79E+02	21.4	67.1	1.35E-03	4.19E-03
96	60-09-3	4-Aminoazobenzene	0.00E+00	478.6	76.3	8.87E-04	3.65E-03
320	106-44-5	p-Cresol	1.03E-01	123.0	24.3	8.57E-04	3.54E-03
35	75-27-4	Dichlorobromoethane	2.19E+02	25.1	54.9	1.12E-03	3.52E-03
91	108-05-4	Vinylacetata	5.28E+01	25.1	16.3	8.12E-04	3.38E-03
314	95-48-7	o-Cresol	1.24E-01	123.0	24.3	7.46E-04	3.13E-03
300	71-36-3	N-Butylalcohol	9.10E-01	28.8	8.4	7.13E-04	3.00E-03
13	75-09-2	Dichlormethane	3.36E+02	15.5	41.5	9.29E-04	2.98E-03
299	121-69-7	N,N-Dimethylaniline	5.87E+00	141.3	38.9	6.55E-04	2.78E-03
33	107-30-2	Chloromethylmethylether	3.14E+01	15.5	29.6	8.37E-04	2.70E-03
18	79-00-5	1,1,2-Trichlorethane	8.51E+01	53.7	71.3	7.76E-04	2.52E-03
235	34123-59-6	Isoproturon	1.16E-05	263.0	41.2	5.73E-04	2.48E-03
75	74-90-8	Hydrogencyanide	1.37E+01	4.6	16.6	7.32E-04	2.39E-03
45	57-57-8	beta-Proplolactone	7.99E+00	4.0	15.3	7.21E-04	2.36E-03

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
36	106-89-8	Epichlorohydrin	3.14E+00	22.4	31.2	7.03E-04	2.31E-03
127	120-36-5	Dichlorprop	0.00E+00	323.6	49.6	5.09E-04	2.23E-03
293	74-88-4	Methyliodide	5.44E+02	24.5	27.1	4.65E-04	2.00E-03
224	91-22-5	Quinoline	1.73E-01	134.9	25.7	3.44E-04	1.57E-03
71	151-56-4	Ethylenelmine	1.25E+00	7.4	16.9	4.15E-04	1.42E-03
21	107-06-2	1,2-Dichlorethane	1.22E+02	38.0	44.0	3.89E-04	1.34E-03
3	75-34-3	1,1-Dichlorethane	5.81E+02	33.9	44.0	3.31E-04	1.15E-03
70	75-21-8	Ethylenoxide	1.53E+01	9.8	18.1	3.27E-04	1.14E-03
84	78-93-3	Methylethylketone	5.88E+00	14.5	21.0	3.16E-04	1.11E-03
46	91-59-8	beta-Naphthylamine	1.92E-02	154.9	35.4	2.89E-04	1.02E-03
29	75-25-2	Bromoform	5.53E+01	35.5	36.8	2.70E-04	9.58E-04
82	67-56-1	Methanol	4.70E-01	4.9	12.4	2.64E-04	9.41E-04
365	60-29-7	Diethylether	1.27E+02	37.2	20.6	1.71E-04	8.43E-04
10	74-87-3	Chlormethane	9.11E+02	9.5	25.6	2.11E-04	7.66E-04
220	86-30-6	N-Nitrosodiphenylamine	0.00E+00	457.1	66.6	1.49E-04	7.47E-04
7	74-83-9	Bromethane	6.45E+02	11.5	21.0	2.05E-04	7.45E-04
11	156-59-2	cis-1,2-Dichlorethen	4.22E+02	50.1	43.7	1.98E-04	7.23E-04
22	540-59-0	1,2-Dichorethylene	4.22E+02	50.1	43.7	1.98E-04	7.23E-04
16	156-60-5	trans-1,2-Dichlorethen	9.69E+02	50.1	43.7	1.55E-04	5.78E-04
6	111-44-4	Bis(2-chloroethyl)ether	1.76E+00	67.6	54.0	1.51E-04	5.63E-04

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
296	80-62-6	Methylmethacrylate	3.48E+01	49.0	17.3	9.39E-05	4.94E-04
9	75-00-3	Chlorethane	1.15E+03	24.0	27.2	1.26E-04	4.76E-04
163	1836-75-5	Nitrofen	0.00E+00	1318.3	171.5	8.19E-05	4.37E-04
30	56-23-5	Carbontetrachloride	2.85E+03	120.2	163.8	1.05E-04	4.03E-04
40	79-01-6	Trichloroethylene	1.02E+03	125.9	70.7	8.49E-05	3.32E-04
62	64-67-5	Diethylsulfate	8.68E-01	40.7	28.5	7.93E-05	3.12E-04
41	593-60-2	Vinylbromide	1.27E+03	21.4	22.1	7.92E-05	3.12E-04
5	107-05-1	Allylchloride	1.14E+03	45.7	28.6	7.83E-05	3.09E-04
1	71-55-6	1,1,1-Trichlorethane	1.78E+03	186.2	107.4	7.66E-05	3.02E-04
344	75-35-4	Vinylidenchloride	2.70E+03	66.1	43.7	5.59E-05	2.79E-04
23	78-87-5	1,2-Dichloropropane	2.91E+02	83.2	46.8	6.60E-05	2.64E-04
346	510-15-6	Chlorobenzilate	7.48E-03	1230.3	151.3	4.60E-05	2.62E-04
353	78-88-6	2,3-Dichloropropene	4.30E+02	114.8	46.4	4.89E-05	2.60E-04
25	542-75-6	1,3-Dichloropropene	3.67E+02	89.1	46.4	5.95E-05	2.40E-04
39	127-18-4	Tetrachloroetylene	1.83E+03	323.6	114.4	3.84E-05	1.61E-04
157	88-85-7	Dinoseb	4.71E-02	645.7	82.3	2.60E-05	1.58E-04
233	122-14-5	Fenitrothion	9.61E-02	436.5	57.5	2.56E-05	1.55E-04
77	78-84-2	Isobutyraldehyde	1.86E+01	25.1	19.3	3.42E-05	1.45E-04
42	75-01-4	Vinylchloride	2.87E+03	25.7	27.0	3.15E-05	1.34E-04
78	67-63-0	Isopropylalcohol	8.37E-01	14.8	14.0	3.09E-05	1.32E-04

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
241	93-65-2	Mecoprop	0.00E+00	295.1	35.2	1.81E-05	1.14E-04
51	123-72-8	Butyraldehyde	1.19E+01	28.2	19.3	2.17E-05	9.51E-05
215	92-67-1	4-Aminobiphenyl	0.00E+00	316.2	37.9	1.44E-05	9.33E-05
4	106-93-4	1,2-Dibromethane	6.89E+01	53.7	29.5	2.09E-05	9.20E-05
208	53-96-3	2-Acetylaminofluorescence	0.00E+00	436.5	49.2	1.17E-05	7.73E-05
17	75-69-4	Trifluormethane	1.00E+04	67.6	109.3	1.34E-05	6.14E-05
160	1024-57-3	Heptachlorepoxid	3.31E+00	2511.9	2820.5	8.60E-06	5.88E-05
56	126-99-8	Chloroprene	5.80E+03	141.3	30.1	1.13E-05	5.23E-05
83	96-33-3	Methylacrylate	2.04E+01	25.1	16.3	1.06E-05	4.94E-05
52	75-15-0	Carbondisulfide	1.49E+03	107.2	20.5	1.05E-05	4.91E-05
55	7782-50-5	Chlorine	4.65E+03	6.2	20.0	8.47E-06	4.02E-05
53	463-58-1	Carbonylsukfide	4.97E+03	2.1	19.1	6.04E-06	2.95E-05
207	105-67-9	2,4-Dimethylphenol	2.07E-01	239.9	29.8	3.65E-06	2.74E-05
65	141-78-6	Essigsäureethylester	1.38E+01	29.5	16.4	4.92E-06	2.45E-05
80	108-39-4	m-Cresol	8.94E-02	123.0	24.3	4.72E-06	2.36E-05
59	334-88-3	Diazomethane	0.00E+00	114.8	17.7	3.22E-06	1.66E-05
57	1319-77-3	Cresol(mixed Isomers)	1.24E-01	123.0	24.3	2.84E-06	1.48E-05
170	106-99-0	1,3-Butadiene	7.61E+03	55.0	18.6	2.70E-06	1.45E-05
43	98-88-4	Benzoylchloride	1.36E+01	58.9	25.8	2.69E-06	1.41E-05
15	76-13-1	FREON 113	5.44E+04	398.1	203.8	2.32E-06	1.23E-05

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
89	126-72-7	Tris(2,3-dibromopropyl)phosphate	0.00E+00	1584.9	154.4	1.23E-06	1.04E-05
58	110-82-7	Cyclohexane	1.55E+04	478.6	21.2	1.73E-06	9.41E-06
86	108-88-3	Toluene	6.86E+02	144.5	24.3	1.67E-06	8.93E-06
326	115-07-1	Propylene	2.03E+04	28.8	17.7	1.07E-06	8.44E-06
283	91-20-3	Naphthalene	4.55E+01	467.7	79.3	9.32E-07	8.14E-06
31	108-90-7	Chlorobenzene	3.21E+02	173.8	34.1	1.45E-06	7.99E-06
376	1937-37-7	CI Direct Black 38	0.00E+00	3715.4	2134.5	7.60E-07	6.79E-06
66	140-88-5	Ethylacrylate	4.06E+01	44.7	17.3	1.17E-06	6.56E-06
38	77-47-4	Hexachlorocyclopentadiene	2.79E+03	7079.5	531.5	9.61E-07	5.48E-06
303	924-16-3	N-Nitrosodi-n-butylamine	1.36E+00	166.0	19.3	5.73E-07	5.28E-06
12	75-71-8	Dichlordifluormethane	3.54E+04	37.2	72.9	7.32E-07	4.27E-06
223	156-10-5	p-Nitrosodiphenylamine	0.00E+00	457.1	42.9	4.06E-07	3.88E-06
347	67-72-1	Hexachloroethane	4.02E+02	2290.9	686.6	5.24E-07	3.20E-06
250	34622-58-7	Orbencarb	0.00E+00	831.8	72.5	2.92E-07	2.89E-06
68	74-85-1	Ethylene	2.36E+04	13.5	16.7	3.63E-07	2.25E-06
137	2303-16-4	Diallate	3.93E-01	1023.3	100.1	2.14E-07	2.20E-06
131	2642-71-9	Azinphos-Ethyl	9.84E-04	549.5	48.0	1.69E-07	1.78E-06
269	84-66-2	Diethylphthalate	4.65E-02	251.2	22.2	1.24E-07	1.35E-06
372	74-98-6	Propan	7.31E+04	37.2	17.8	1.38E-07	1.33E-06
79	108-38-3	m-Xylene	7.42E+02	398.1	31.1	1.29E-07	8.74E-07

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
379	2832-40-8	CI Disperse Yellow 3	0.00E+00	1230.3	96.0	7.44E-08	8.58E-07
319	106-42-3	p-Xylol	7.13E+02	398.1	31.1	6.81E-08	4.65E-07
92	1330-20-7	Xylene(mixed Isomeres)	6.85E+02	398.1	31.1	6.02E-08	4.15E-07
369	100-41-4	Ethylbenzene	8.14E+02	354.8	25.8	5.43E-08	3.78E-07
252	56-38-2	Parathion	5.84E-02	691.8	52.9	2.50E-08	3.25E-07
371	75-28-5	Isobutan	1.23E+05	81.3	18.9	3.96E-08	3.13E-07
24	541-73-1	1,3-Dichlorobenzene	2.72E+02	575.4	61.5	4.21E-08	3.12E-07
27	88-06-2	2,4,6-Trichlorophenol	2.69E-01	645.7	102.0	3.31E-08	2.51E-07
348	87-86-5	Pentachlorophenol	2.53E-03	3020.0	304.2	1.79E-08	2.42E-07
26	106-46-7	1,4-Dichlorobenzene	2.49E+02	575.4	61.5	3.15E-08	2.39E-07
123	298-03-3	Demeton(includ. Demeton-o,Demeton-s,Demeton-s-m)	3.51E-01	398.1	33.1	1.74E-08	2.35E-07
311	95-47-6	o-Xylol	5.35E+02	398.1	31.1	2.69E-08	1.98E-07
204	122-66-7	1,2-Diphenylhydrazine	0.00E+00	407.4	29.8	1.25E-08	1.76E-07
362	106-97-8	Butan	9.82E+04	93.3	10.6	2.35E-08	1.75E-07
213	101-61-1	4,4'-Methylenebis(N,N-dimethyl)benzenamine	0.00E+00	1949.8	135.5	1.21E-08	1.70E-07
370	110-54-3	Hexan	1.86E+05	575.4	12.0	2.04E-08	1.54E-07
20	95-50-1	1,2-Dichlorbenzene	1.98E+02	575.4	61.5	1.45E-08	1.18E-07
114	94-81-5	4-(4-Chlor-2-Methylphenoxy) buttersäure	0.00E+00	549.5	37.4	4.23E-09	6.69E-08
335	97-56-3	CI Solvent Yellow 3	3.29E-03	1778.3	119.8	3.97E-09	6.33E-08
339	98-82-8	Cumene	1.19E+03	776.2	27.3	4.54E-09	3.89E-08

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
253	40487-42-1	Pendimethalin	8.85E-02	2290.9	164.0	1.96E-09	3.37E-08
343	94-59-7	Safrole	0.00E+00	645.7	42.7	1.87E-09	3.23E-08
341	120-58-1	Isosafrole	0.00E+00	588.8	37.0	1.36E-09	2.43E-08
217	92-93-3	4-Nitrobiphenyl	0.00E+00	758.6	46.0	1.03E-09	1.89E-08
331	100-42-5	Styrene (monomer)	2.84E+02	275.4	22.1	1.99E-09	1.86E-08
278	86-74-8	Carbazol	0.00E+00	501.2	30.2	8.46E-10	1.60E-08
169	108-67-8	1,3,5-Trimethylbenzol	9.06E+02	1096.5	38.1	1.71E-09	1.59E-08
216	60-11-7	4-Dimethylaminoazobenzene	0.00E+00	1778.3	108.4	8.26E-10	1.56E-08
37	87-68-3	Hexachloro-1,3-butadiene	1.06E+03	8317.6	335.2	1.54E-09	1.51E-08
28	100-44-7	Benzylchloride	4.26E+01	229.1	34.0	1.38E-09	1.36E-08
95	80-05-7	4,4'Isopropylidenephenol	0.00E+00	812.8	47.5	3.17E-10	6.67E-09
352	108-70-3	1,3,5-Trichlorbenzol	0.00E+00	1905.5	106.2	2.46E-10	5.33E-09
168	95-63-6	1,2,4-Trimethylbenzene	6.37E+02	1096.5	38.1	3.10E-10	3.32E-09
101	98-83-9	Isopropylbenzene	8.12E+02	776.2	23.5	2.68E-10	2.91E-09
158	72-20-8	Endrin	7.77E-01	4466.8	1947.0	1.00E-10	2.39E-09
175	90-43-7	2-Phenyphenol	0.00E+00	537.0	26.3	1.66E-11	4.83E-10
156	60-57-1	Dieldrin	5.99E+00	4466.8	1947.0	7.20E-12	2.30E-10
262	1582-09-8	Trifluralin	1.06E+01	3890.5	525.3	5.20E-12	1.72E-10
19	120-82-1	1,2,4-Trichlorethane	1.47E+02	1905.5	106.2	4.32E-12	6.92E-11
143	14816-18-3	Phoxim	0.00E+00	1412.5	59.4	9.46E-13	3.77E-11

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
351	87-61-6	1,2,3-Trichlorbenzol	1.29E+02	1905.5	106.2	1.32E-12	2.97E-11
138	298-04-4	Disulfolon	4.12E-01	794.3	35.4	5.16E-13	2.20E-11
225	82-68-8	Quintozene	8.27E+00	4365.2	532.8	4.03E-13	1.76E-11
234	55-38-9	Fenthion	1.51E-01	1023.3	41.6	3.27E-13	1.47E-11
87	584-84-9	Toluene-2,4-diisocyanate	0.00E+00	912.0	35.9	2.01E-13	9.50E-12
88	91-08-7	Toluene-2,6-diisocyanate	0.00E+00	912.0	35.9	2.01E-13	9.50E-12
110	26471-62-5	Toluenediisocyanate (mixed Isom,)	0.00E+00	912.0	35.9	2.01E-13	9.50E-12
50	141-32-2	Butylacrylate	4.75E+01	144.5	10.9	1.53E-13	3.24E-12
136	56-72-4	Coumaphos	0.00E+00	1548.8	55.1	5.19E-14	2.85E-12
44	94-36-0	Benzoylperoxide	3.66E-01	631.0	38.2	1.04E-13	2.29E-12
162	72-43-5	Methoxychlor	0.00E+00	5623.4	384.6	2.76E-14	1.62E-12
228	115-32-2	Dicofol	0.00E+00	6606.9	989.6	1.86E-14	1.14E-12
128	581-42-0	2,6-Dimethylnaphthalin	0.00E+00	1230.3	38.5	6.92E-15	4.74E-13
363	77-73-6	Dicyclopentadien	0.00E+00	871.0	26.0	6.86E-16	6.05E-14
161	118-74-1	Hexachlorbenzol	1.76E+02	6918.3	547.1	1.91E-16	6.99E-15
350	634-90-2	1,2,3,5-Tetrachlorbenzol	1.63E+02	6309.6	183.4	4.79E-18	2.32E-16
171	90-12-0	1-Methylnaphthalin	3.67E+01	1288.2	31.3	2.49E-19	5.25E-17
177	91-57-6	2-Methylnaphthalin	5.35E+01	1288.2	31.3	3.39E-19	4.92E-17
285	85-01-8	Phenanthren	3.68E+00	4168.7	98.1	1.35E-19	3.05E-17
274	120-12-7	Anthracene	5.75E+00	4168.7	98.1	8.96E-20	2.12E-17

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
159	76-44-8	Heptachlor	1.53E+02	10232.9	2590.1	7.89E-20	5.41E-18
349	634-66-2	1,2,3,4-Tetrachlorbenzol	7.85E+01	6309.6	183.4	4.07E-21	1.35E-18
47	92-52-4	Biphenyl	3.18E+01	1412.5	26.2	0.00E+00	0.00E+00
48	103-23-1	Bis(2-ethylhexyl)adipate	4.48E-02	173780.1	13.2	0.00E+00	0.00E+00
102	101-68-8	Methylenebis (phenylisocyanate)	0.00E+00	5370.3	49.7	0.00E+00	0.00E+00
112	126-73-8	Tributylphosphate	1.55E-02	1023.3	6.1	0.00E+00	0.00E+00
147	50-29-3	1,1'-(2,2,2-Trichlorethyliden)-bis-(4-chlor-Benzol(DDT))	8.89E-01	19054.6	709.0	0.00E+00	0.00E+00
150	309-00-2	Aldrin	5.09E+01	18197.0	1788.3	0.00E+00	0.00E+00
154	57-74-9	Chlordane	5.02E+00	15488.2	4229.6	0.00E+00	0.00E+00
164	8001-35-2	Toxaphene	6.20E-01	19054.6	4303.0	0.00E+00	0.00E+00
165	1746-01-6	2,3,7,8-Tetrachlordibenzo-p-dioxin	5.17E+00	41686.9	361.3	0.00E+00	0.00E+00
166	3268-87-9	Octachlordibenzo-p-dioxin	0.00E+00	912010.8	3212.8	0.00E+00	0.00E+00
167	40321-76-4	1,2,3,7,8-PentaCDD	0.00E+00	89125.1	623.8	0.00E+00	0.00E+00
199	19408-74-3	1,2,3,7,8,9-HexaCDD	0.00E+00	194984.5	1077.2	0.00E+00	0.00E+00
200	51207-31-9	2,3,7,8-Tetrachlordibenzofuran	0.00E+00	19498.4	269.5	0.00E+00	0.00E+00
201	57117-41-6	1,2,3,7,8-PentaCDF	0.00E+00	42658.0	465.4	0.00E+00	0.00E+00
202	57117-31-4	2,3,4,7,8-PentaCDF	0.00E+00	42658.0	465.4	0.00E+00	0.00E+00
203	39001-02-0	OctaCDF	1.95E-01	426579.5	2396.9	0.00E+00	0.00E+00
256	55512-33-9	Pyridat	0.00E+00	6025.6	59.8	0.00E+00	0.00E+00
265	72-55-9	1,1'-Bis-(4-chlorphenyl)-2,2-dichlorethen	2.17E+00	91201.1	249.4	0.00E+00	0.00E+00

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
266	117-81-7	Di-(2-ethylhexyl)phthalate	1.52E+00	239883.3	14.4	0.00E+00	0.00E+00
267	117-84-0	N-Dioctylphthalate	0.00E+00	288403.2	14.4	0.00E+00	0.00E+00
270	84-74-2	di(n-butyl)phthalate	1.87E-01	2630.3	8.9	0.00E+00	0.00E+00
272	85-68-7	Butylbenzylphthalate	1.30E-01	3467.4	17.6	0.00E+00	0.00E+00
273	83-32-9	Acenaphthen	1.65E+01	2884.0	38.1	0.00E+00	0.00E+00
275	56-55-3	Benz(a)anthracene	8.29E-01	37153.5	183.6	0.00E+00	0.00E+00
276	50-32-8	Benzo(a)pyren	4.72E-02	112201.8	203.4	0.00E+00	0.00E+00
277	205-99-2	Benzo(b)fluoranthen	6.79E-02	112201.8	203.4	0.00E+00	0.00E+00
279	218-01-9	Chrysen	9.78E+00	37153.5	183.6	0.00E+00	0.00E+00
280	53-70-3	Dibenz(a,h)anthracen	0.00E+00	338844.2	227.3	0.00E+00	0.00E+00
281	206-44-0	Fluoranthen	9.16E-01	12302.7	164.3	0.00E+00	0.00E+00
282	86-73-7	Fluoren	9.94E+00	2290.9	34.7	0.00E+00	0.00E+00
284	198-55-0	Perylen	0.00E+00	112201.8	203.4	0.00E+00	0.00E+00
286	129-00-0	Pyren	1.23E+00	12302.7	164.3	0.00E+00	0.00E+00
287	7012-37-5	2,4,4'-Trichlorbiphenyl (PCB 28)	2.07E+01	51286.1	147.0	0.00E+00	0.00E+00
288	35693-99-3	2,2',5,5'-Tetrachlorbiphenyl (PCB 52)	2.07E+01	173780.1	253.9	0.00E+00	0.00E+00
289	37680-73-2	2,2',4,5,5'-Pentachlorbiphenyl (PCB 101)	9.30E+00	562341.3	438.4	0.00E+00	0.00E+00
290	35065-28-2	2,2',3,4,4',5-Hexachlorbiphenyl (PCB 138)	2.17E+00	1862087.1	757.1	0.00E+00	0.00E+00
291	35065-27-1	2,2',4,4',5,5'-Hexachlorbiphenyl (PCB 153)	2.38E+00	1862087.1	757.1	0.00E+00	0.00E+00
292	35065-29-3	2,2',3,4,4',5,5'-Heptachlorbiphenyl (PCB 180)	1.03E+00	6309573.4	1307.6	0.00E+00	0.00E+00

Nr.	CAS-No.	Substanz	Henry (J/mol)	KOC (L/kg)	DT50 (d)	Sickerwasser Mittelwert (µg/L)	Sickerwasser 90.Perzentil (µg/L)
317	57-11-4	Octadecansäure	0.00E+00	141253.8	13.8	0.00E+00	0.00E+00
337	128-66-5	CI Vat Yellow 4	0.00E+00	19498.4	66.6	0.00E+00	0.00E+00
382	3118-97-6	CI Solvent Orange 7	0.00E+00	28183.8	102.9	0.00E+00	0.00E+00
383	842-07-9	CI Solvent Yellow 14	0.00E+00	7762.5	65.5	0.00E+00	0.00E+00

Umweltforschungsplan
des Bundesministeriums für Umwelt,
Naturschutz und Reaktorsicherheit
Gewässergüte und Wasserwirtschaft

Förderkennzeichen (UFOPLAN) 297 23 663

Anwendung von Modellen zur Abschätzung der Grundwassergefährdung durch organische Stoffe aus Reststoffen

von

Dr. Michael Klein

Anhang 2

Die Bestimmung von Sickerwasserkonzentrationen mit Nomogrammen

Fraunhofer-Institut
für Umweltchemie und Ökotoxikologie
57392 Schmallenberg
Institutsleiter:
Prof. Dr. W. Klein

IM AUFTRAG
DES UMWELTBUNDESAMTES

Schmallenberg, 31. August 2000

Inhaltsverzeichnis

Die Berechnung der Sickerwasserkonzentrationen ***3***

Berechnungsbeispiel ***4***

Karte der Sickerwasserszenarien ***5***

Nomogramme ***6***

Bestimmung des Unsichertheitsfaktors U ***6***
Bestimmung des Konzentrationsfaktors K ***7***
Bestimmung des Schwankungsfaktors S ***73***
Bestimmung des Henryfaktors HF ***139***

1 Die Berechnung der Sickerwasserkonzentrationen

Die jährlichen Sickerwasserkonzentrationen können für insgesamt 22 Versickerungszenarien und jeweils drei Ausbringungszeitpunkte (Mai, Juli und November) berechnet werden. Im Anhang findet man auf der Seite III eine Karte mit den Versickerungsszenarien. Zunächst muss die Menge der Substanz, die regelmäßig mit dem Reststoff auf die landwirtschaftliche Fläche gelangt, bestimmt werden.

$$R_S = c * R_R / 1000.0 \quad (1)$$

R_S: jährliche Menge der Substanz, die auf die landwirtschaftliche Fläche gelangt [kg/(ha Jahr)]
c_S: Konzentration der Substanz im Reststoff [mg/kg]
R_R: jährliche Aufbringungsrate für den Reststoff [t/(ha Jahr)]

Anschließend muss der Konzentrationsfaktor für die Substanz mit Hilfe der Logarithmen der beiden Größen KOC (Sorptionskonstante bezogen auf den Gehalt an organischem Kohlenstoff im Boden) und Halbwertszeit im Boden (= DT50) im entsprechenden Diagramm abgelesen werden (im Anhang die Seiten 4 bis 69). Der mit diesen Diagrammen bestimmbare stoffabhängige Konzentrationsfaktor KF berücksichtigt allerdings noch keine (mögliche) Verflüchtigung der Substanz aus dem Boden. Zur Berücksichtigung dieses Prozesses kann der Henryfaktor HF aus entsprechenden Diagrammen abgelesen werden. Für jede Kombination aus Versickerungsszenrario und Aufbringungszeitpunkt liegt ein Diagramm vor (im Anhang die Seiten 136 bis 201). Der Henryfaktor wird nur für Substanzen verwendet, die höhere (dimensionslose) Henrykonstanten aufweisen als im Diagrammtitel angegeben. Ist die Henrykonstante kleiner als der im Diagramm angegebene Grenzwert, wird von einem Henryfaktor = 1 ausgegangen. Die mittlere Sickerwasserkonzentration wird dann nach Gleichung (2) berechnet.

$$c_{SW} = R_s * HF * 10^{KF} \quad (2)$$

c_{SW}: mittlere jährliche Sickerwasserkonzentration der Substanz [µg/L]
R_S: jährliche Menge der Substanz, die auf die landwirtschaftliche Fläche gelangt [kg/(ha Jahr)]
HF: Henryfaktor [-]
KF: Konzentrationsfaktor [-]

Zur Berücksichtigung der Schwankungsbreite möglicher Sickerwasserkonzentrationen muss zunächst der Schwankungsfaktor S in Abhängigkeit der Logarithmen von KOC und DT50 aus den entsprechenden Diagrammen bestimmt werden (im Anhang die Seiten 70 bis 135). Sie liegen ebenfalls für jede Kombination aus Sickerwasserszenario und Anwendungszeitpunkt vor. Mit Hilfe des Diagramms im

Anhang Seite 3 kann für jeden Schwankungsfaktor S und einer vorgegebenen Perzentile der Unsicherheitsfaktor U abgelesen werden. Man erhält dann das Perzentil der jährlichen Sickerwasserkonzentration durch Multiplikation des Unsicherheitsfaktors mit dem Mittelwert der jährlichen Sickerwasserkonzentration.

$$c_{SWP} = c_{SW} * U \qquad (3)$$

c_{SW}: mittlere jährliche Sickerwasserkonzentration der Substanz [µg/L]

c_{SWP}: Perzentil der jährlichen Sickerwasserkonzentration der Substanz [µg/L]

U: Unsicherheitsfaktor [-]

2 Berechnungsbeispiel

Die Berechnung der jährlichen Sickerwasserkonzentration für das Szenario 16 (siehe Karte auf der Seite III) wird im folgendem an einem Beispiel demonstriert. Dabei wird die Substanz Nonylphenol ausgewählt, die im Reststoff in einer (angenommenen) Konzentration von 50 mg/kg vorliegt. Der Reststoff wird in einer Rate von 5 Tonnen pro 3 Jahre (entsprechend 1.67 Tonnen pro Jahr) jeweils im Mai auf die landwirtschaftliche Fläche ausgebracht. Es soll das 90. Perzentil der jährlichen Sickerwasserkonzentrationen bestimmt werden.

Zunächst muss der Konzentrationsfaktor berechnet werden. Es wird dabei von einer Halbwertszeit im Boden von 10 Tagen, einem KOC-Wert von 3500 L/kg und einer Henrykonstante (dimensionslos) von $4\ 10^{-3}$ ausgegangen.

Mit Hilfe von Gleichung (1) wird die jährliche Auftragsrate bestimmt:

$$R_S = c * R_R / 1000.0 = 50 * 1.67 / 1000 = \underline{0.0835\ kg/ha}$$

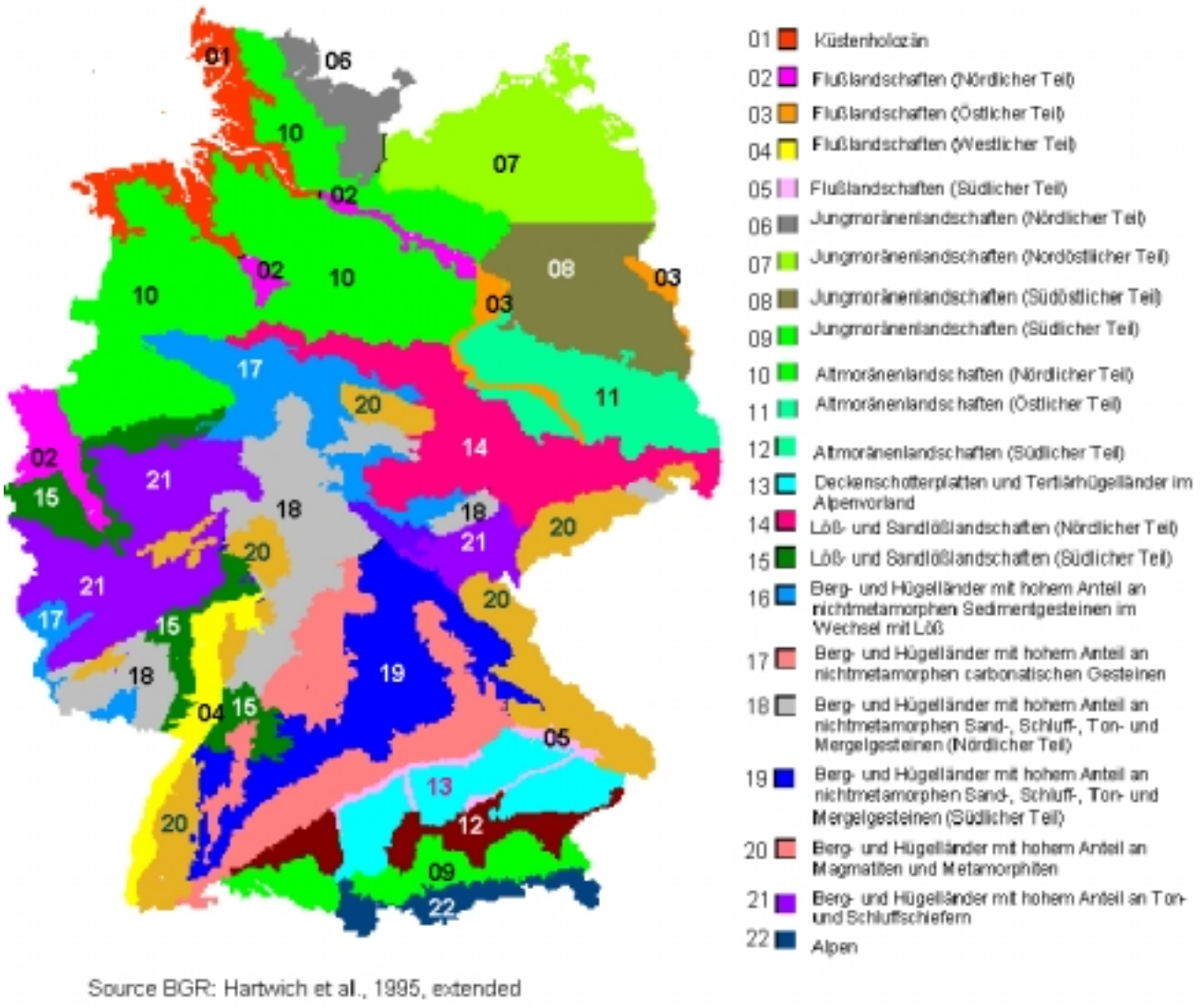
Im nächsten Schritt wird die mittlere jährliche Sickerwasserkonzentration berechnet. Dazu wird im Diagramm auf der Seite 49 für das Szenario 16 und einer Maiaufbringung der Konzentrationsfaktor K abgelesen. Es wird an der Stelle Log(KOC) = Log 3500 = 3.54 (x-Koordinate) und Log(DT50)=Log(15) =1.17 (y-Koordinate) der Wert –0.8 für den Konzentrationsfaktor bestimmt. Die dimensionslose Henrykonstante für Nonylphenol ($4 * 10^{-3}$) ist höher als der Grenzwert im Diagramm auf der Seite 181 (10^{-4}), es muss also mit Hilfe des Henryfaktors eine Korrektur der Sickerwasserkonzentration vorgenommen werden. Da im Diagramm der Wertebereich für den Logarithmus der Sorptionskonstante bei 2.7 endet, muss der Wert des Korrekturfaktors HF näherungsweise an der Stelle (x= 2.7; y= 1.17) abgelesen werden (HF = 0.46). Nach Gleichung (2) ergibt sich für die mittlere Konzentration im Sickerwasser:

c_{SW} = R_s * HF * 10^{KF} = 0.0835 * 0.46 * $10^{-0.8}$ µg/L = 0.006 µg/L

Schließlich wird das 90. Perzentil der Sickerwasserkonzentrationen berechnet. Dazu wird zunächst der Schwankungsfaktor S im Diagramm auf der Seite 115 bestimmt (S= 0.26). Aus dem Diagramm auf der Seite 3 ergibt sich für diesen Schwankungsfaktor für das 90. Perzentil ein Unsicherheitsfaktor U =2 zu. Nach Gleichung 3 wird folgender Wert für das 90. Perzentil der jährlichen Sickerwasserkonzentrationen berechnet:

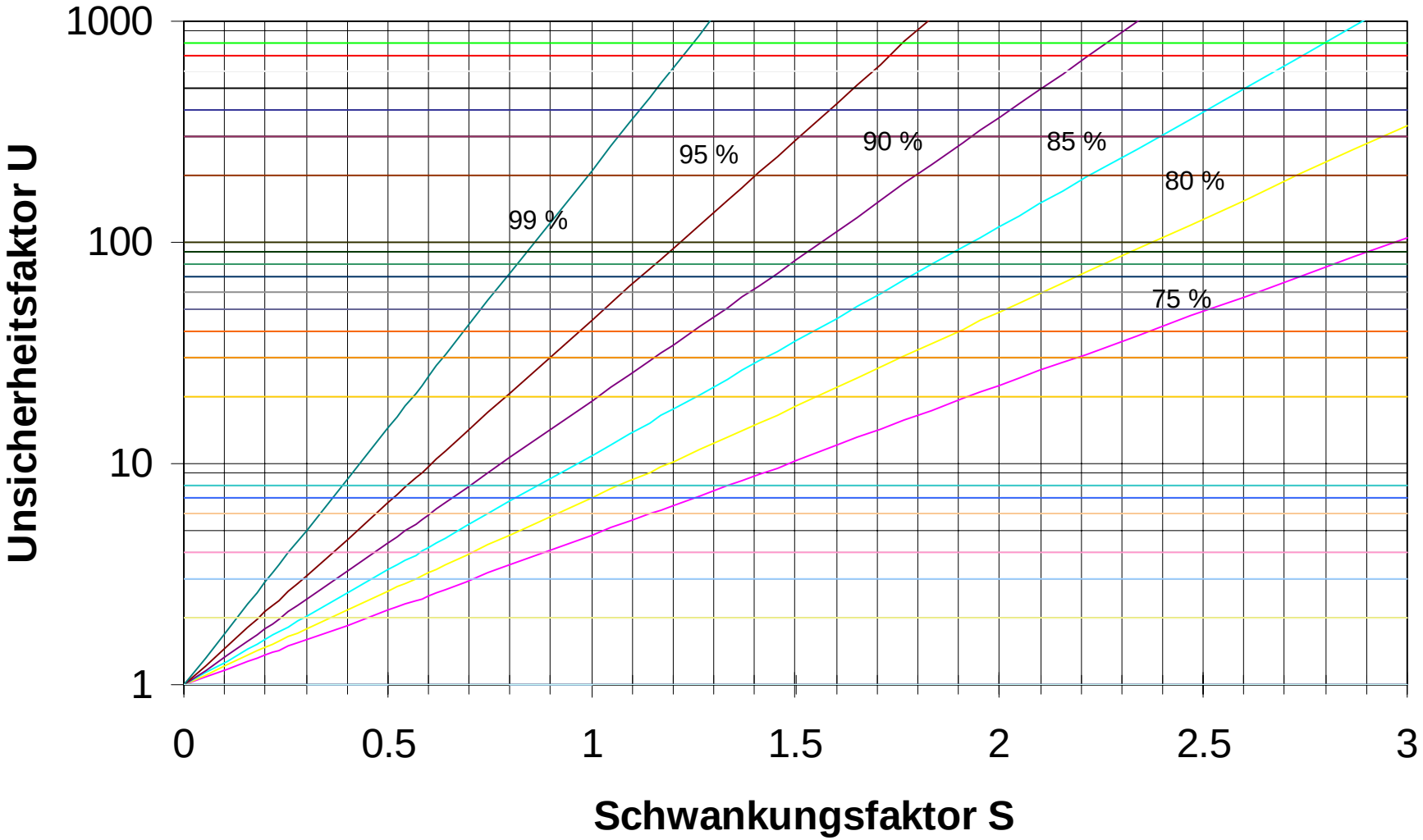
c_{SWP} = c_{SW} * U = 0.006 * 2 µg/L = 0.012 µg/L

3 Karte der Sickerwasserszenarien

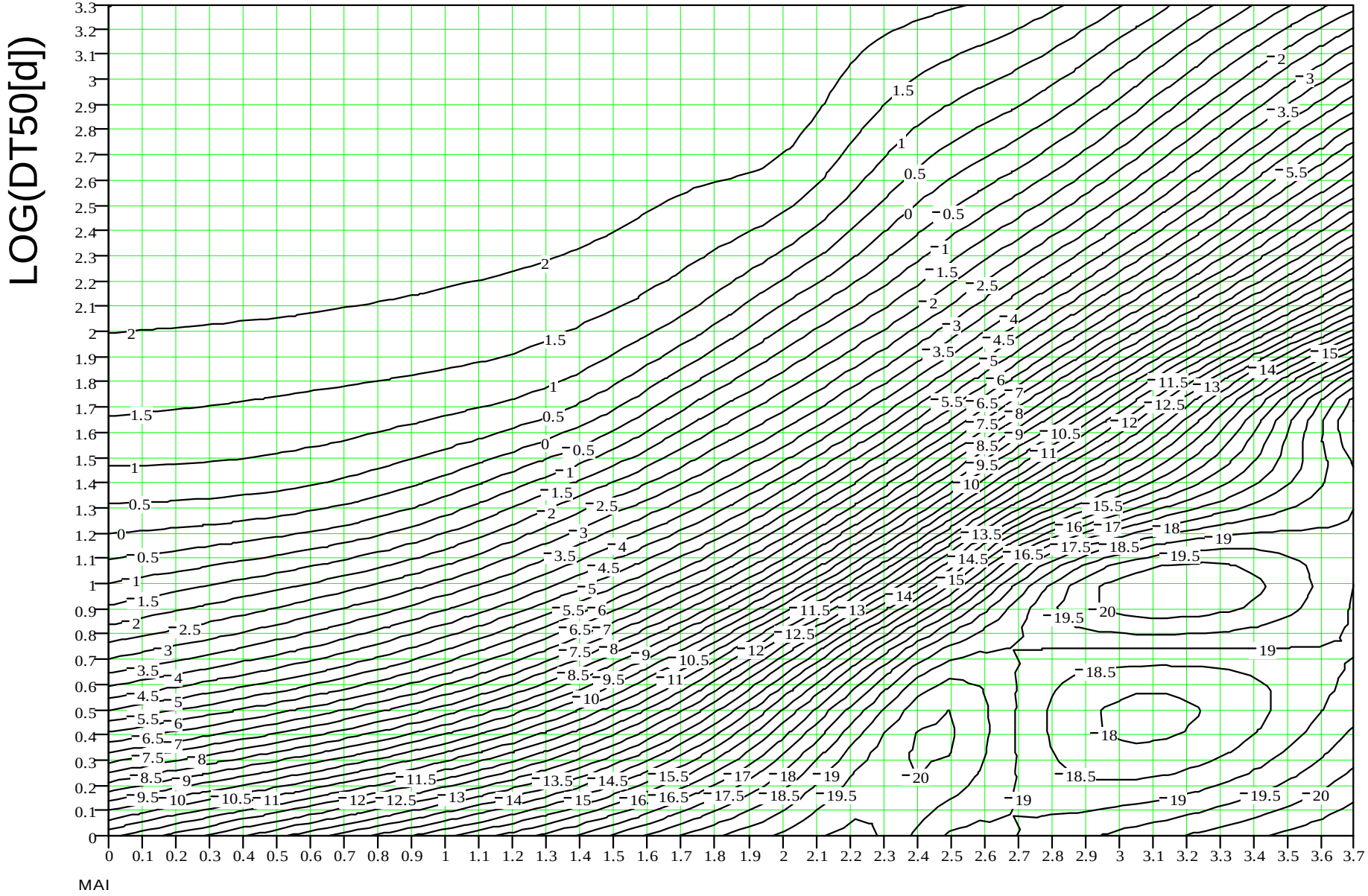


Source BGR: Hartwich et al., 1995, extended

Bestimmung des Unsicherheitsfaktors

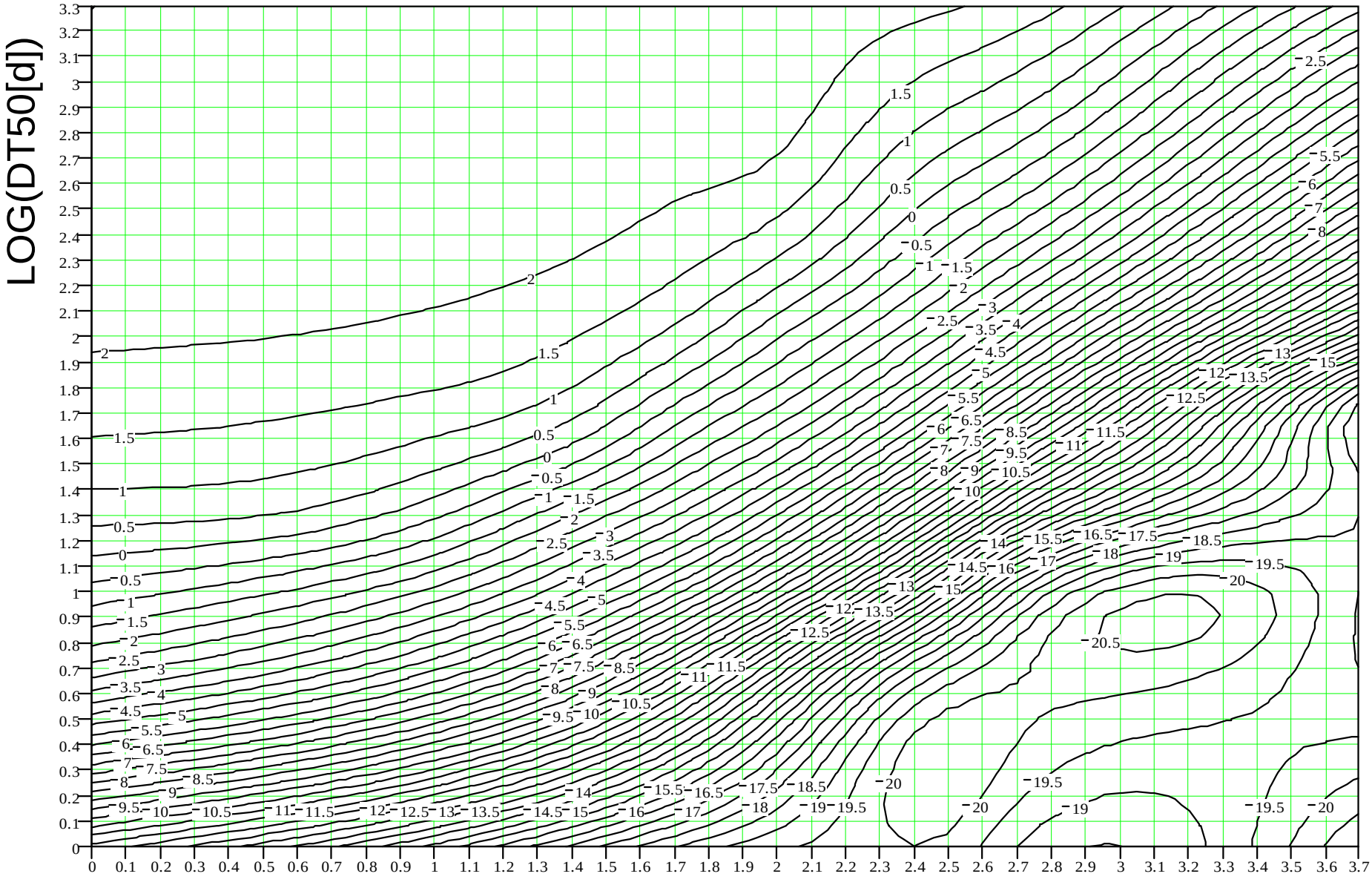


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



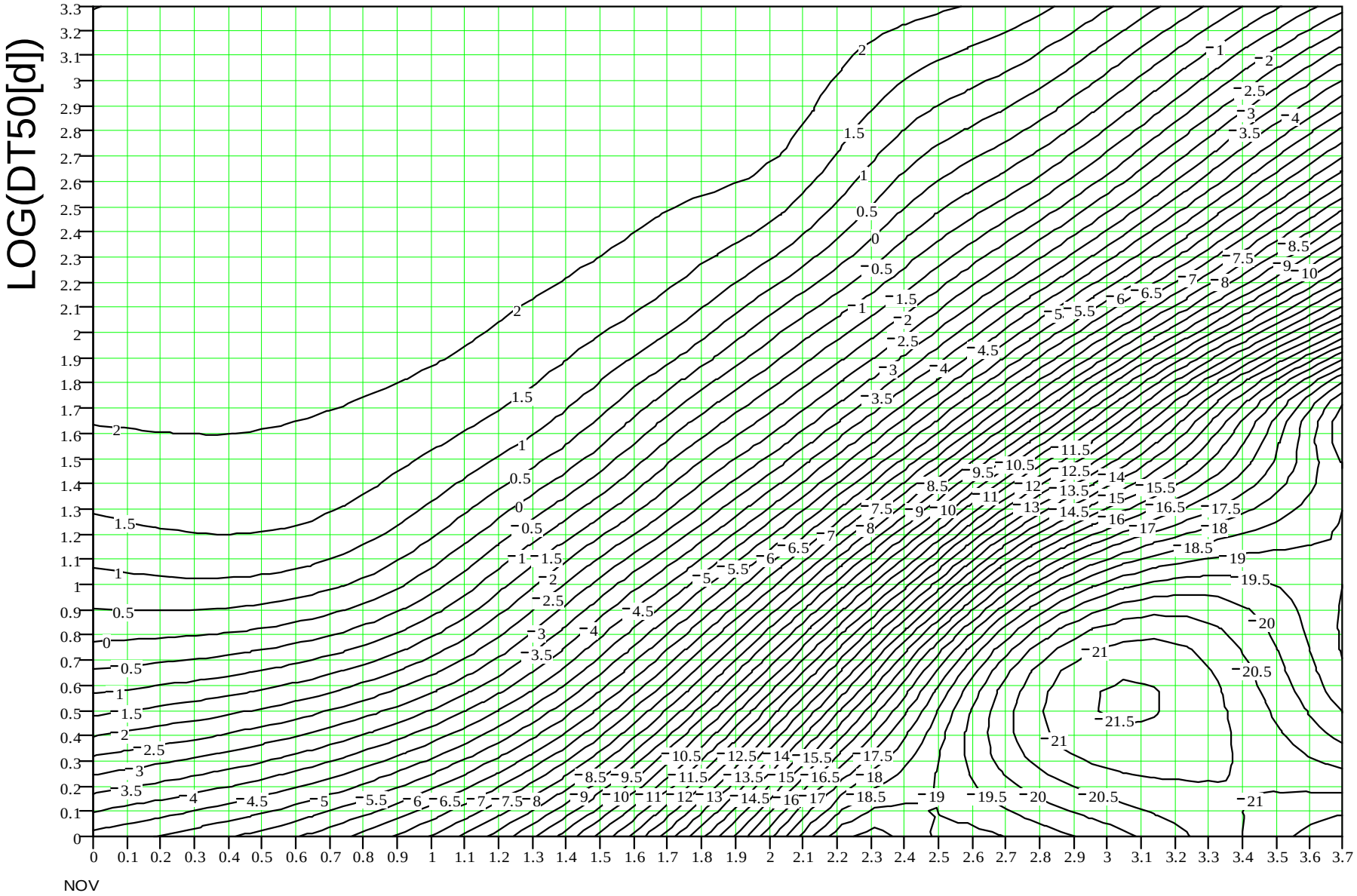
Szenario 1, Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



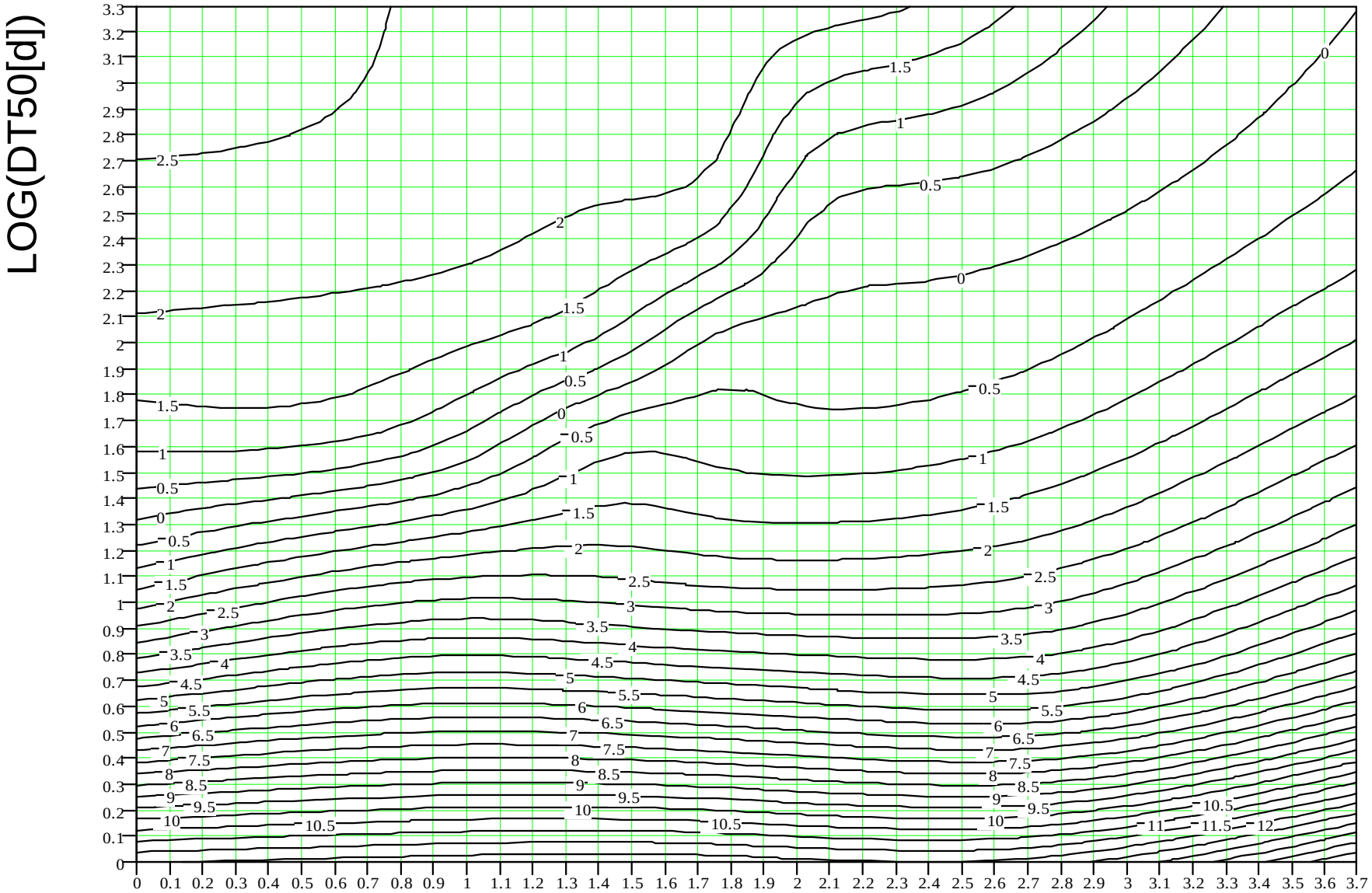
Szenario 1, Juli

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

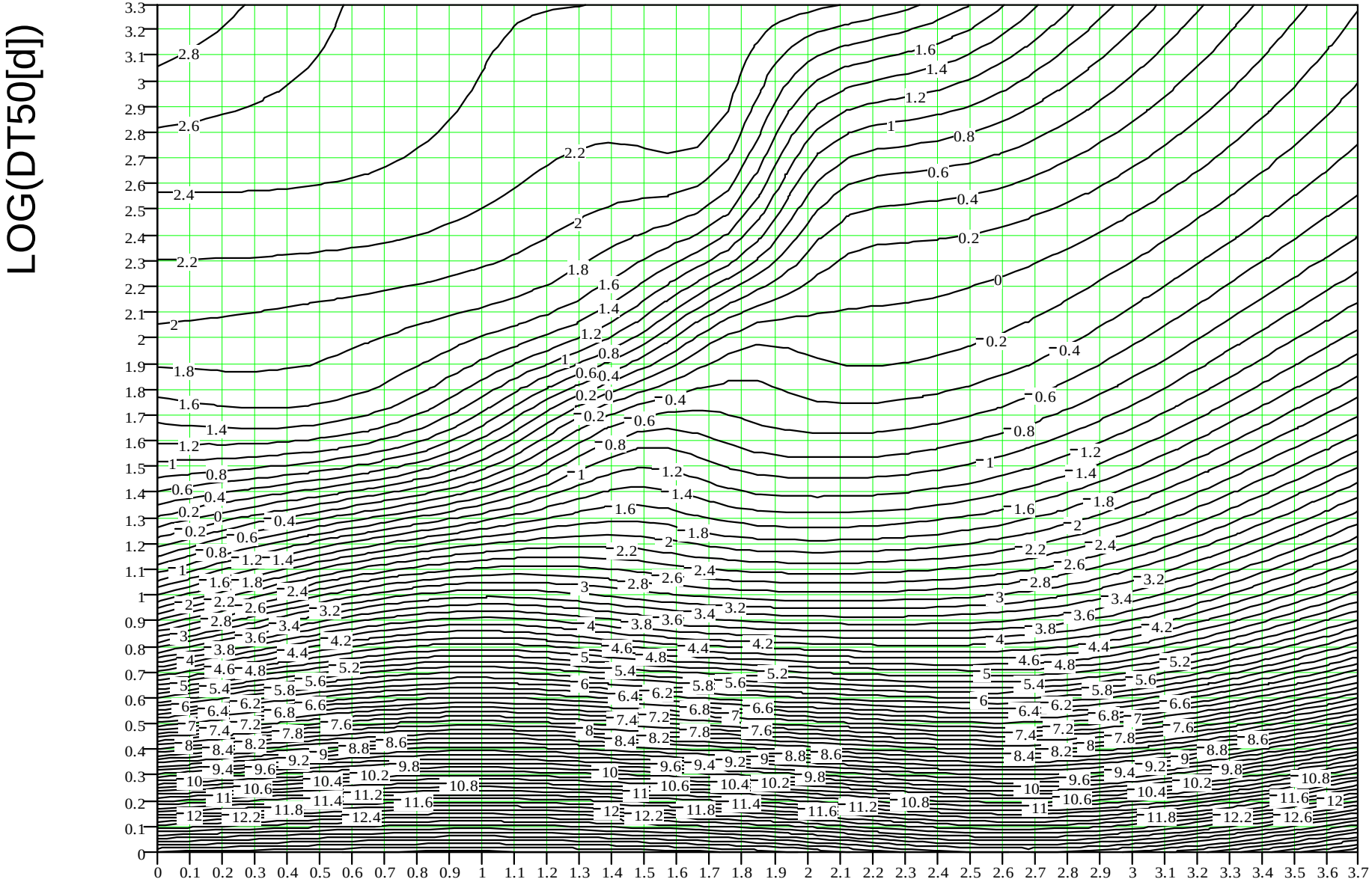


Szenario 1, November

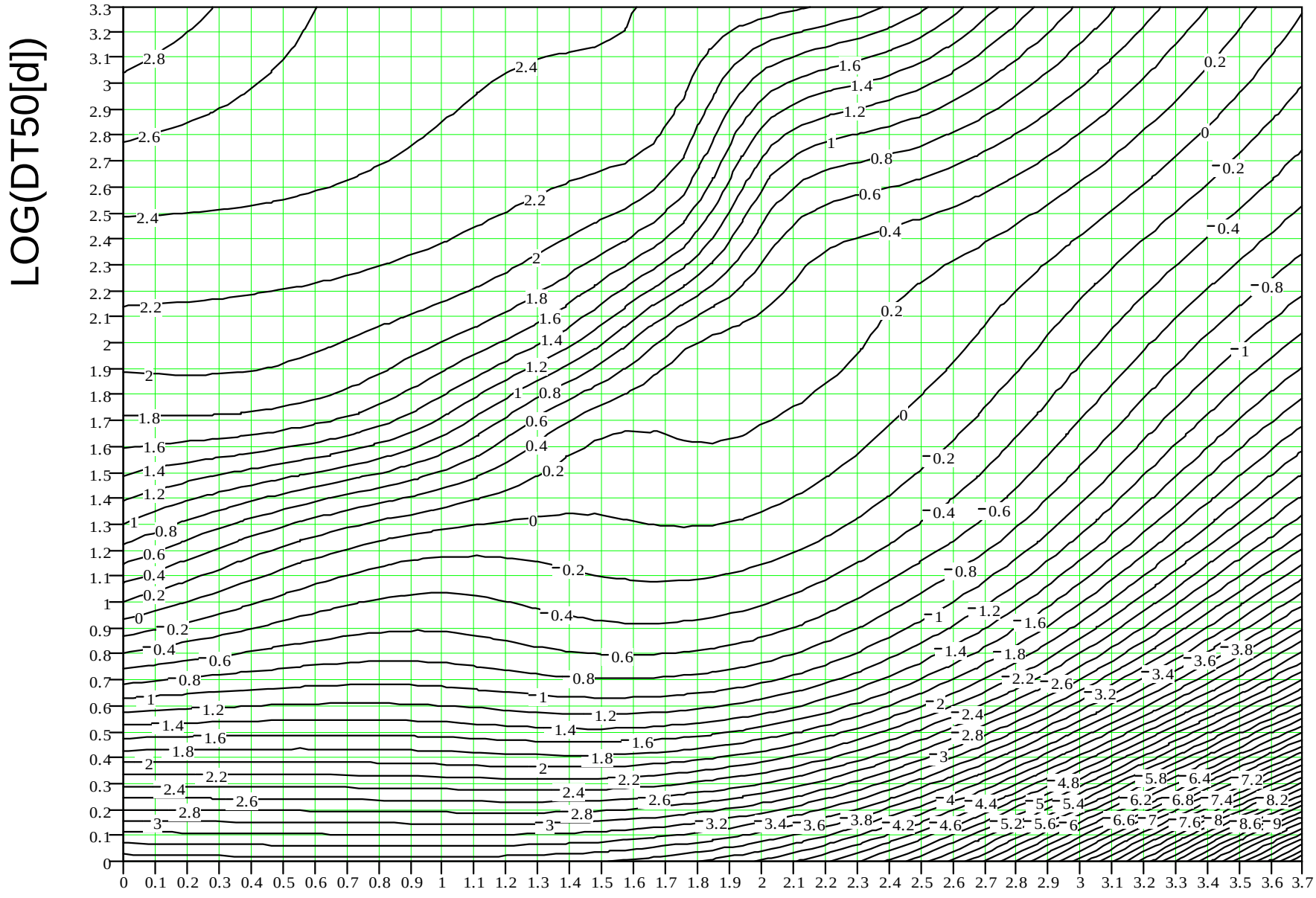
Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

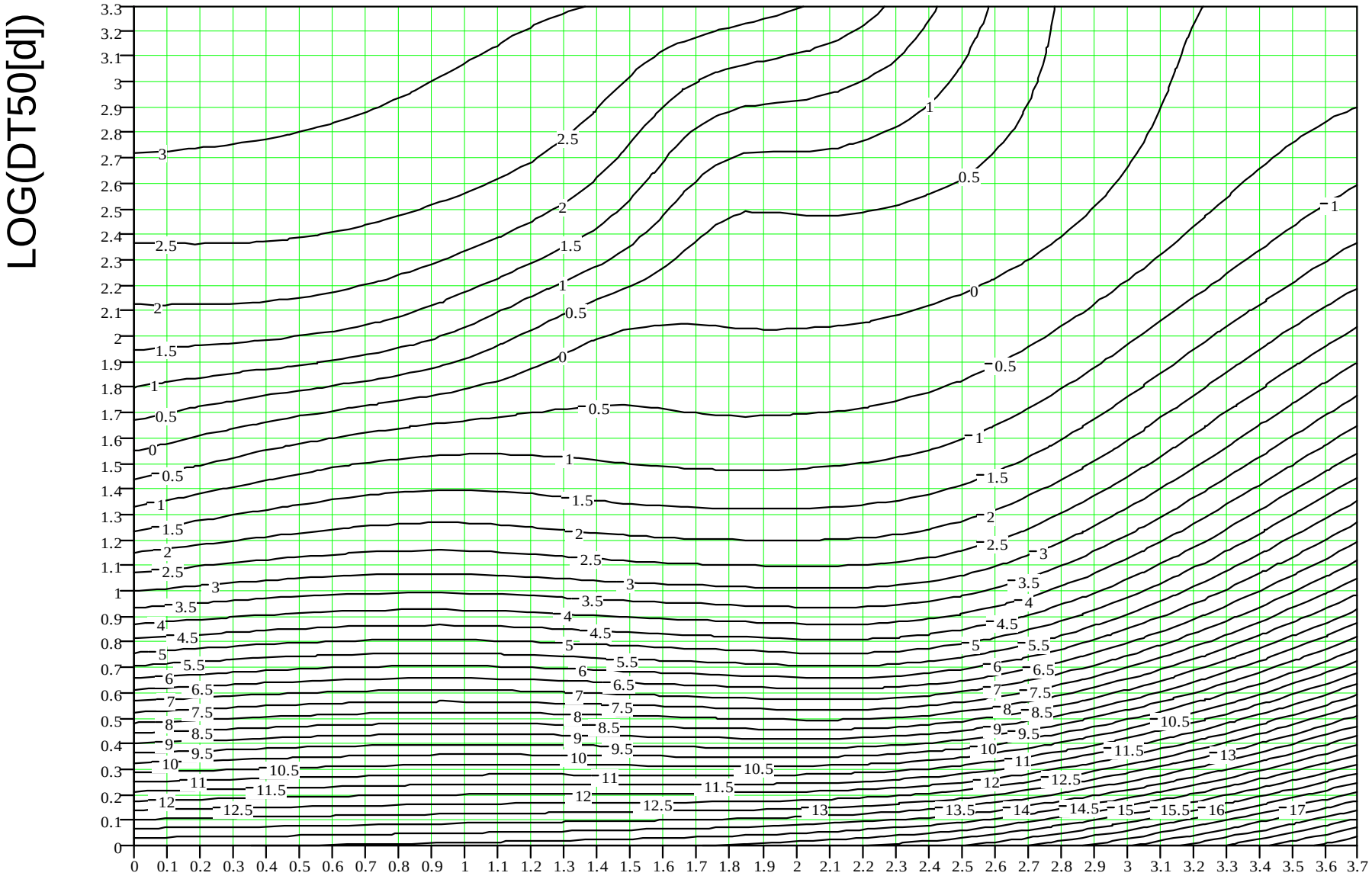


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

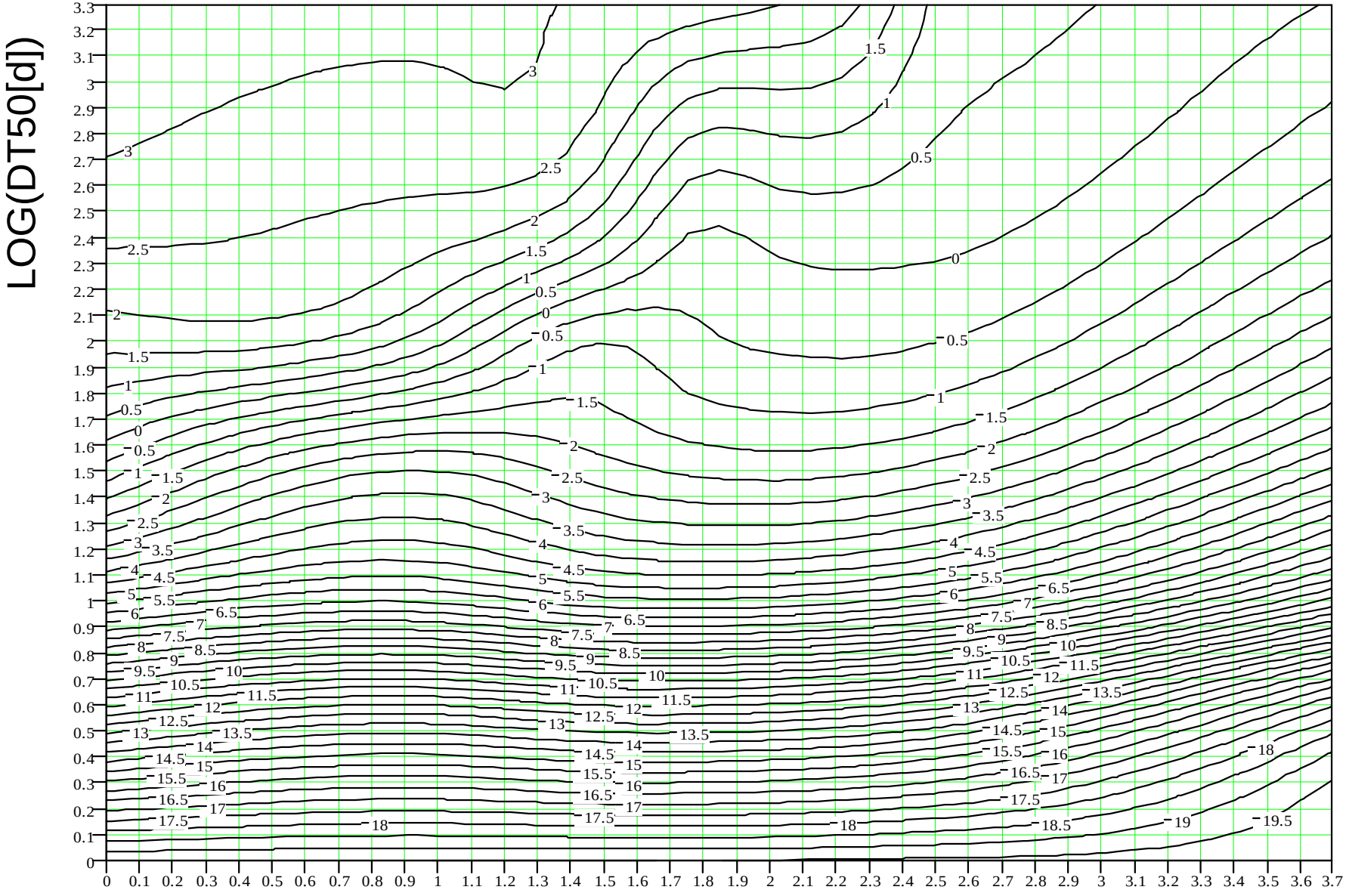


Szenario 2, November

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

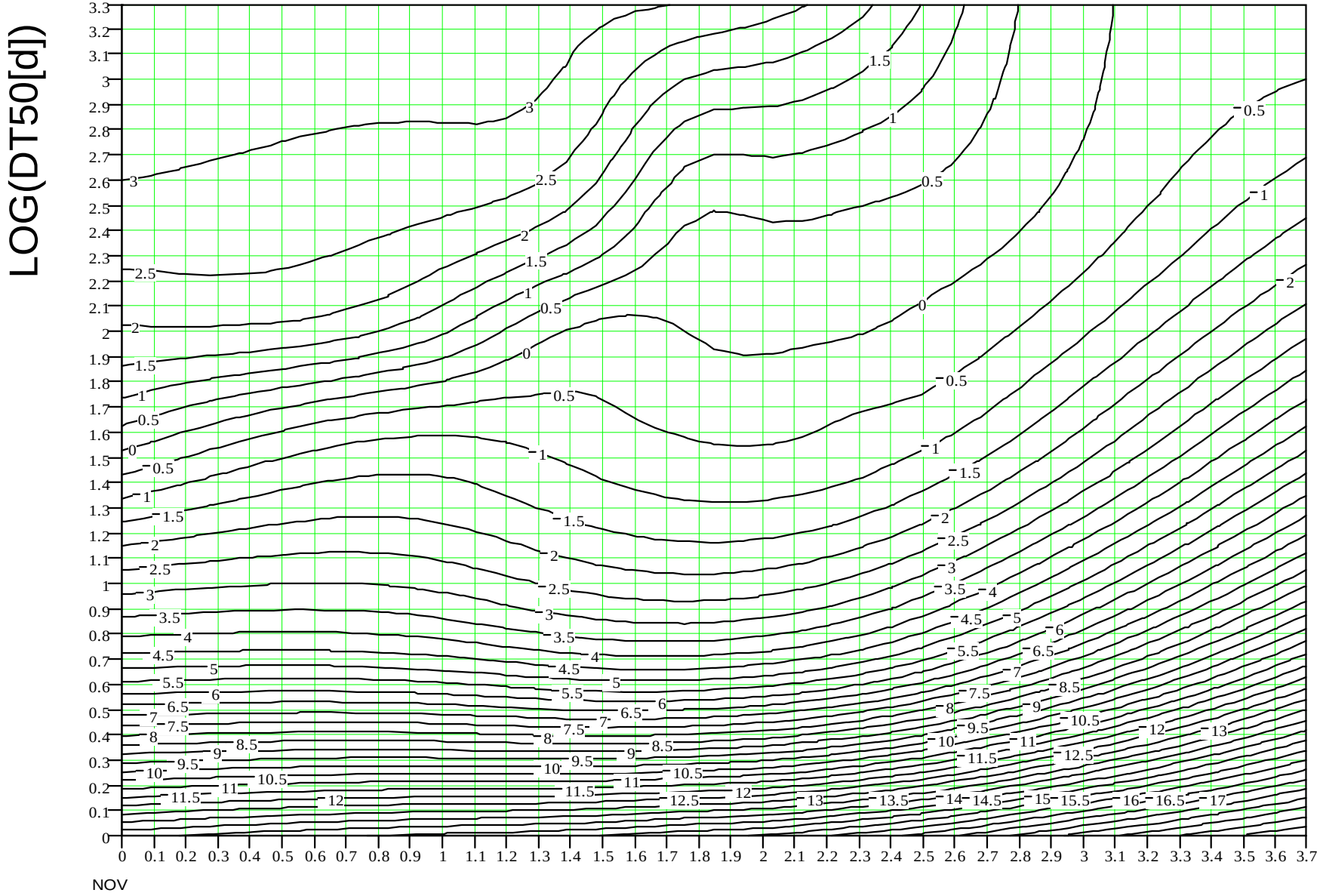


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



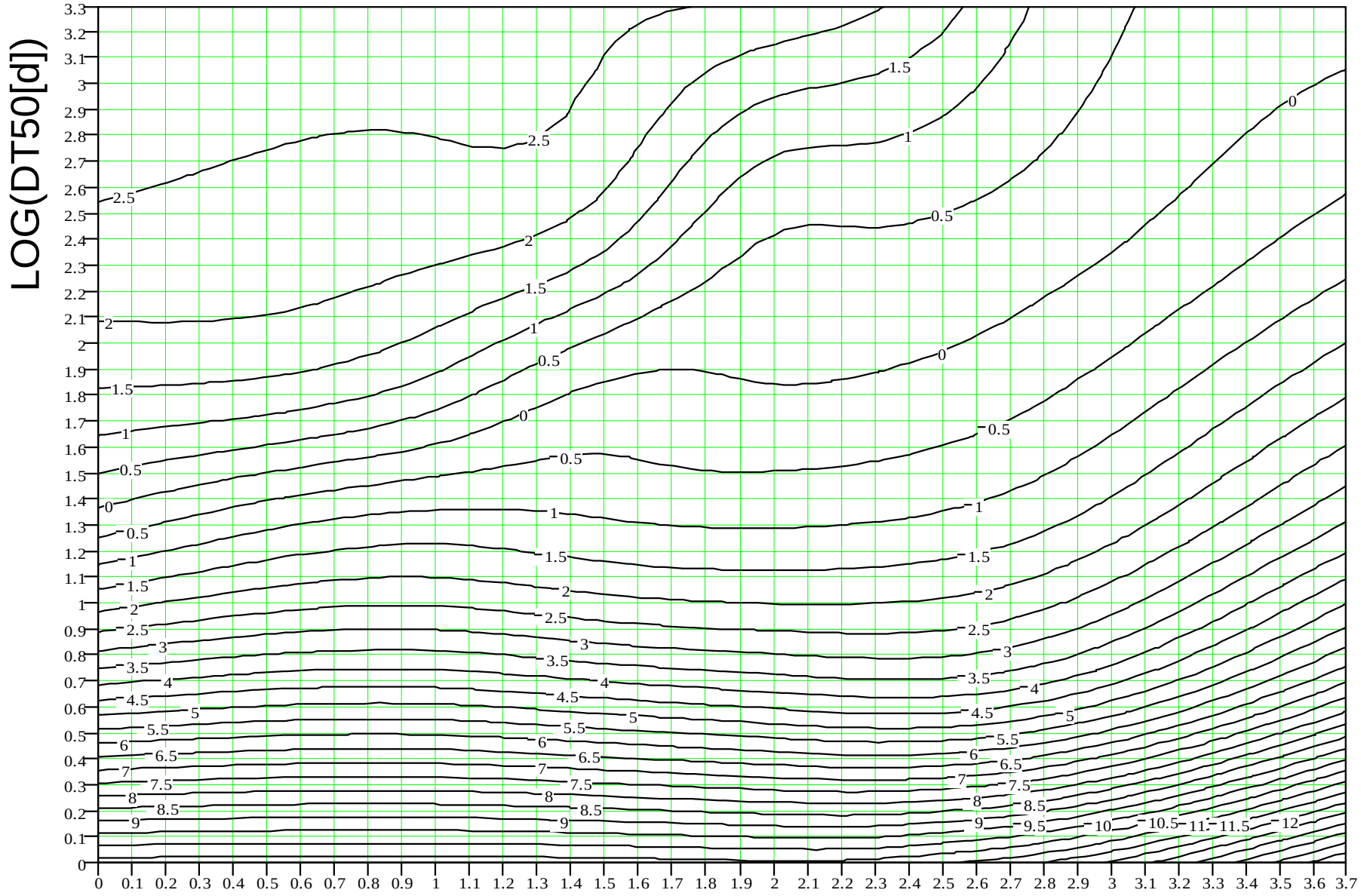
Szenario 3,Juli

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



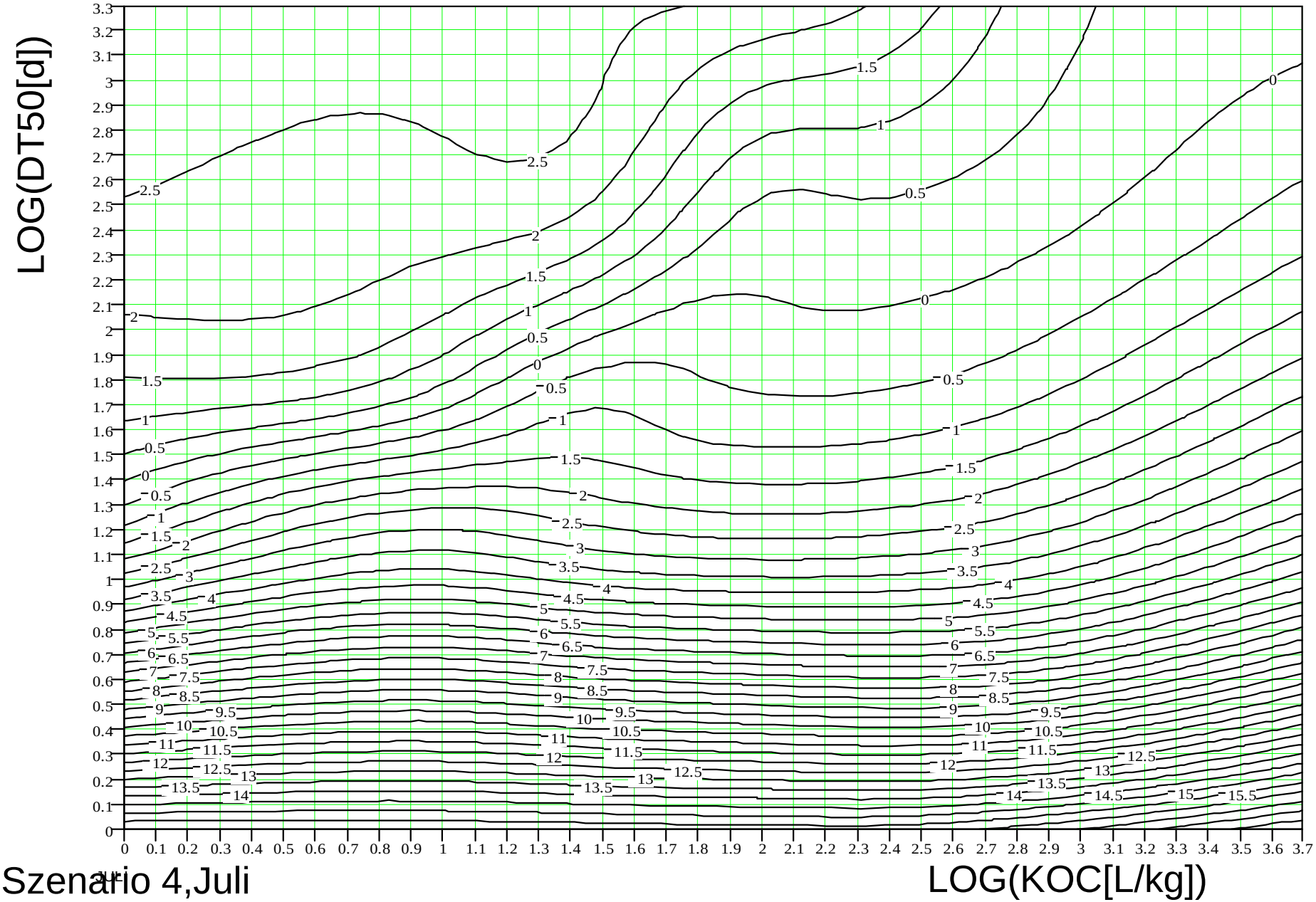
Szenario 3, November

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

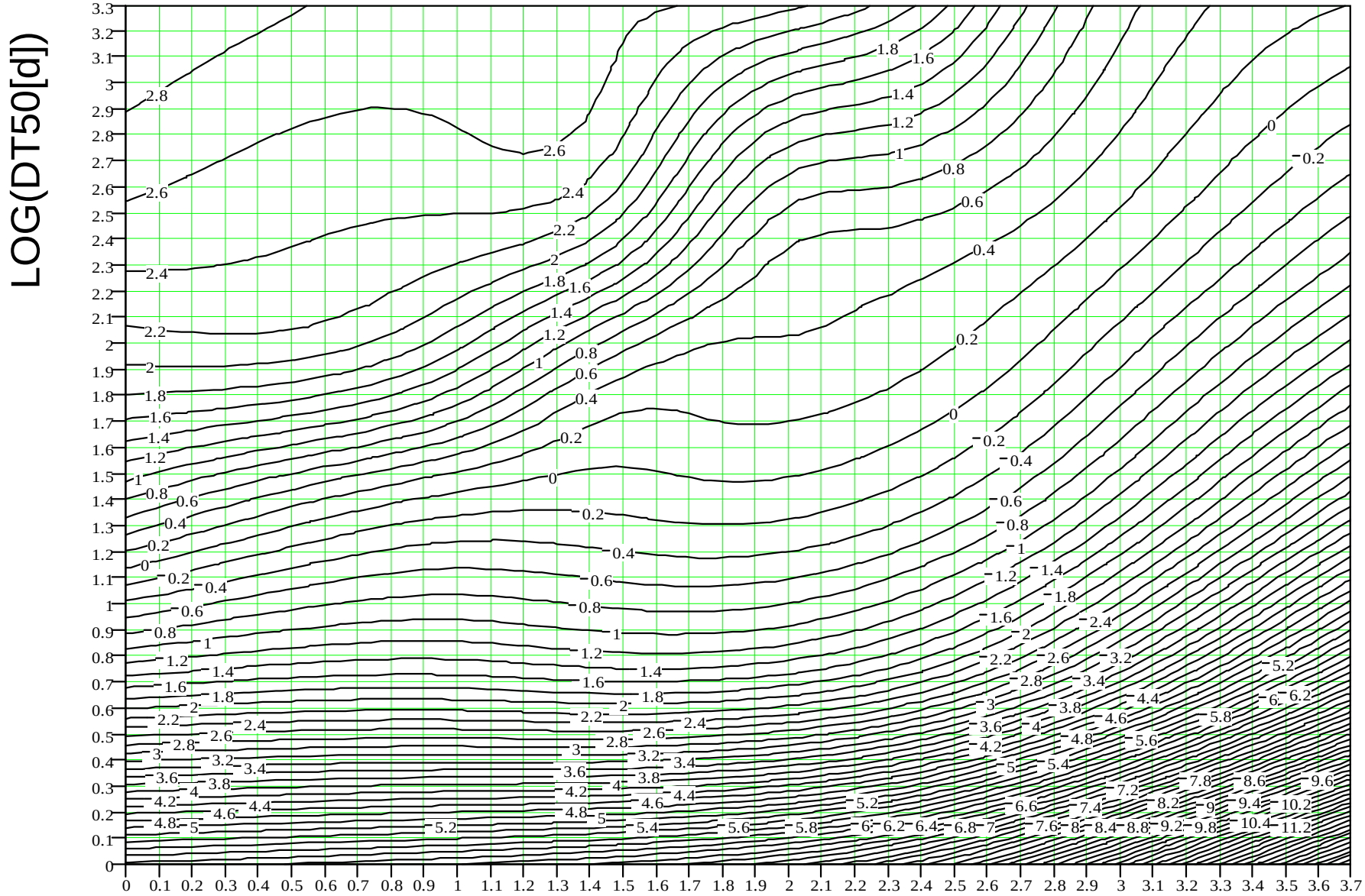


Szenario 4,Mai

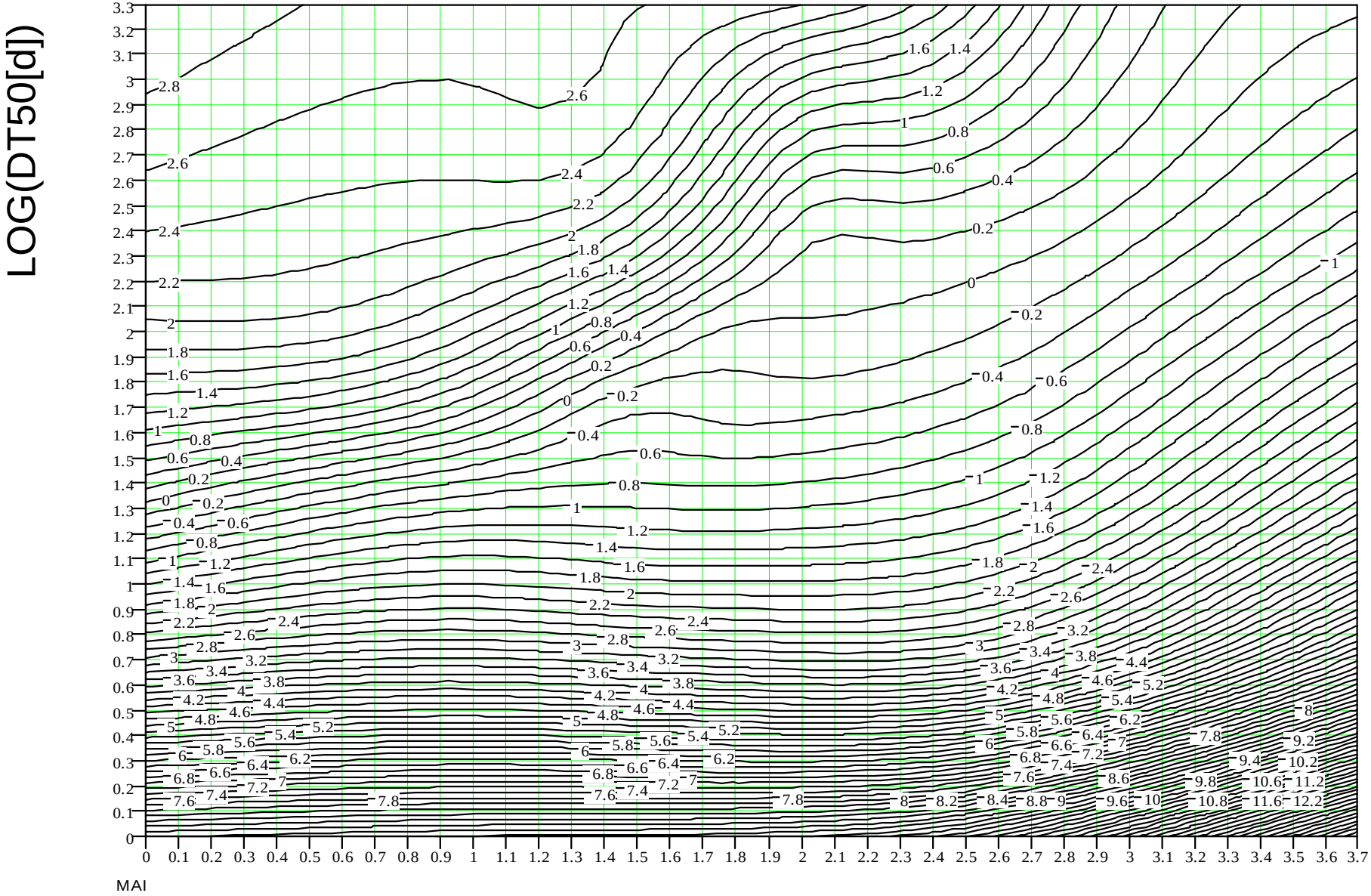
Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

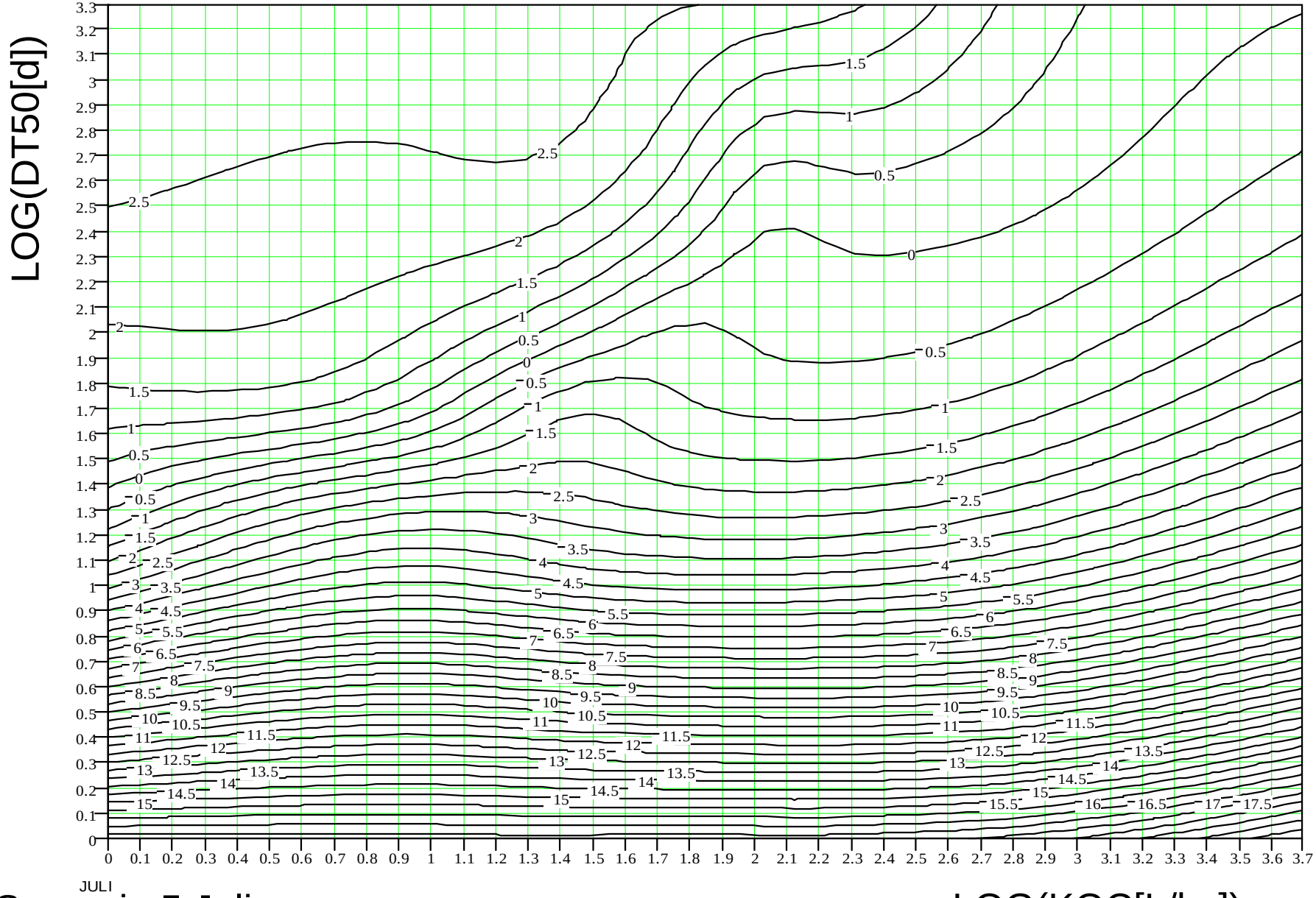


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



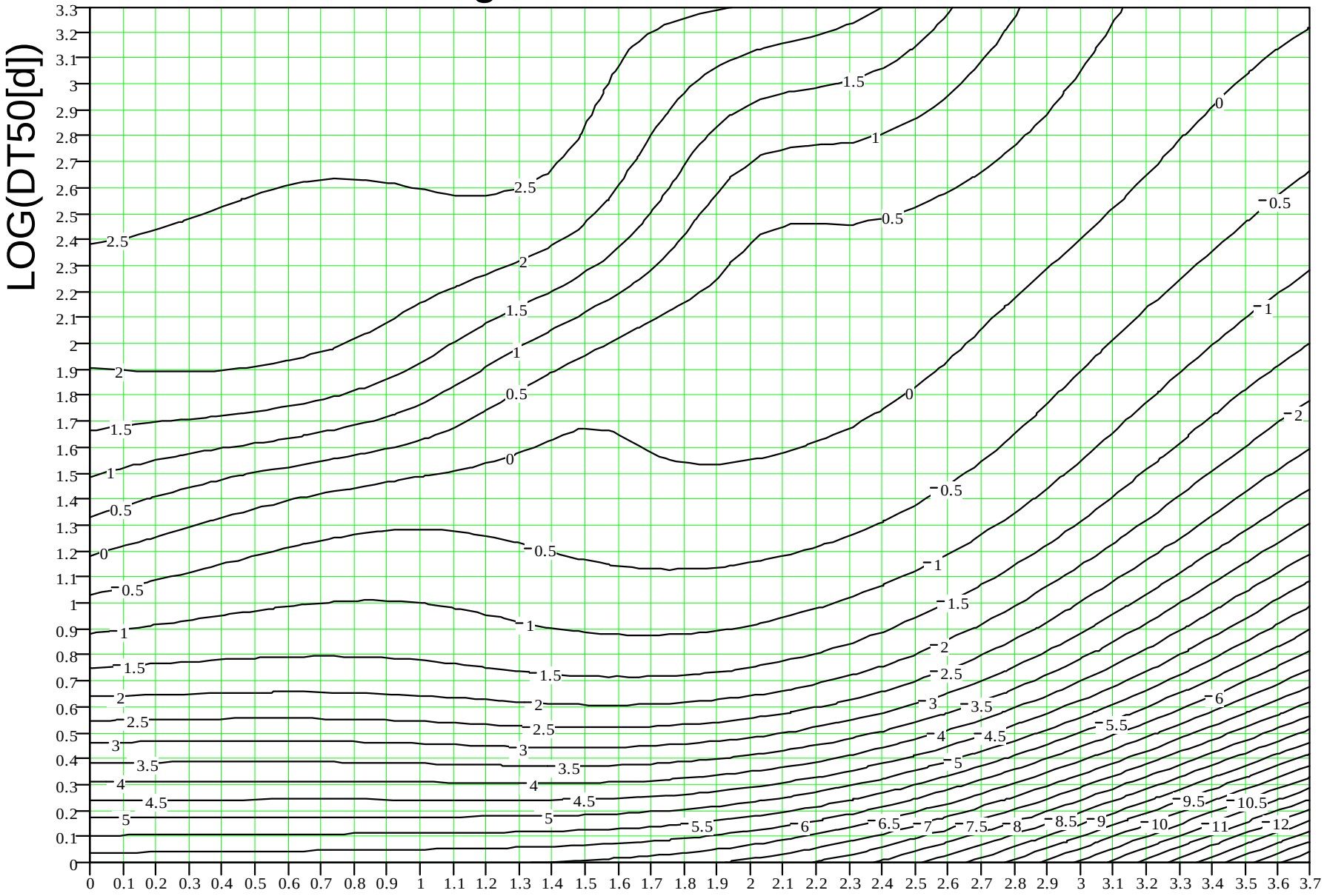
Szenario 5,Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

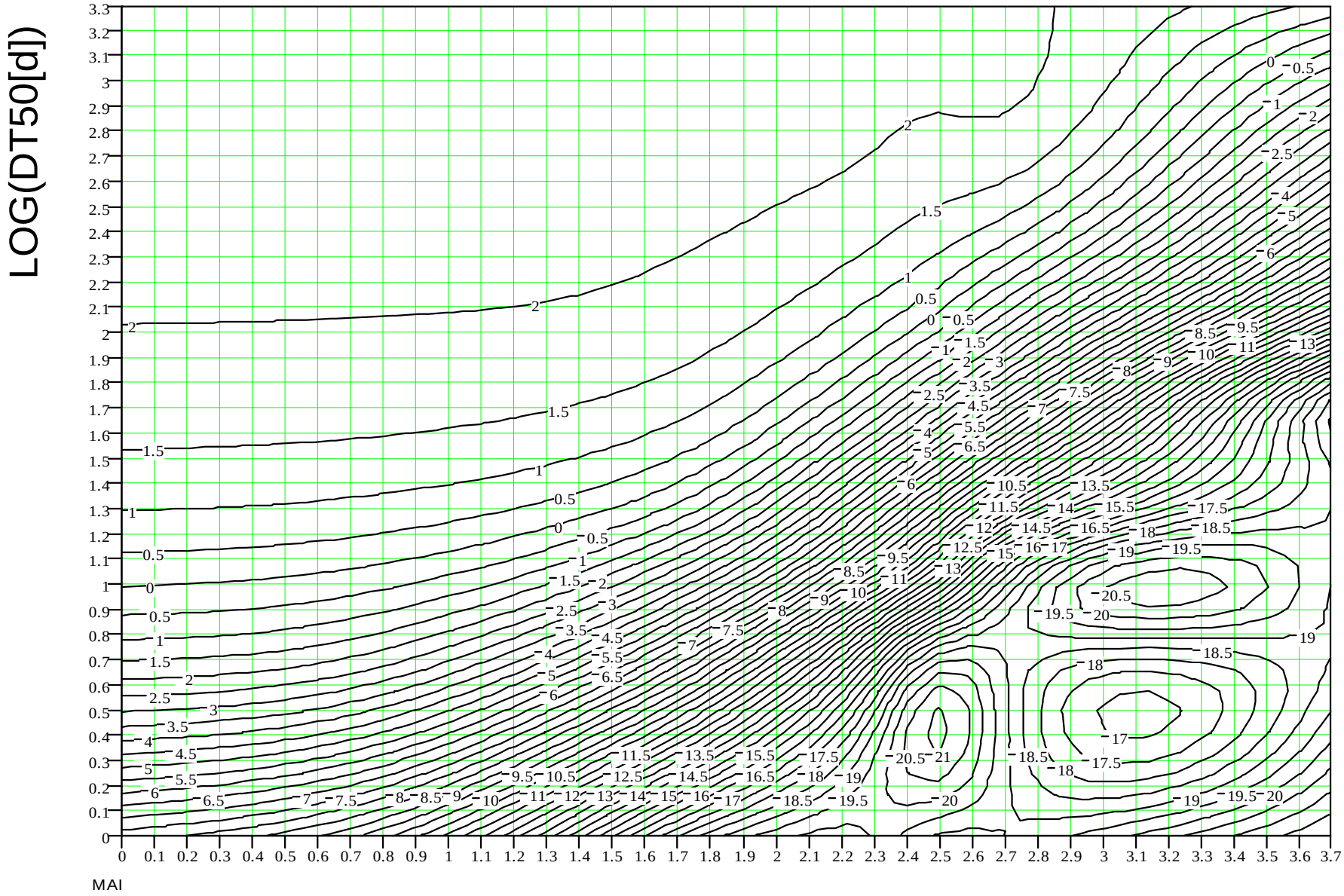


Szenario 5,Juli

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

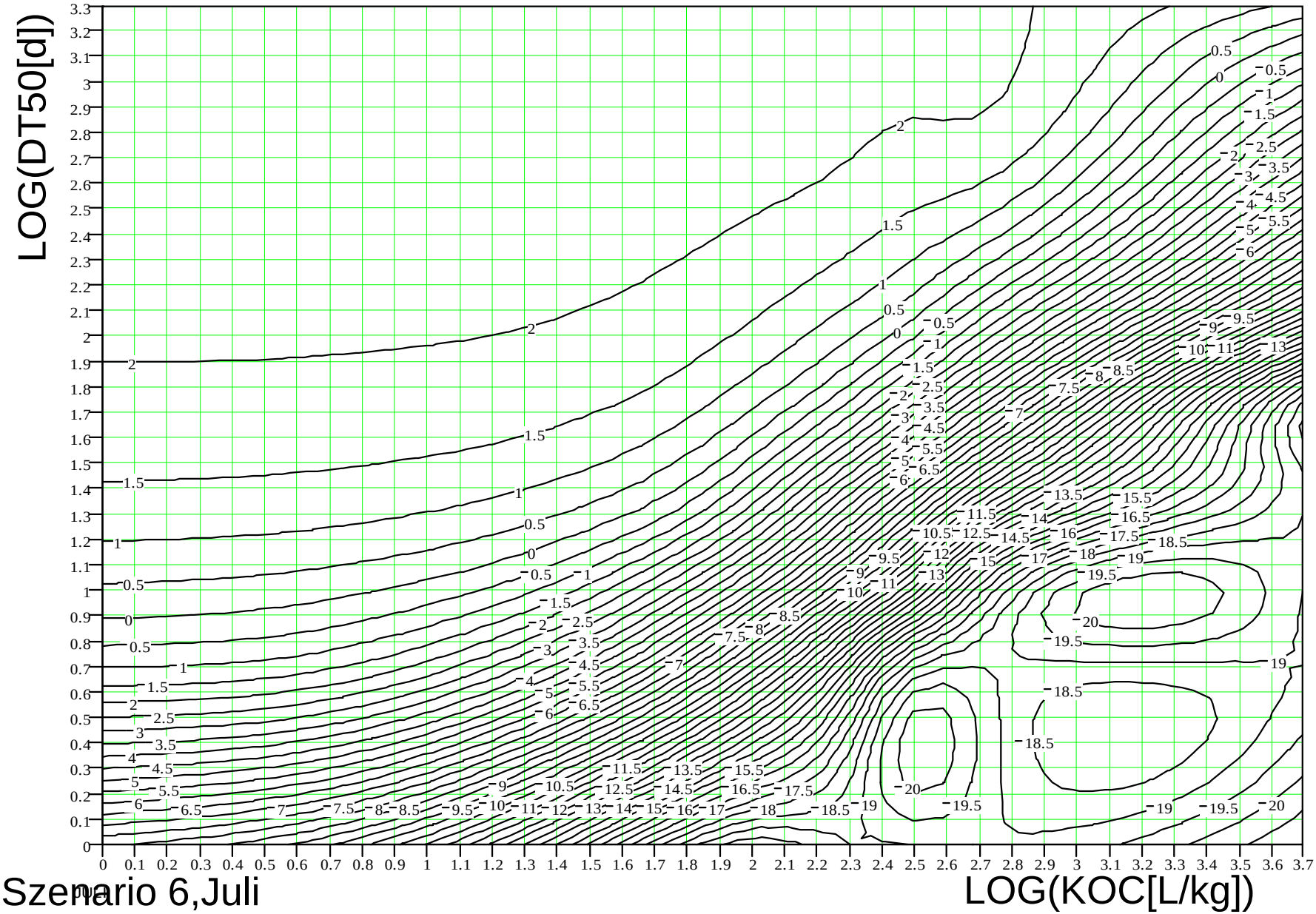


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



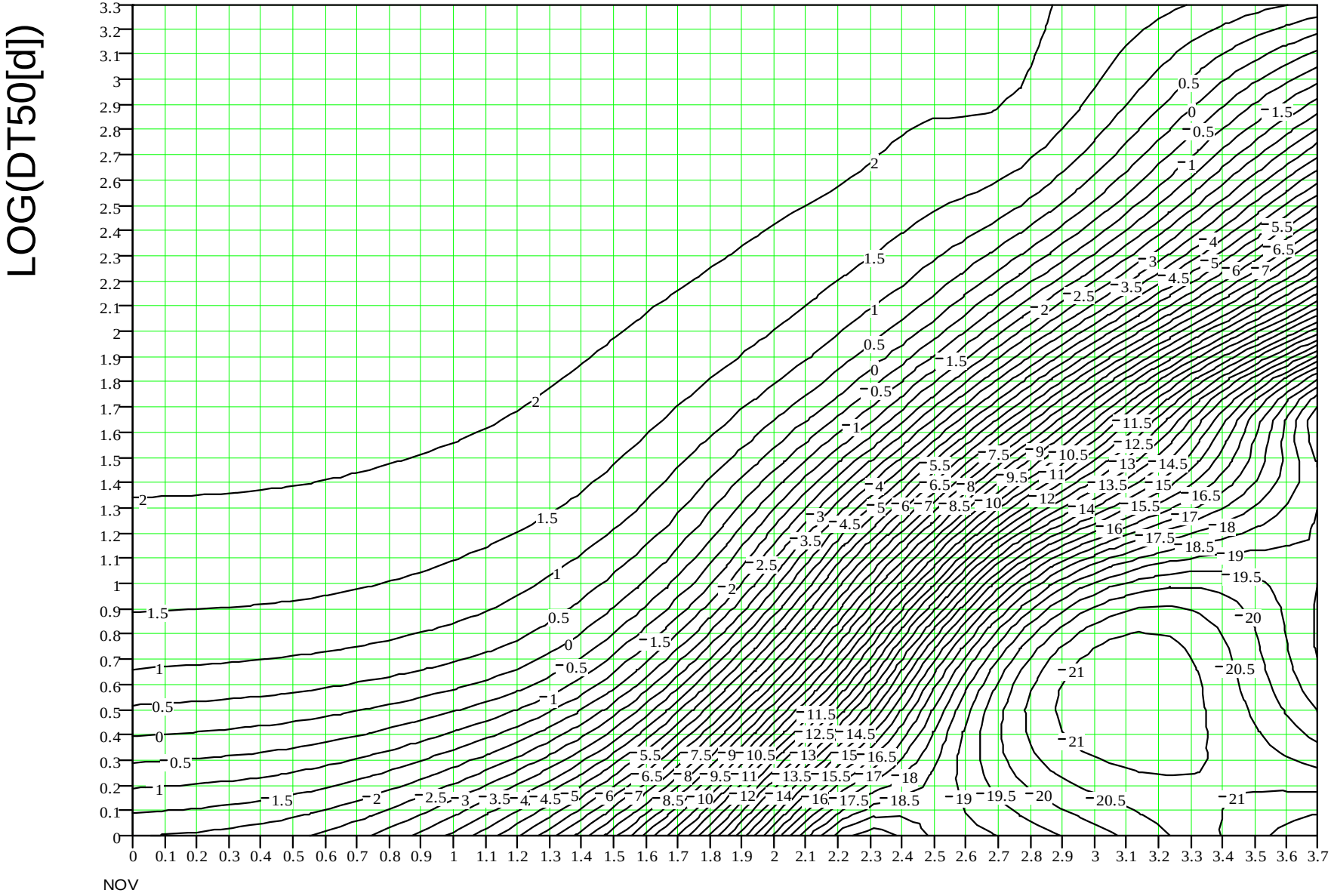
Szenario 6,Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



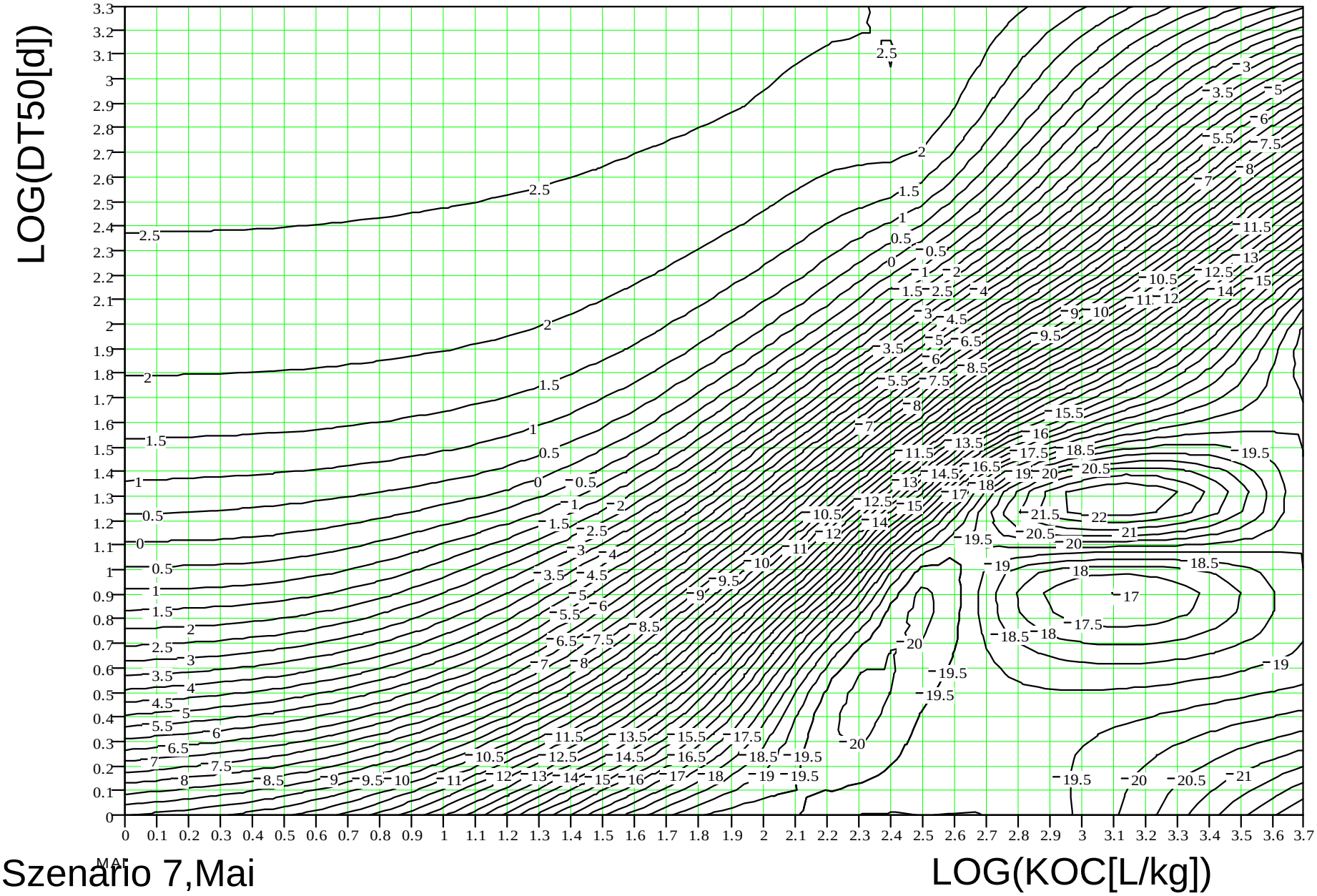
Szenario 6,Juli

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

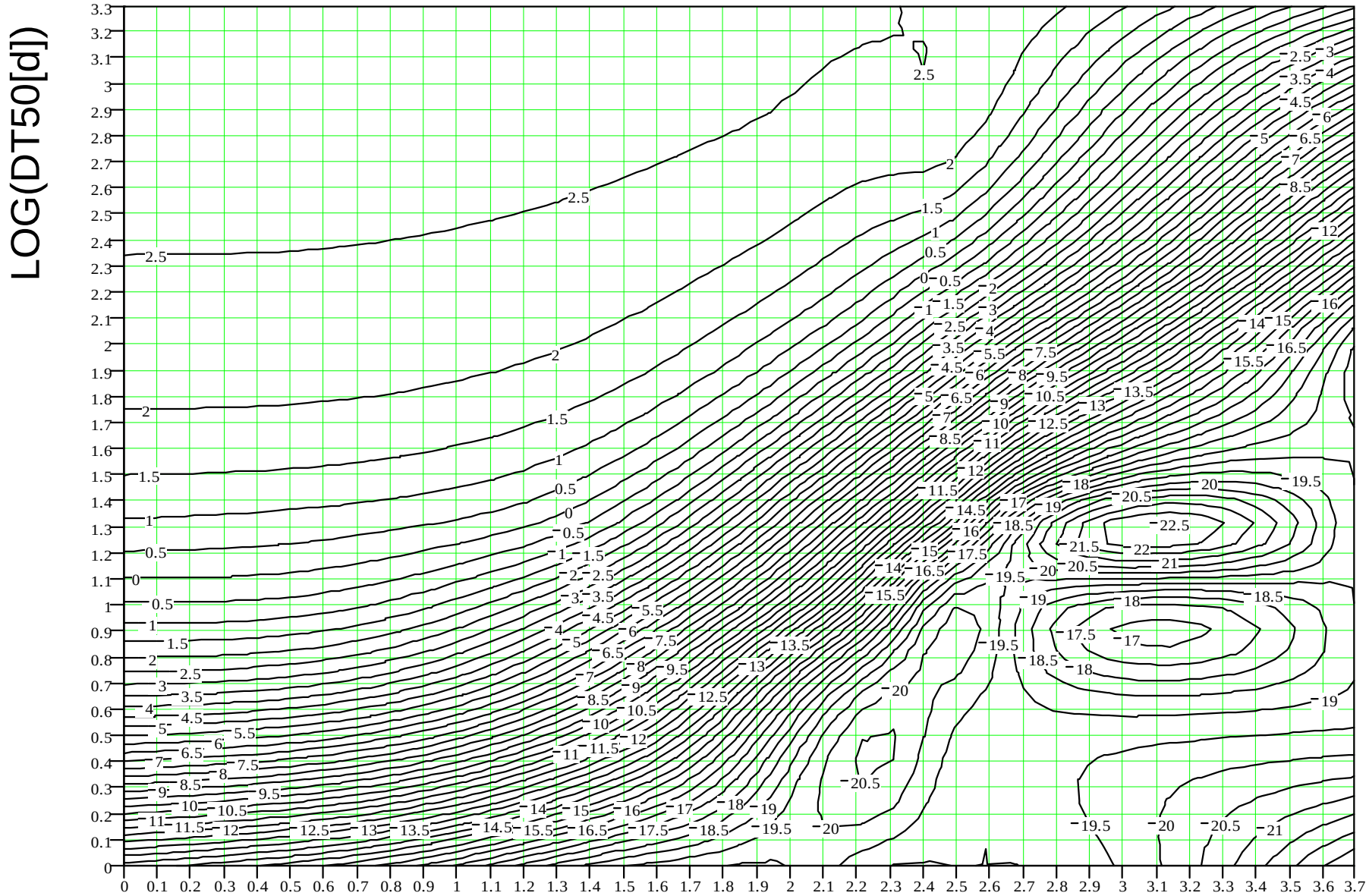


Szenario 6,November

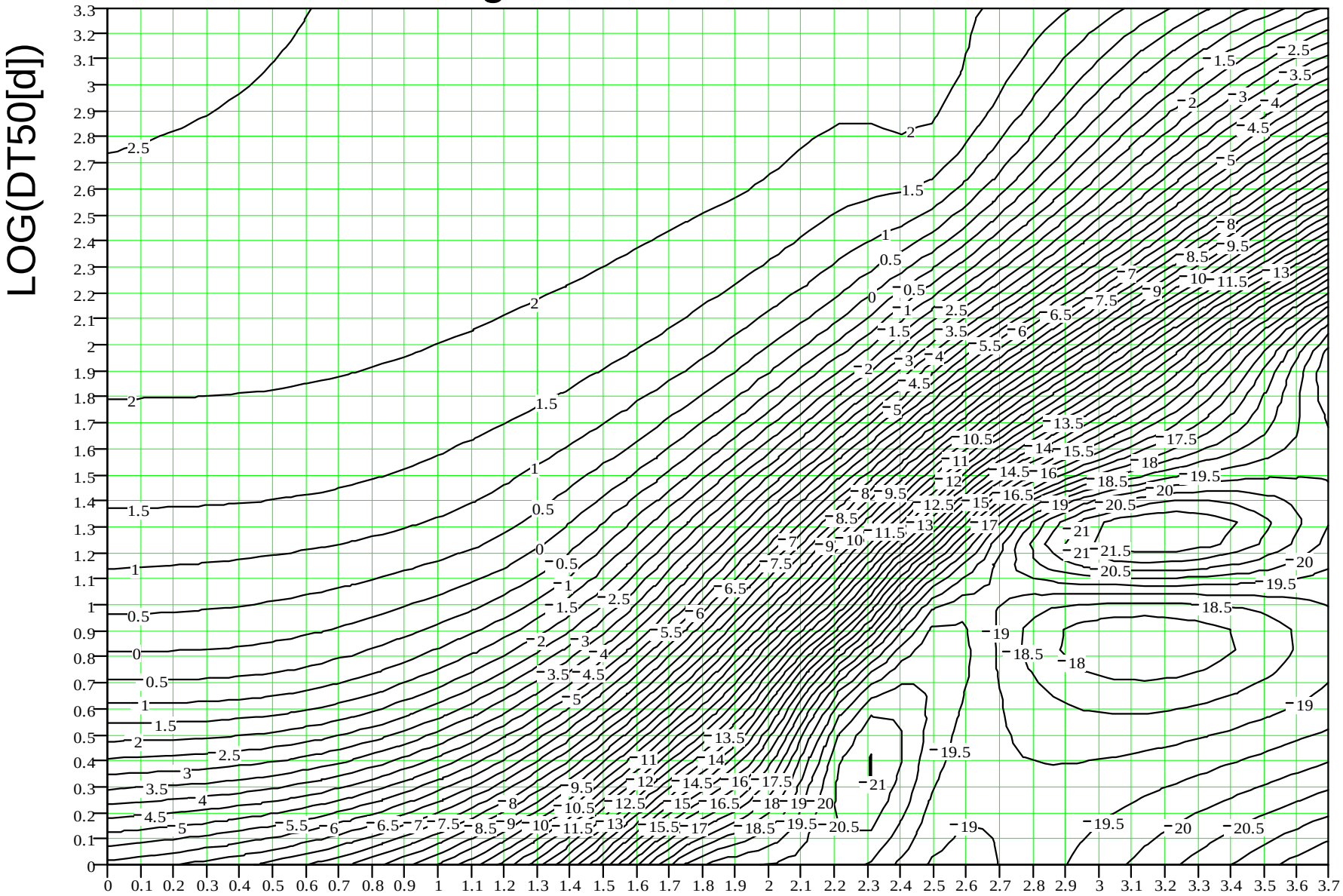
Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



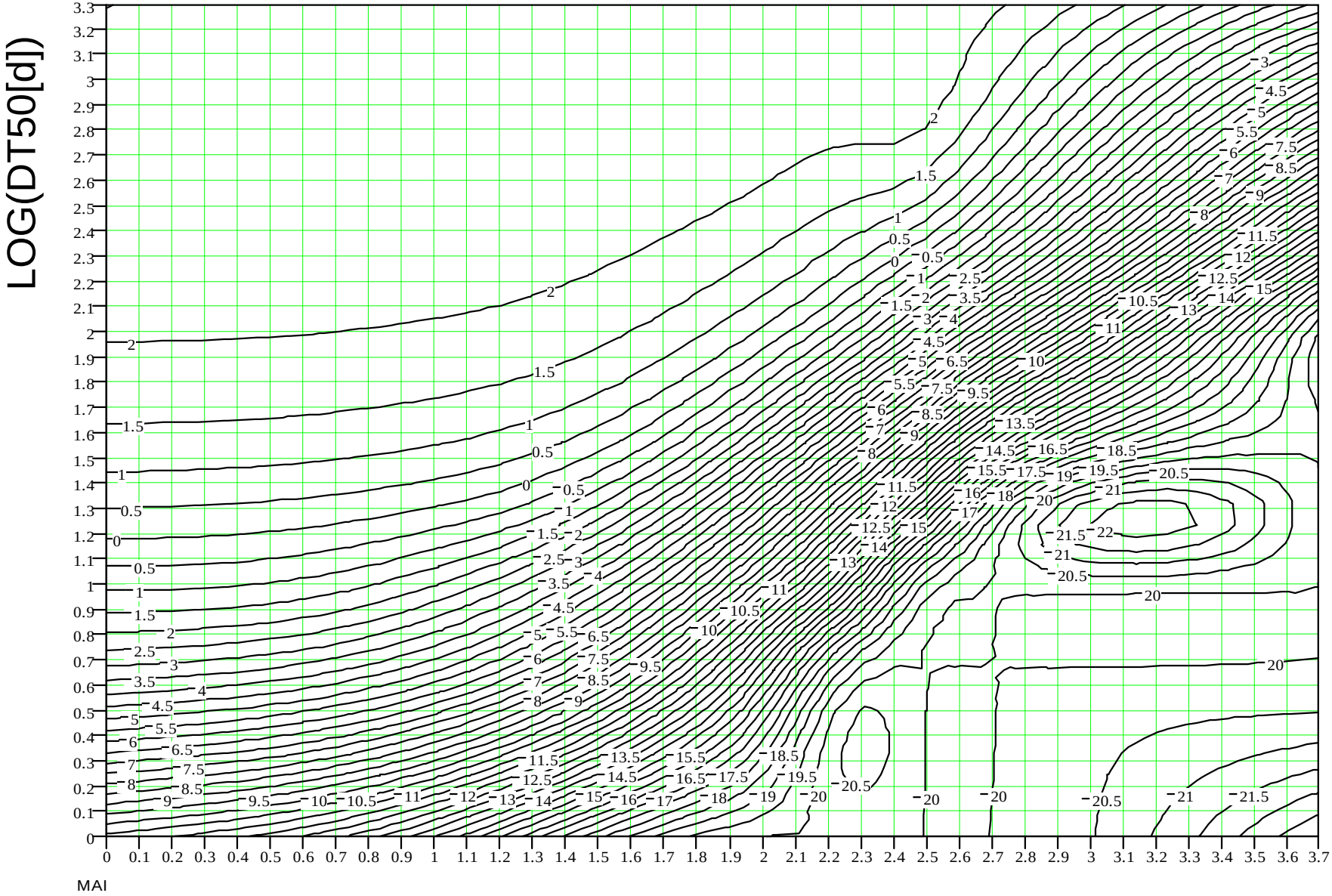
Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



NOV

Szenario 7,November

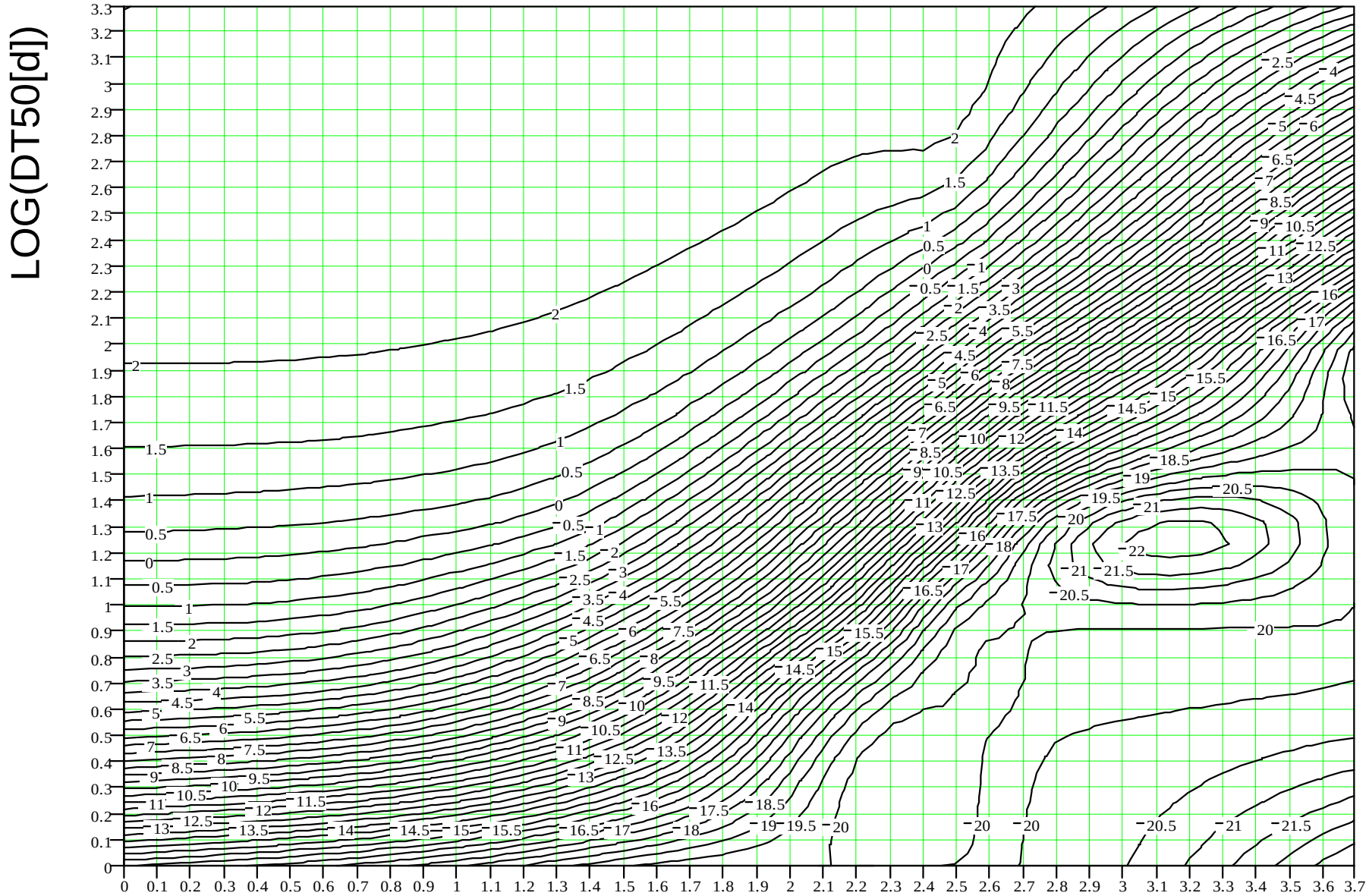
Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



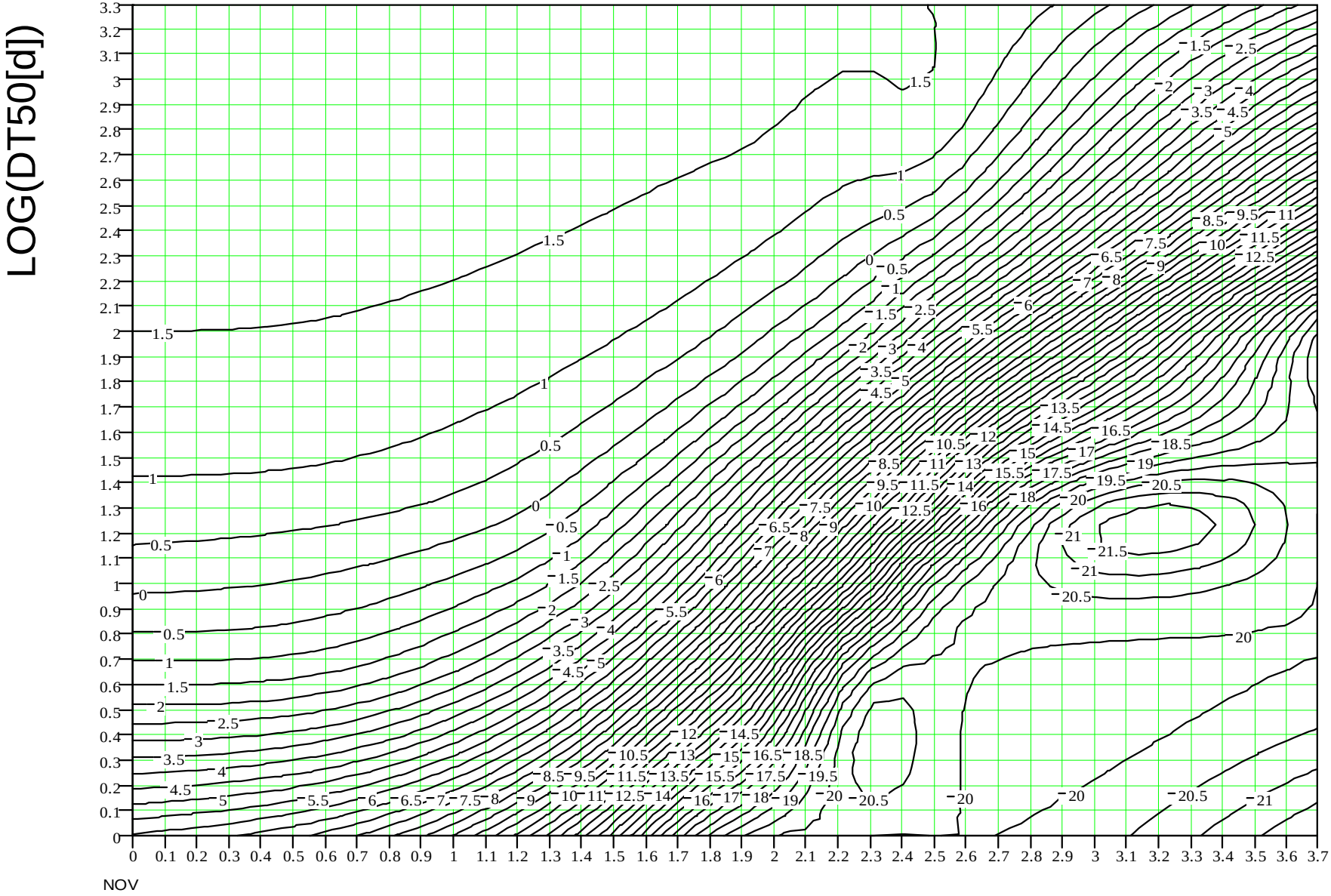
Szenario 8,Mai

LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

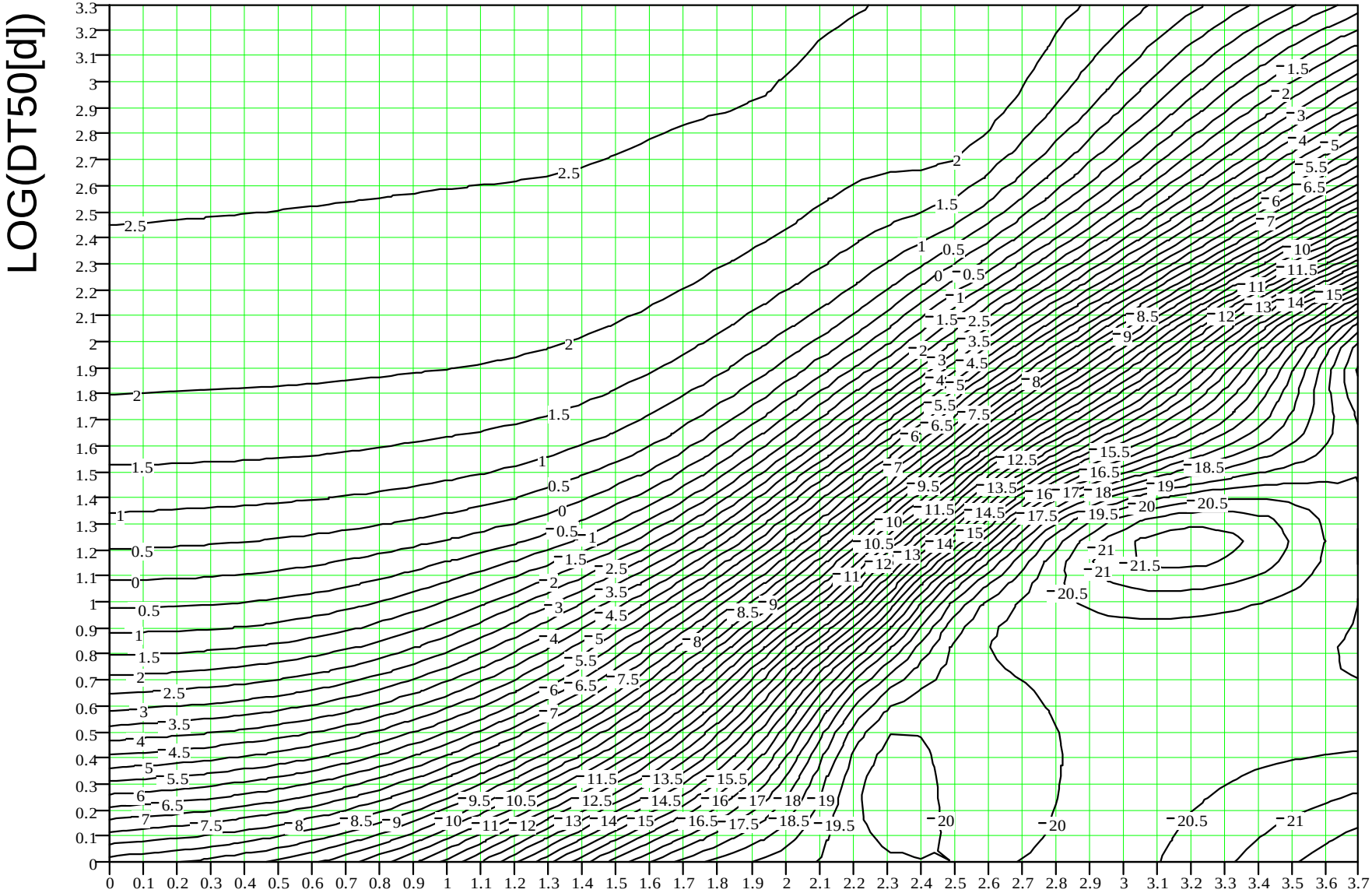


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



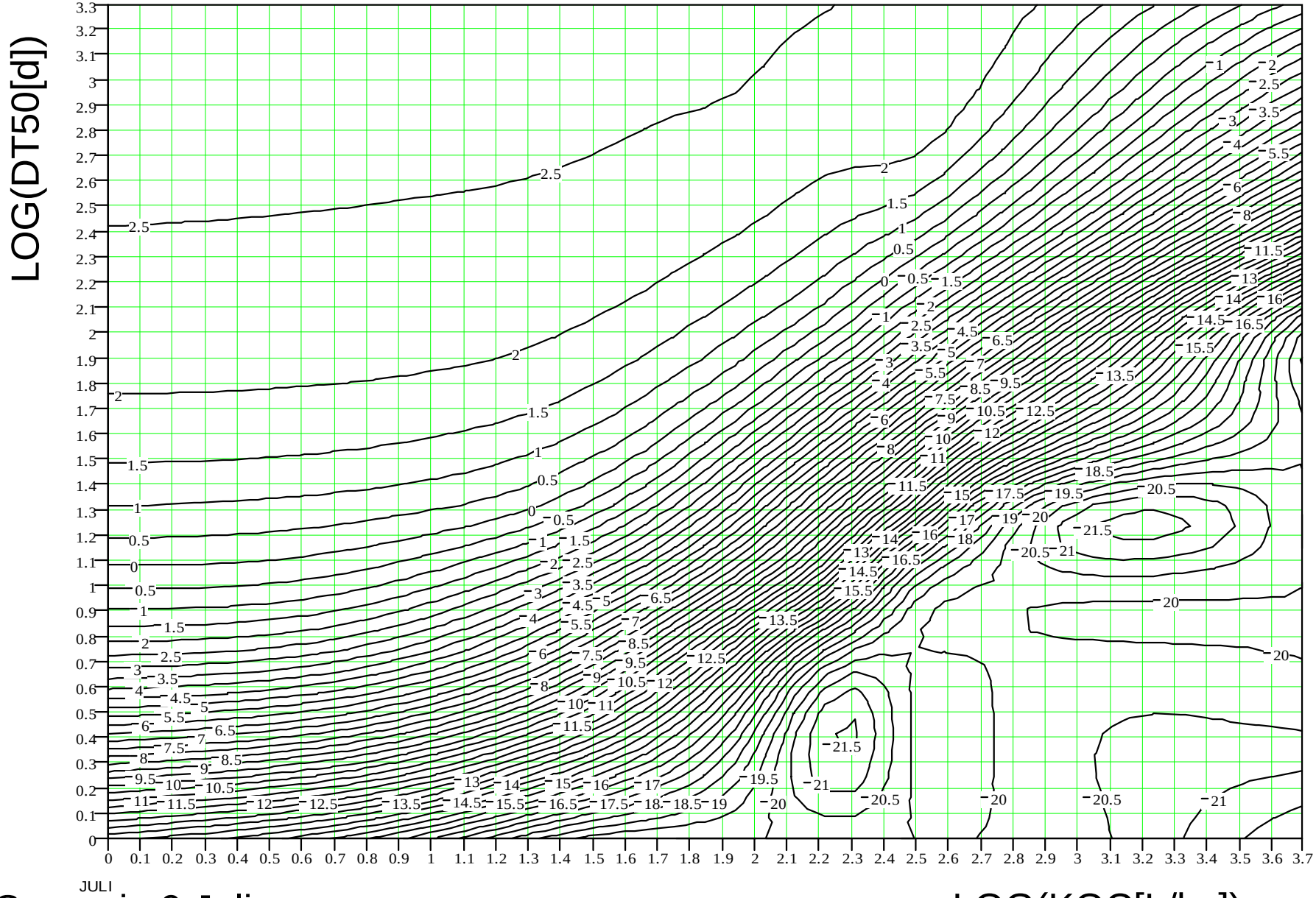
Szenario 8,November

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



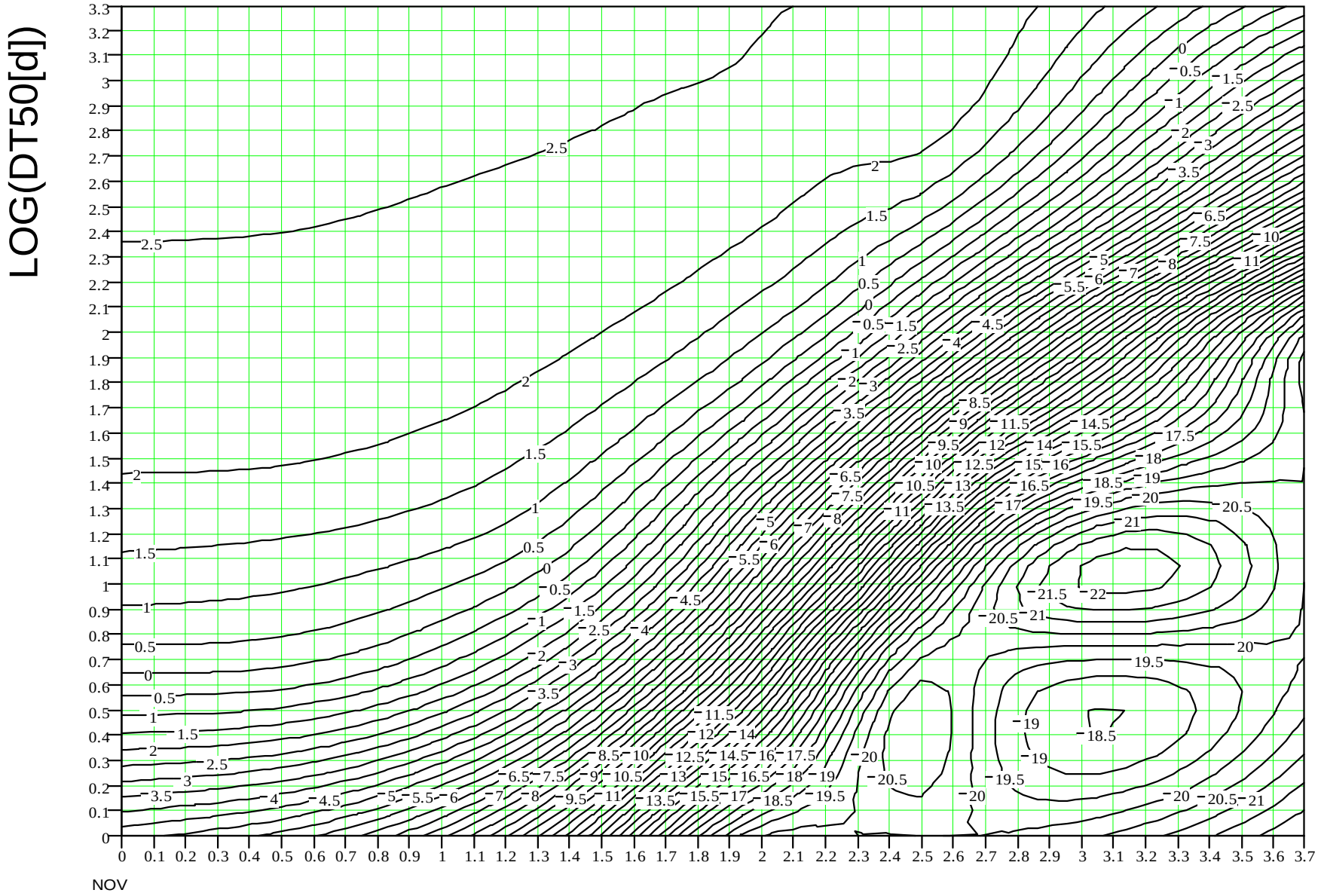
Szenario 9, Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



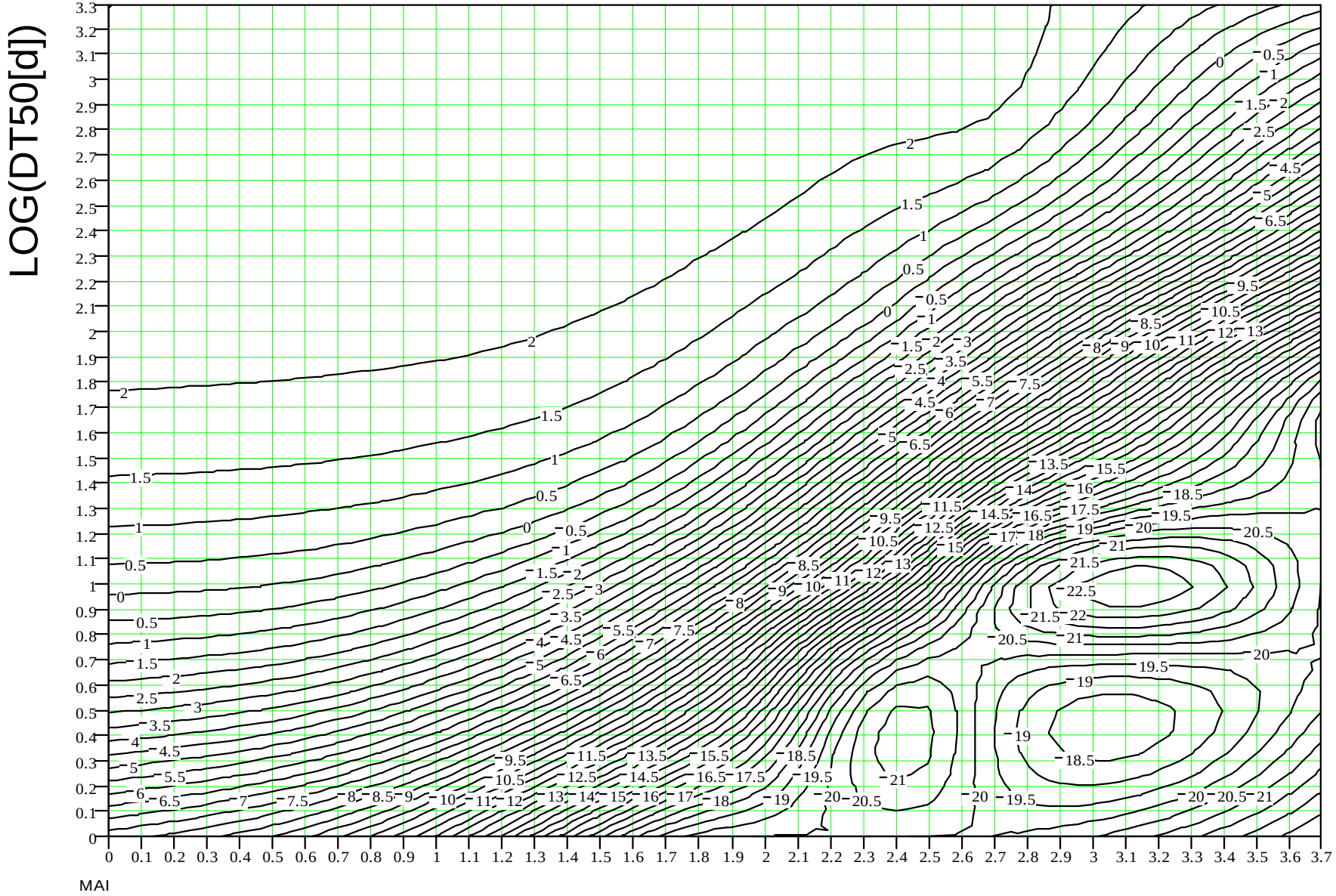
Szenario 9,Juli

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



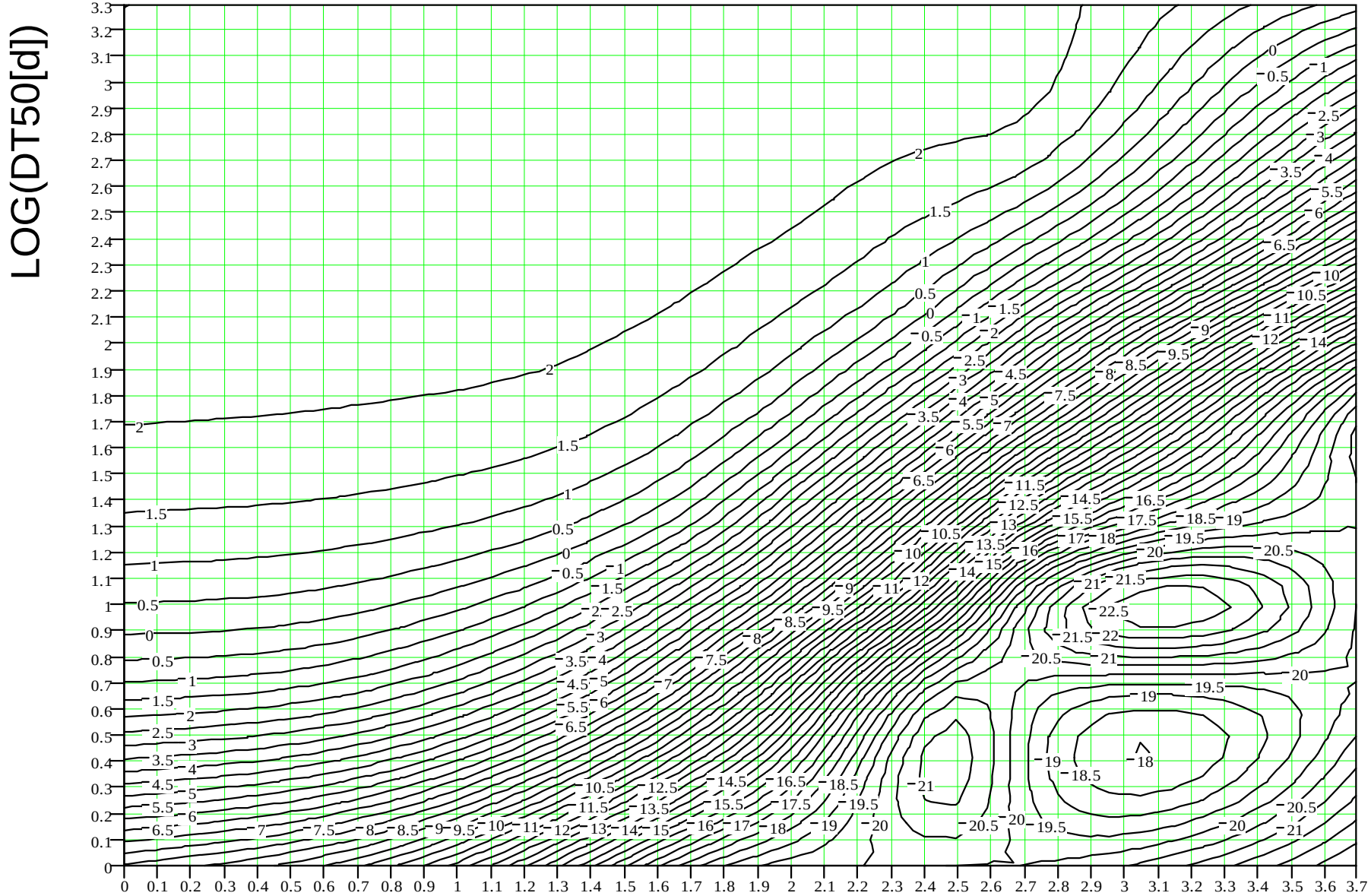
Szenario 9,November

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

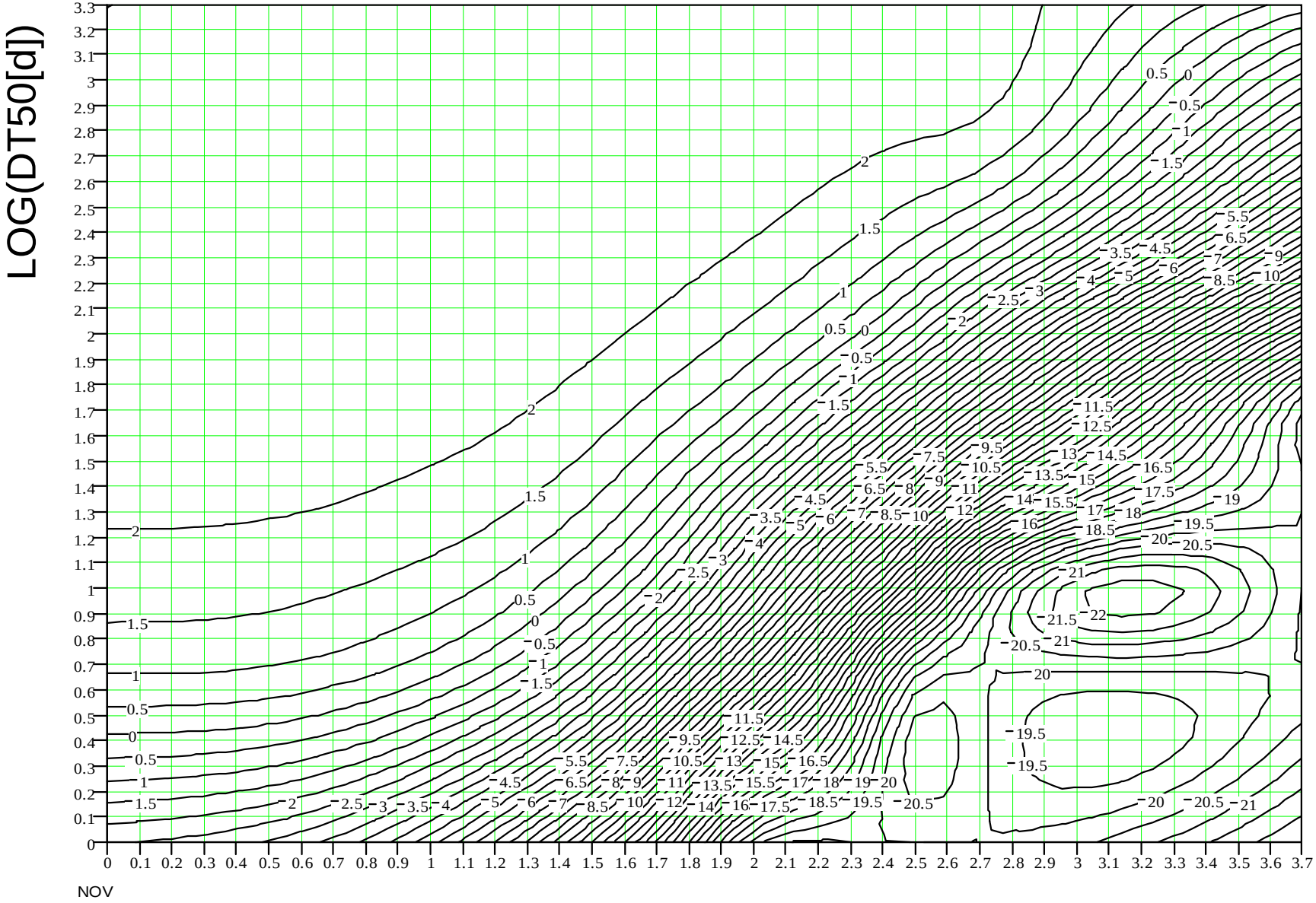


Szenario 10,Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

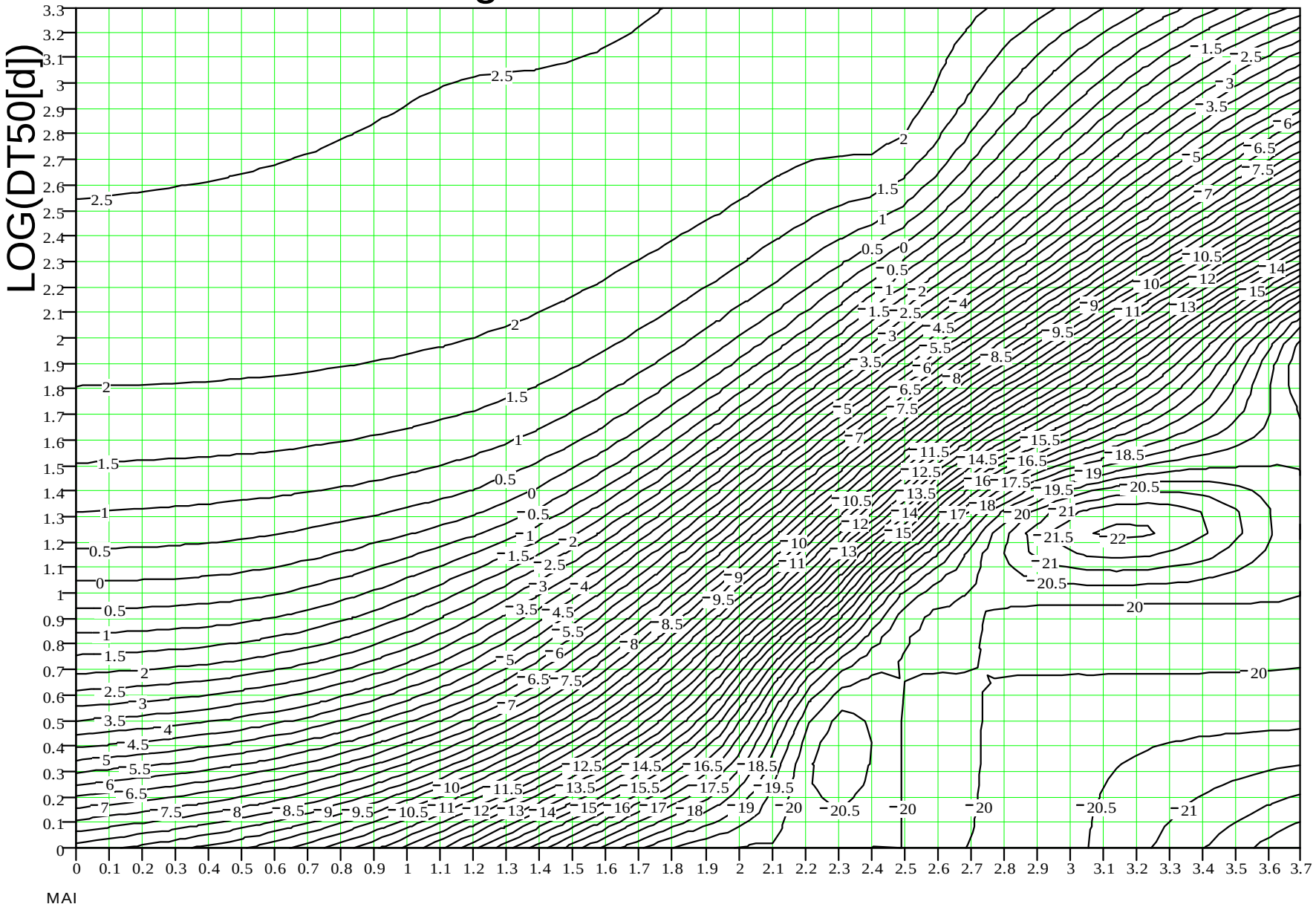


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



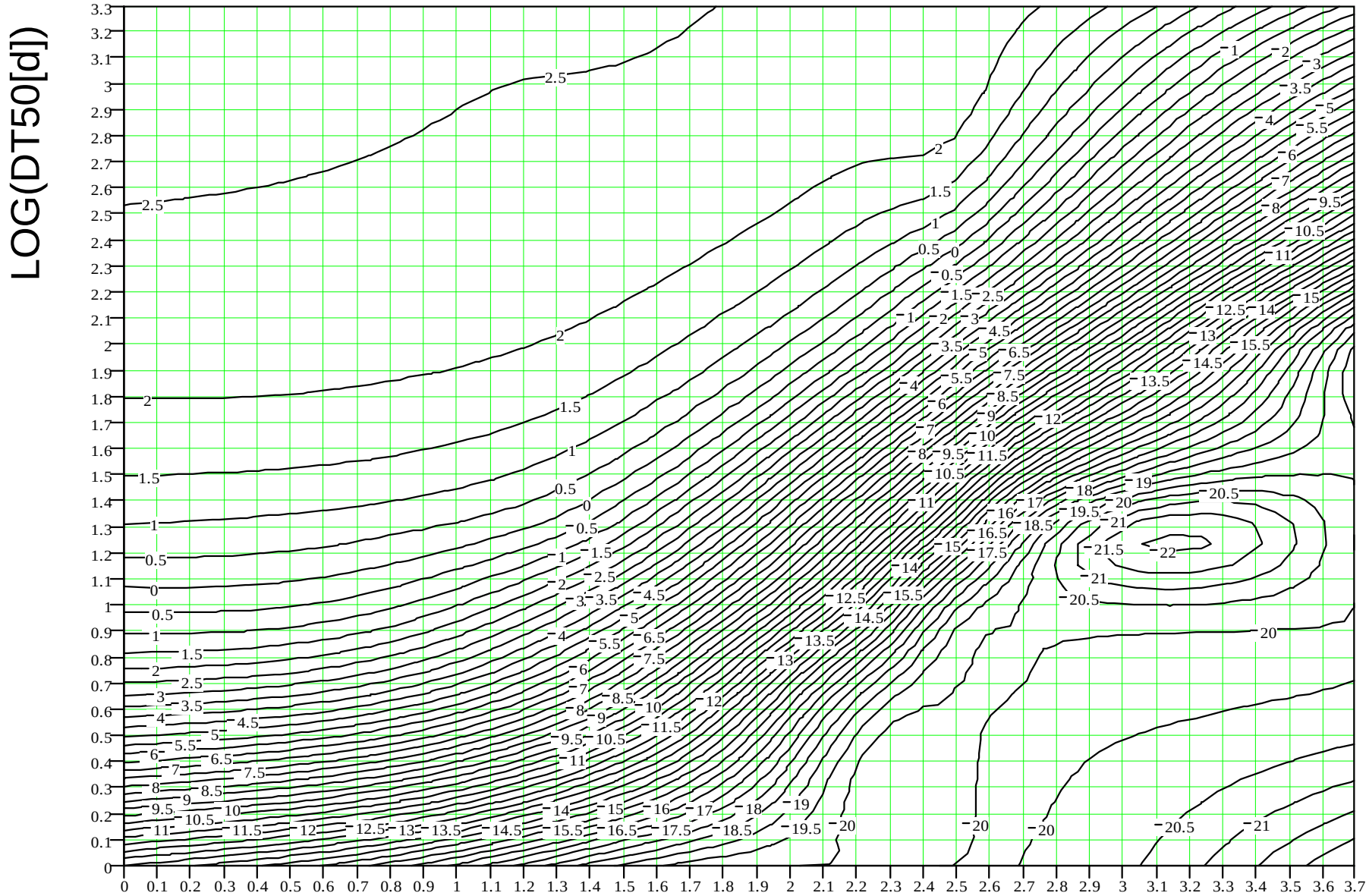
Szenario 10,November

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

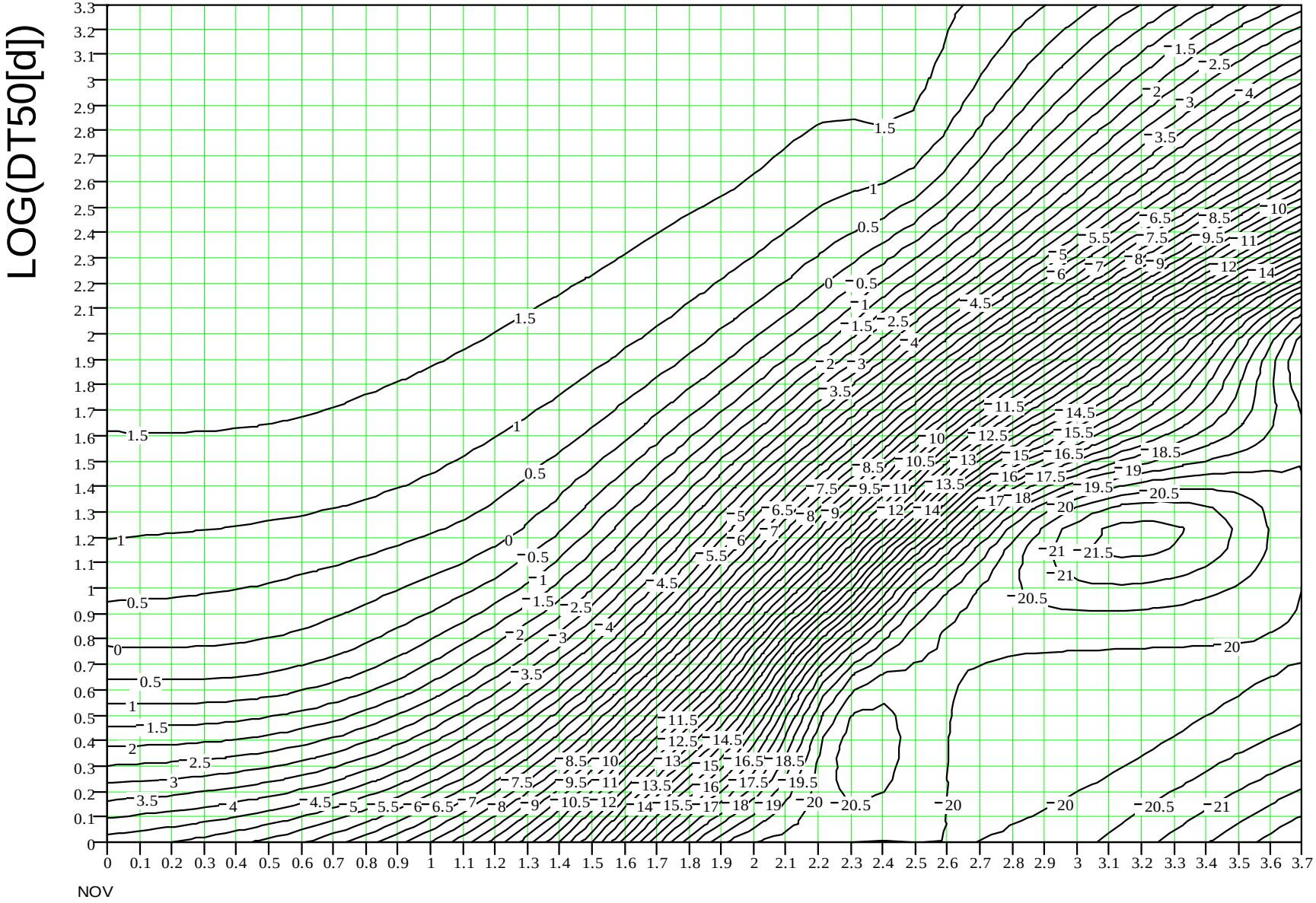


Szenario 11,Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

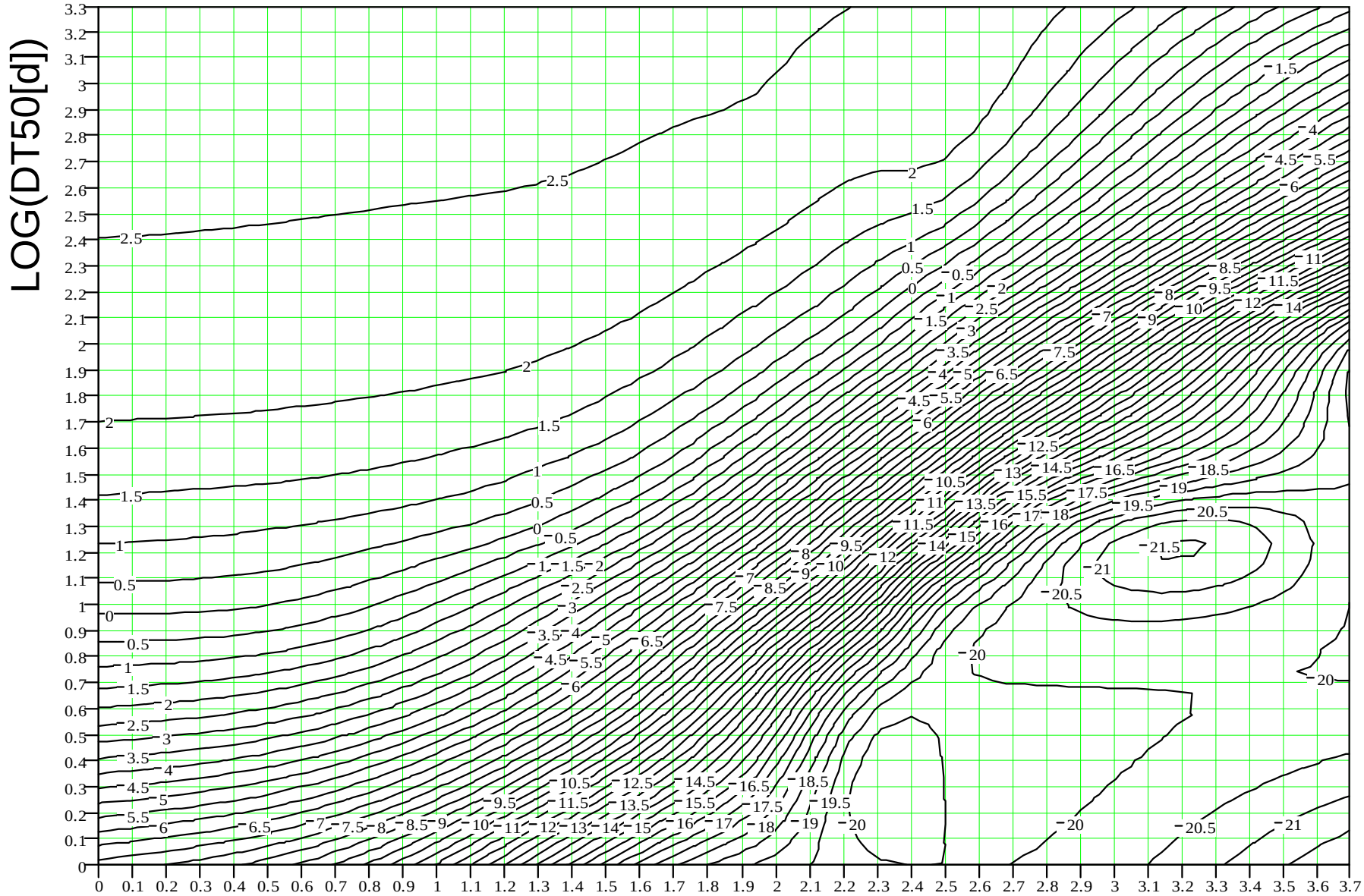


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



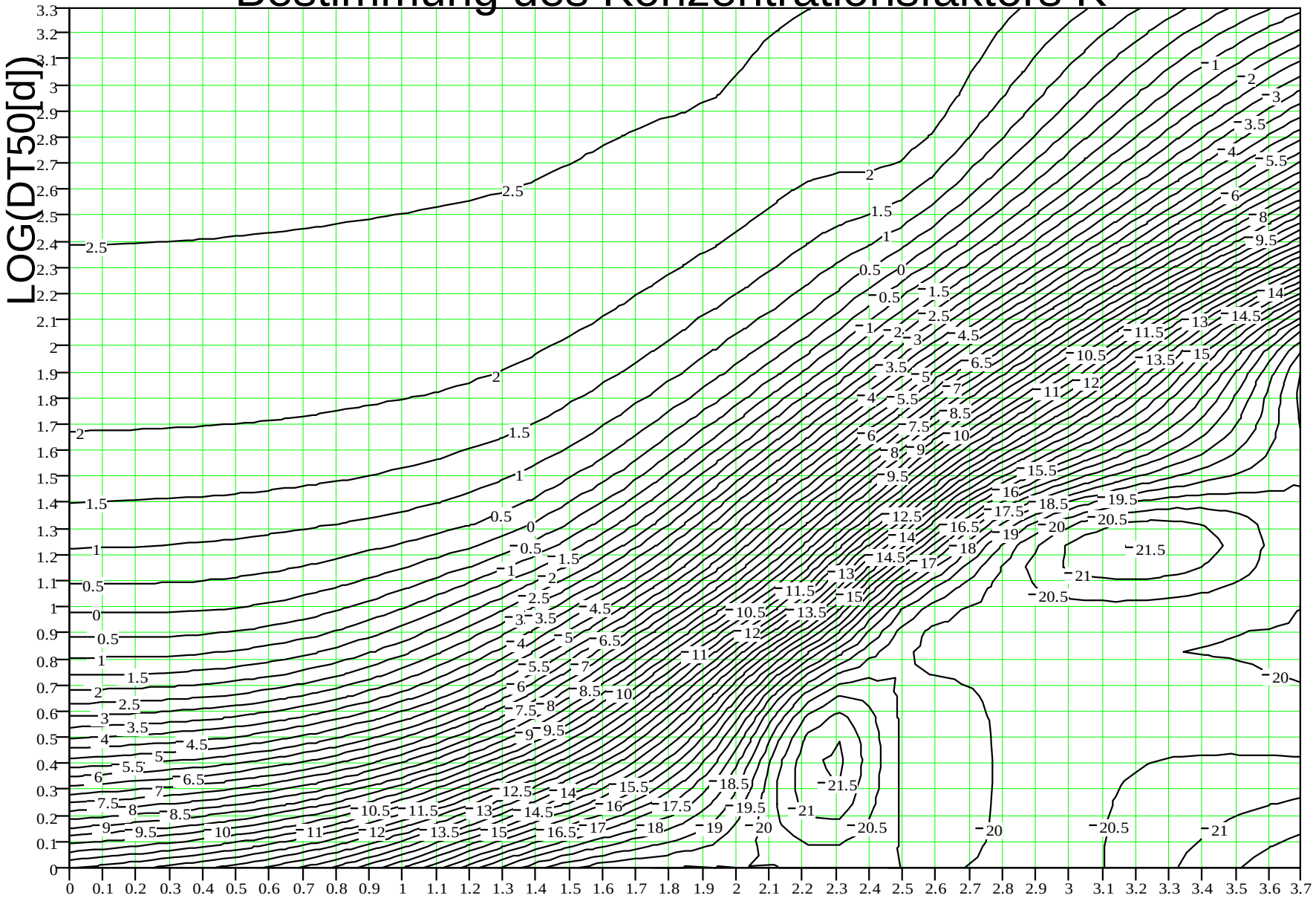
Szenario 11,November

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



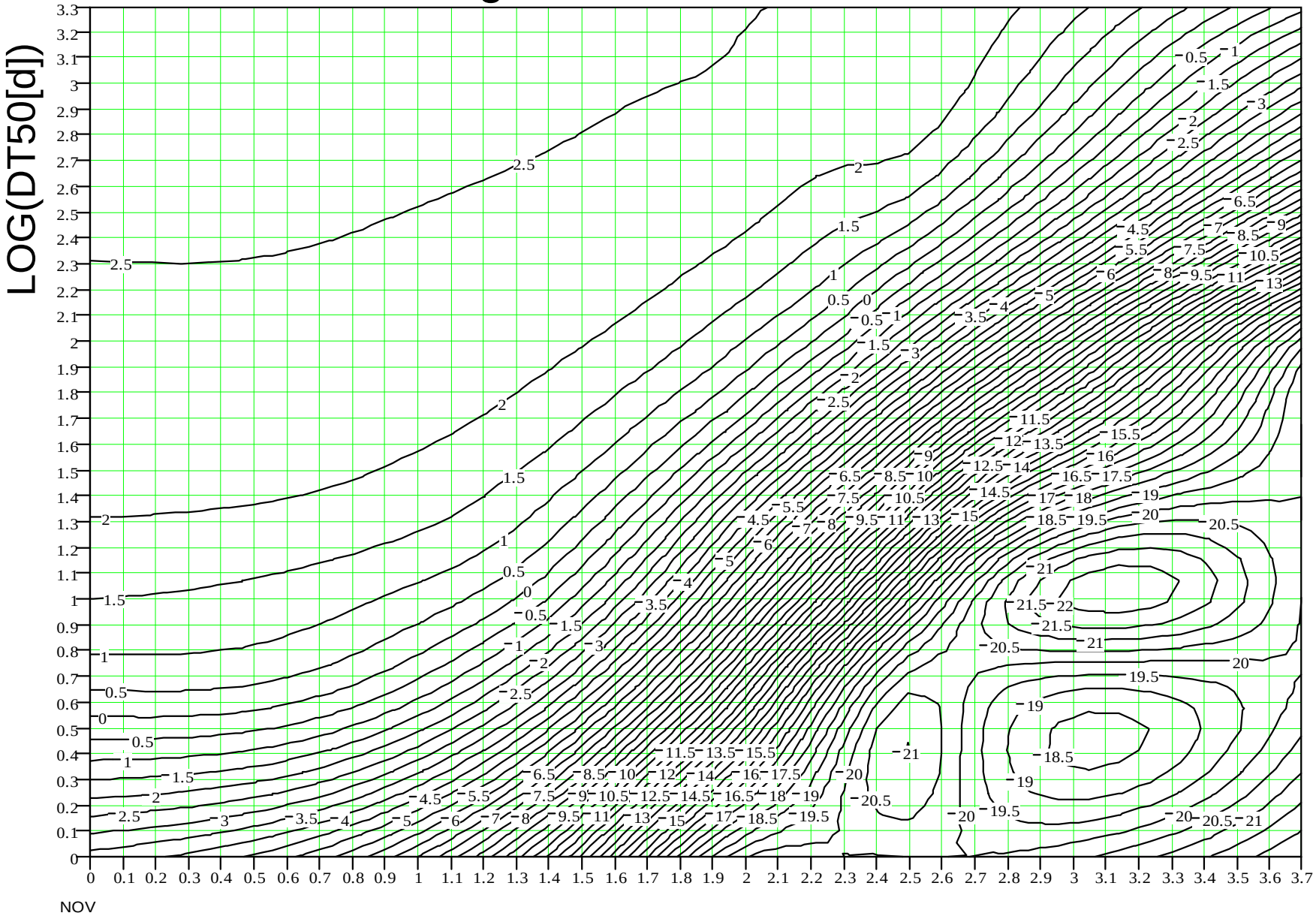
Szenario 12,Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



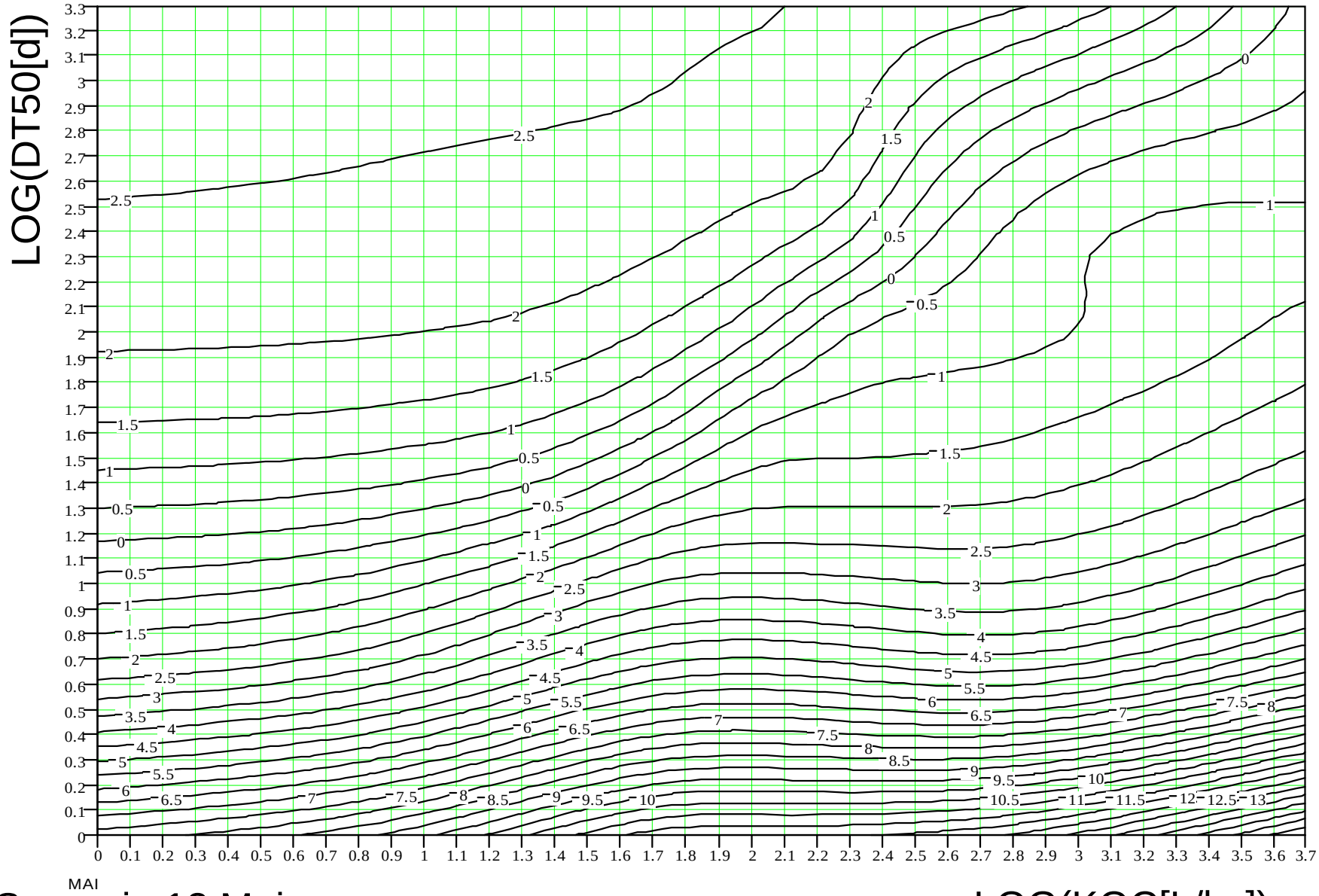
Szenario 12,Juli

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



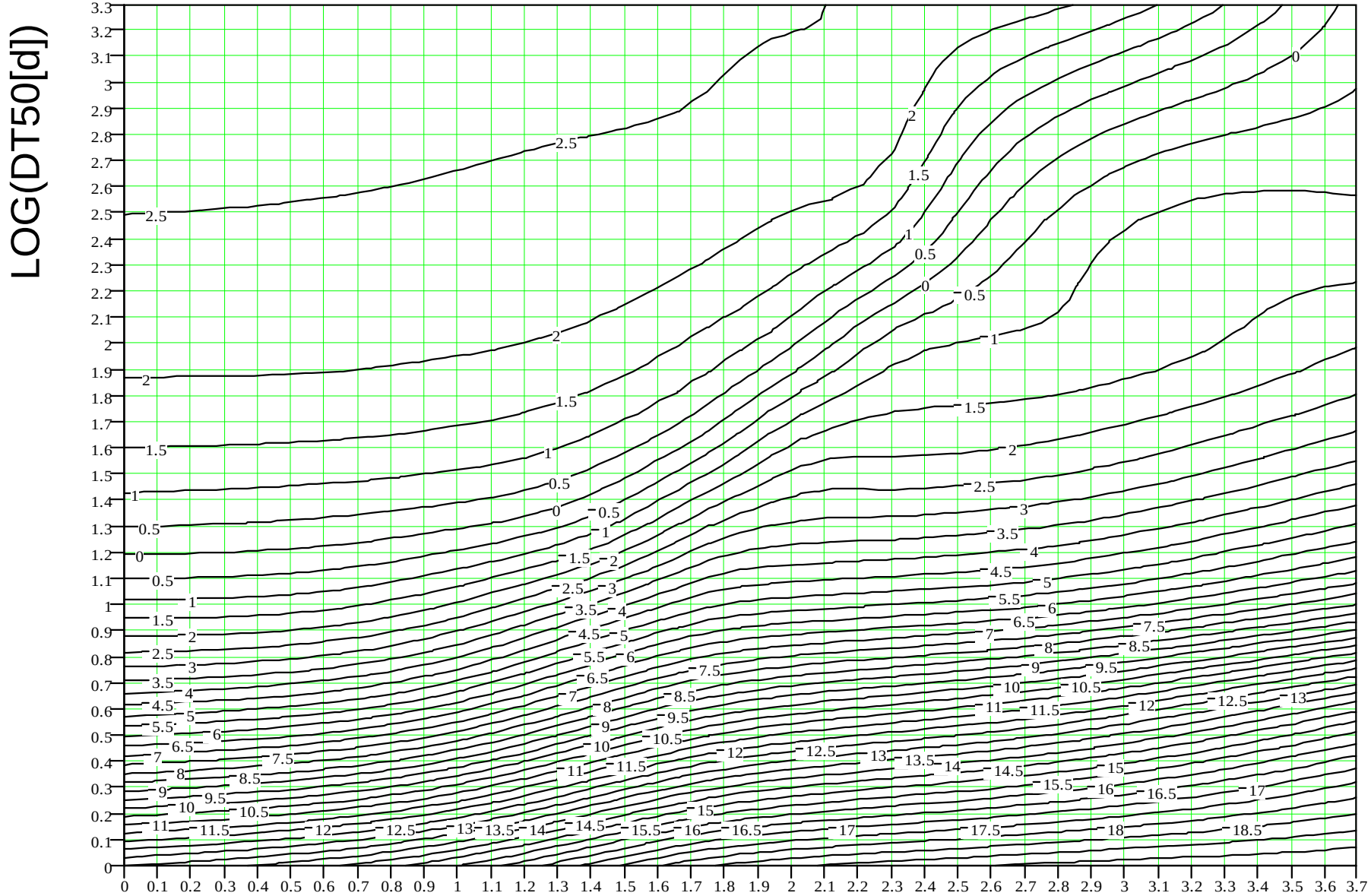
Szenario 12,November

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

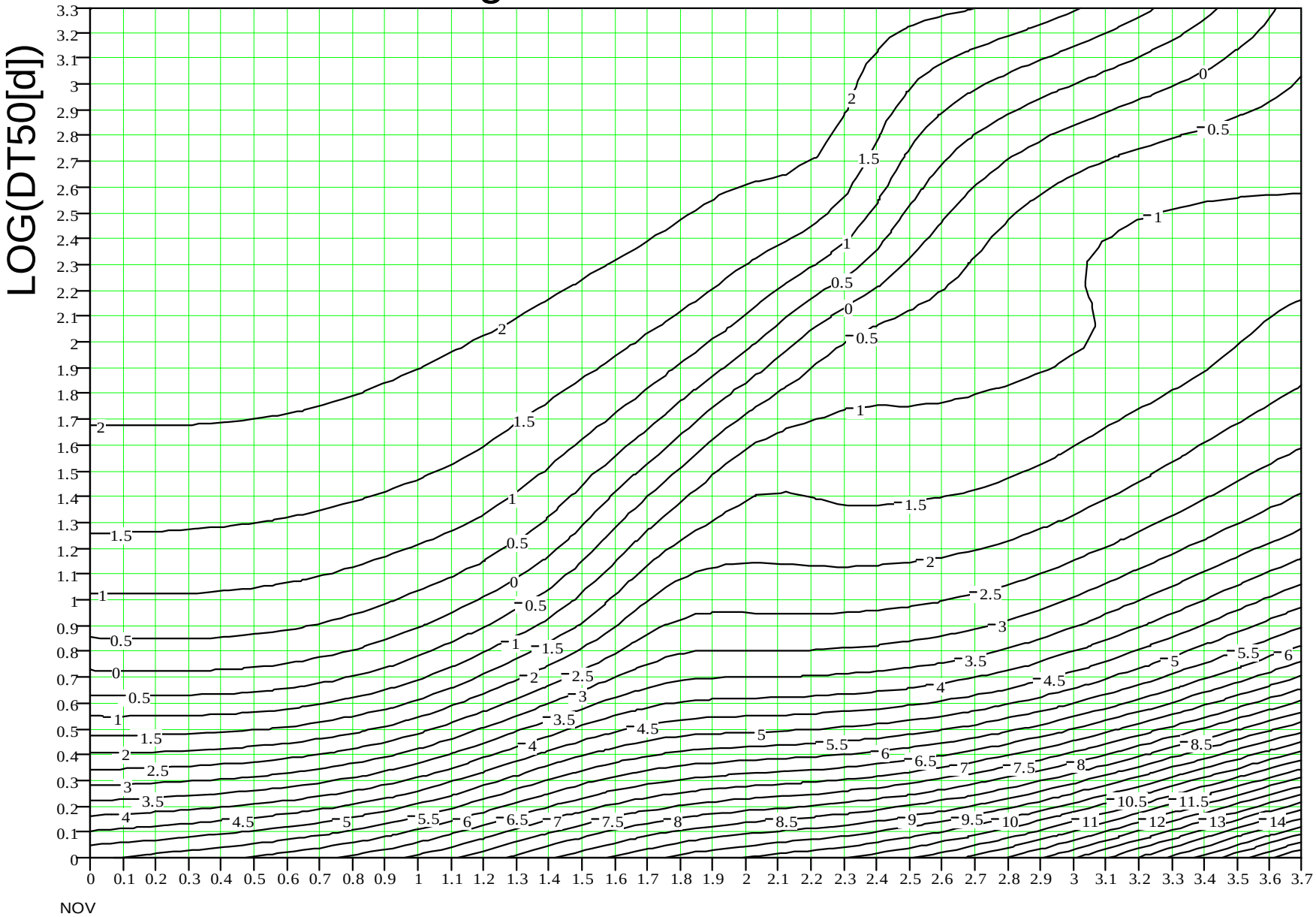


Szenario 13,Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

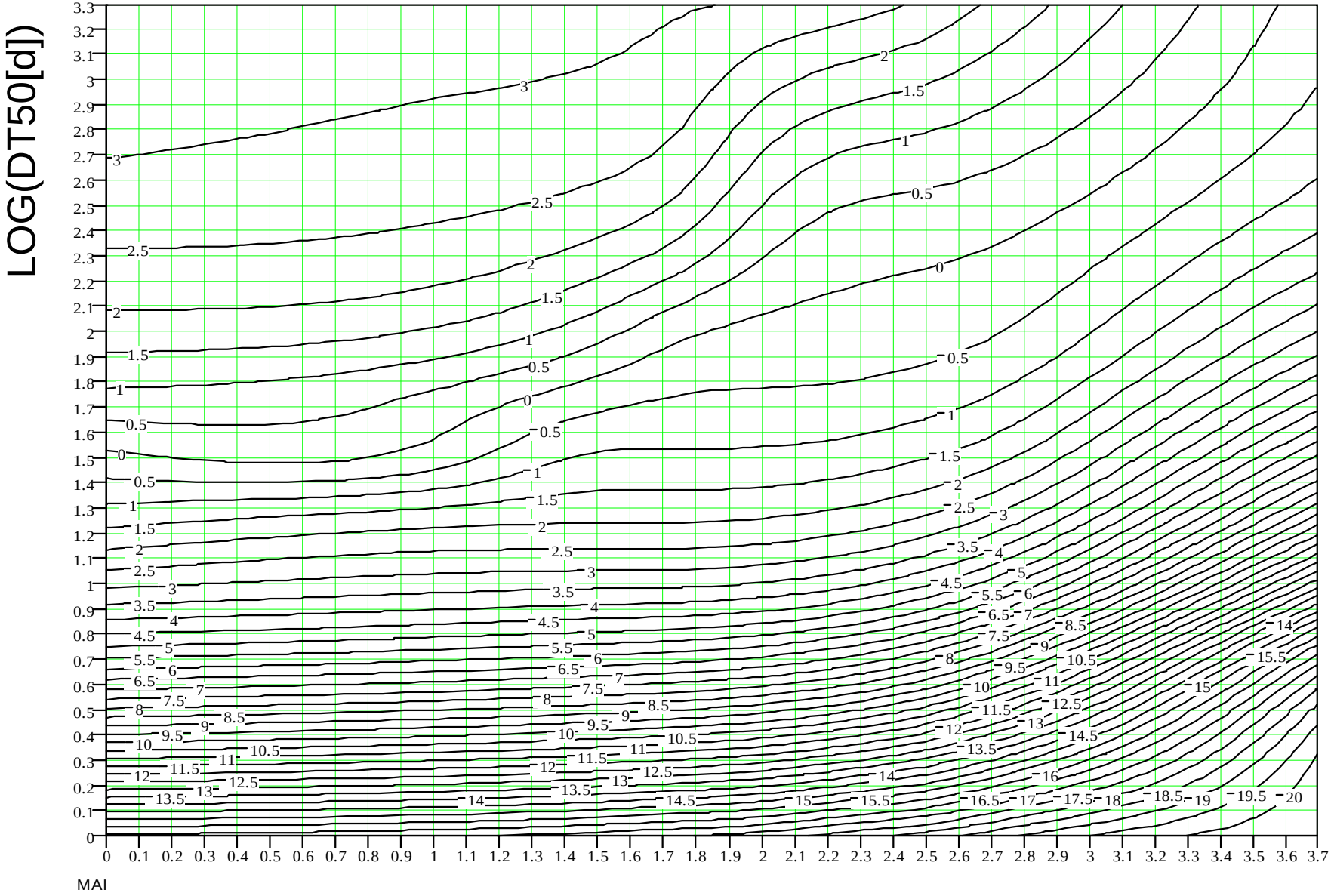


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



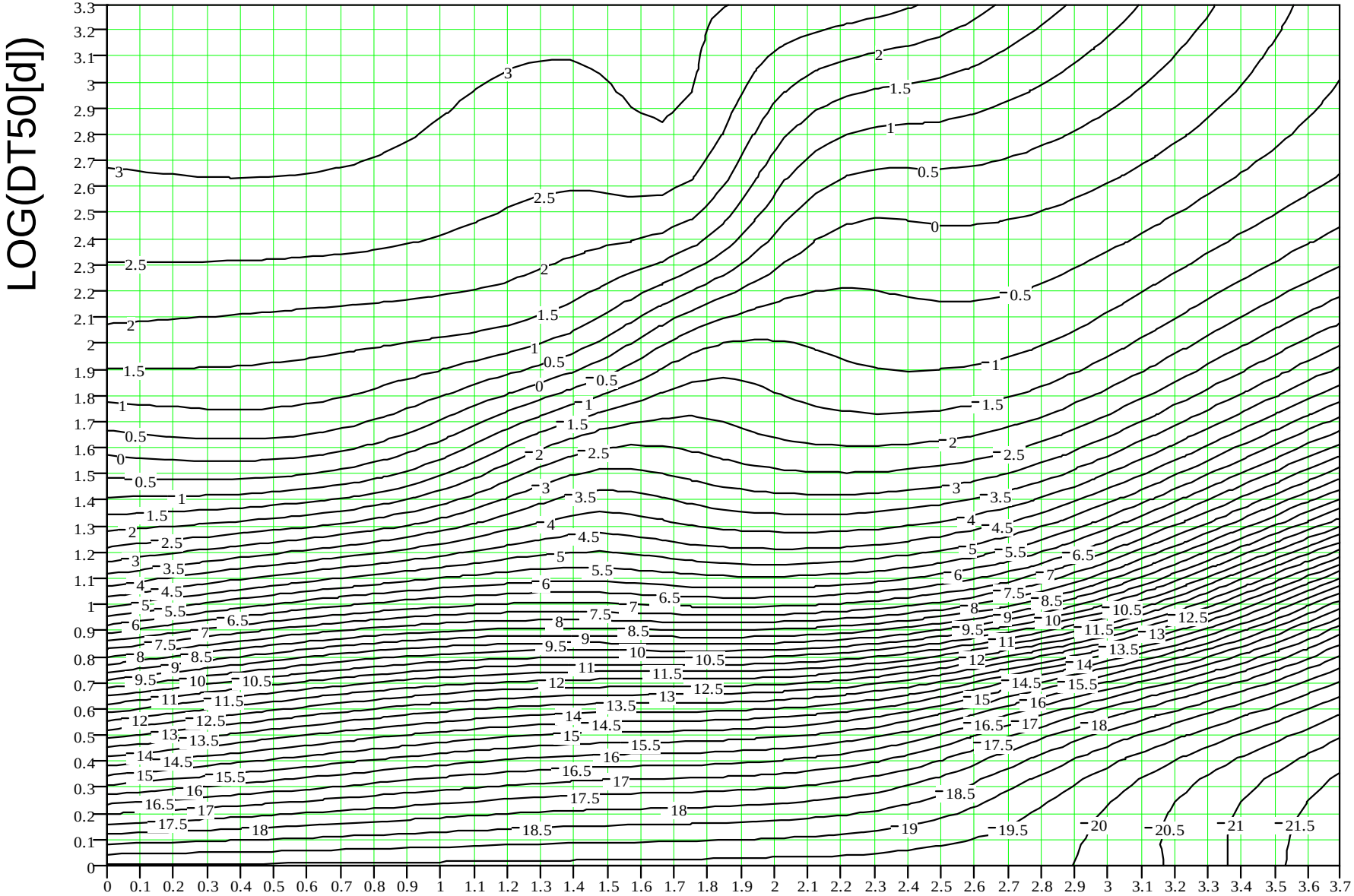
Szenario 13,November

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



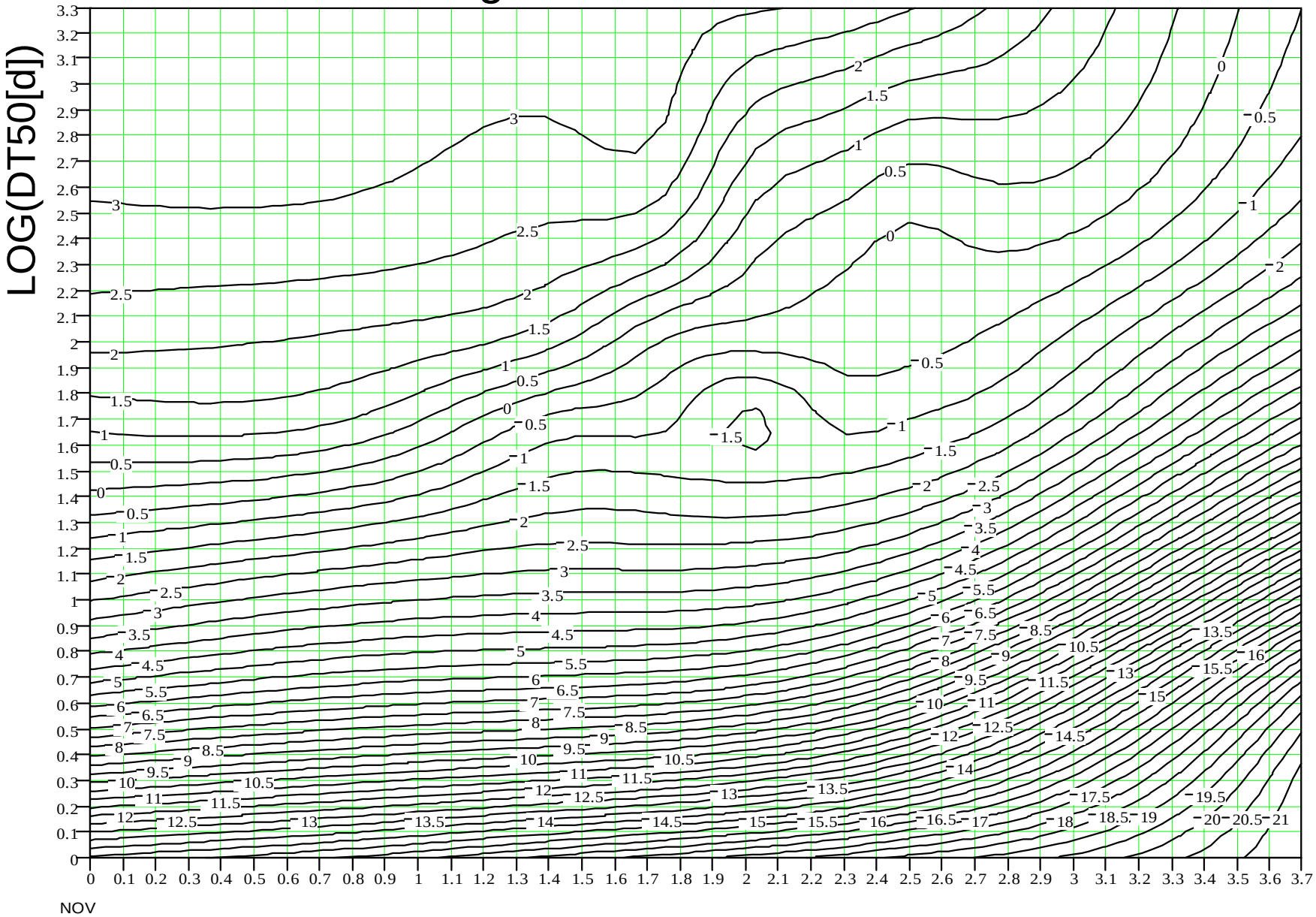
Szenario 14,Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



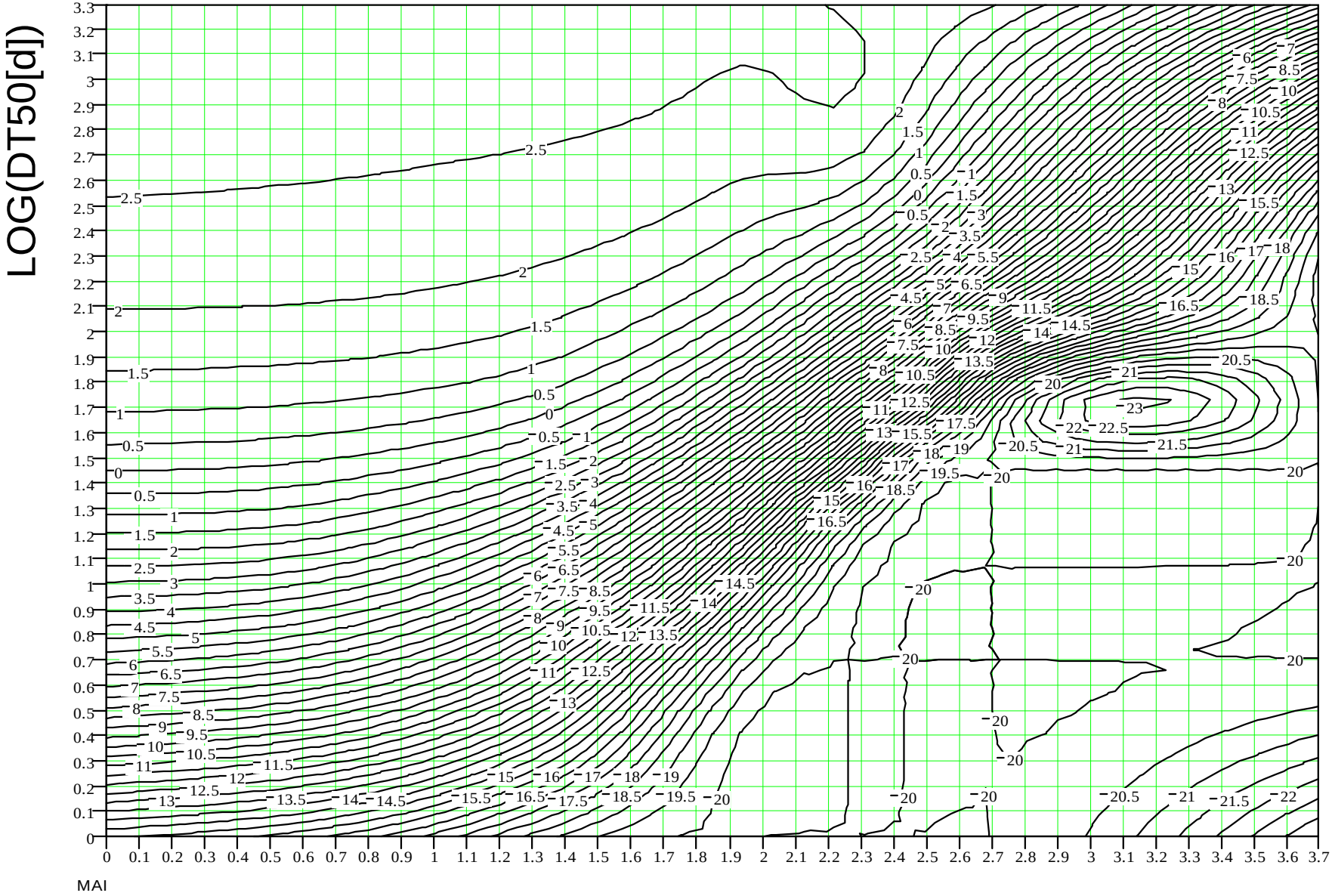
Szenario 14,Juli

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



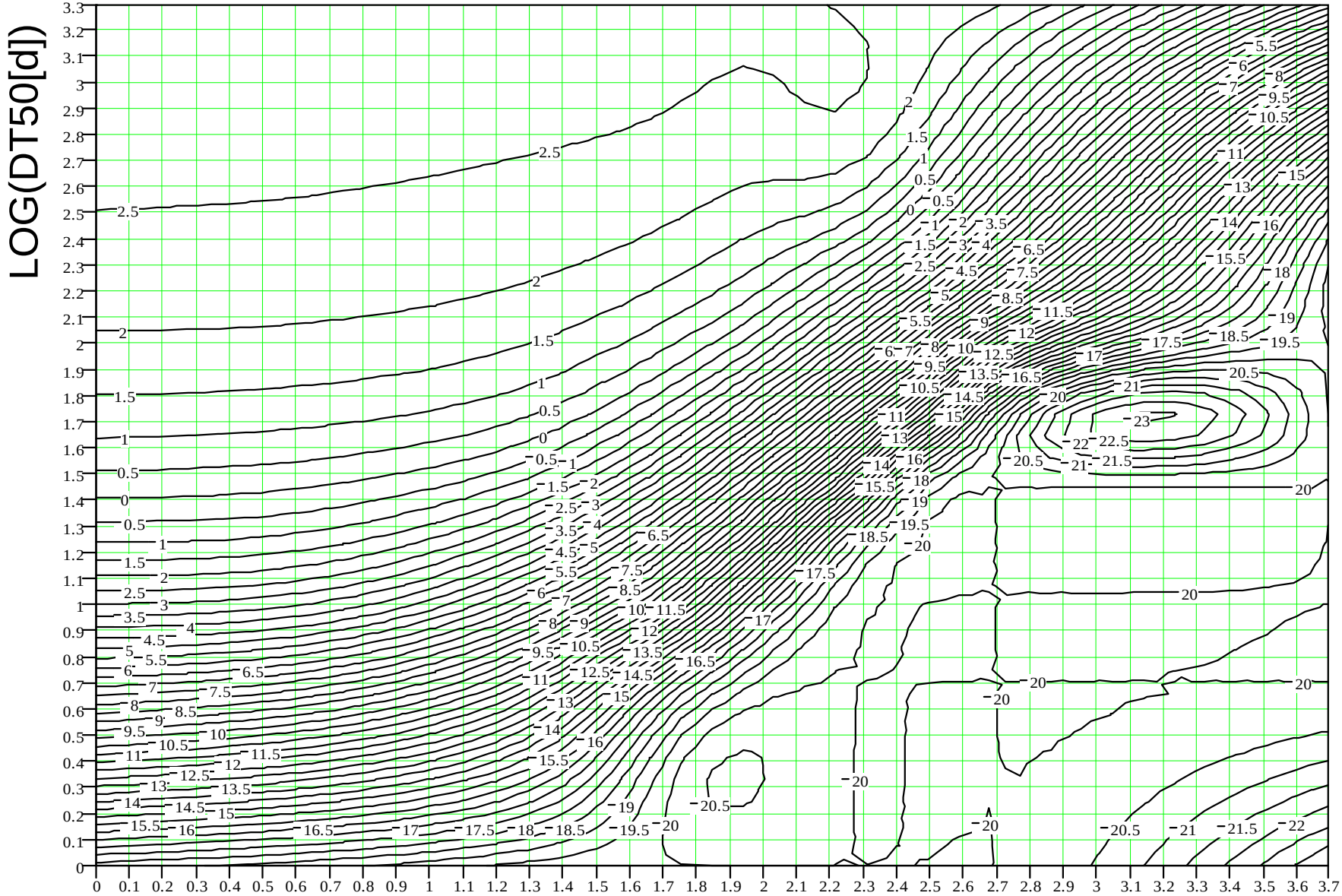
Szenario 14,November

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

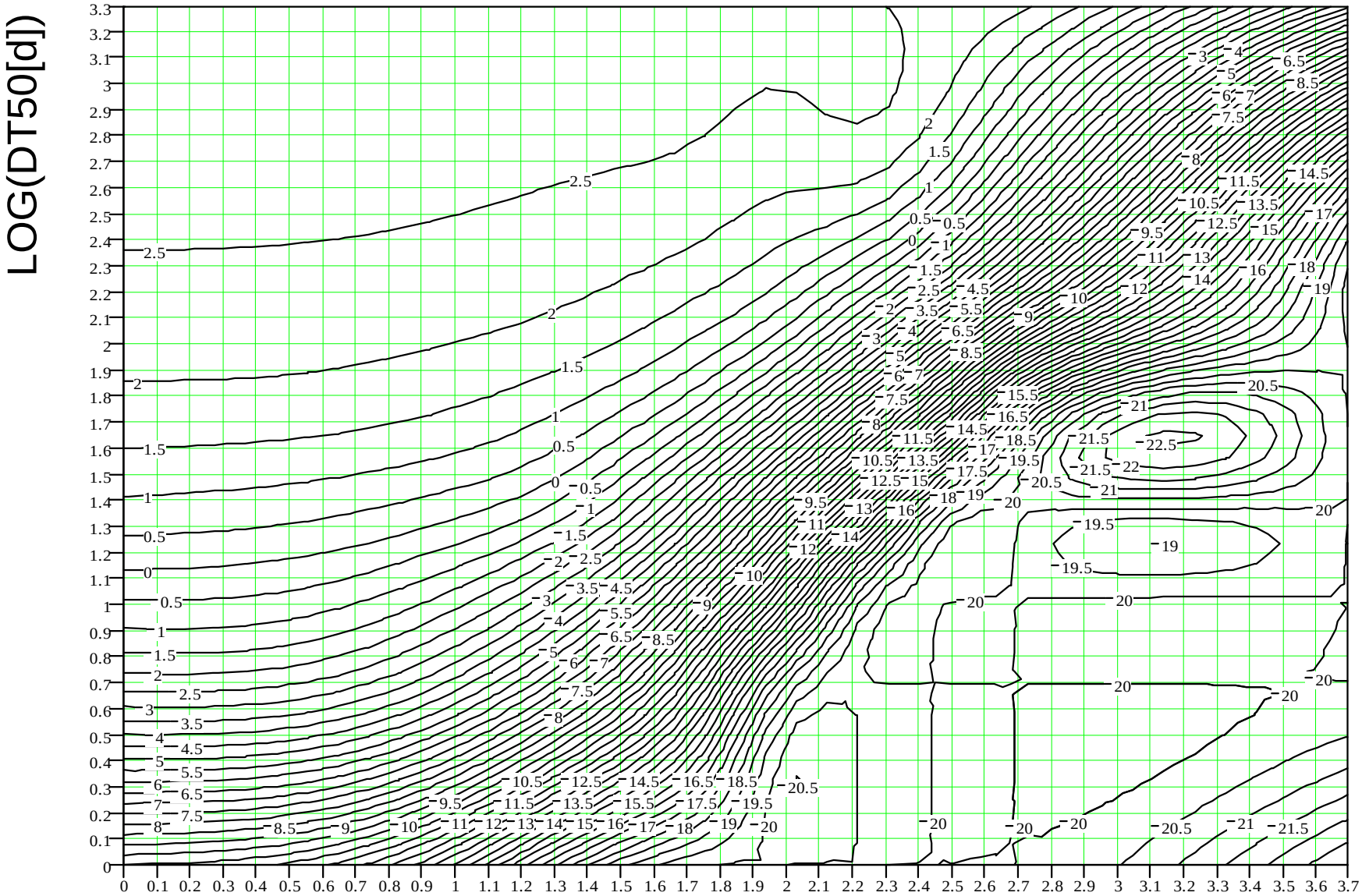


Szenario 15,Mai

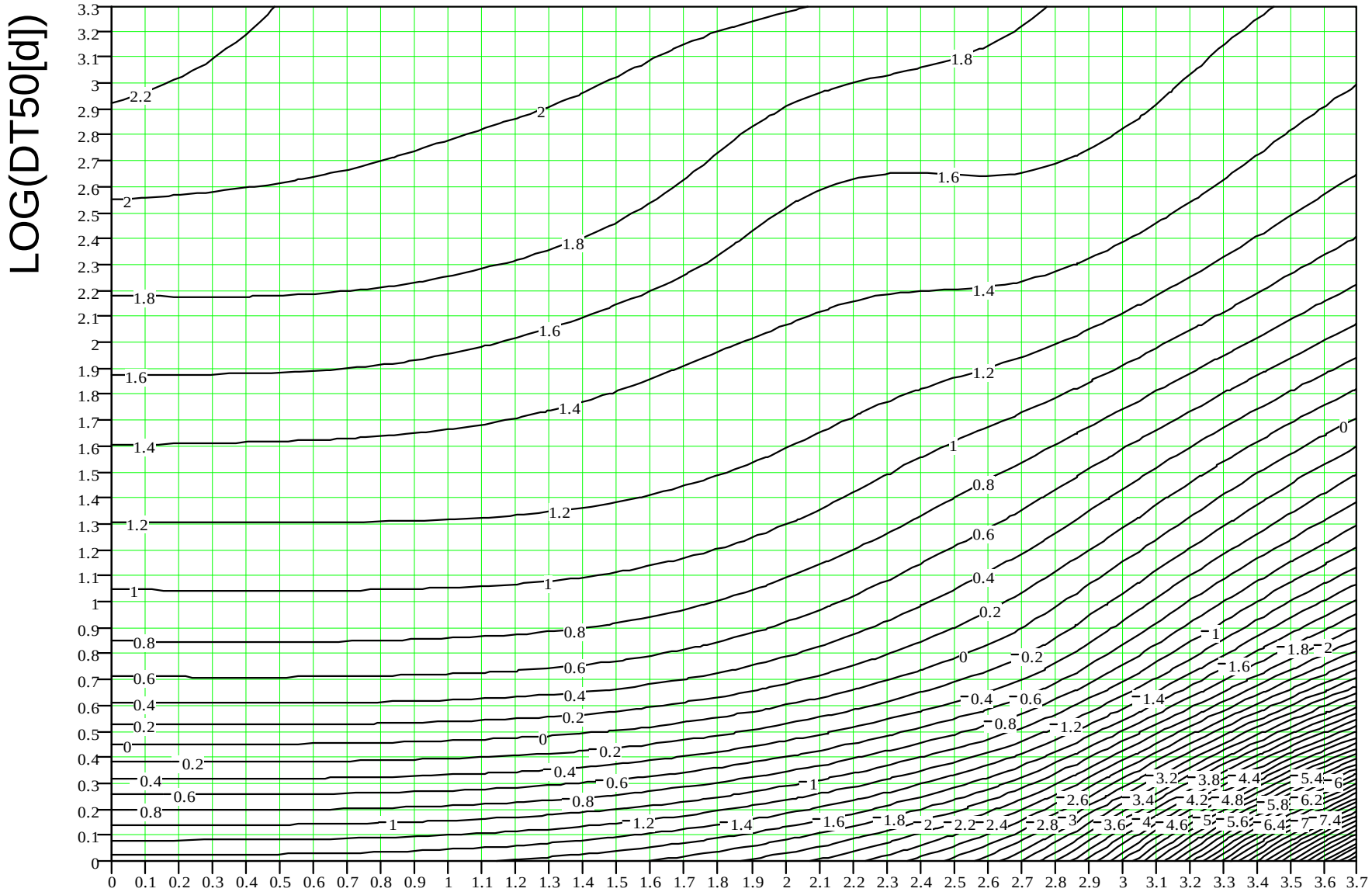
Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

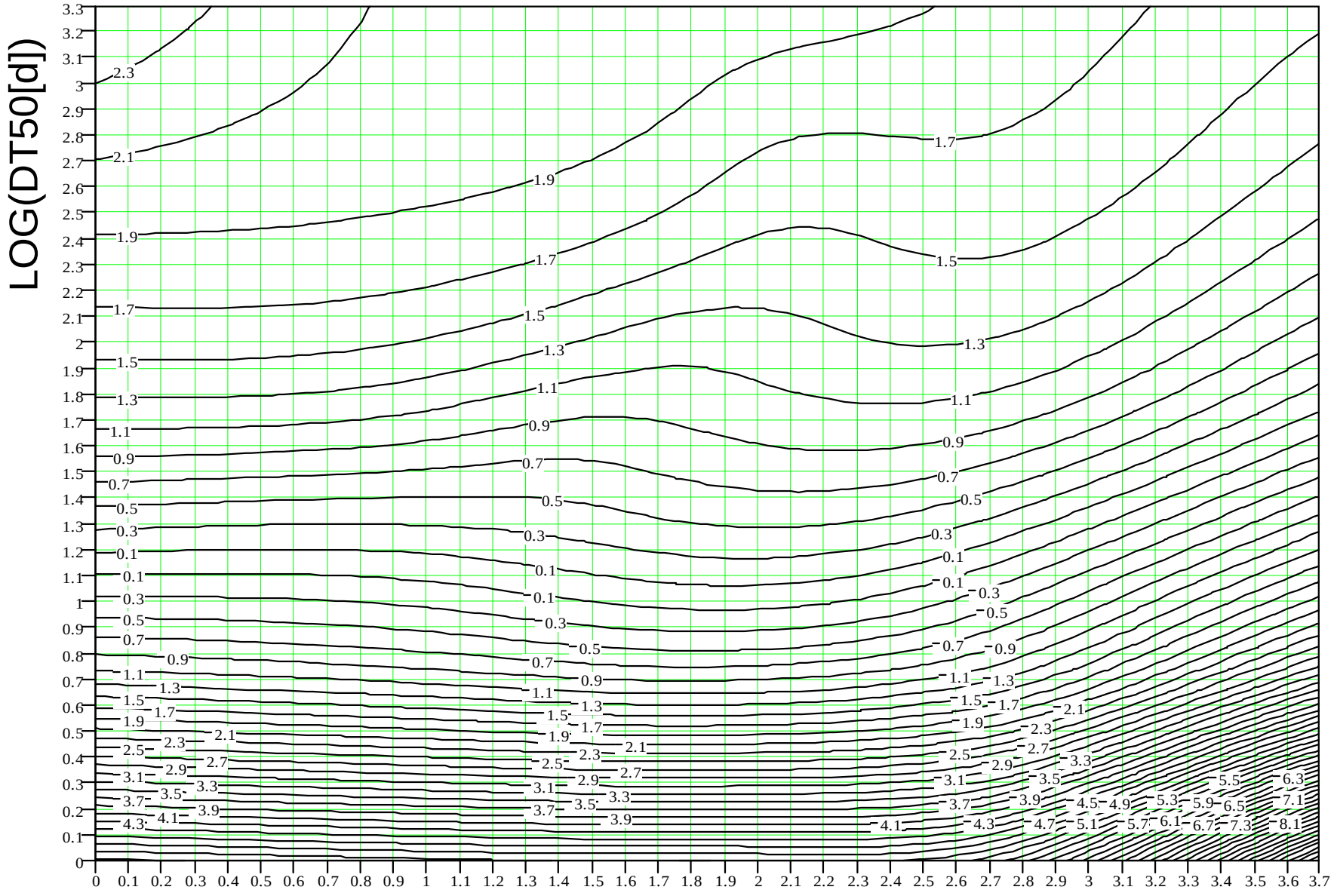


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



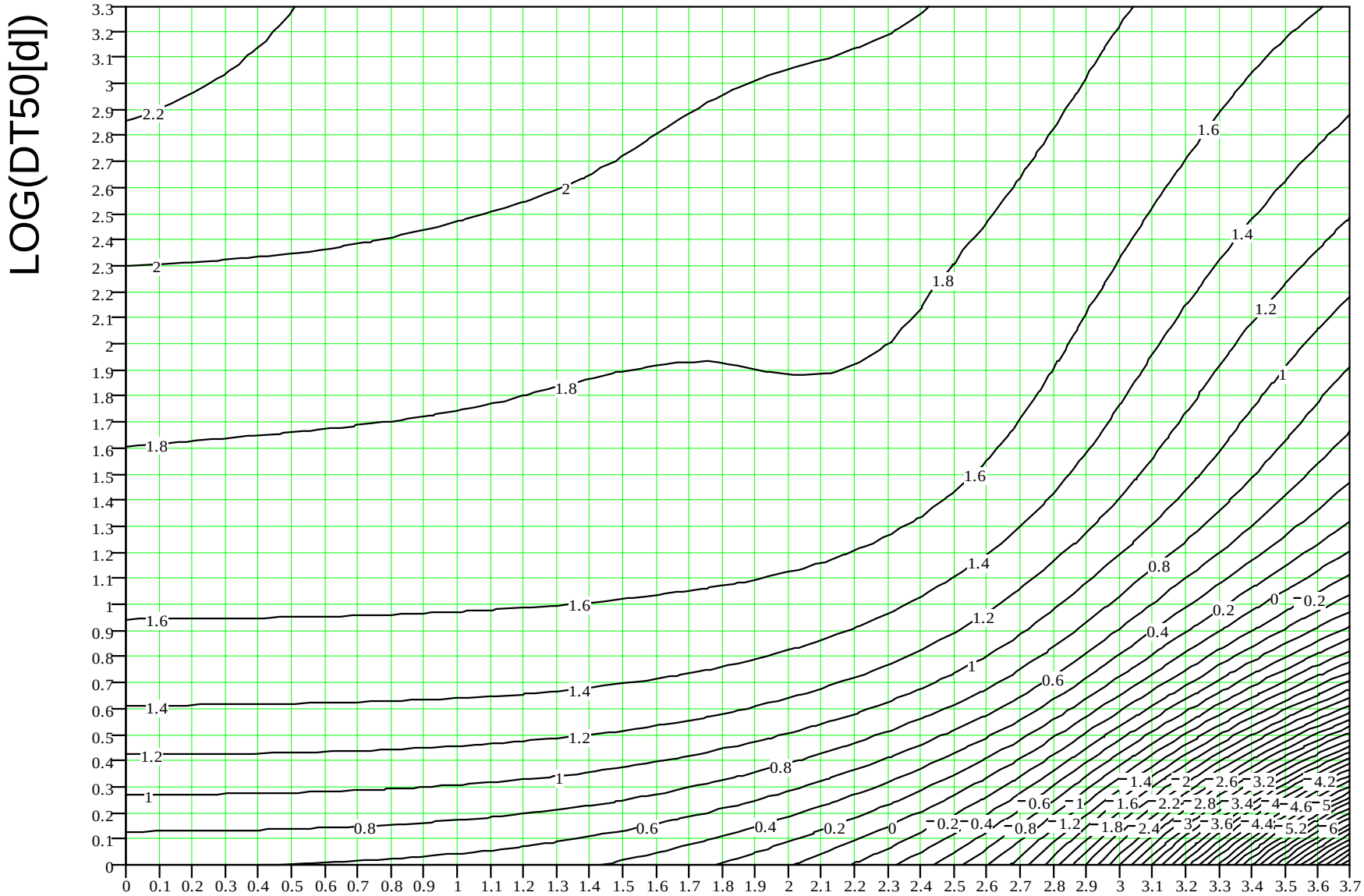
Szenario 16,Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

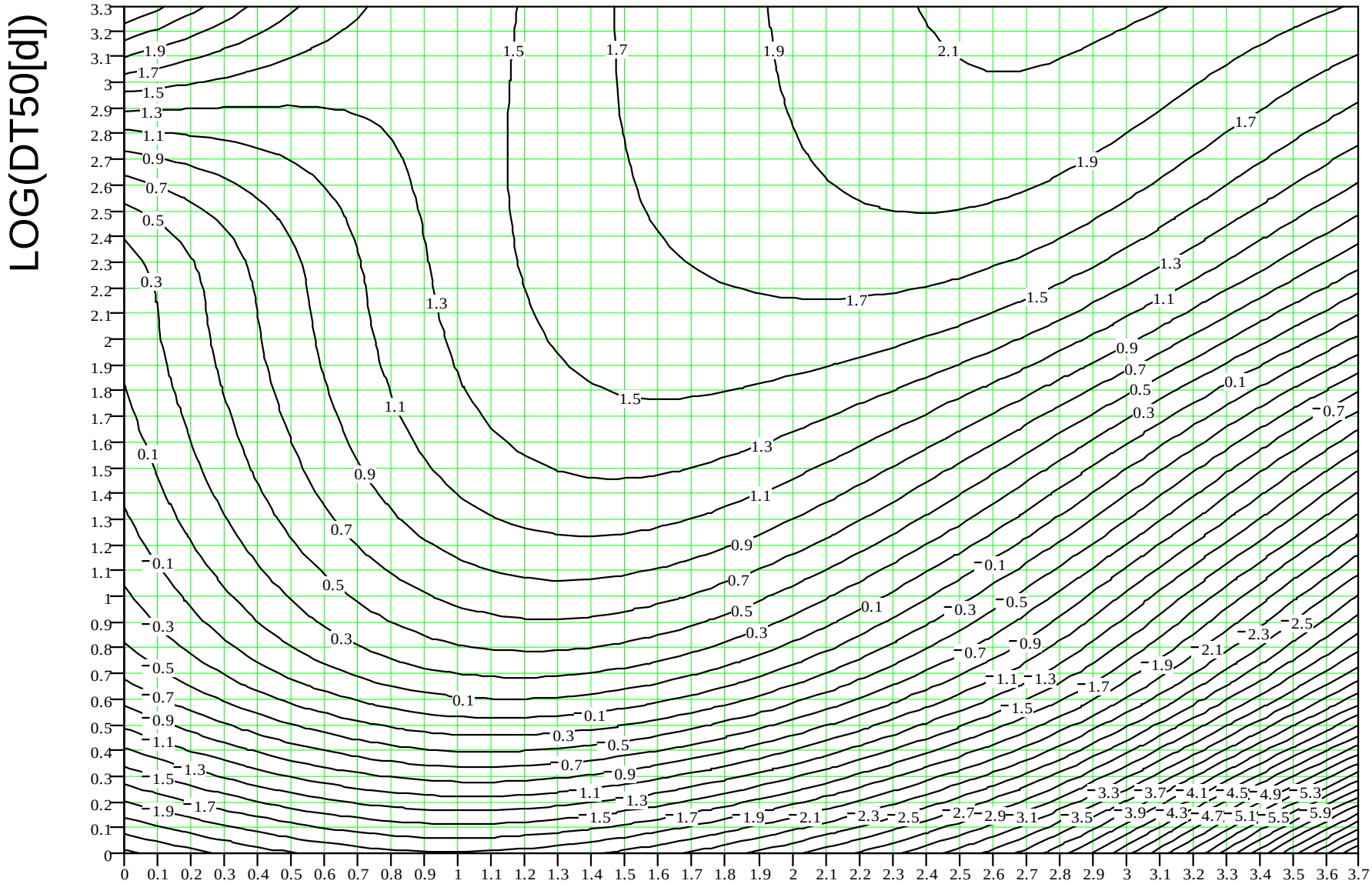


Szenario 16,Juli

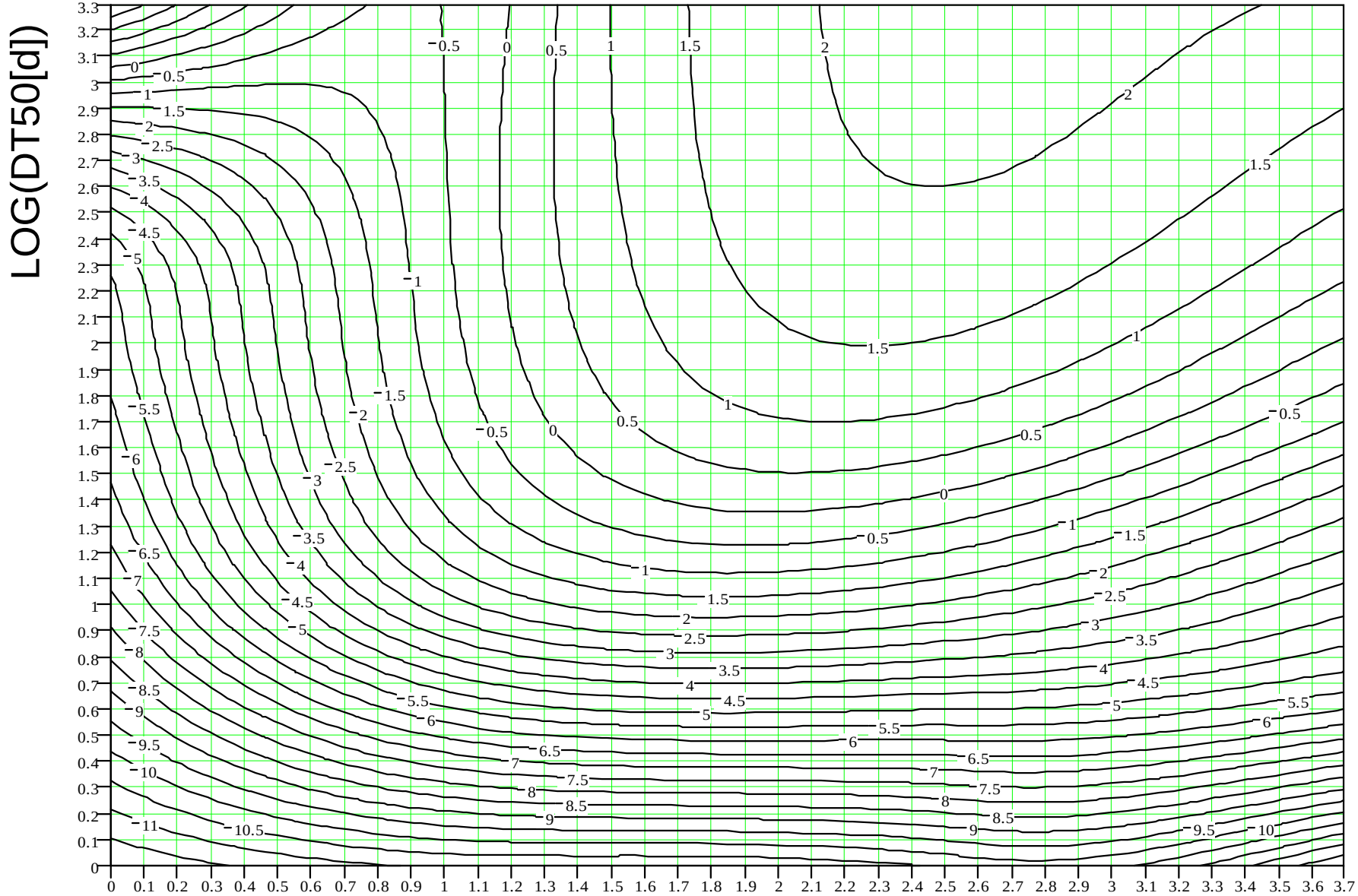
Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



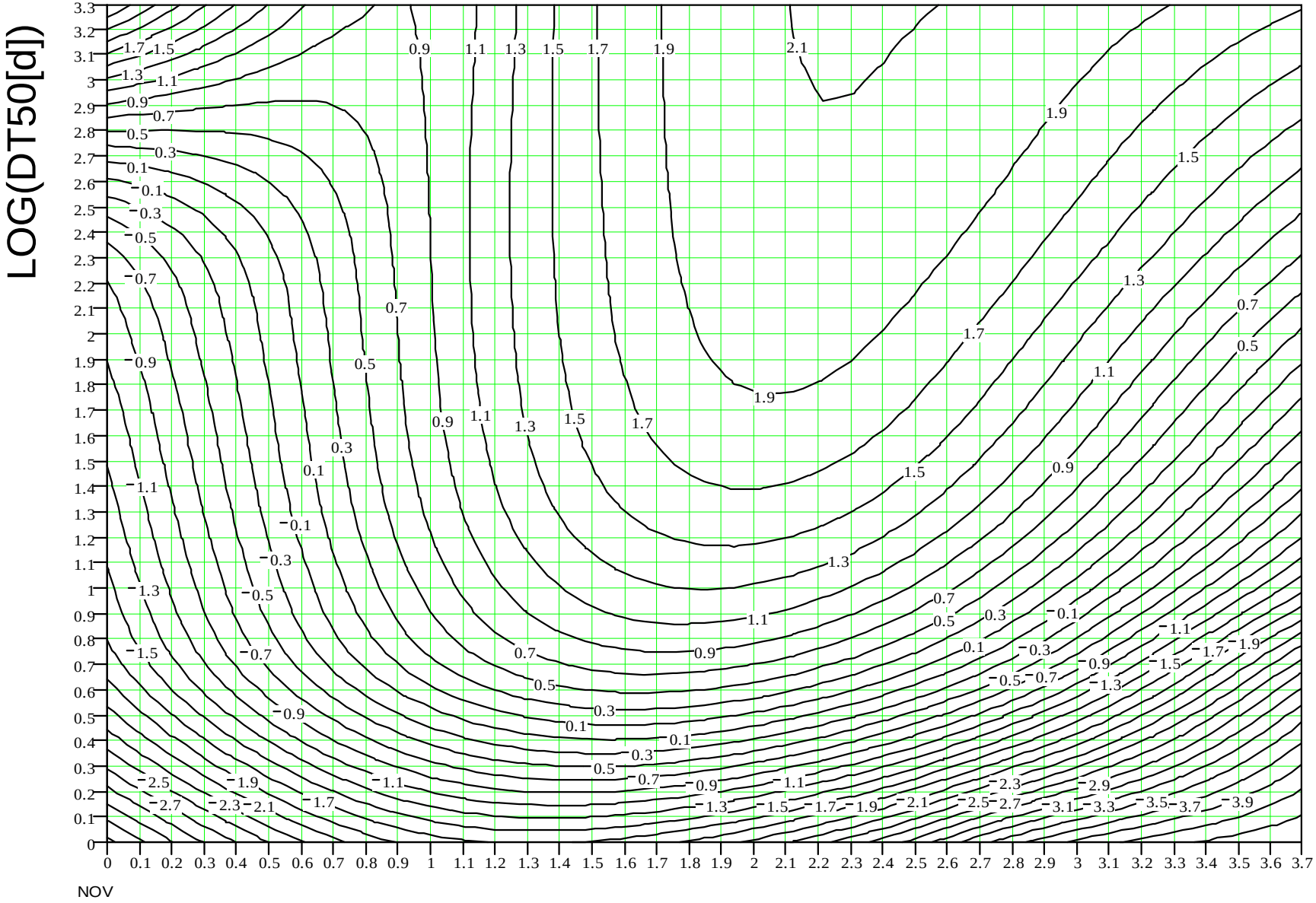
Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

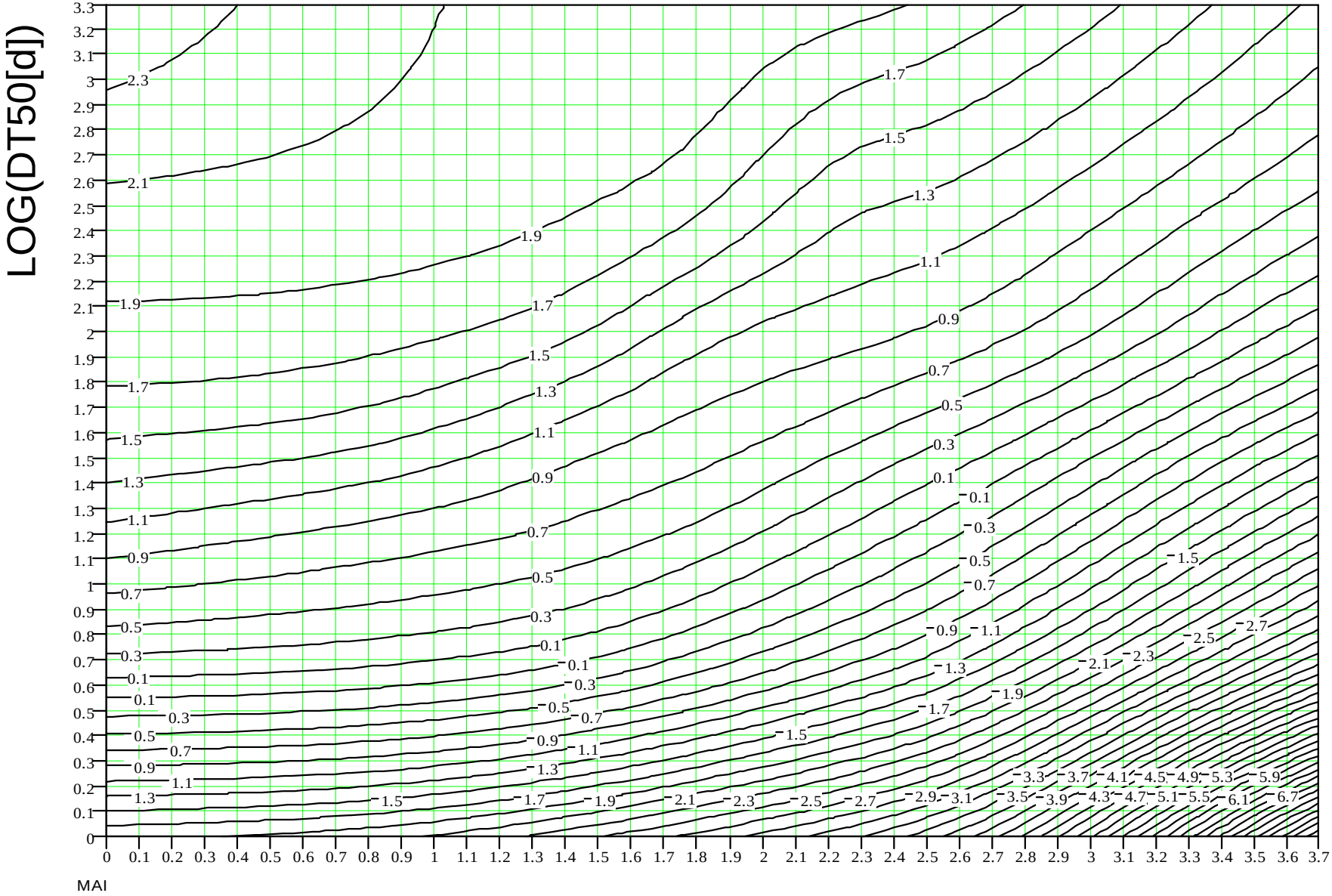


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



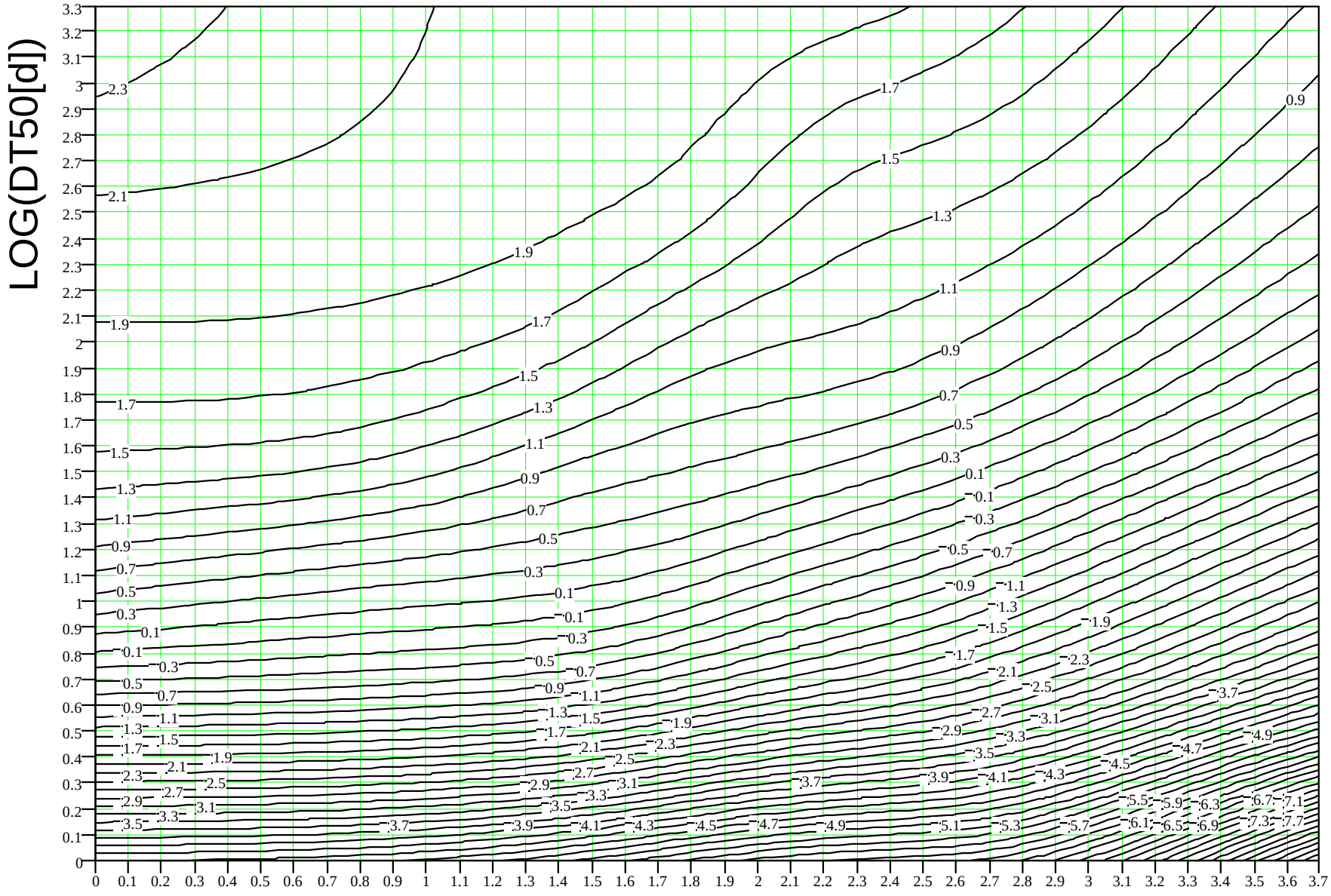
Szenario 17,November

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



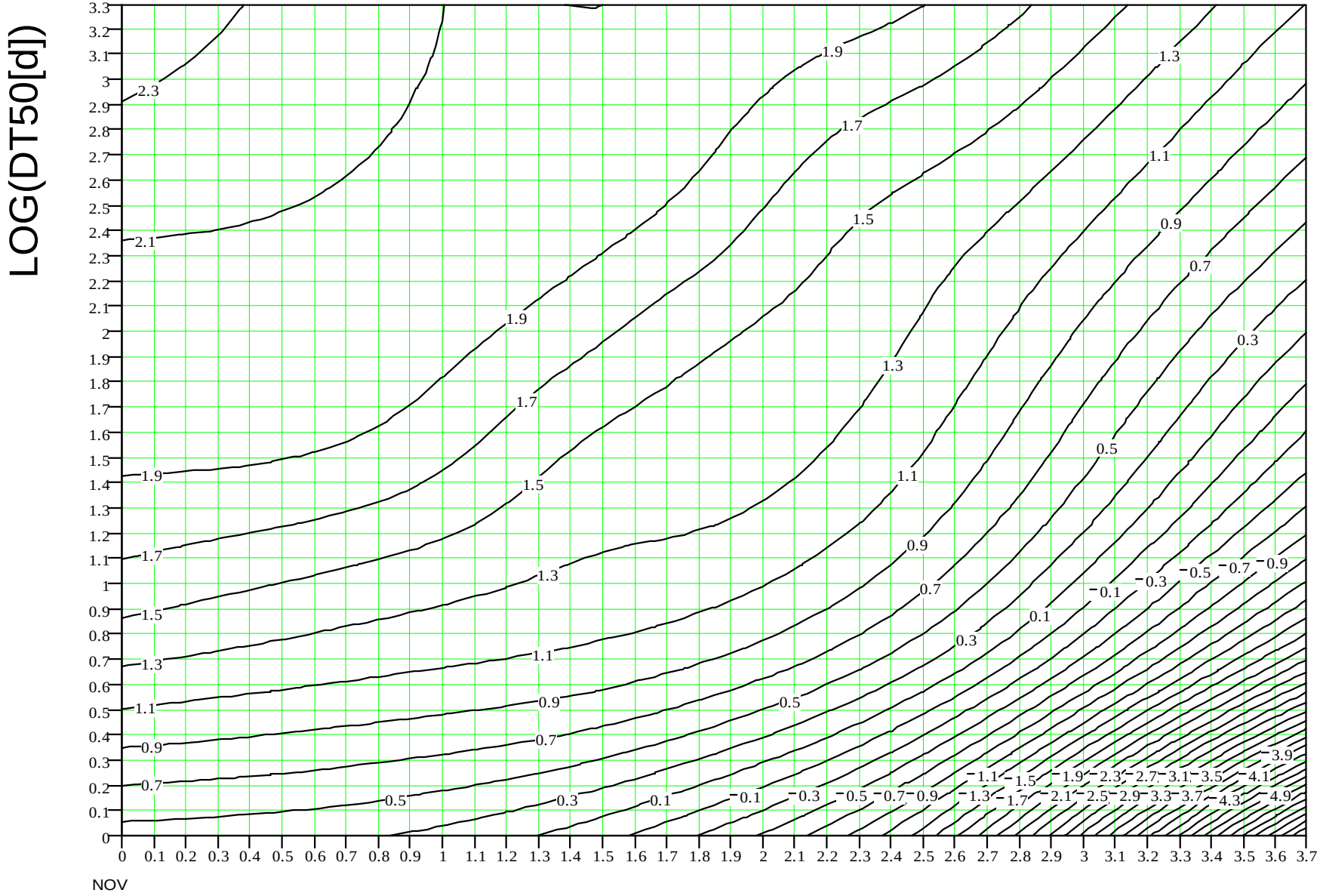
Szenario 18,Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



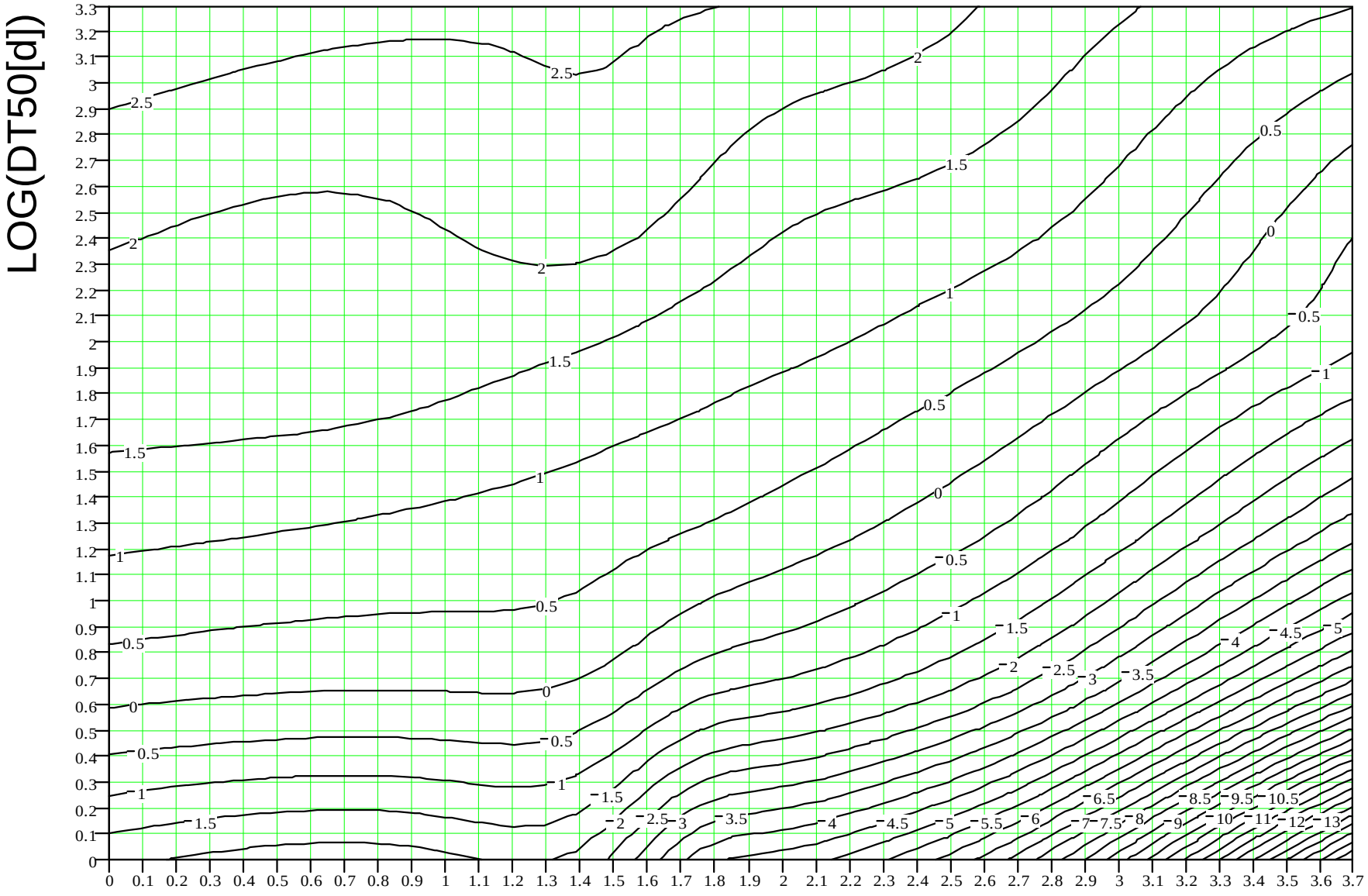
Szenario 18,Juli

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



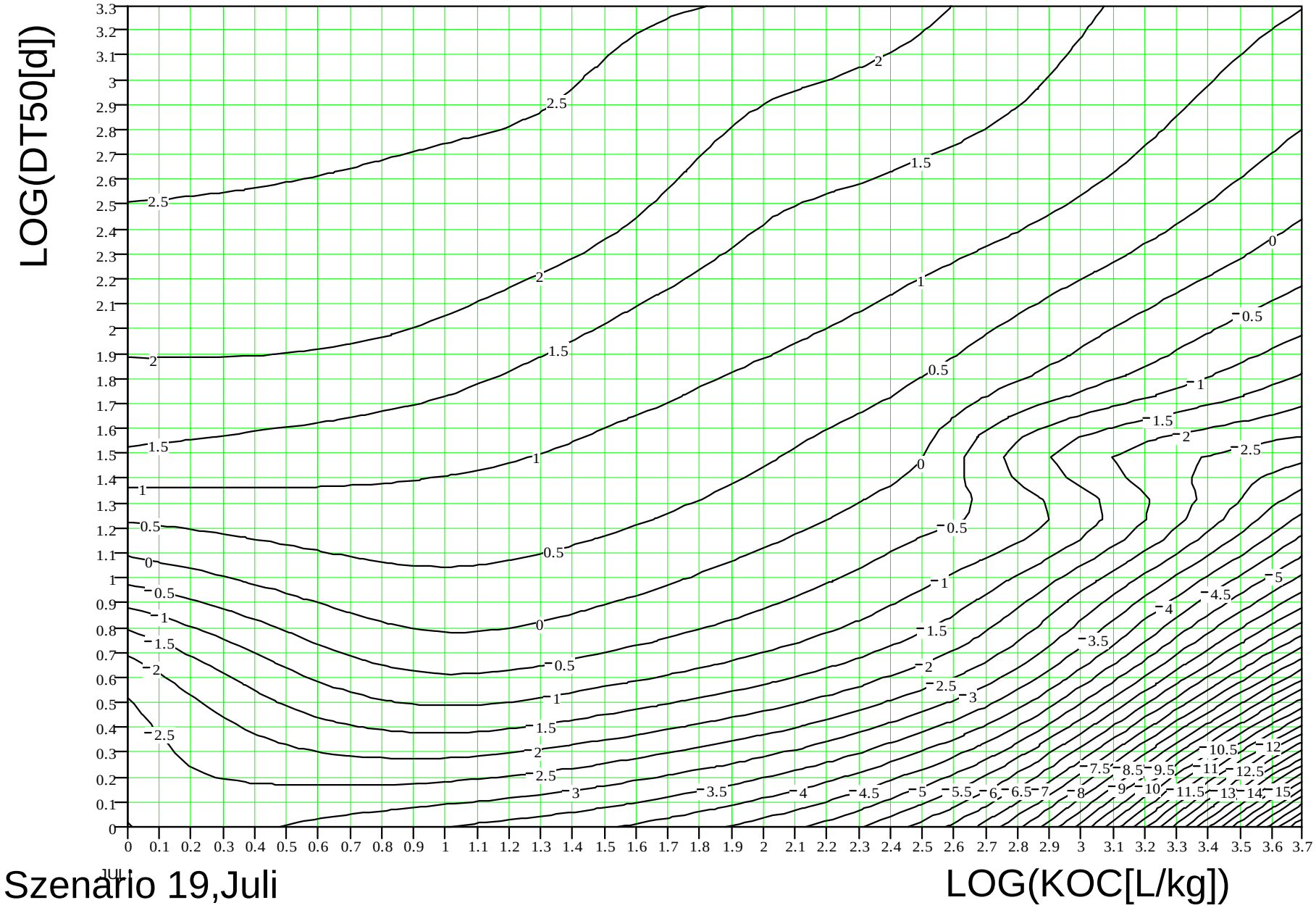
Szenario 18,November

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

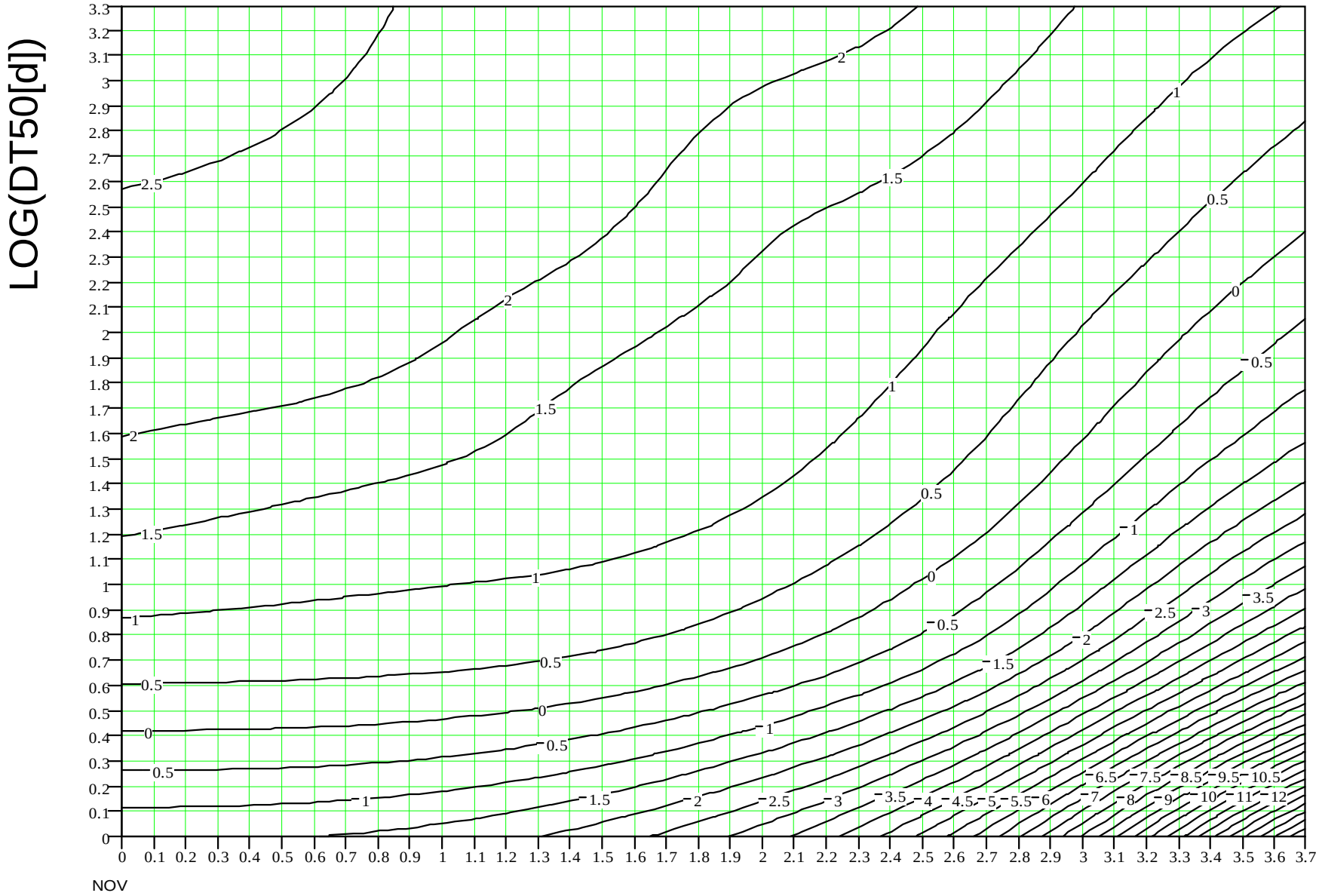


Szenario 19,Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

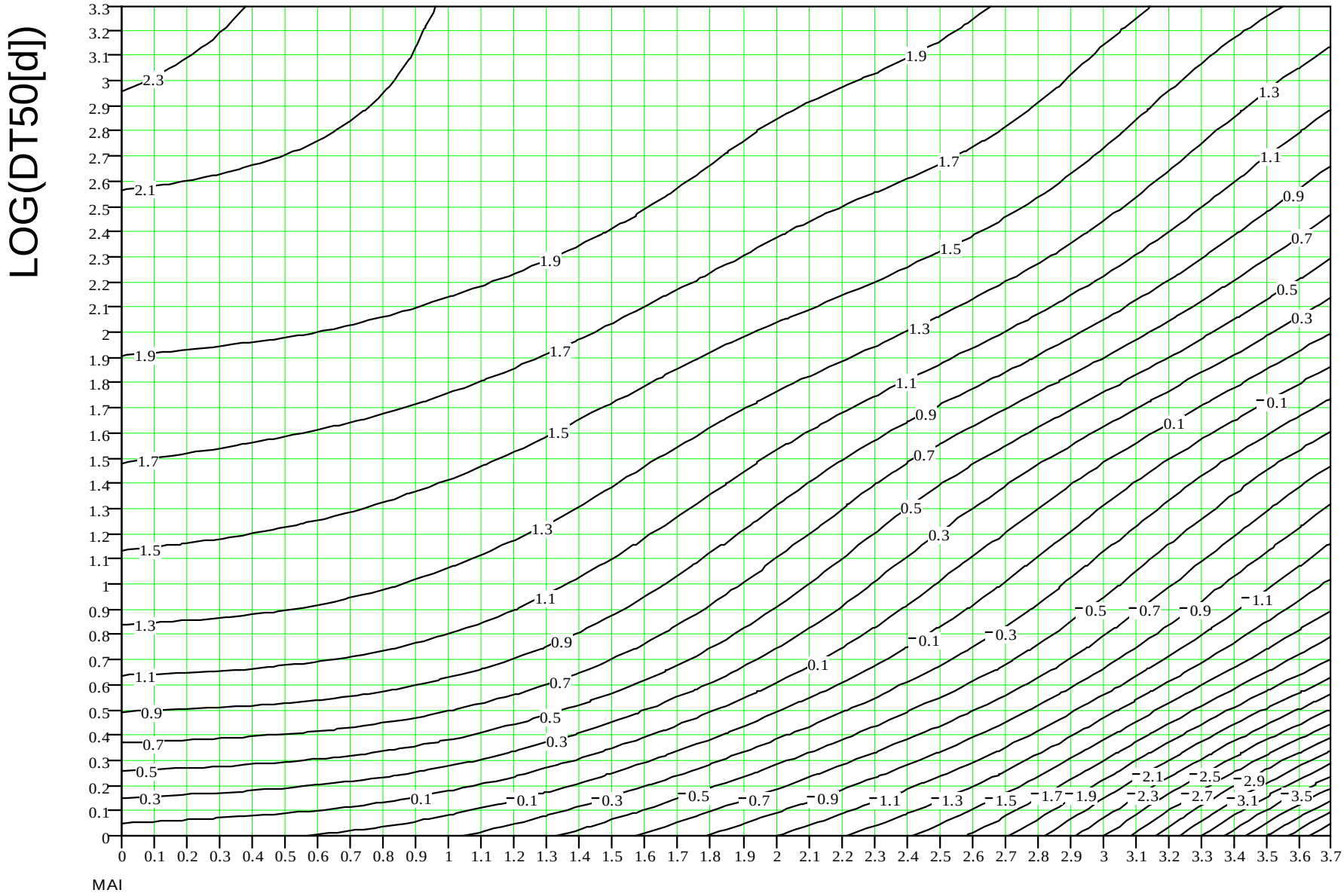


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

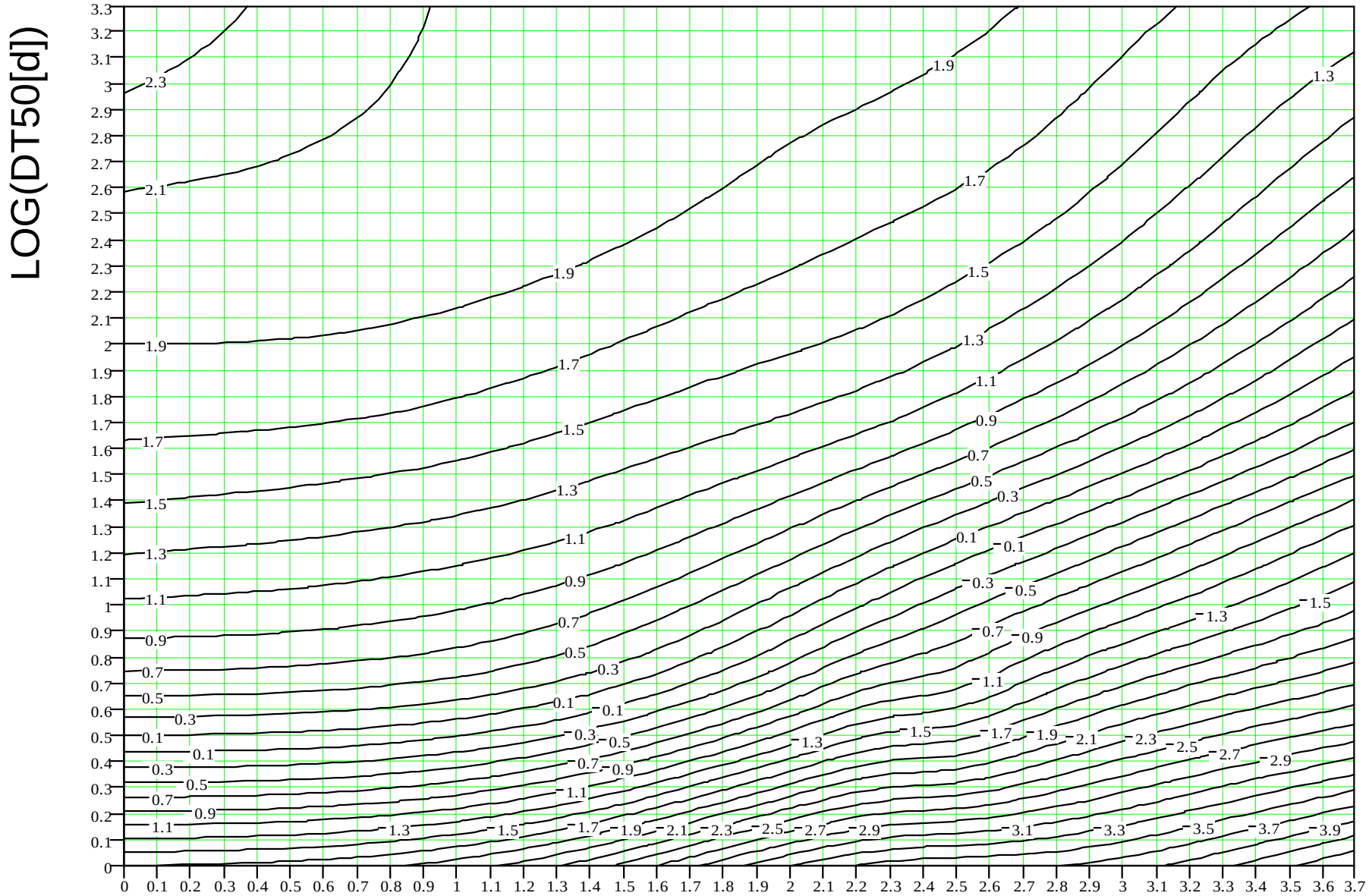


Szenario 19,November

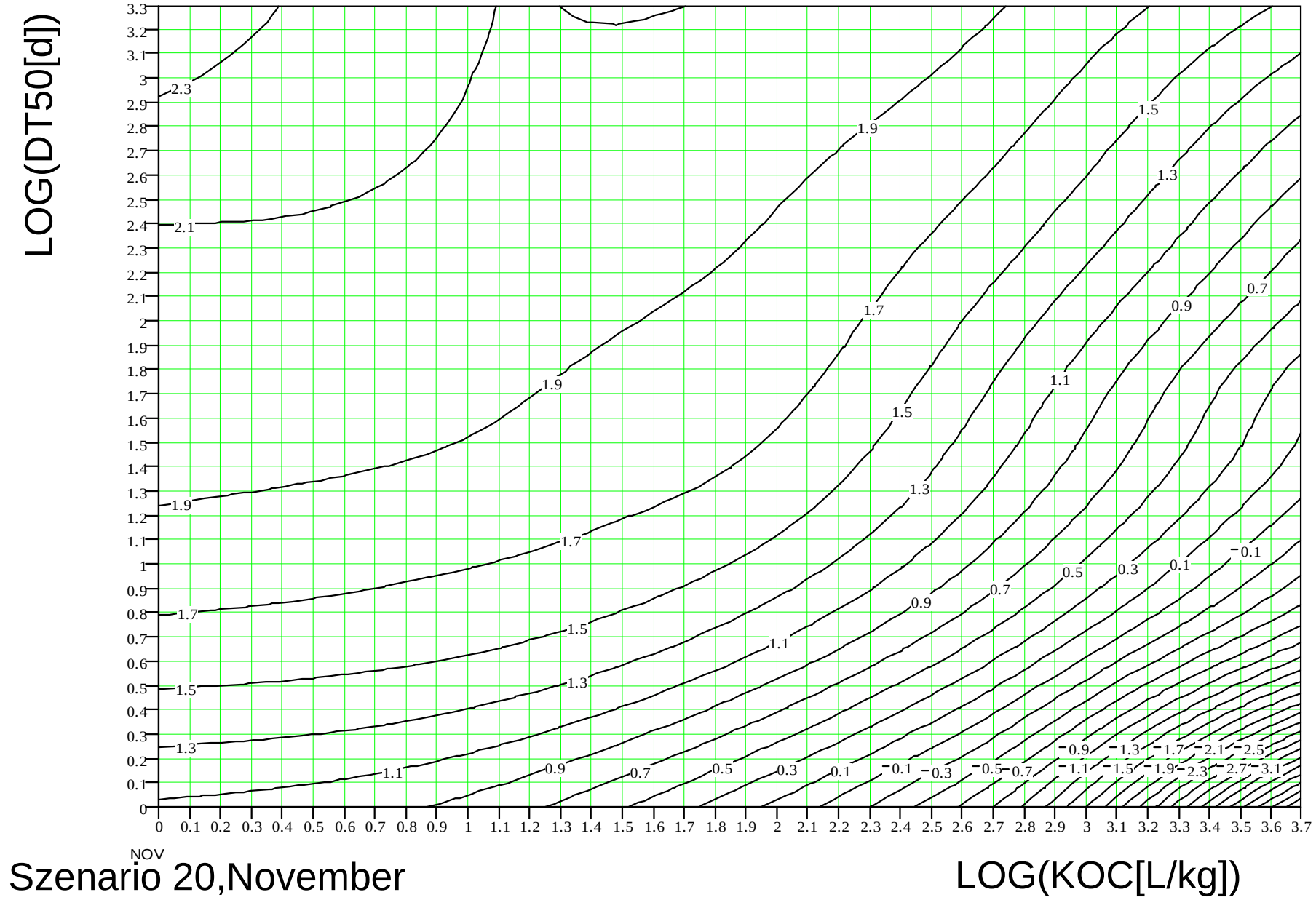
Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



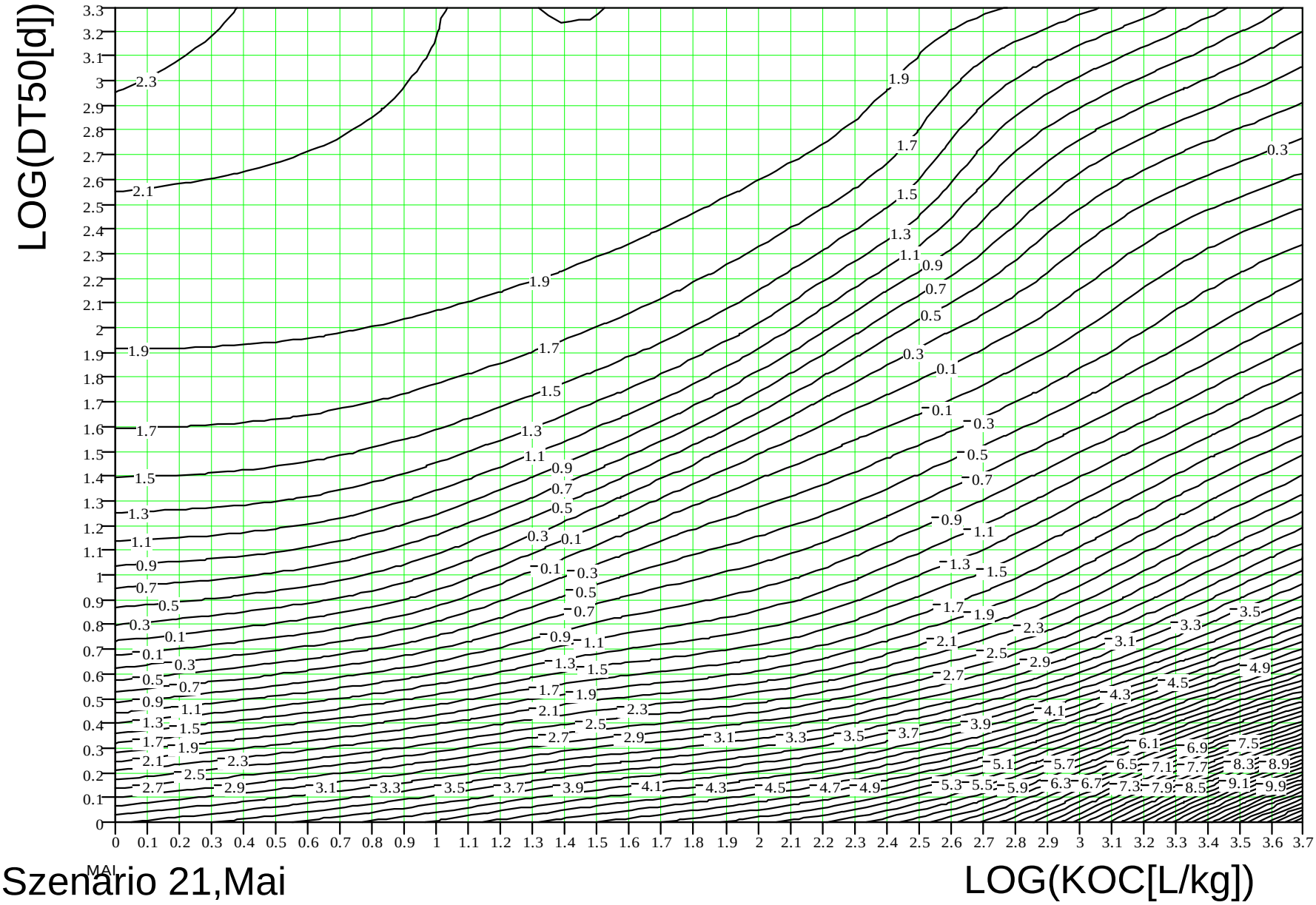
Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

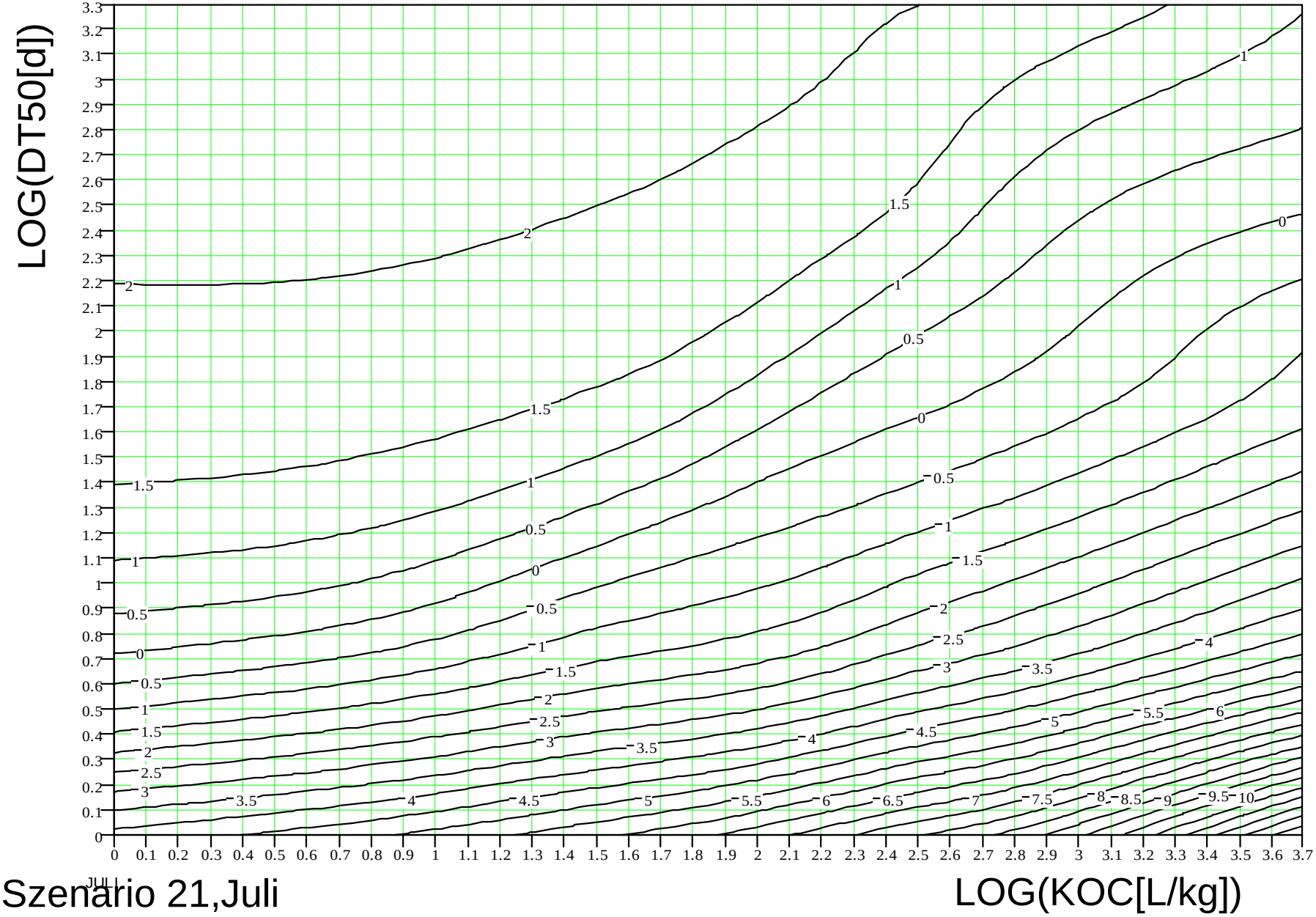


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

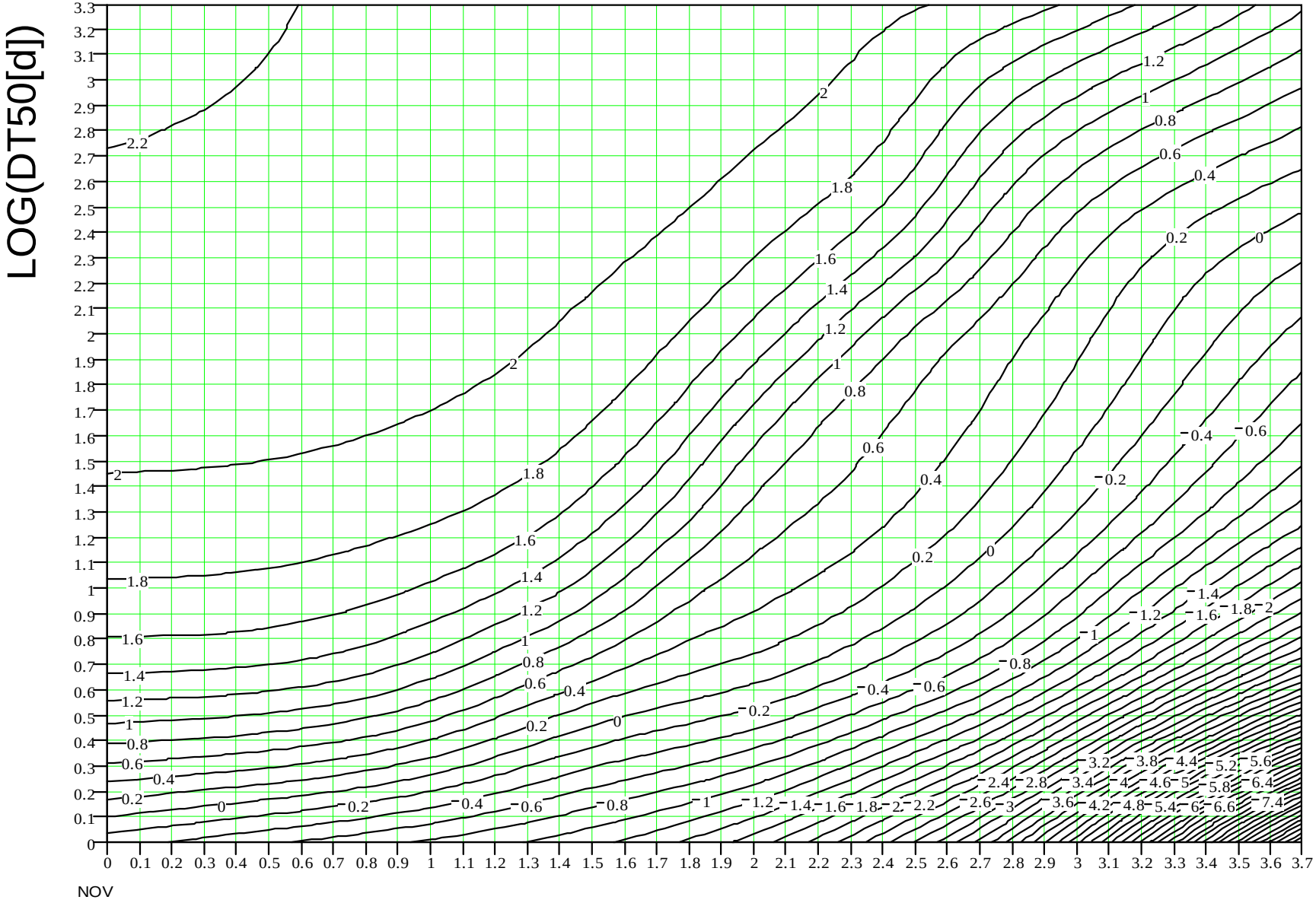


Szenario 21,Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

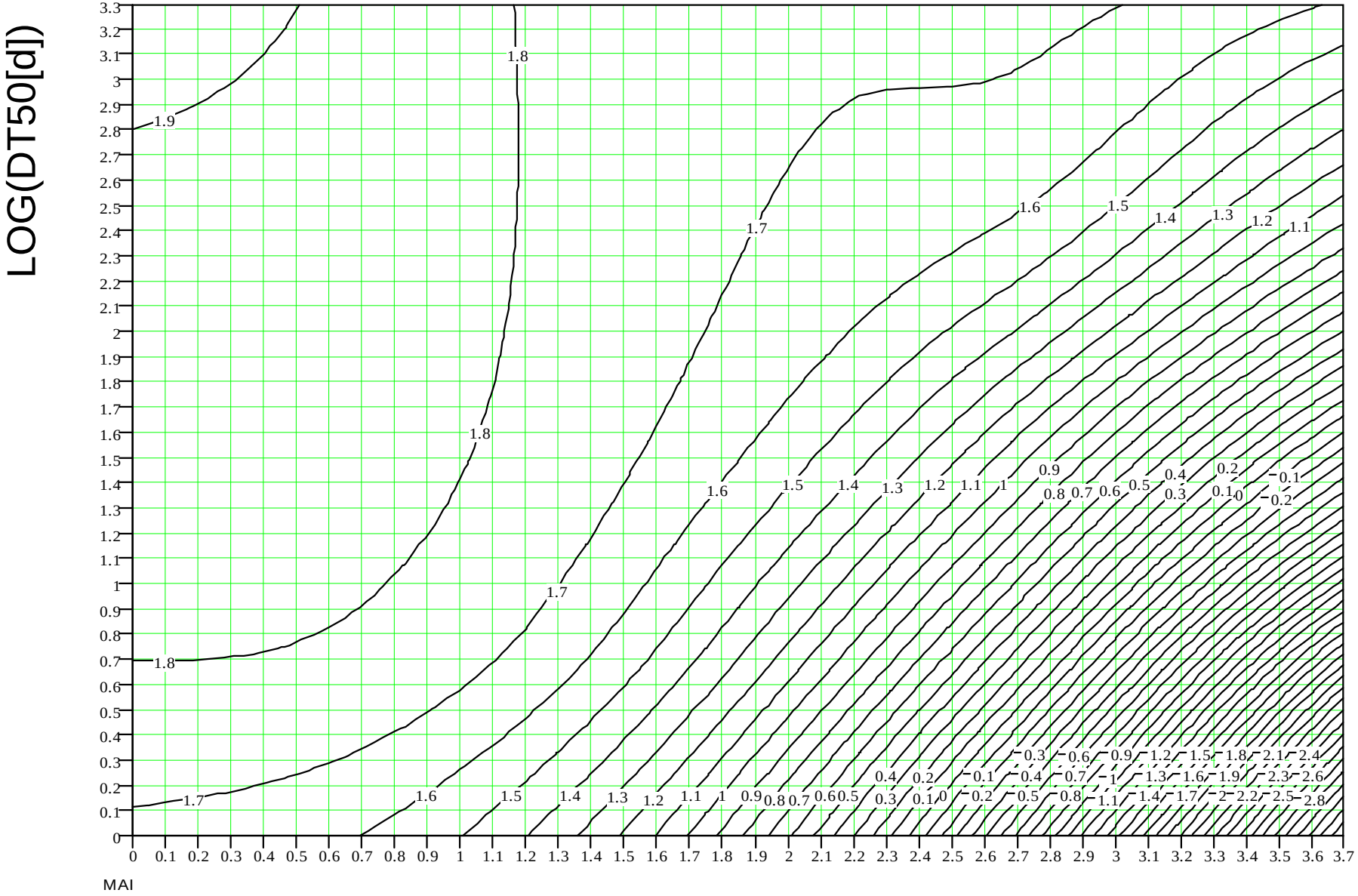


Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



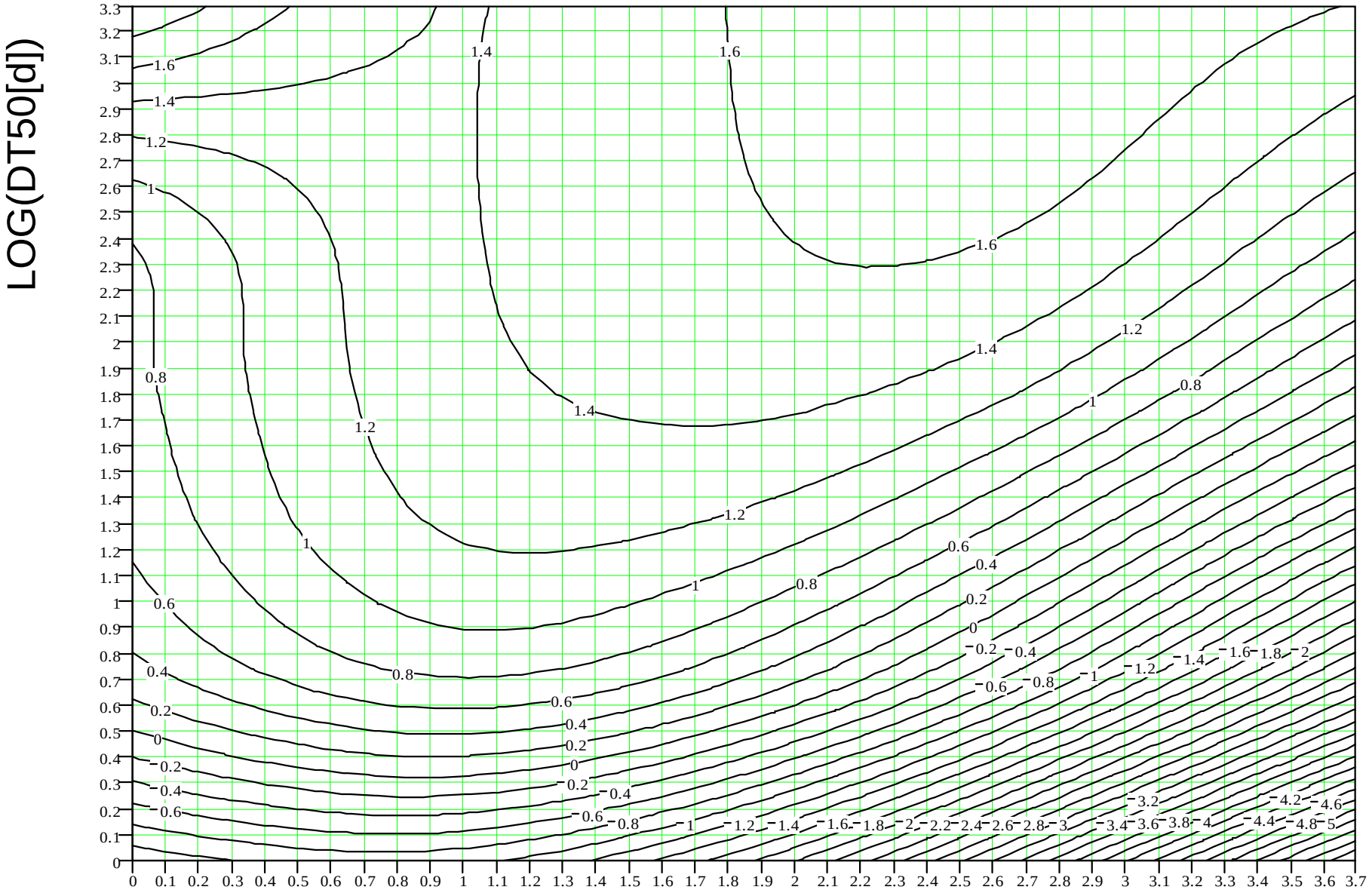
Szenario 21,November

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K



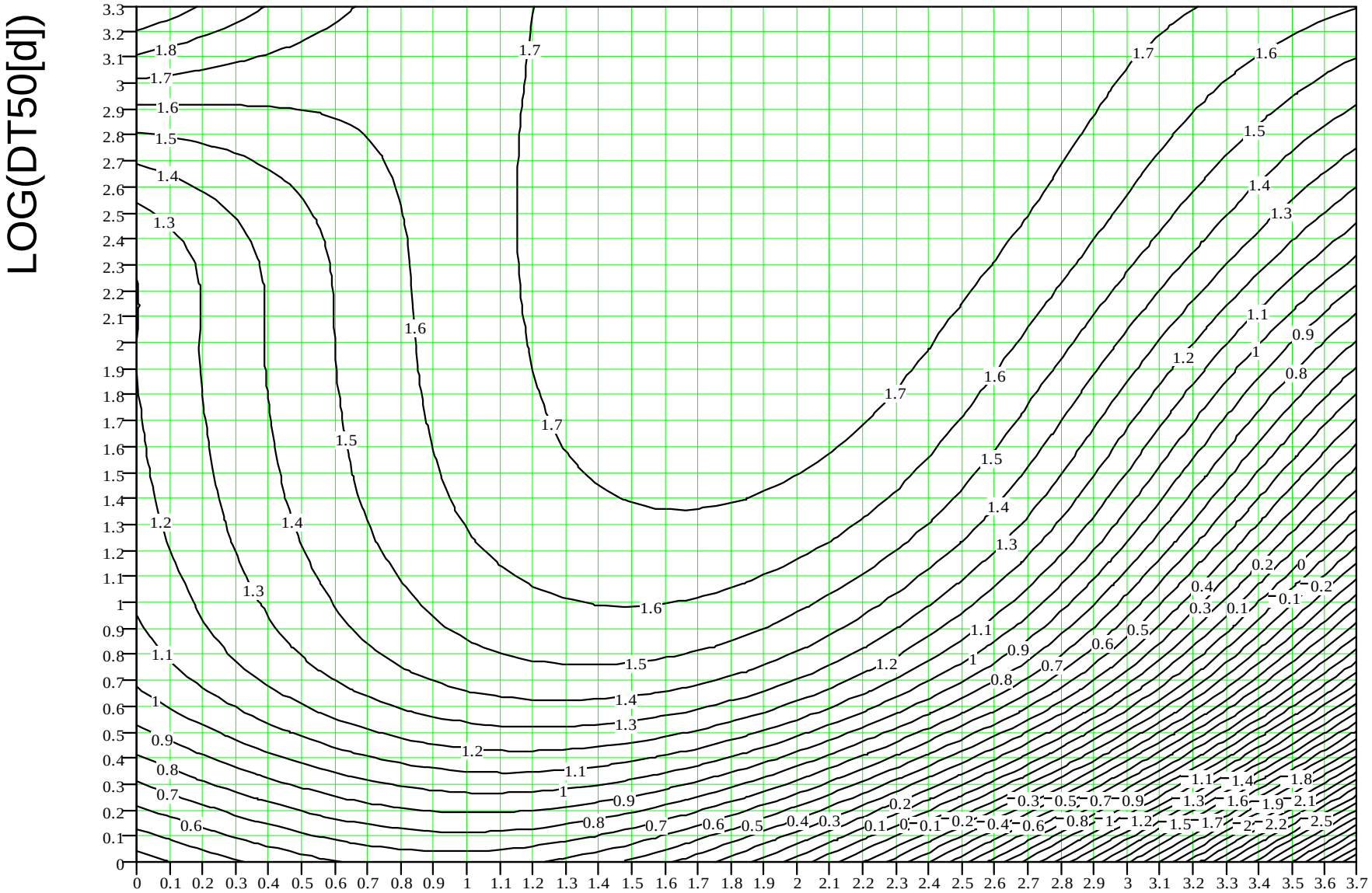
Szenario 22,Mai

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

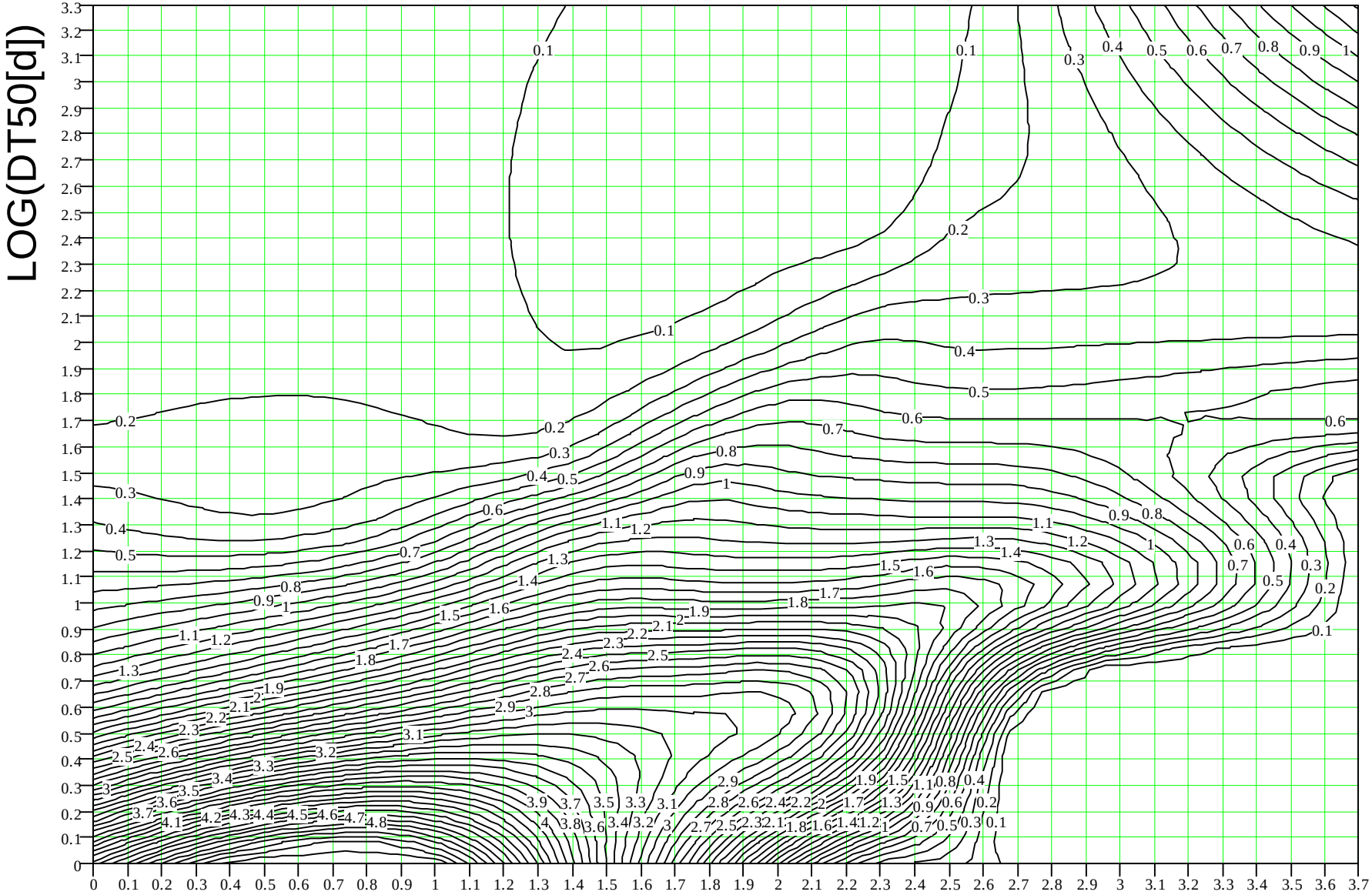


Szenario 22,Juli

Bestimmung des Konzentrationsfaktors K

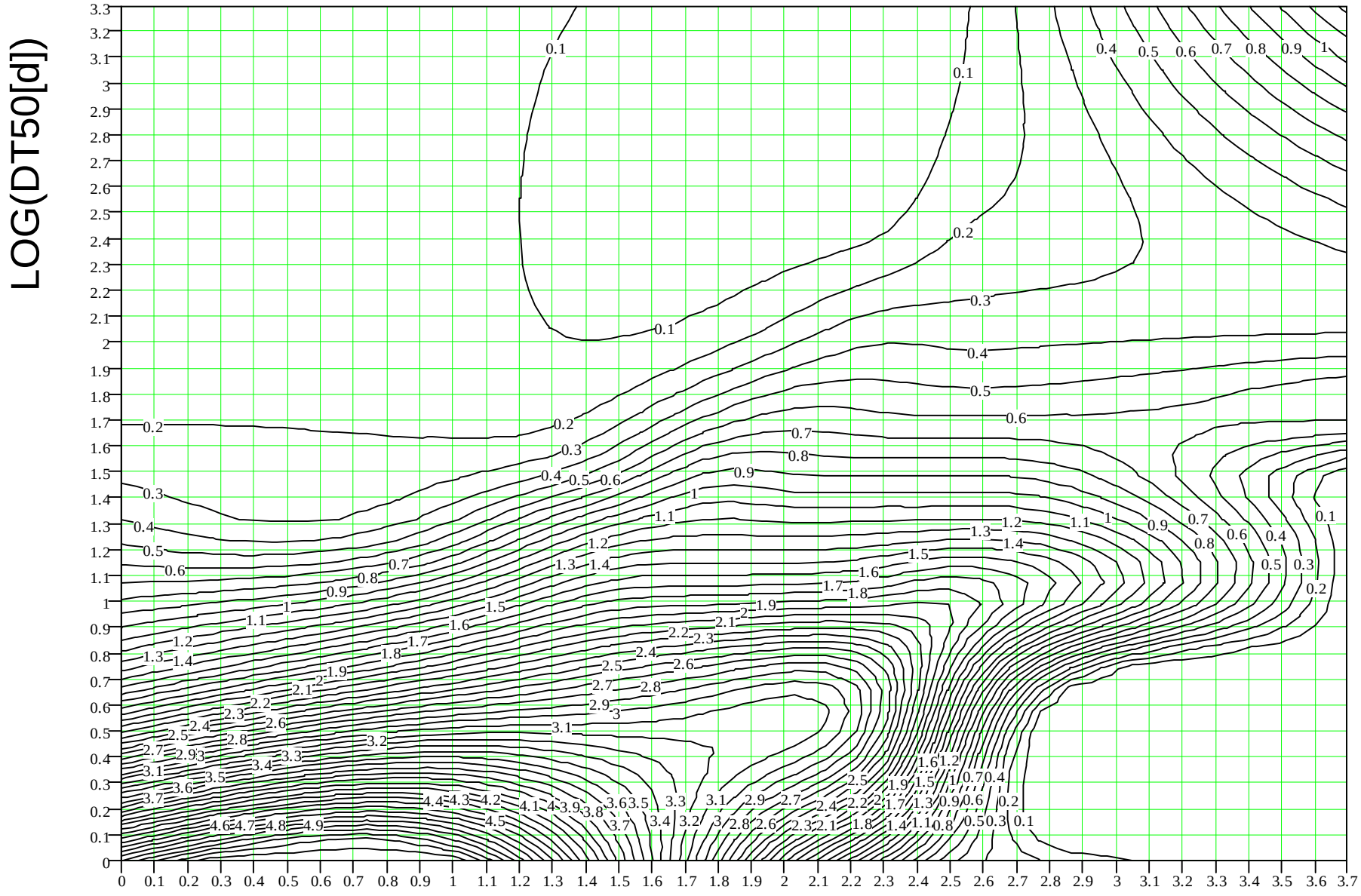


Bestimmung des Schwankungsfaktors S



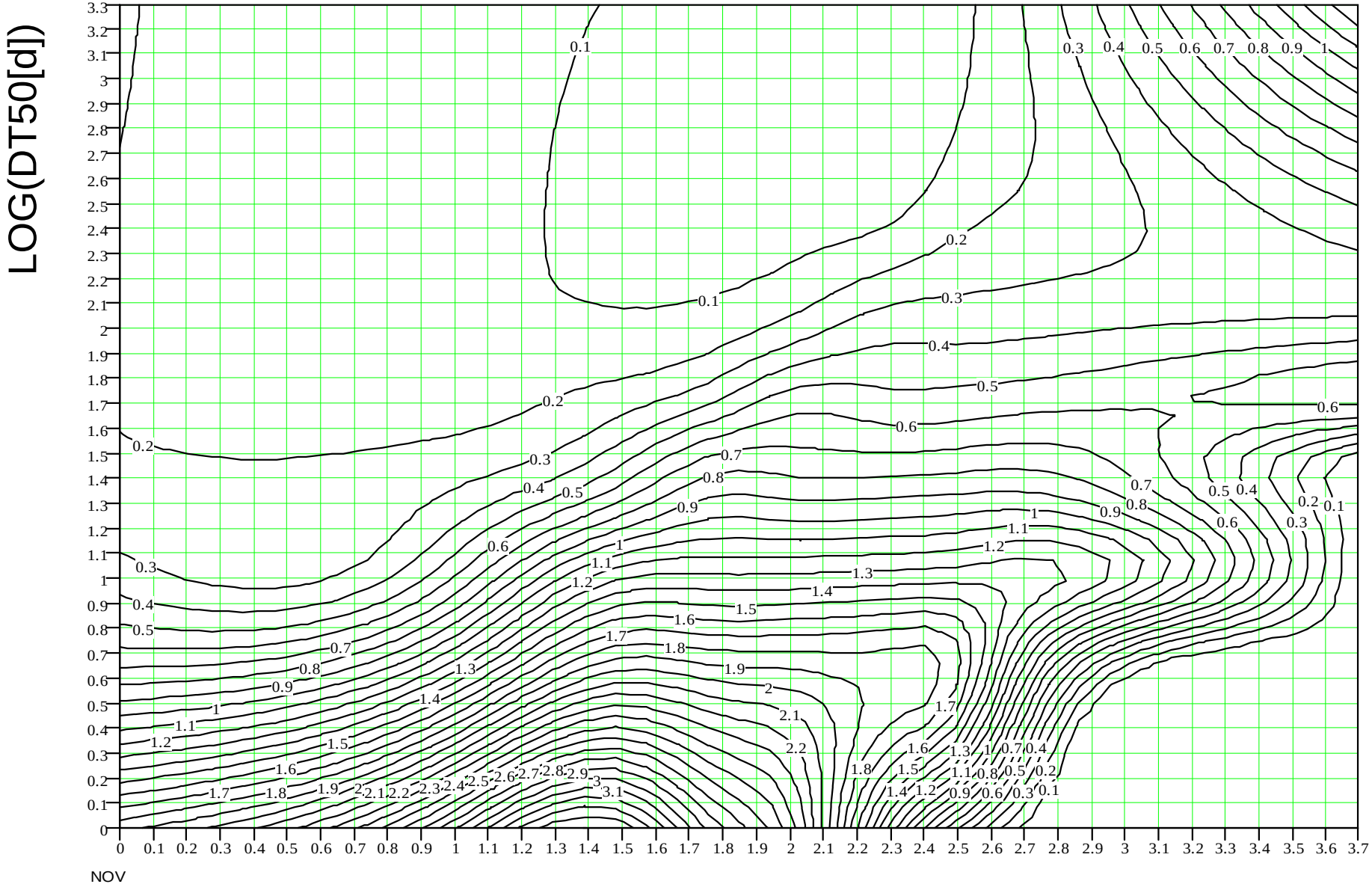
Szenario 1, Mai

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



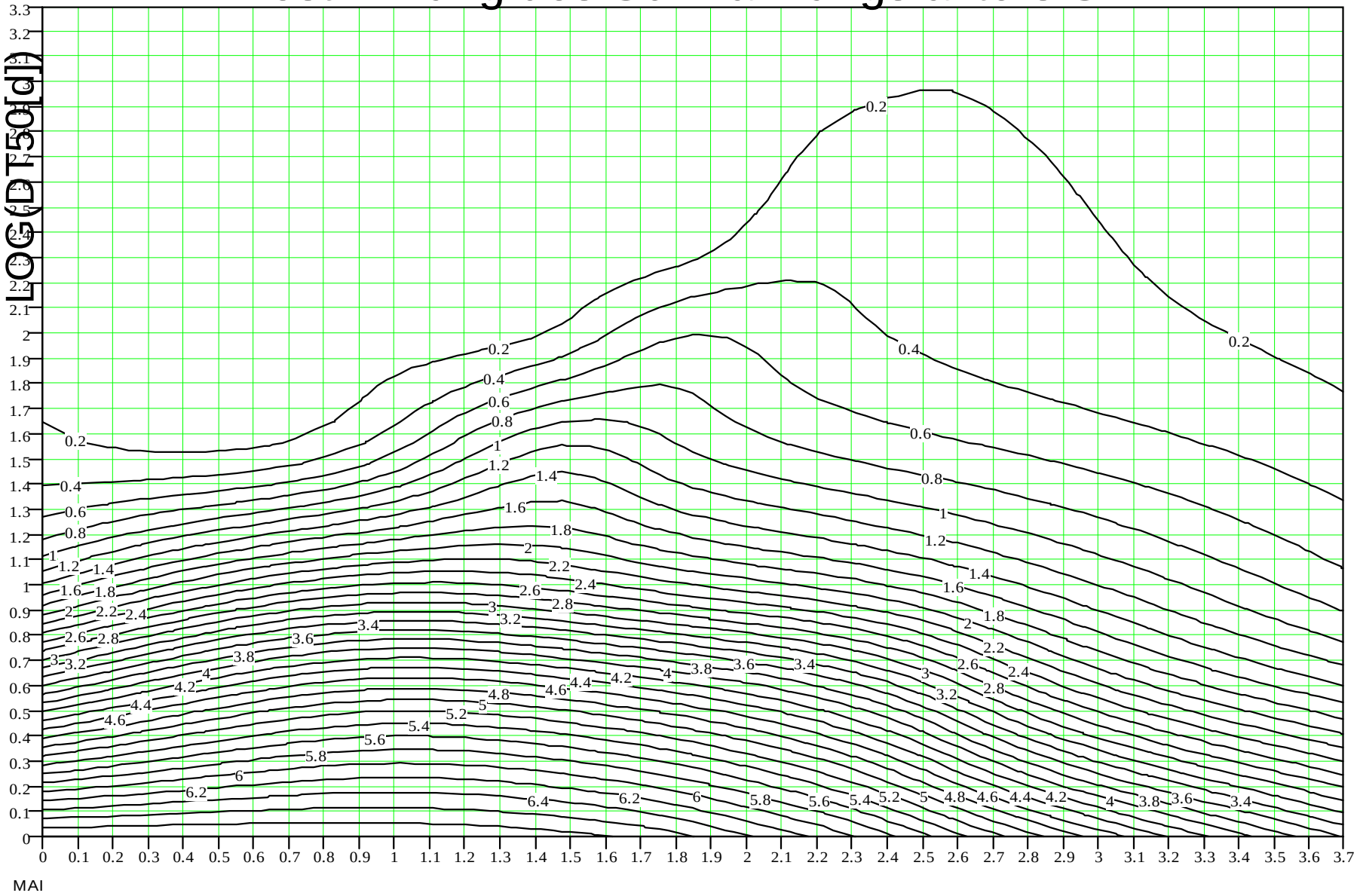
Szenario 1, Juli

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 1, November

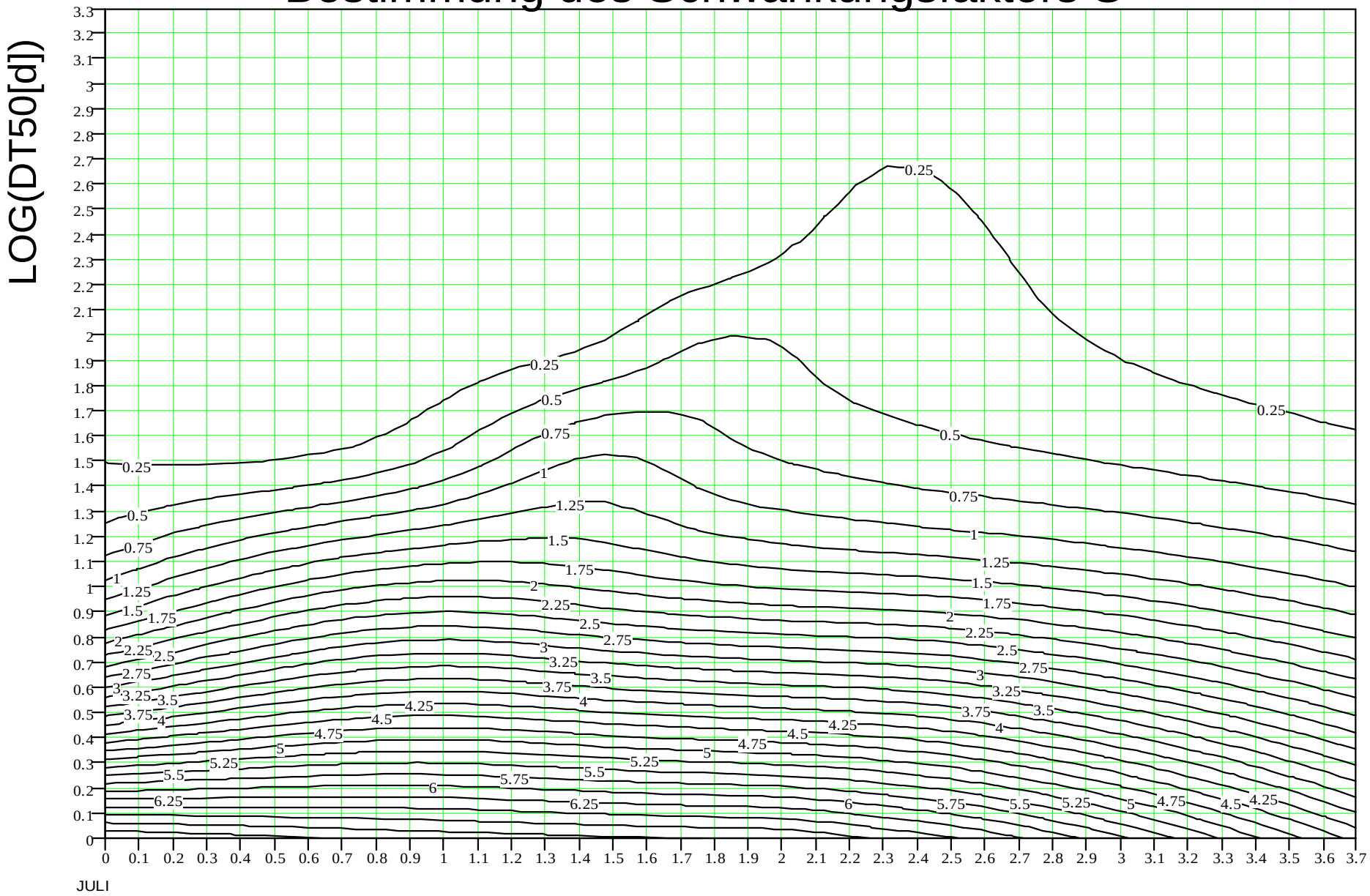
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 2,Mai

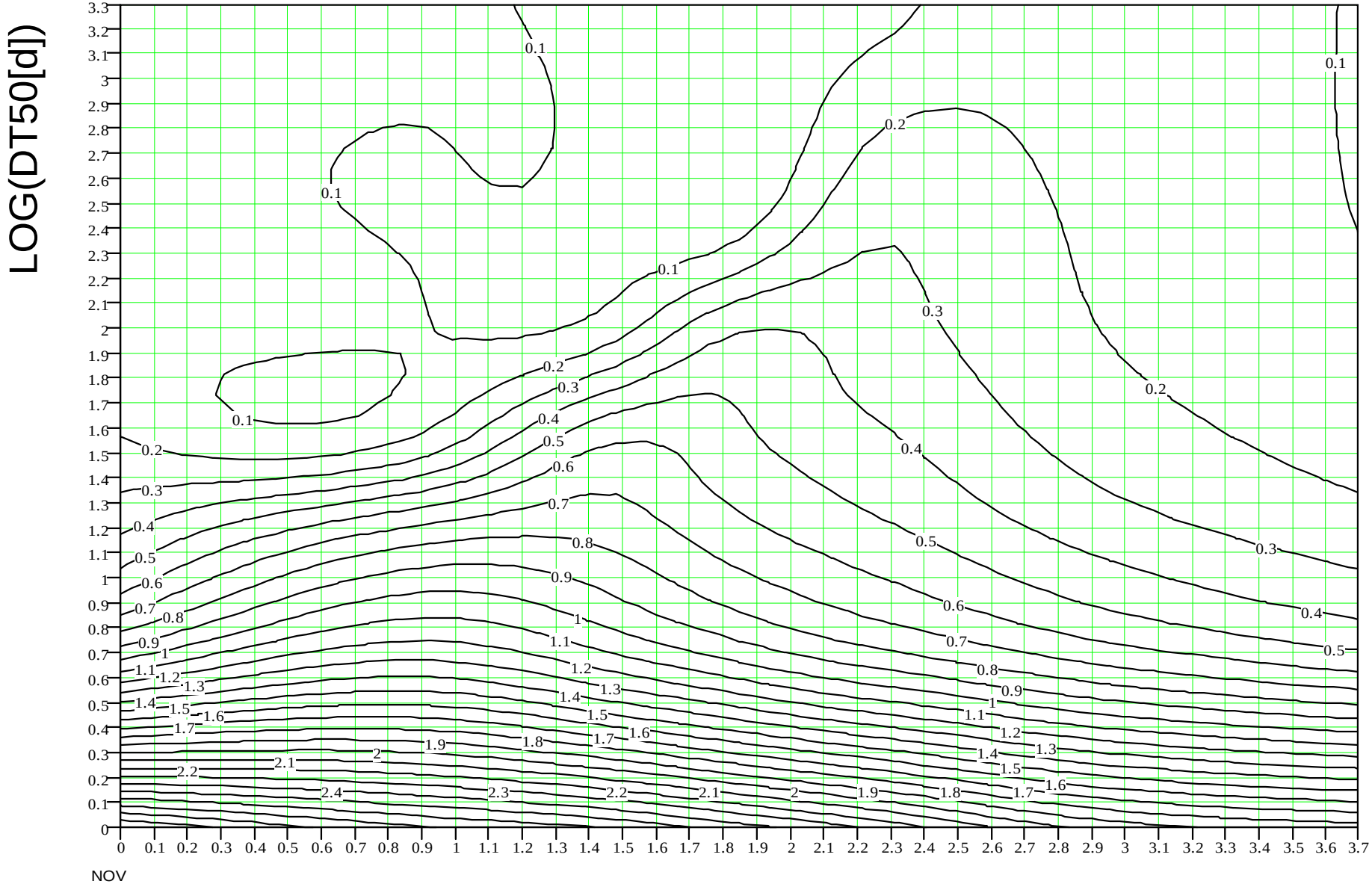
LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



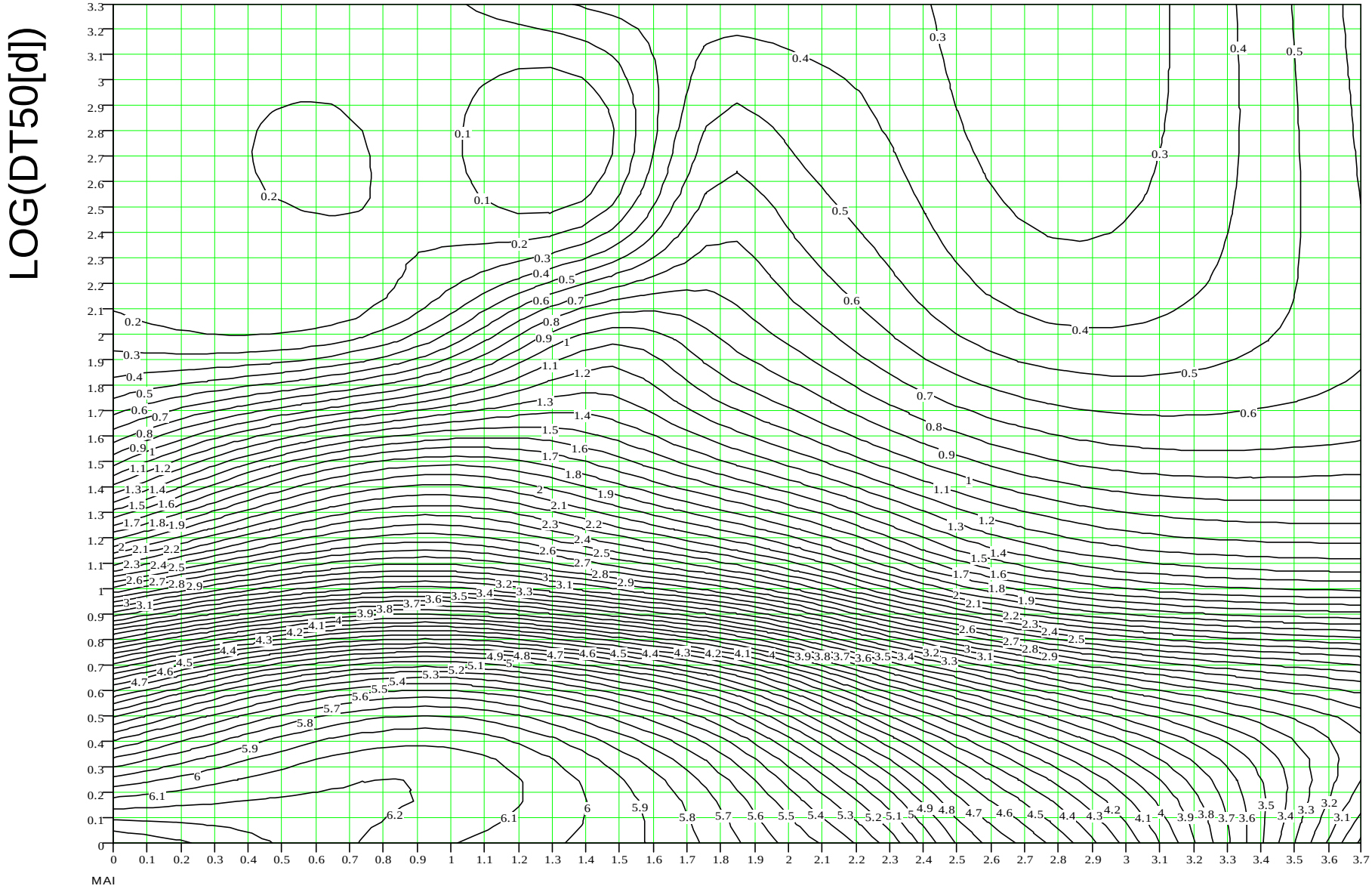
Szenario 2,Juli

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 2, November

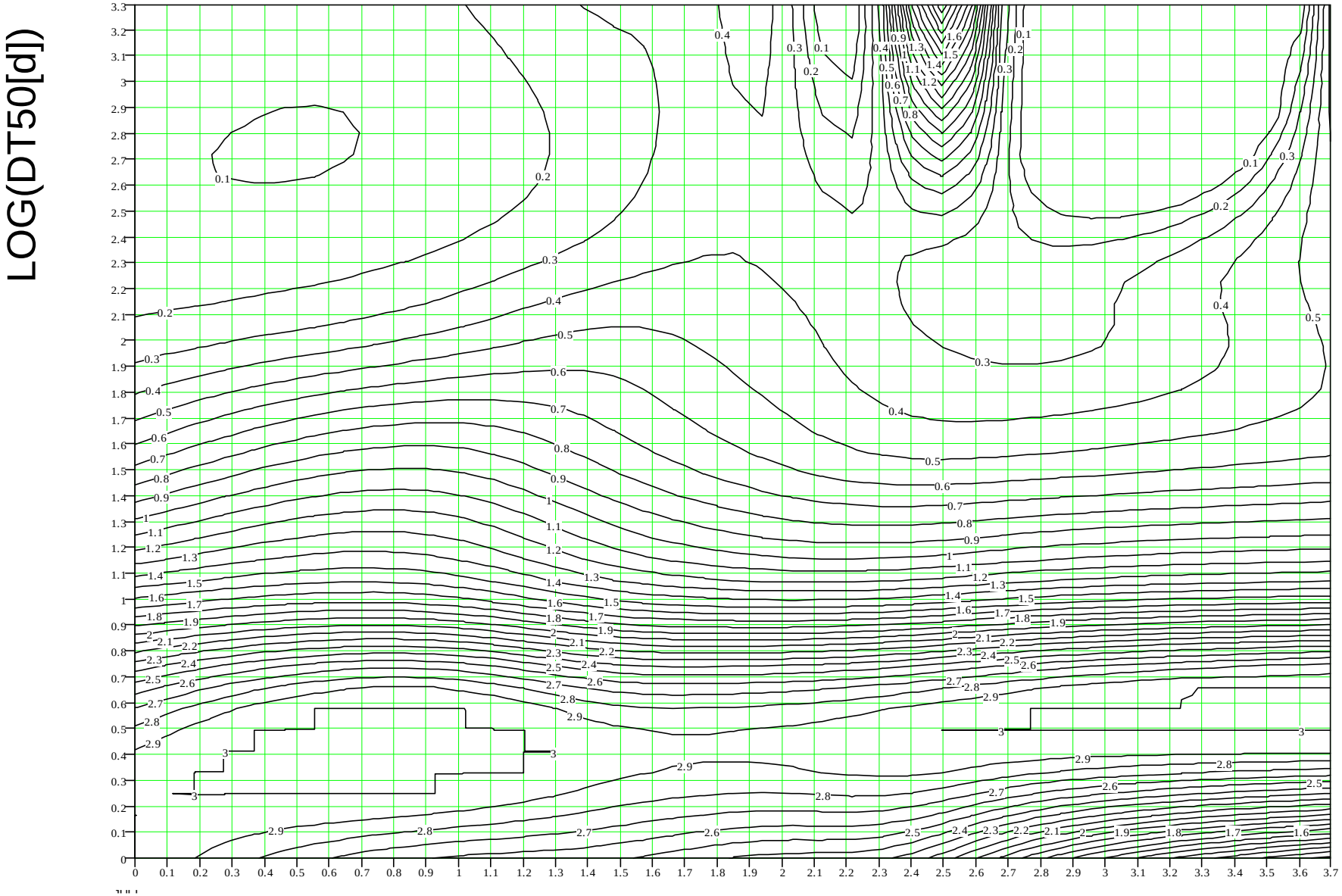
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 3,Mai

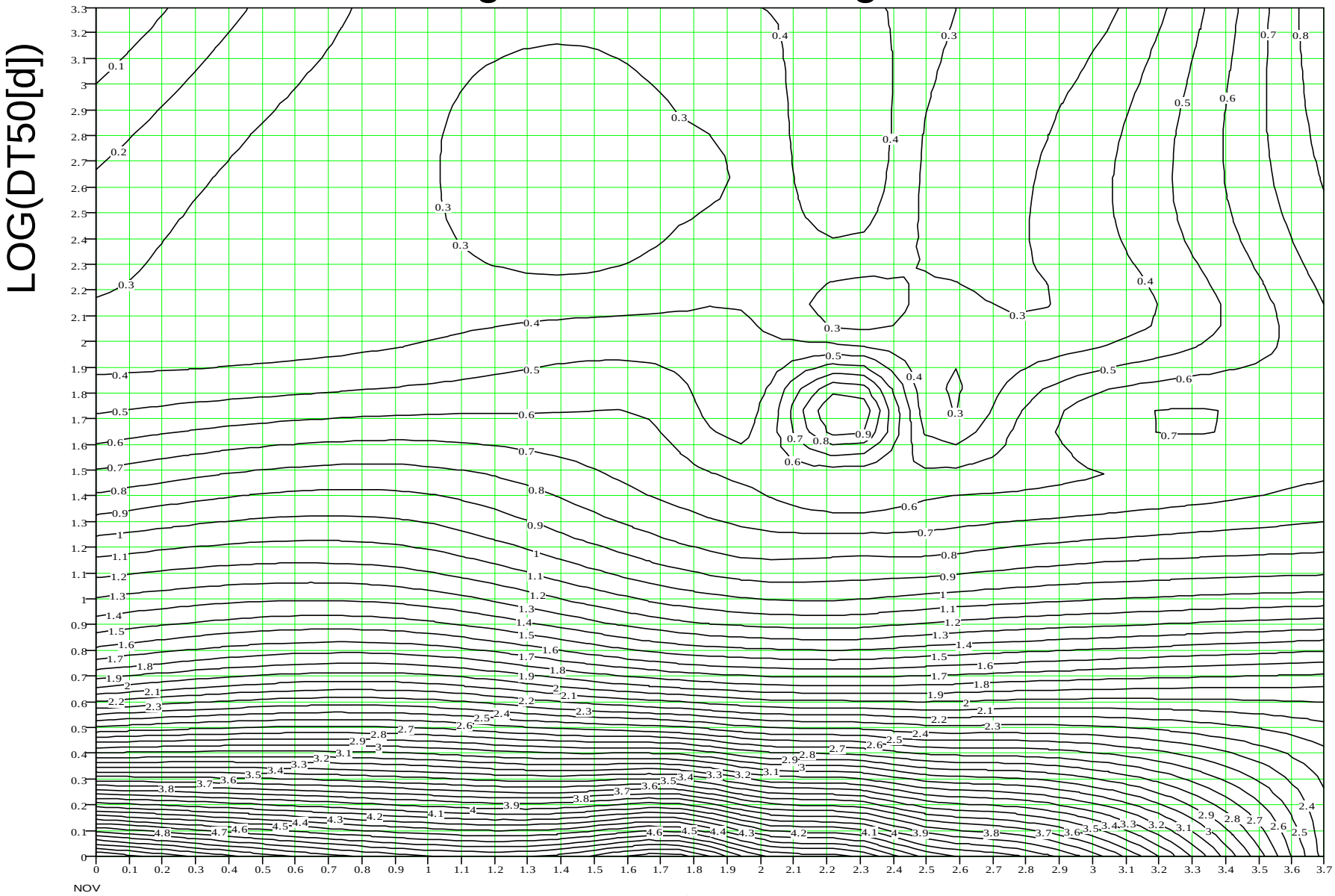
LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 3,Juli

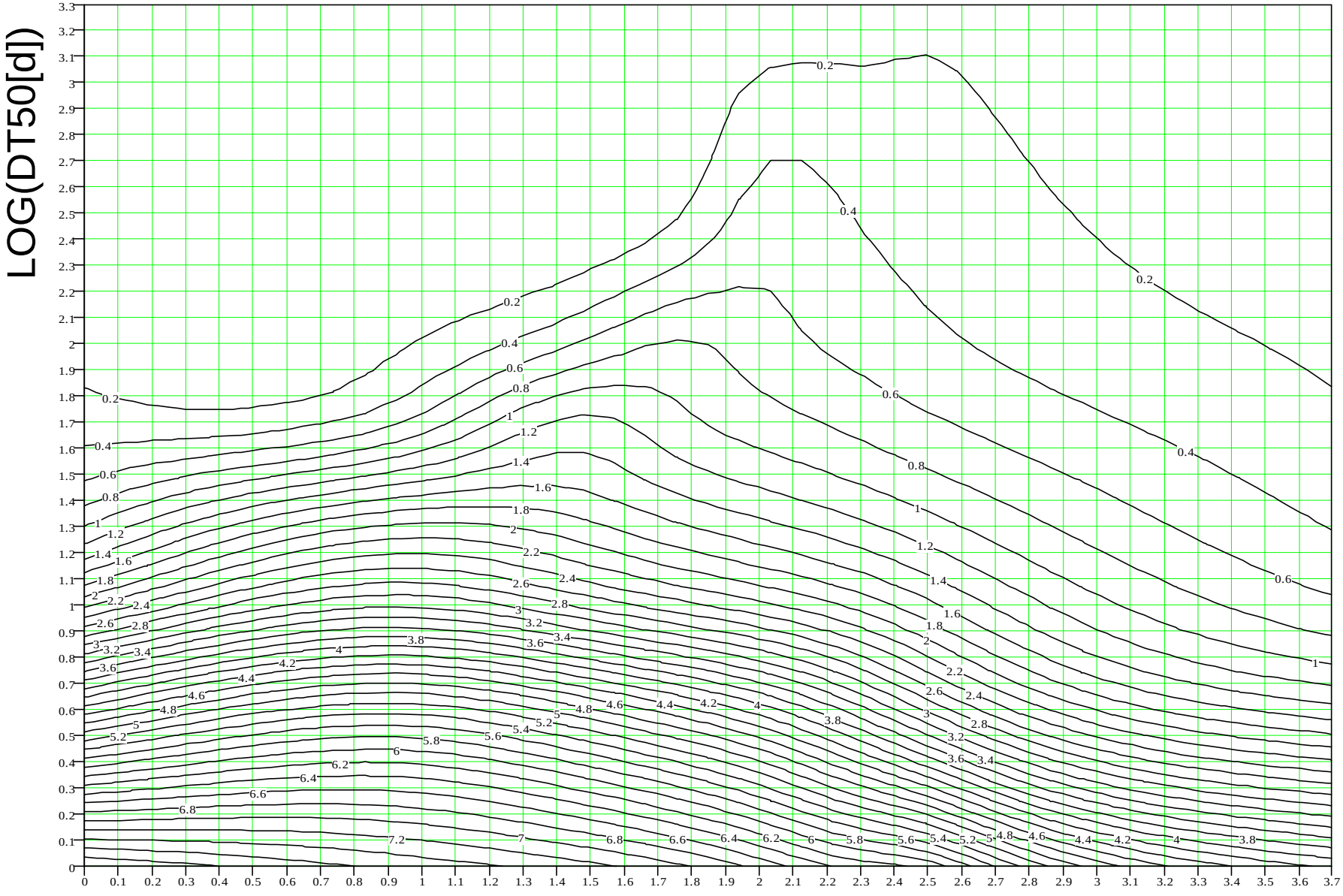
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 3, November

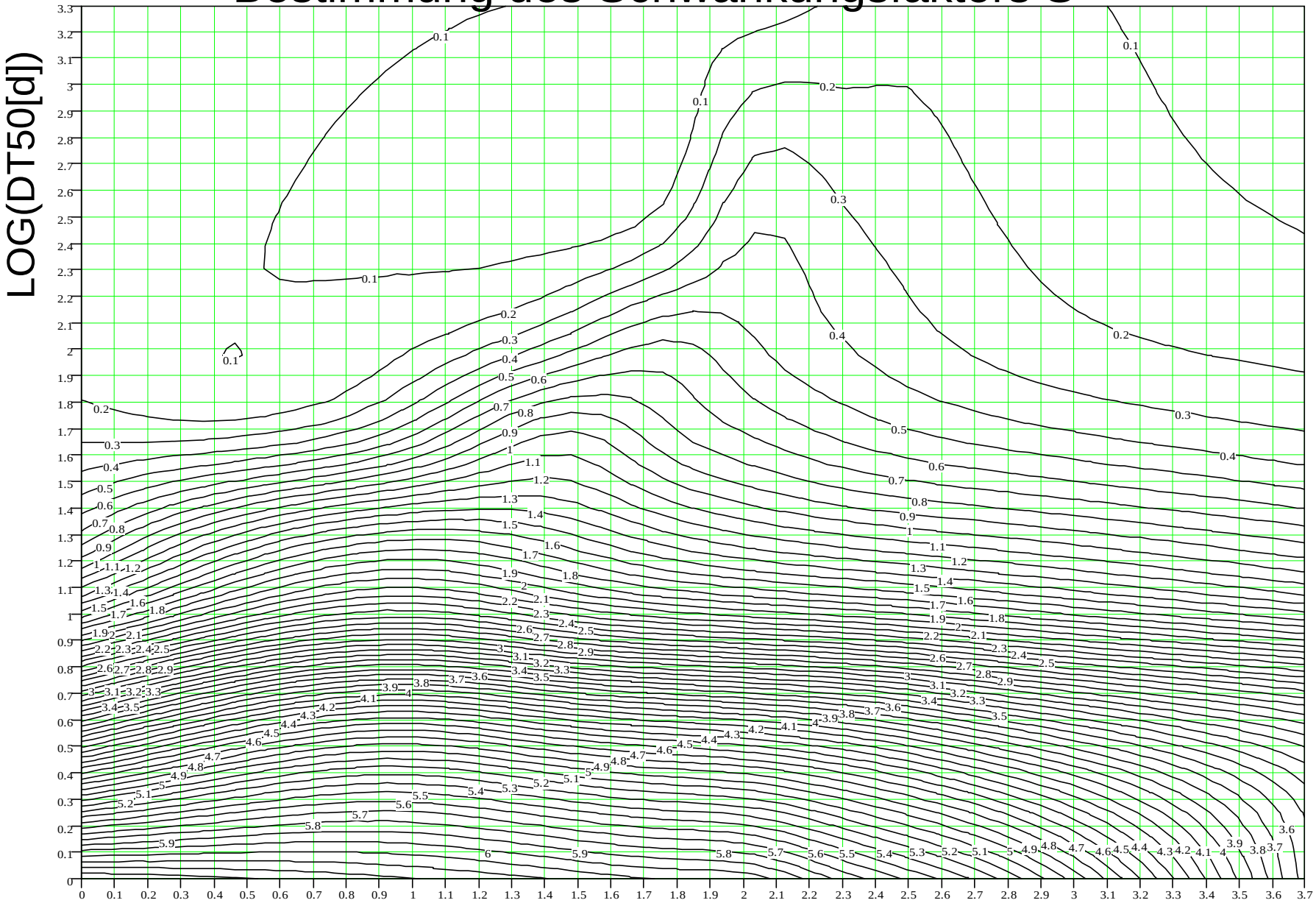
LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Schwankungsfaktors S

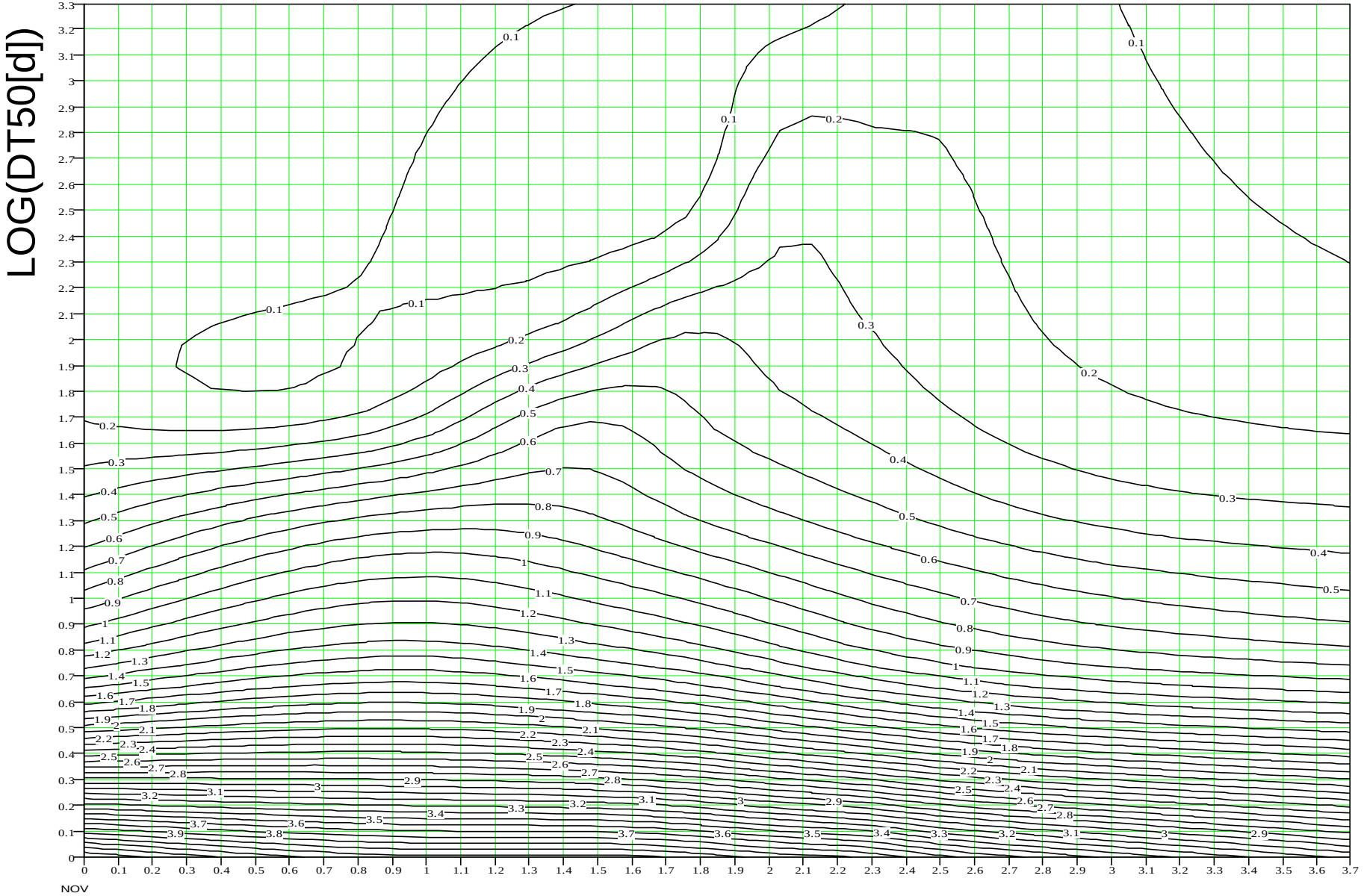


Szenario 4,Mai

Bestimmung des Schwankungsfaktors S

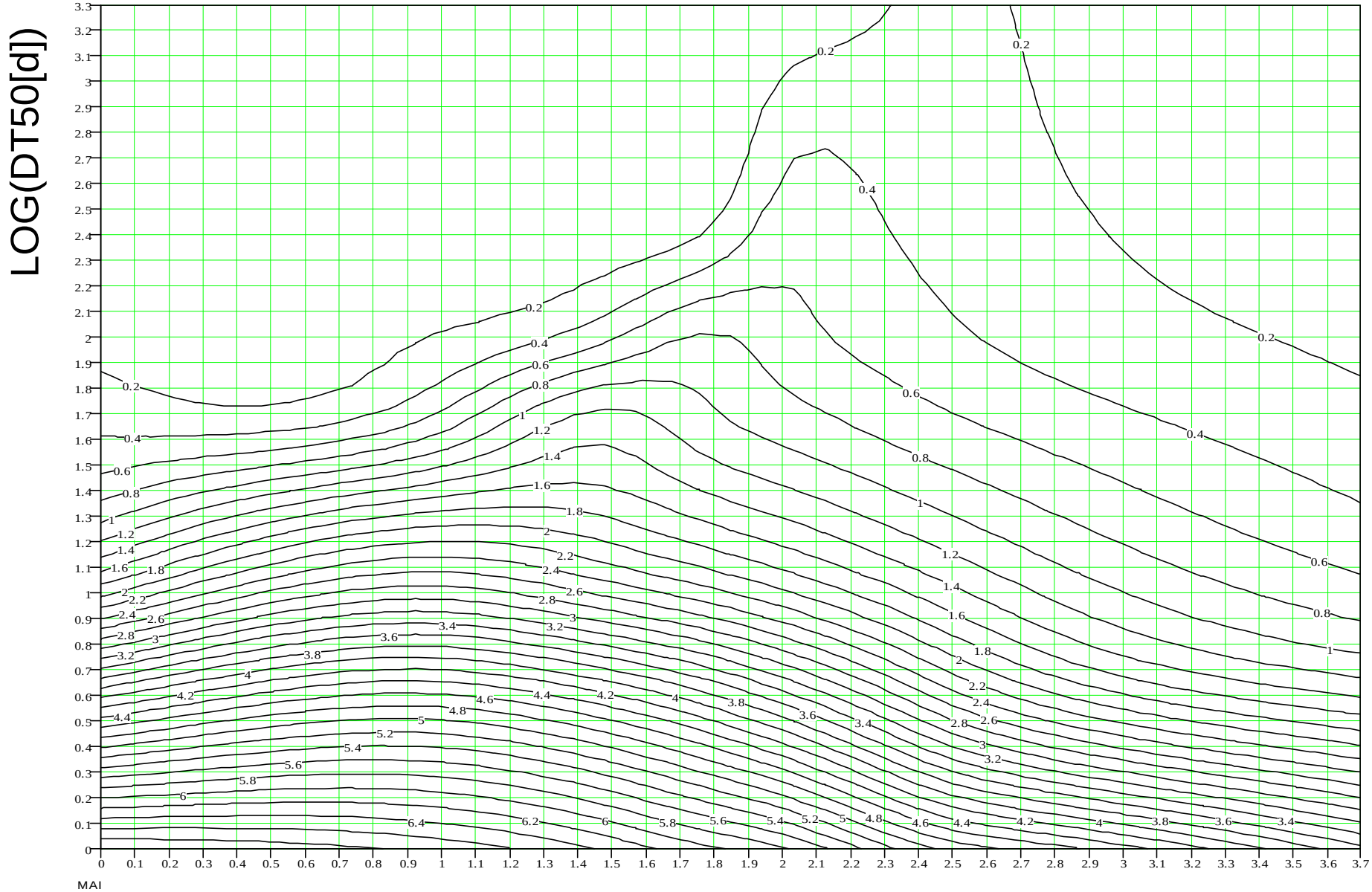


Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 4,November

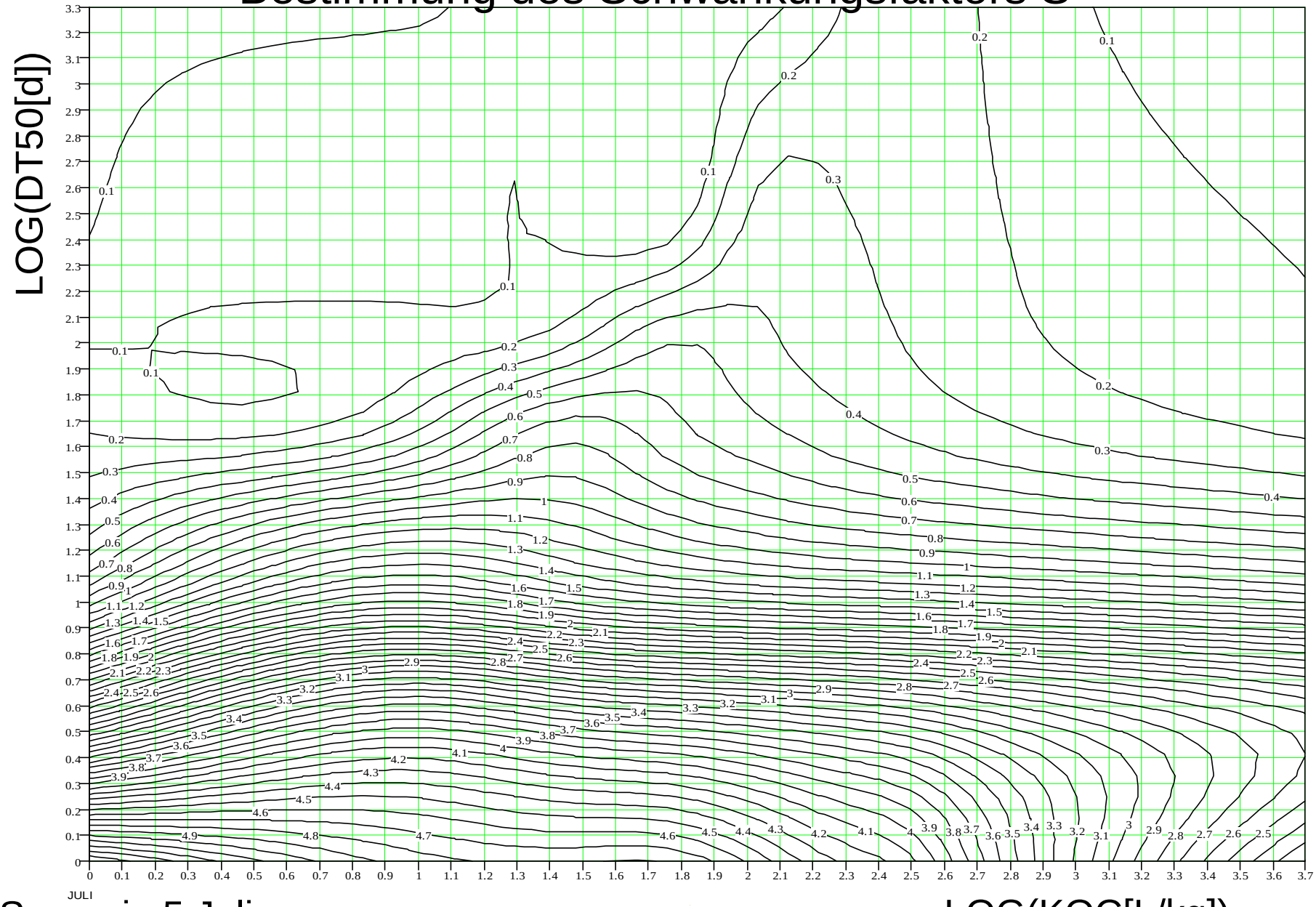
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 5,Mai

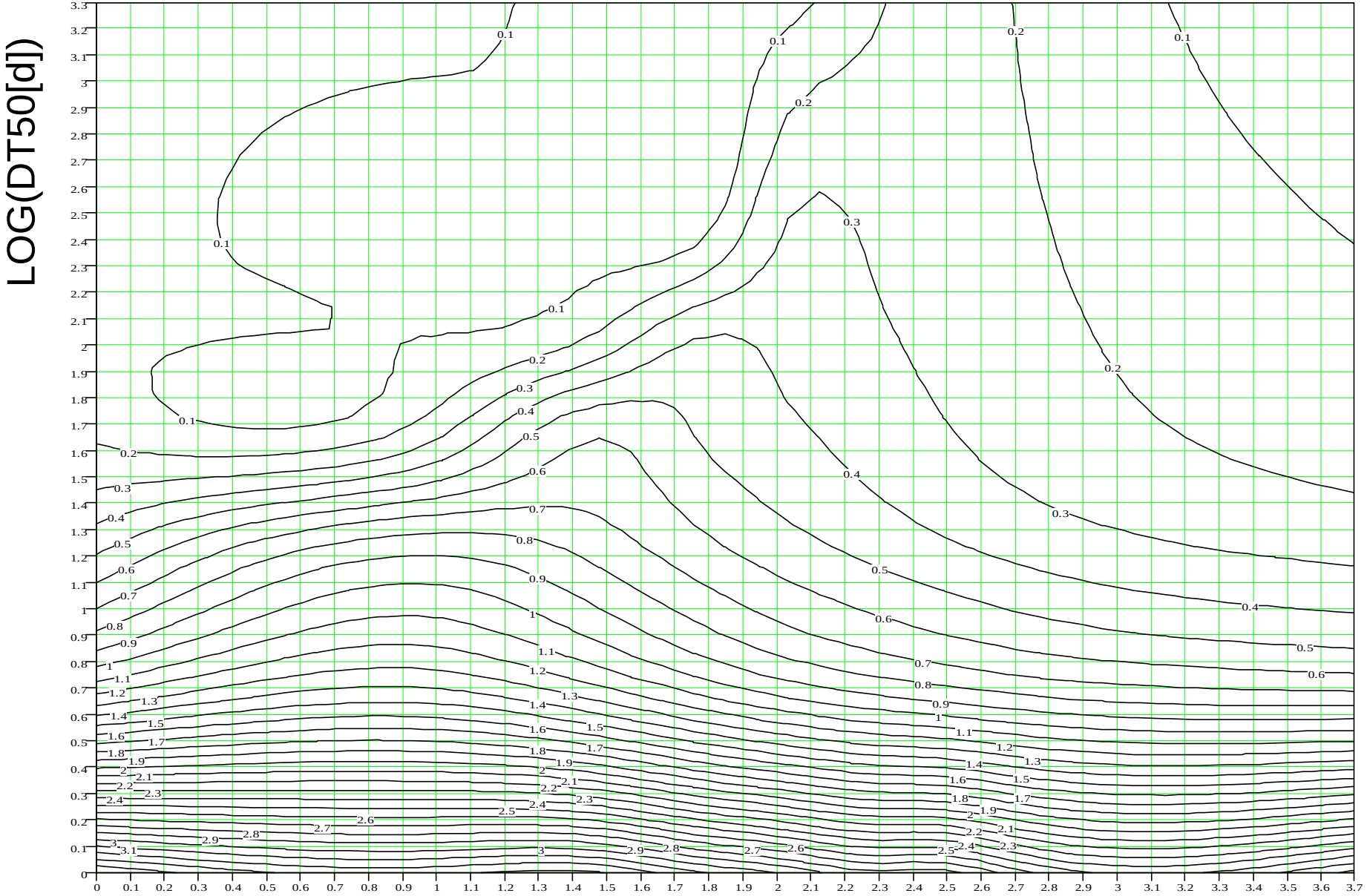
LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



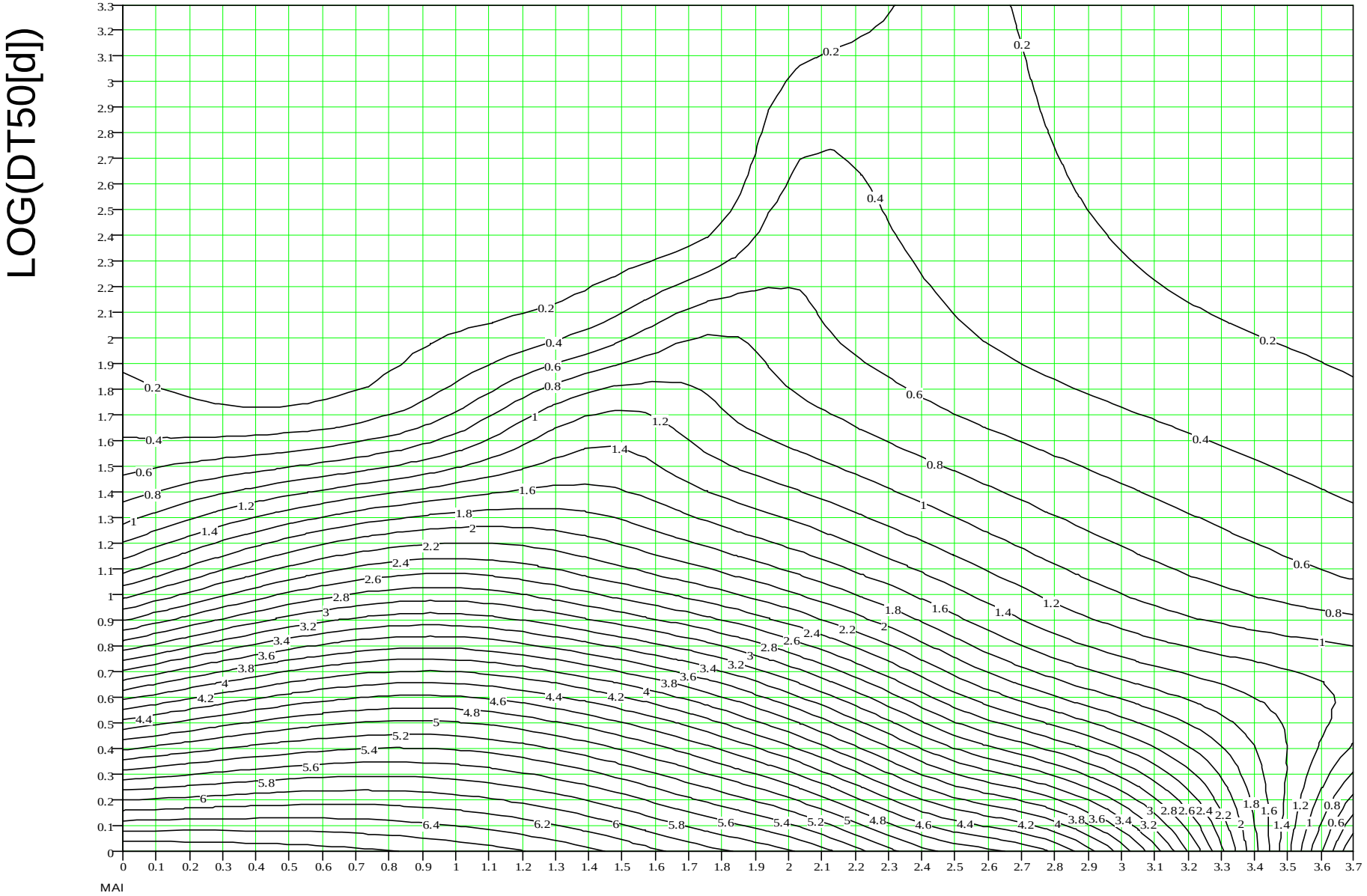
Szenario 5,Juli

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



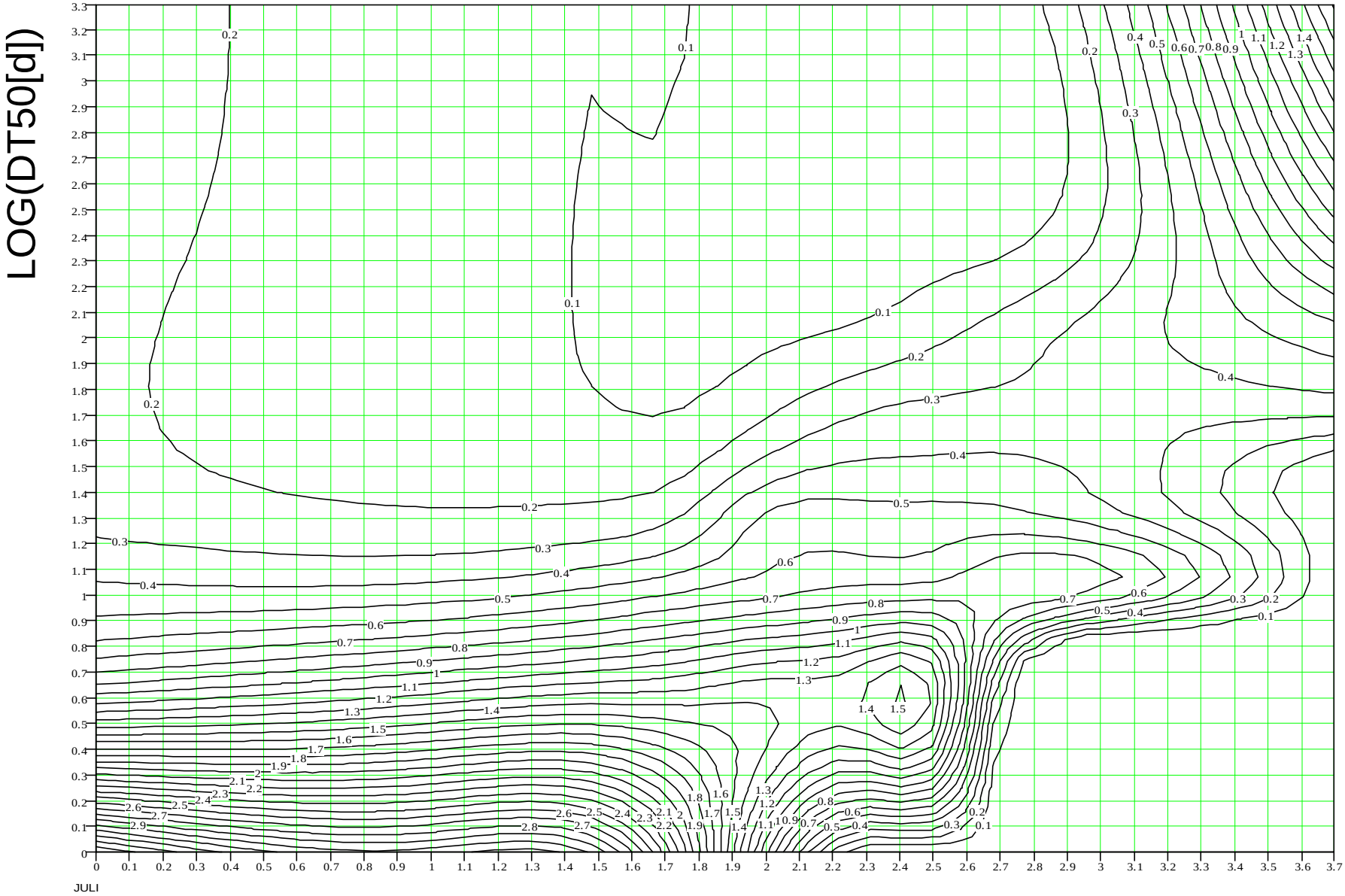
Szenario 5,November

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



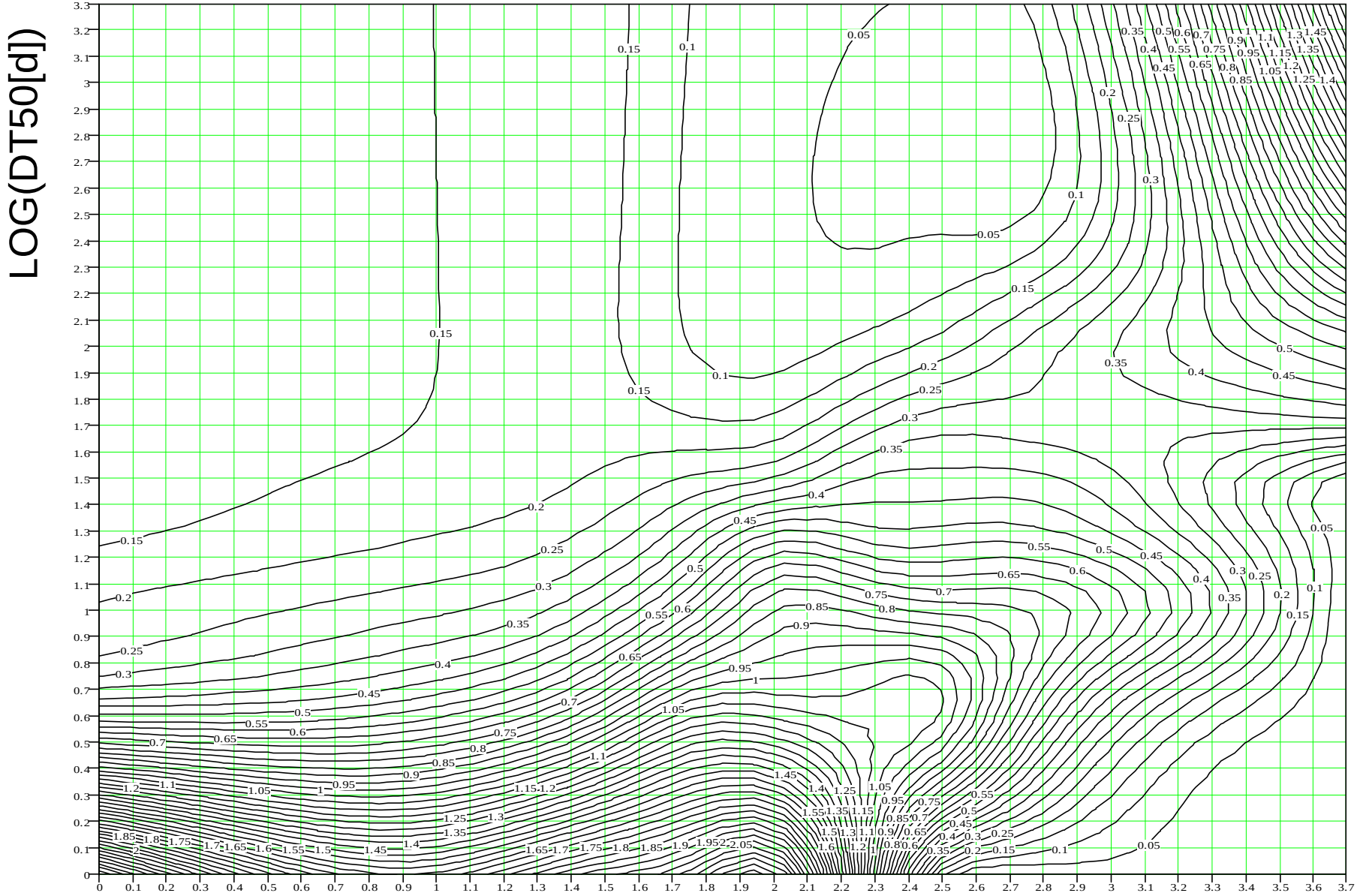
Szenario 6,Mai

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



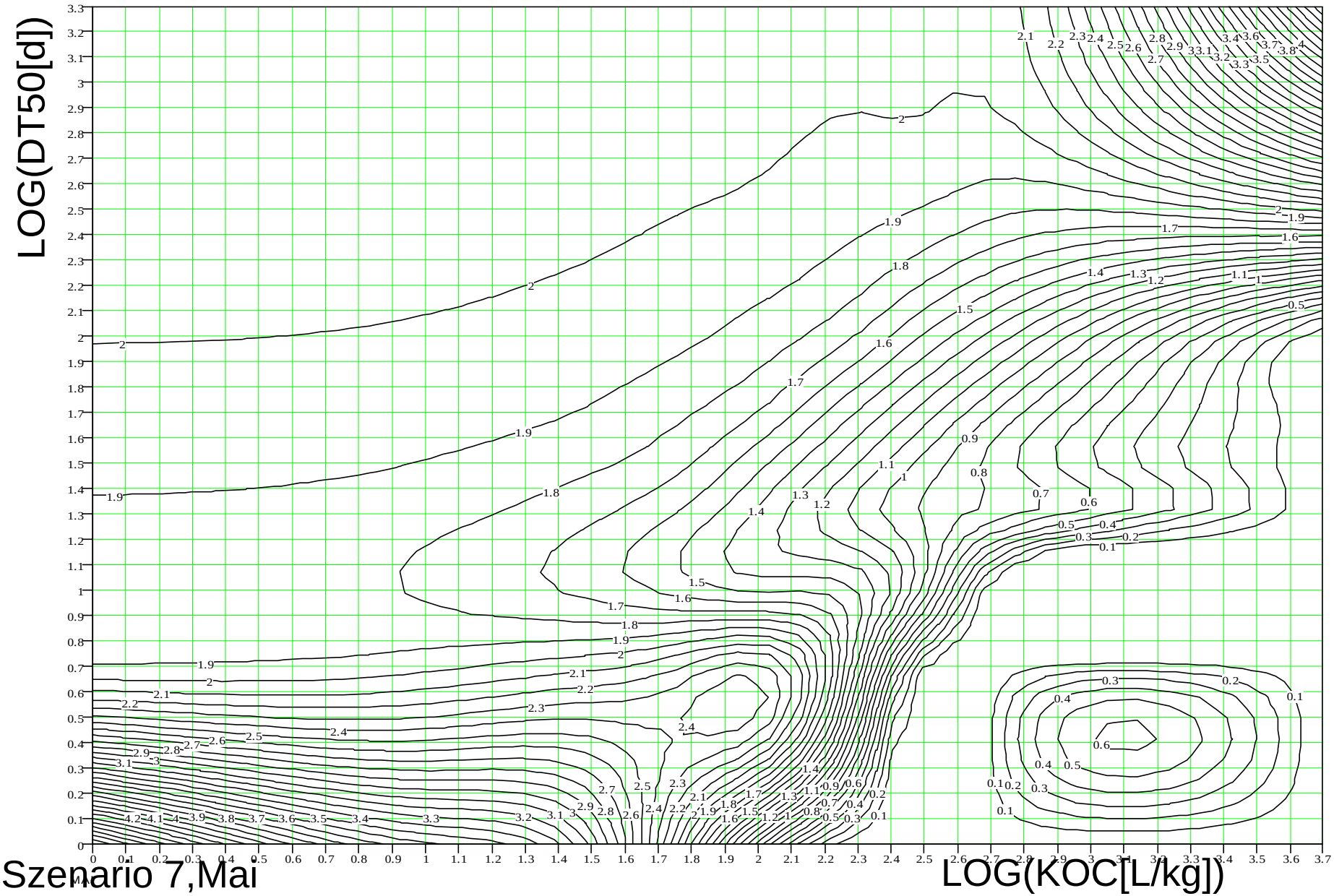
Szenario 6,Juli

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



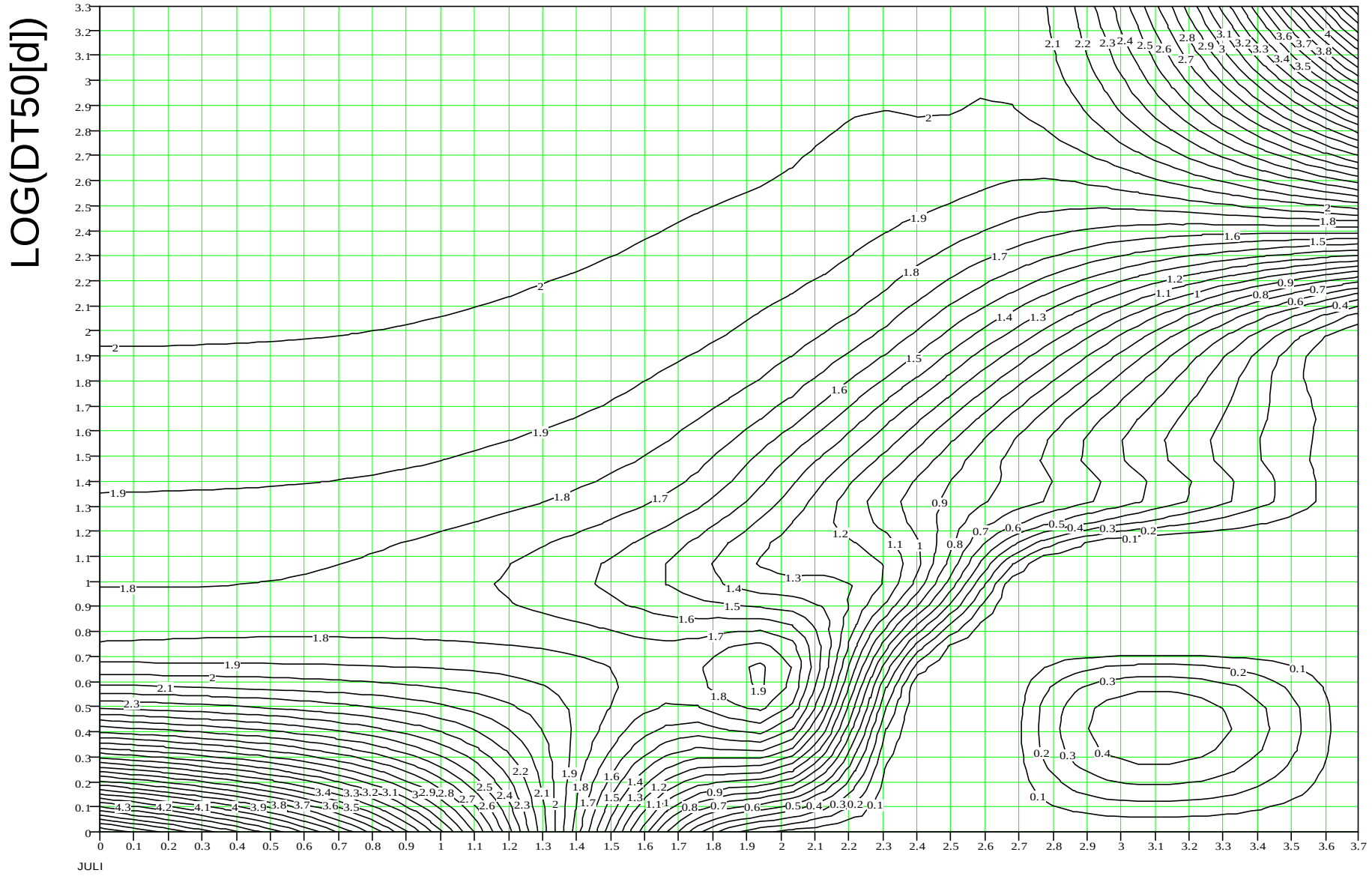
Szenario 6,November

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



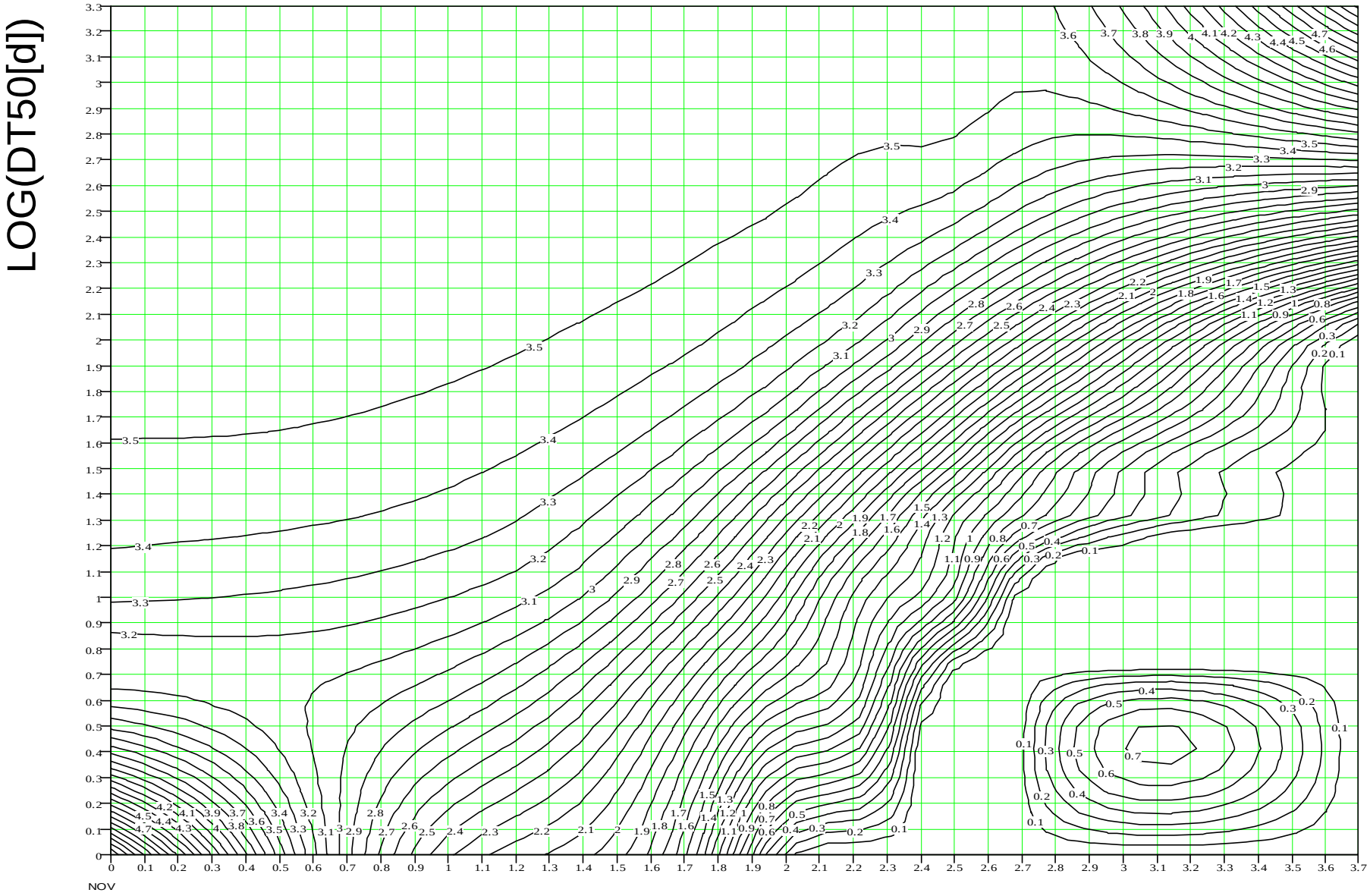
Szenario 7,Mai

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 7,Juli

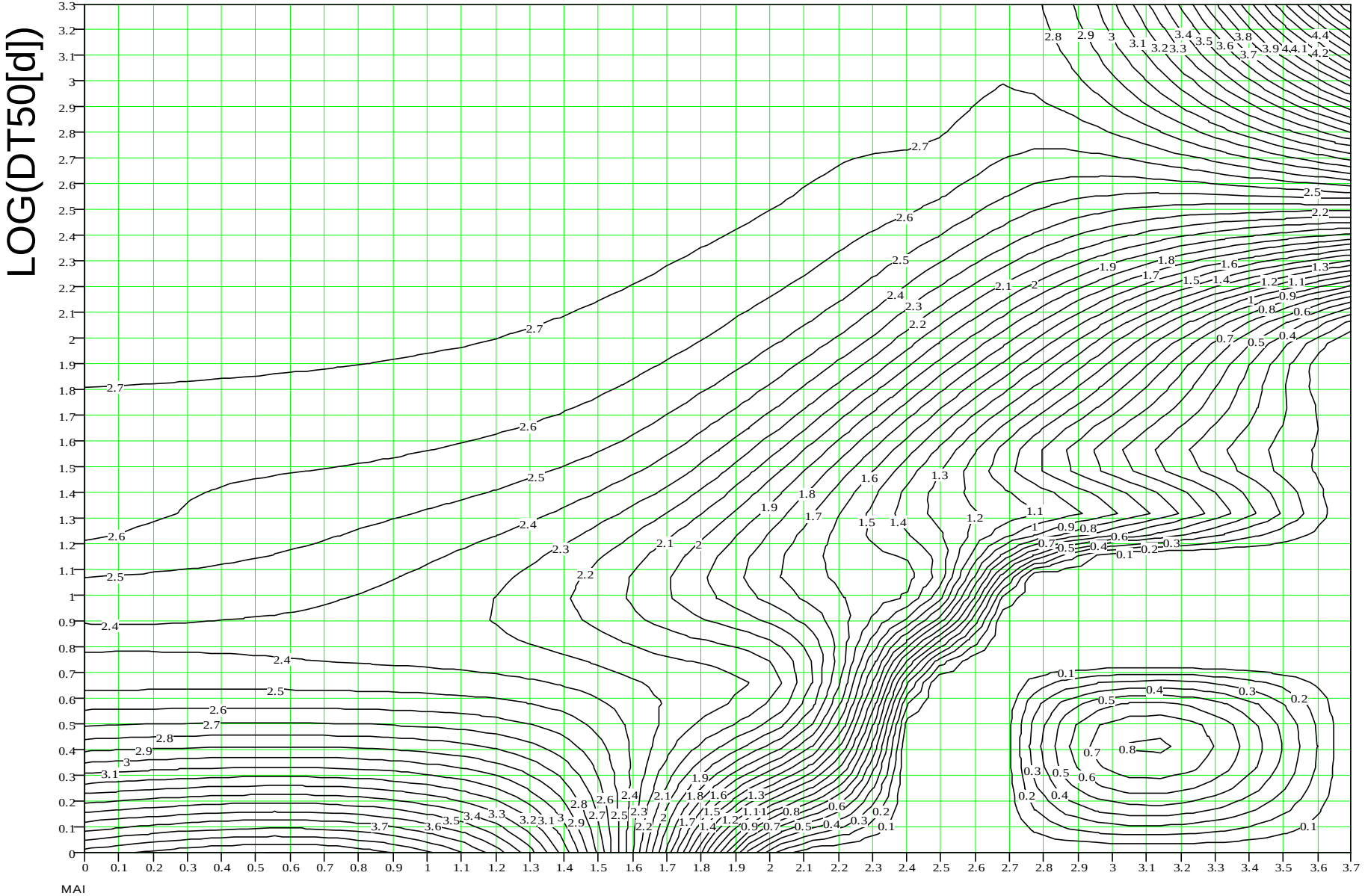
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 7,November

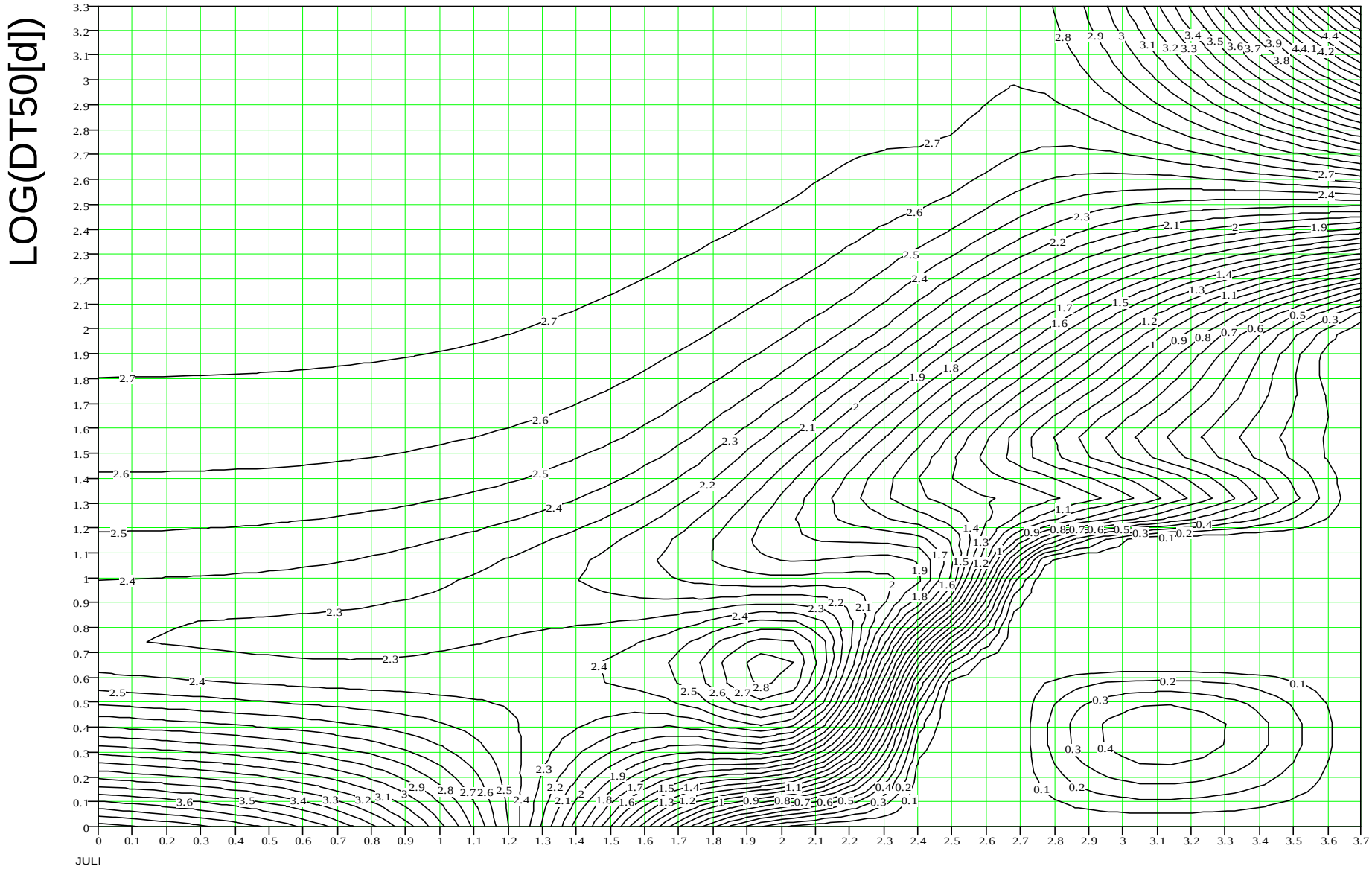
LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



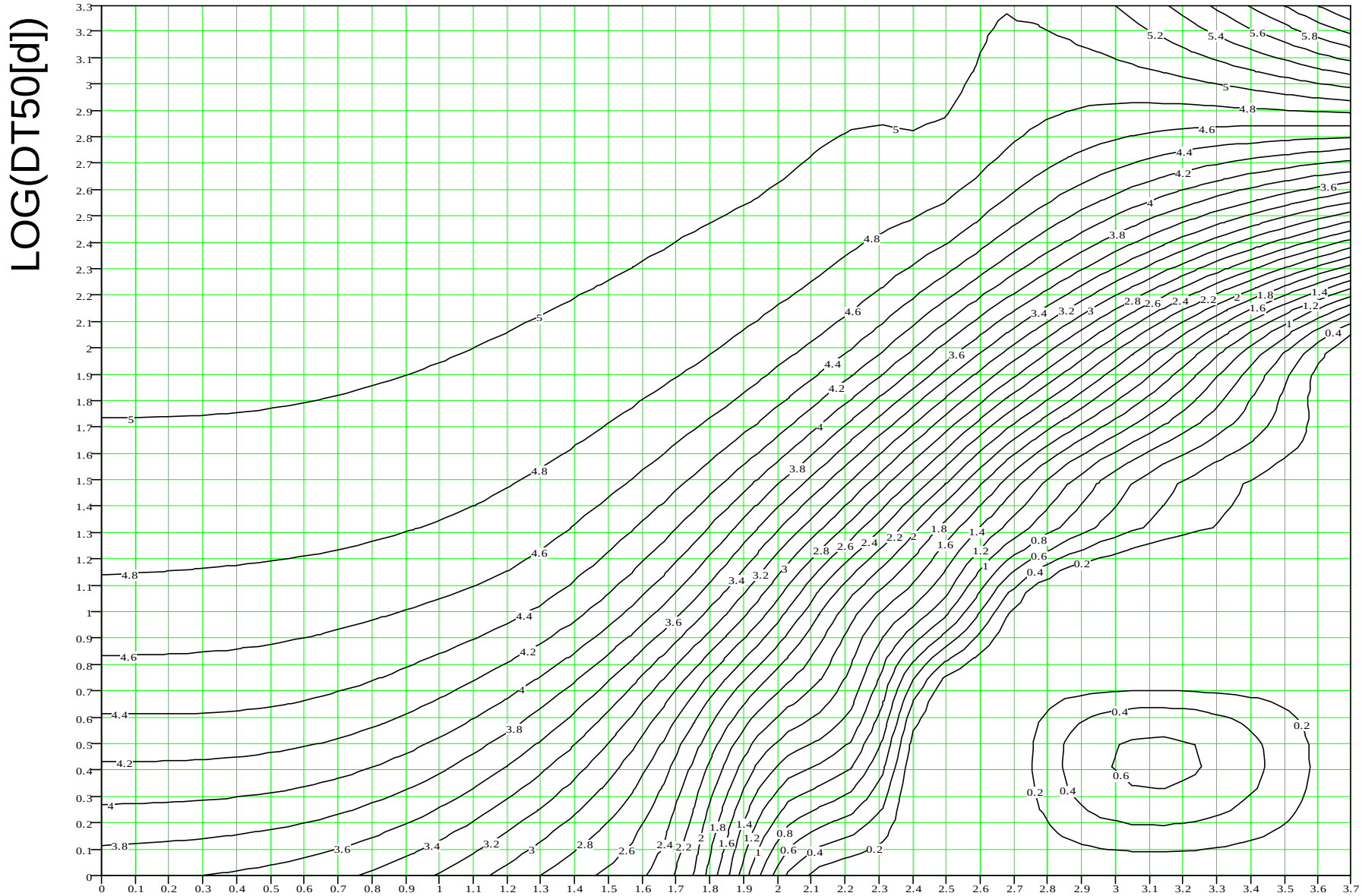
Szenario 8,Mai

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



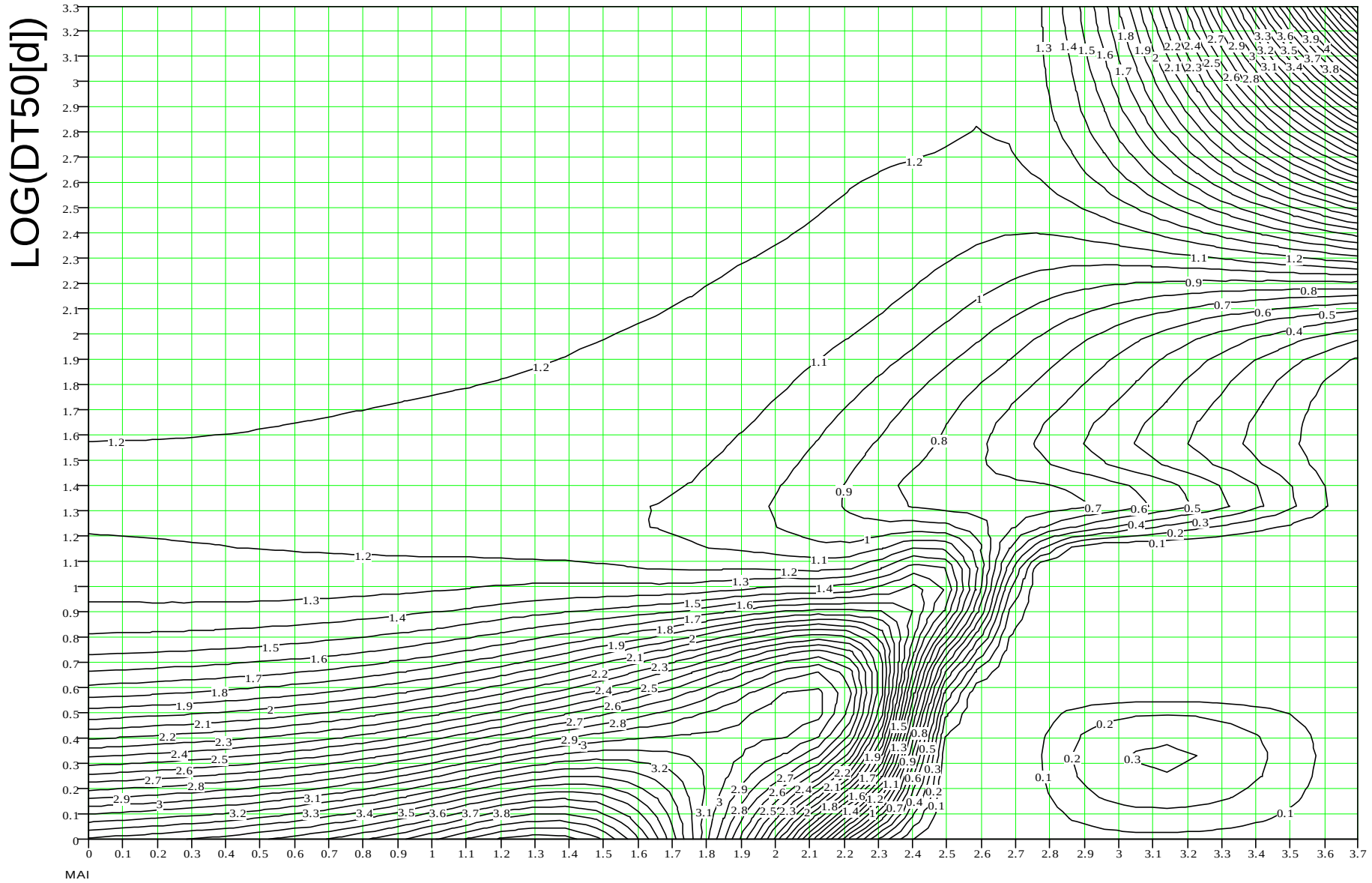
Szenario 8,Juli

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



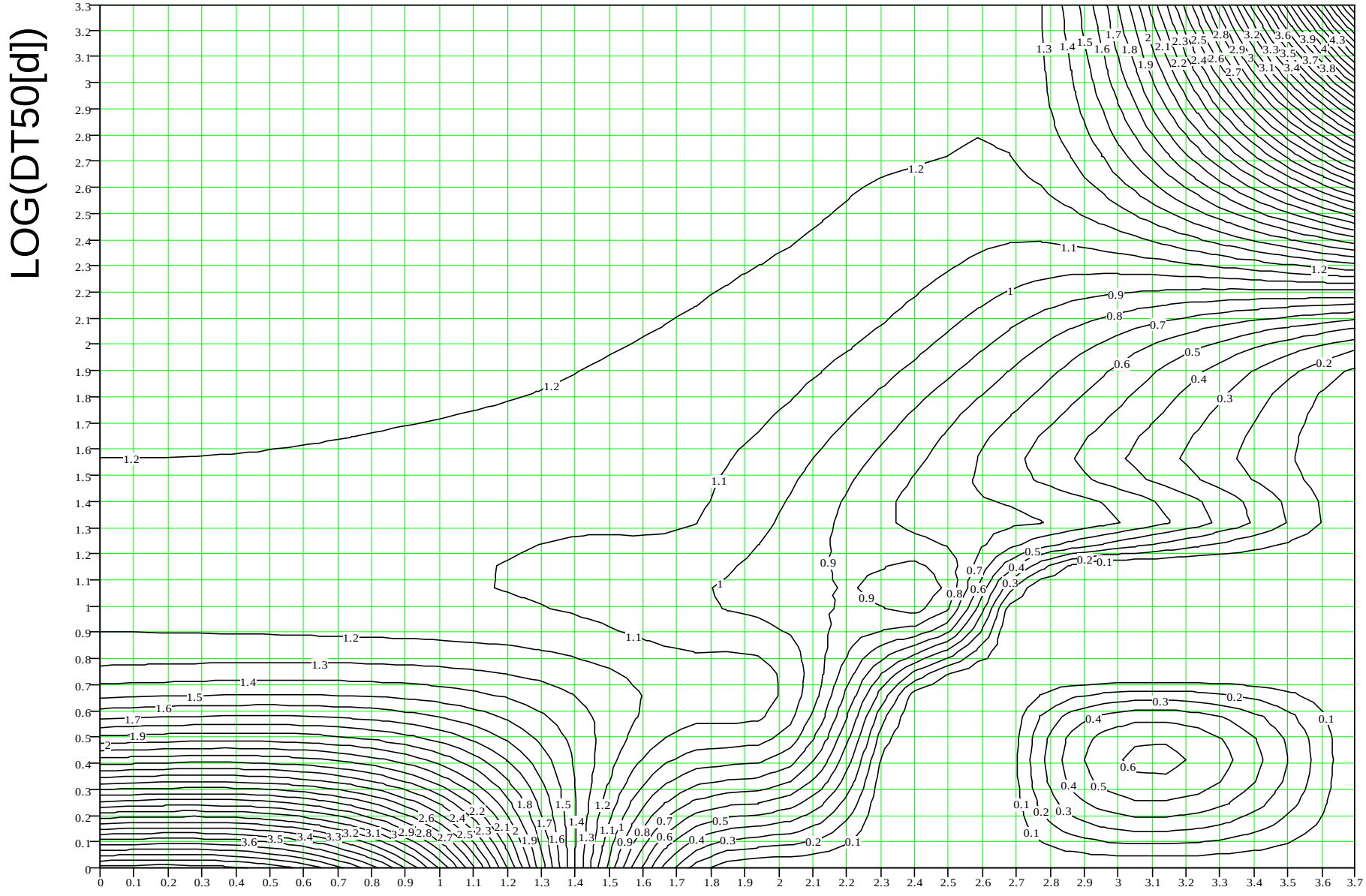
Szenario 8,November

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



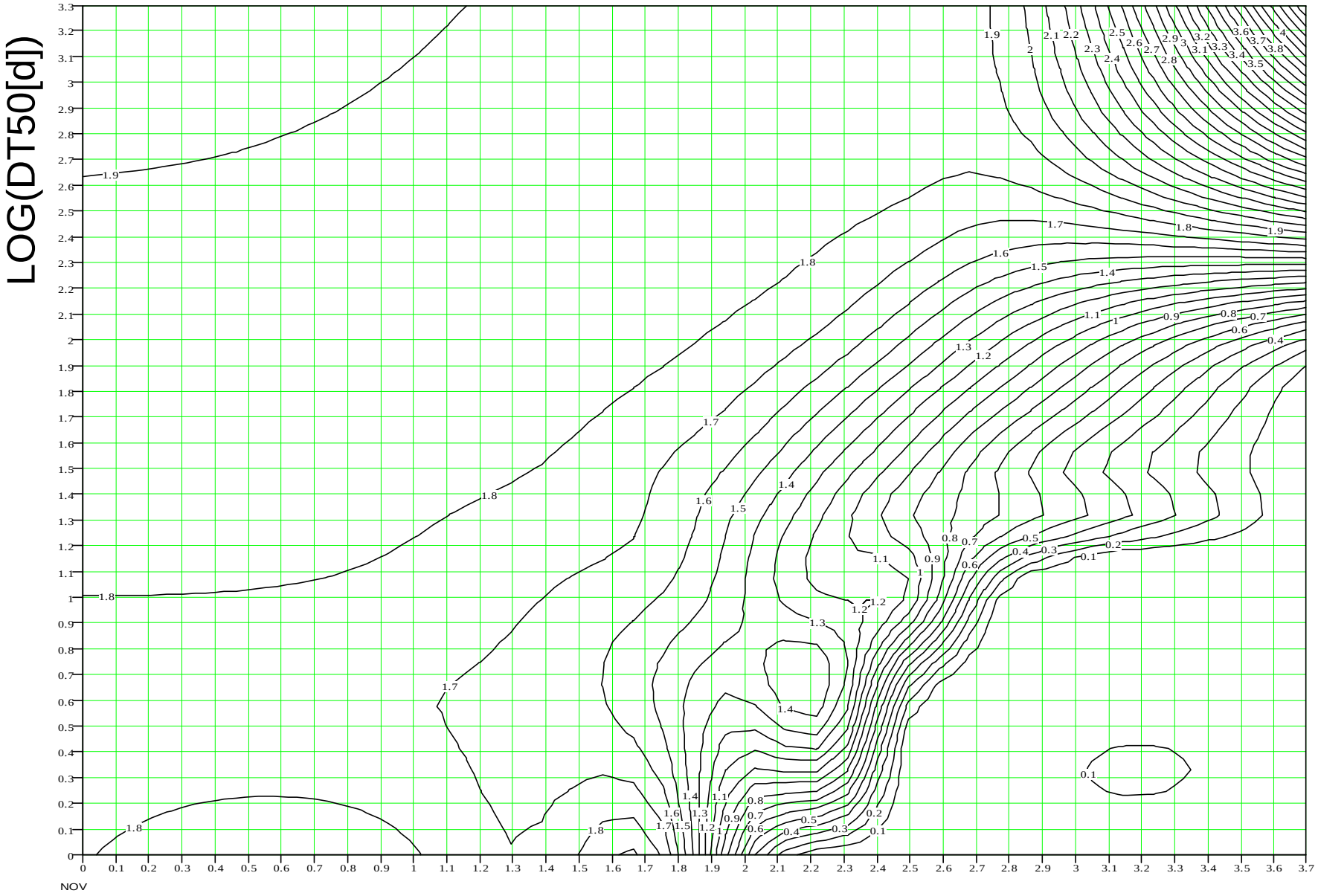
Szenario 9, Mai

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 9,Juli

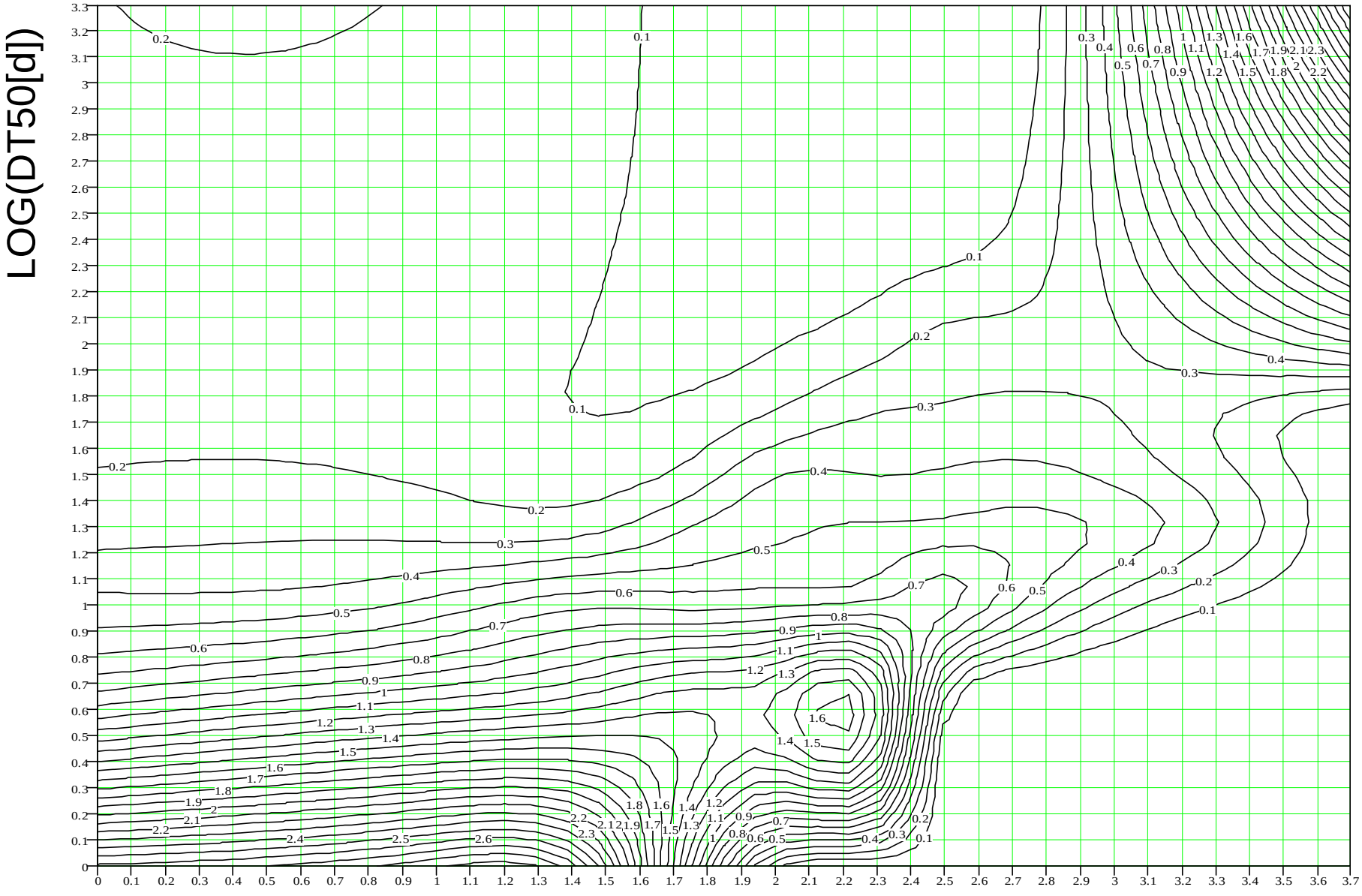
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 9,November

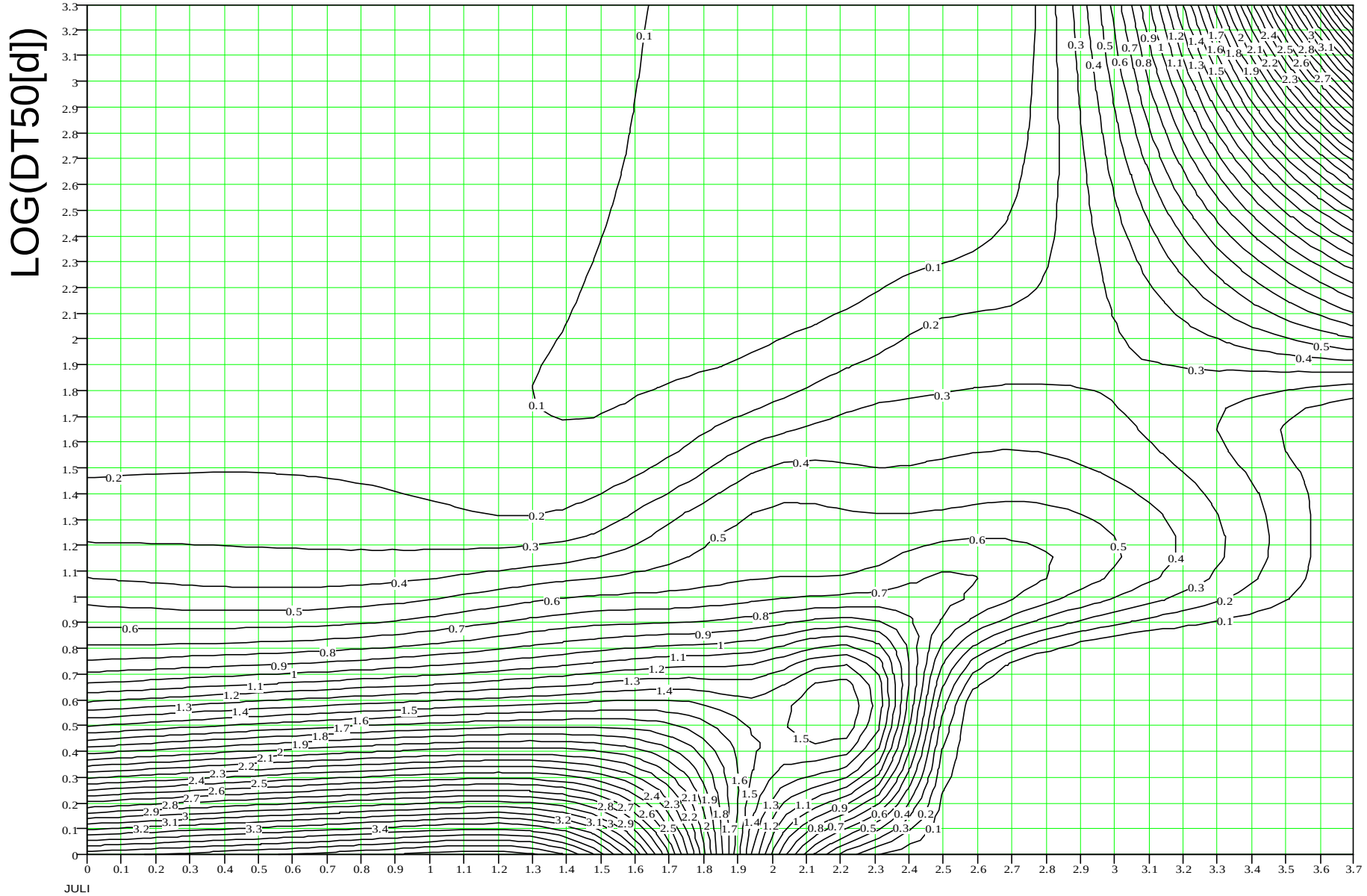
LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 10,Mai

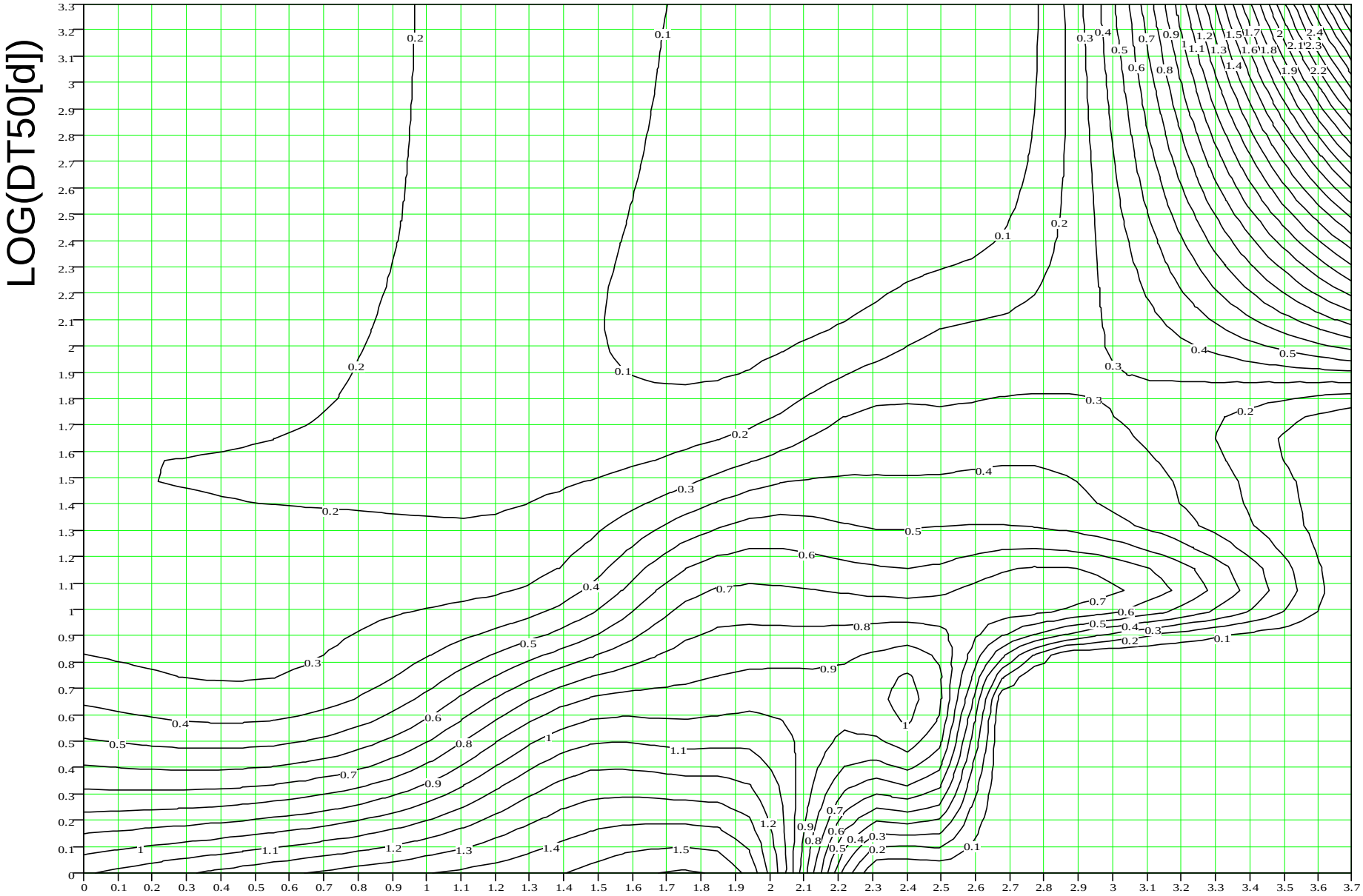
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



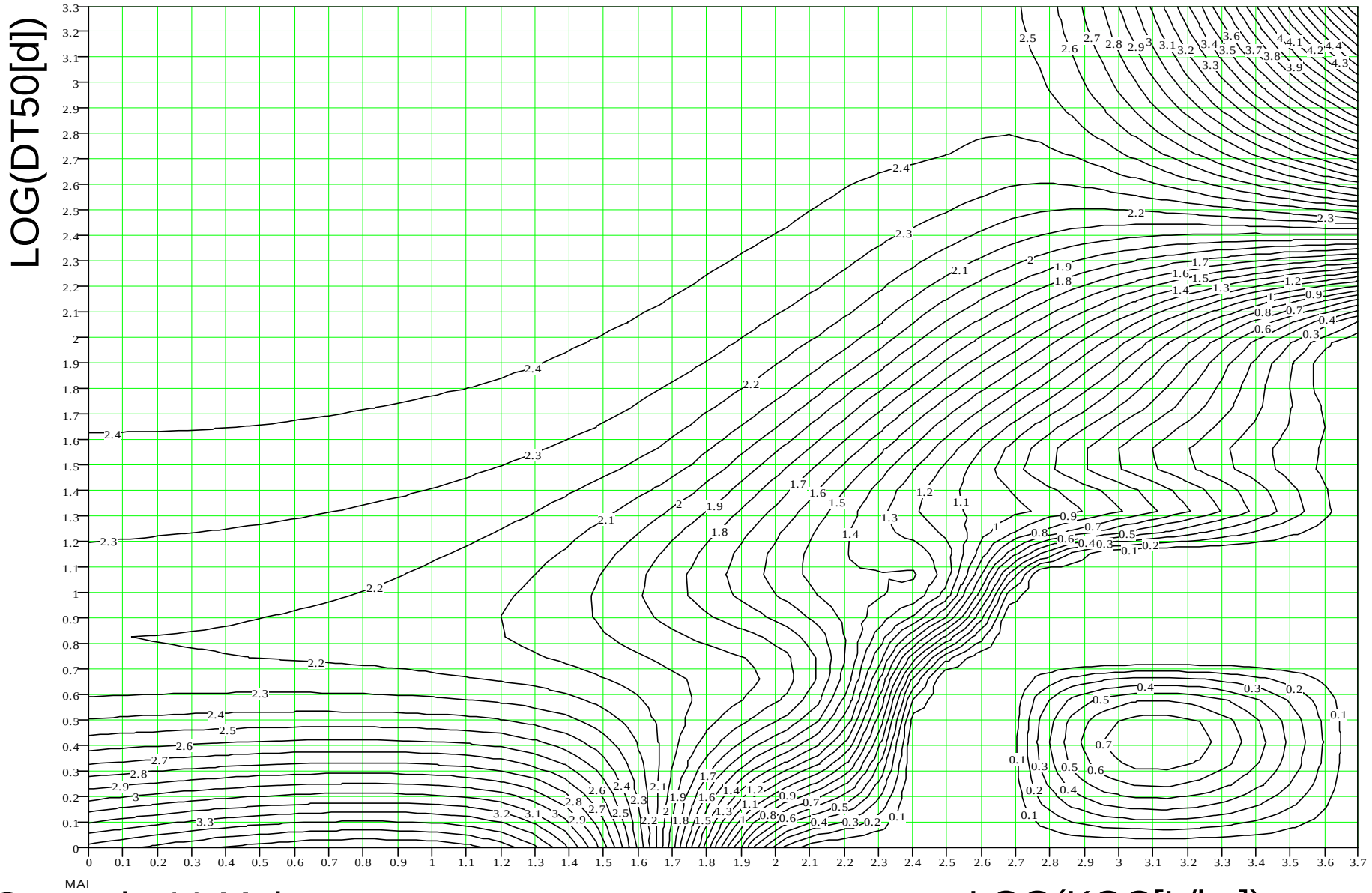
Szenario 10,Juli

LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Schwankungsfaktors S

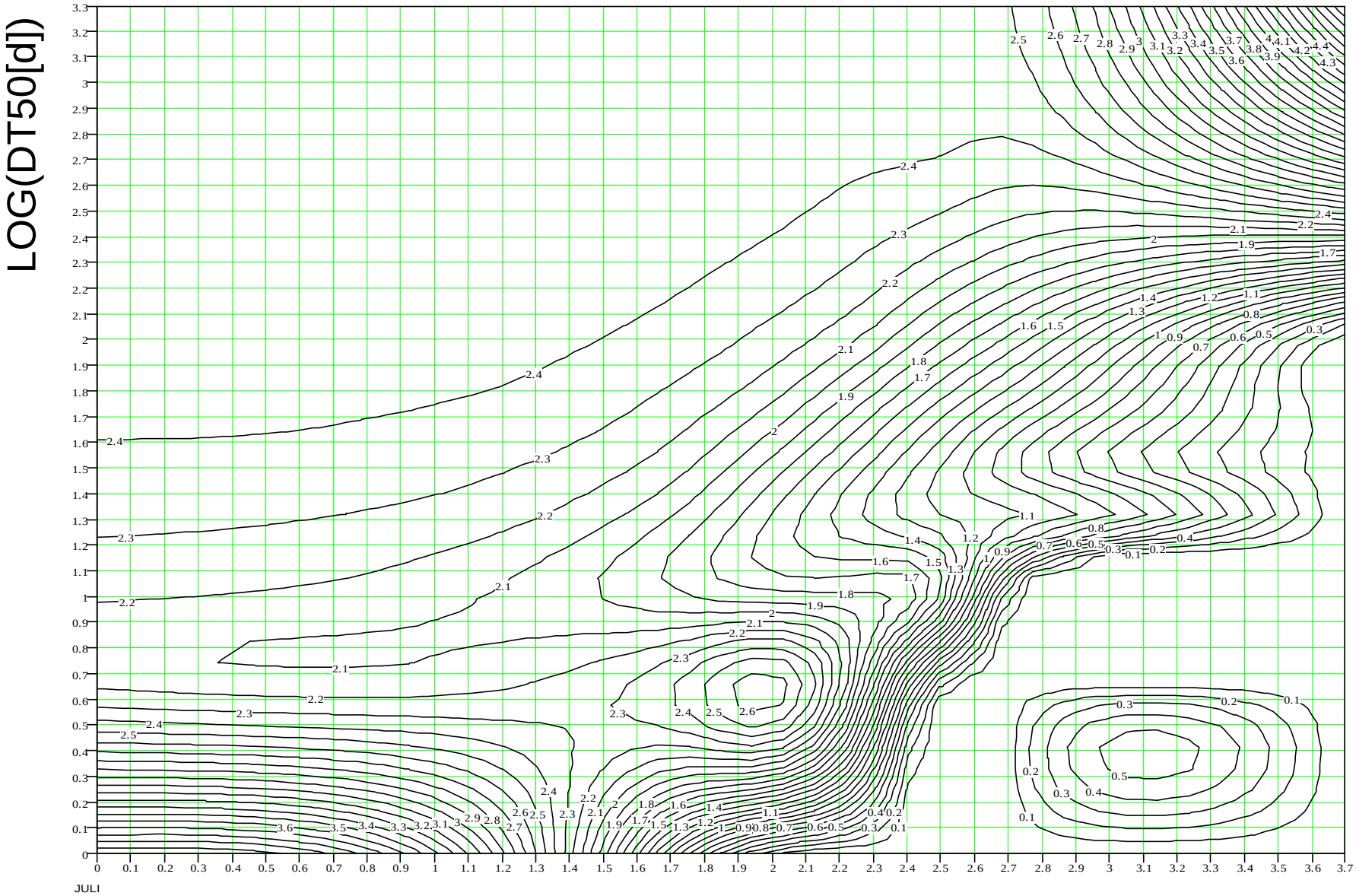


Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 11,Mai

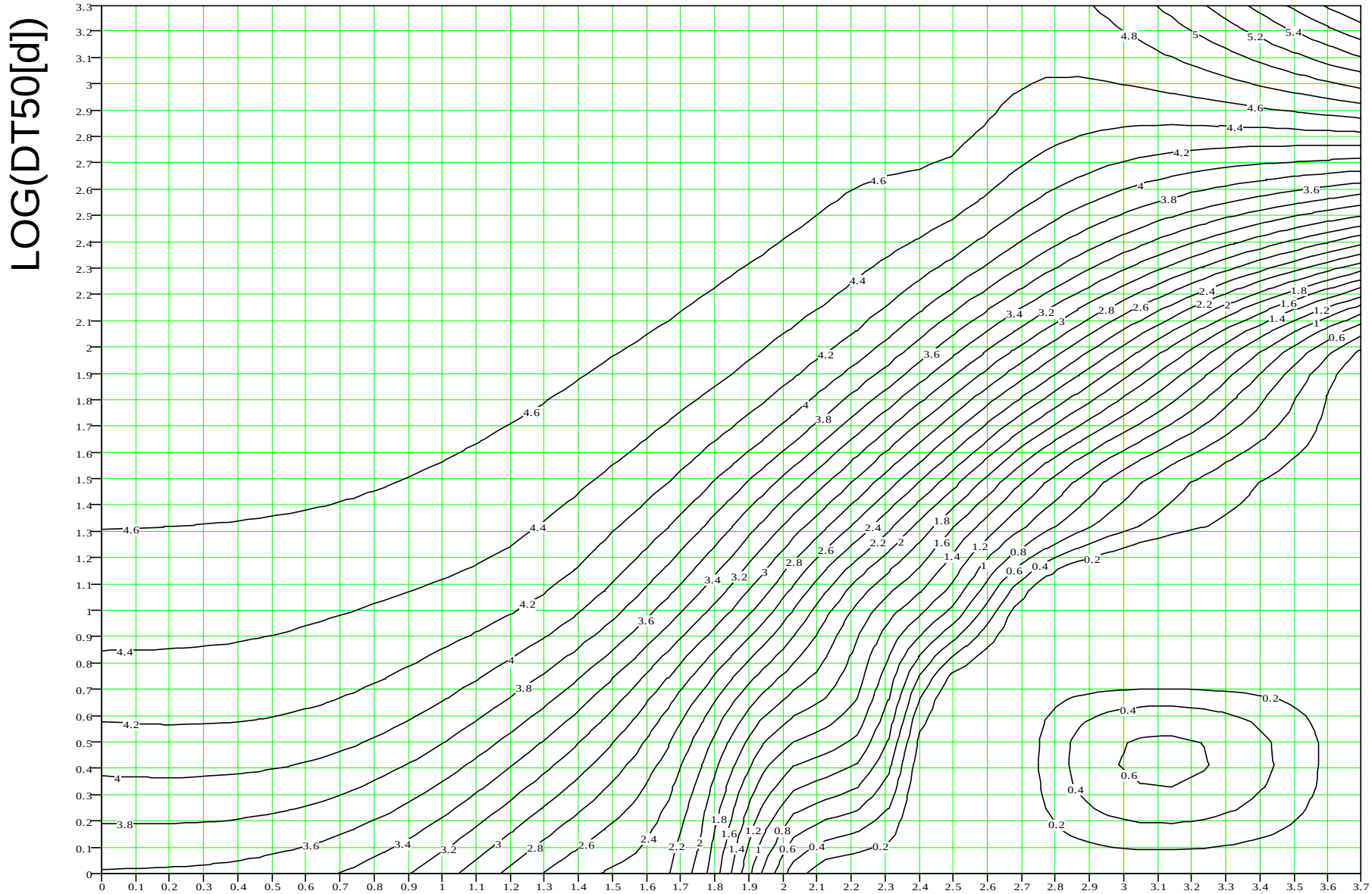
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 11,Juli

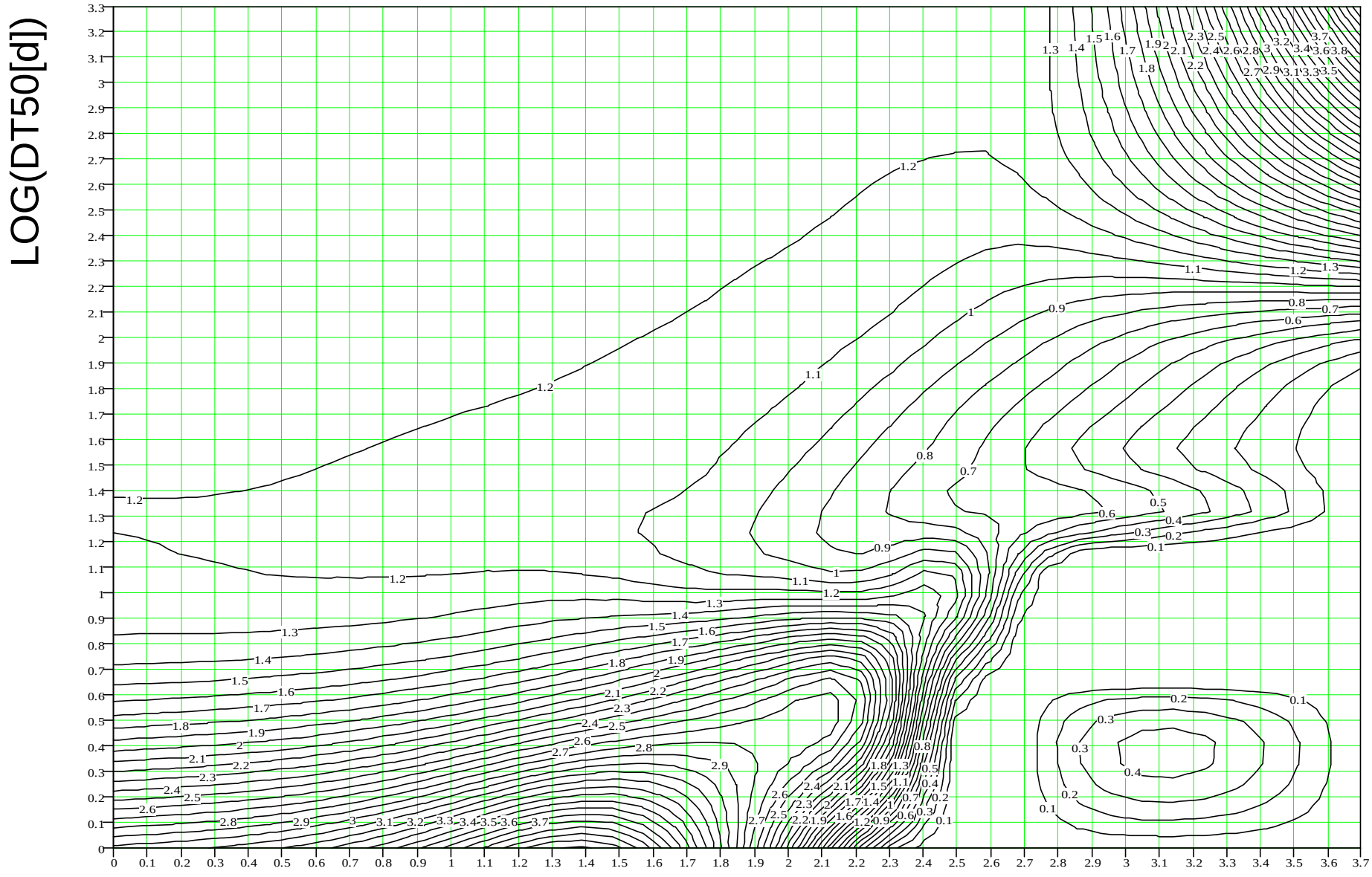
LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Schwankungsfaktors S

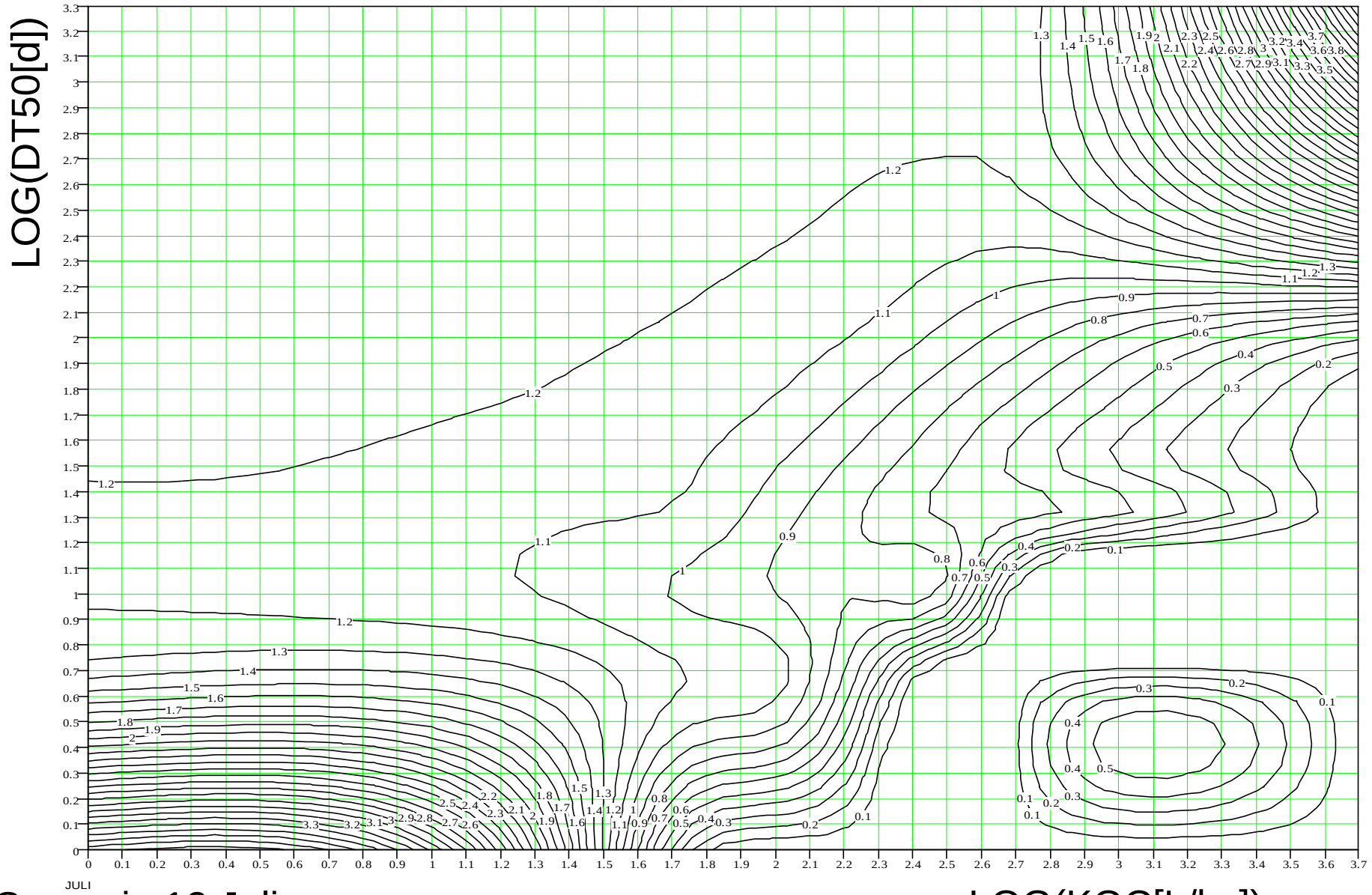


Szenario 11,November

Bestimmung des Schwankungsfaktors S

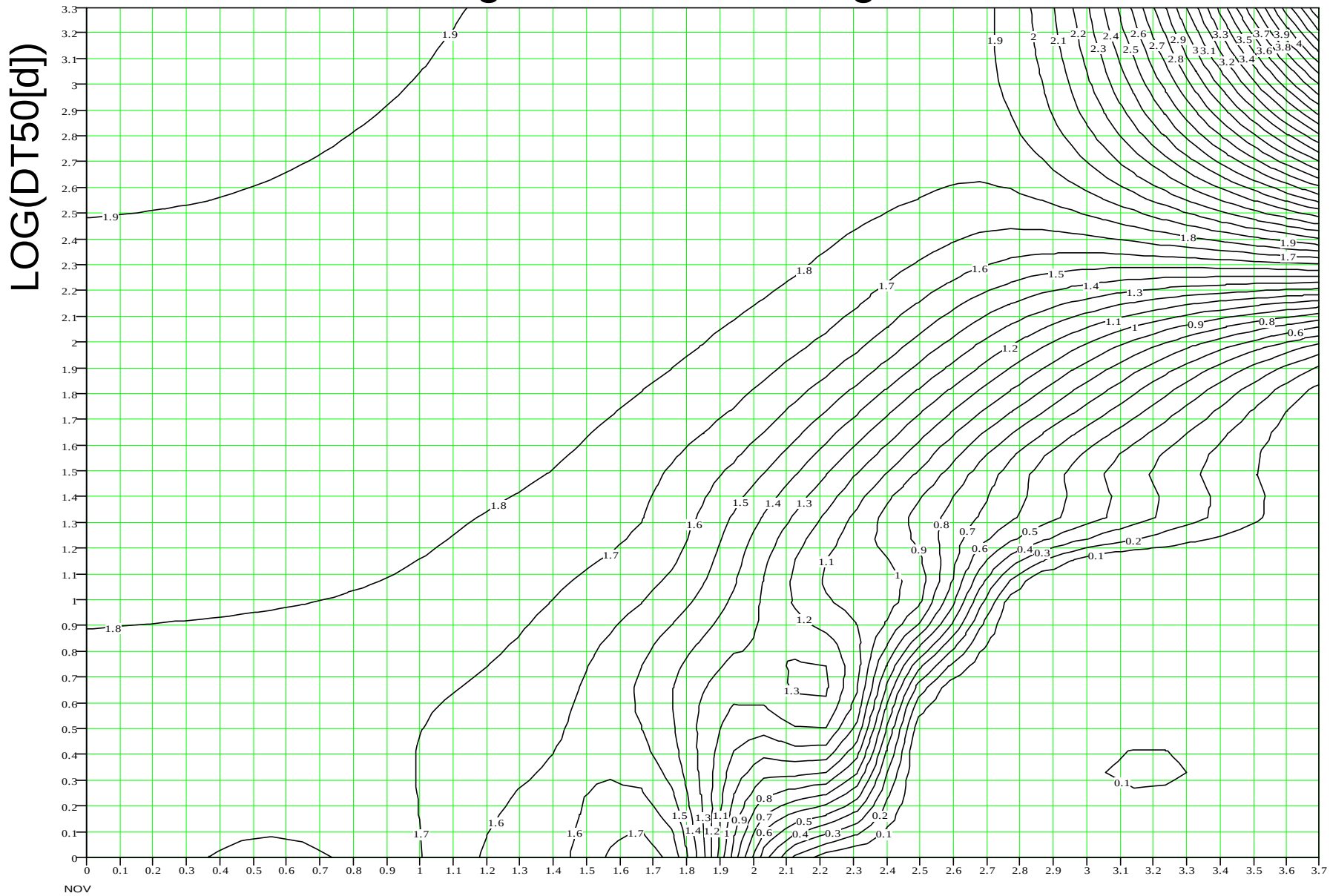


Bestimmung des Schwankungsfaktors S



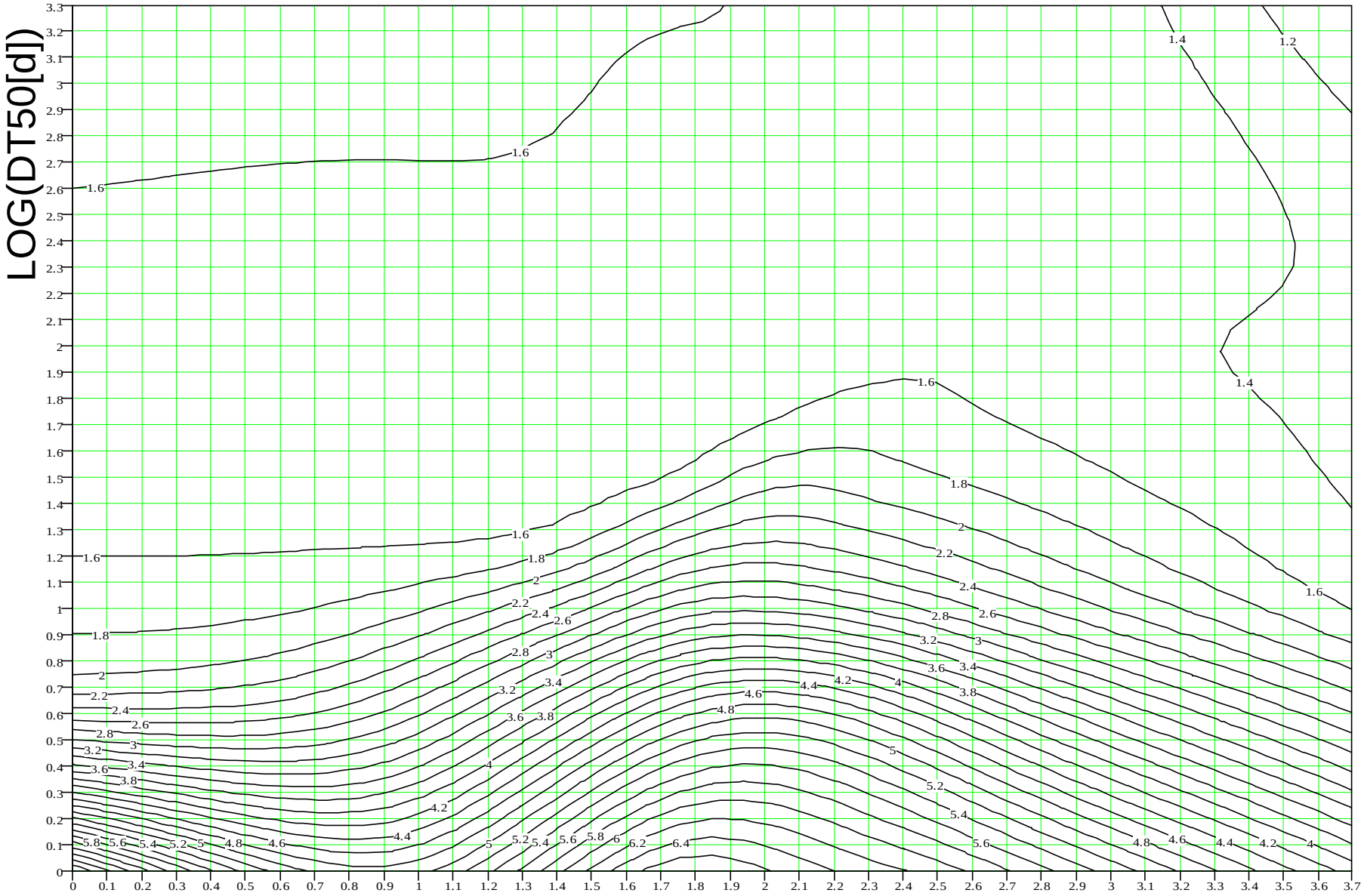
Szenario 12,Juli

Bestimmung des Schwankungsfaktors S

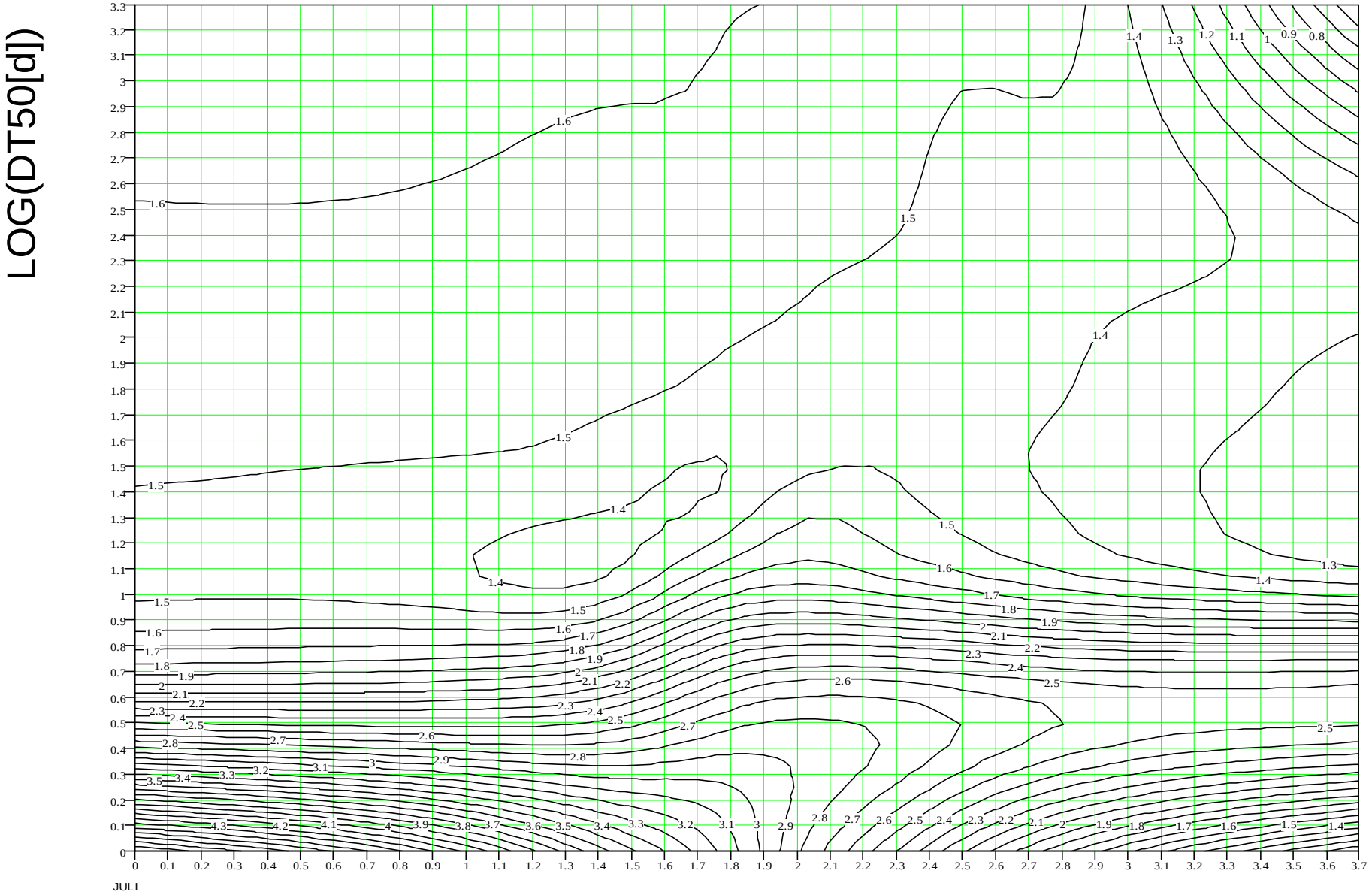


Szenario 12,November

Bestimmung des Schwankungsfaktors S

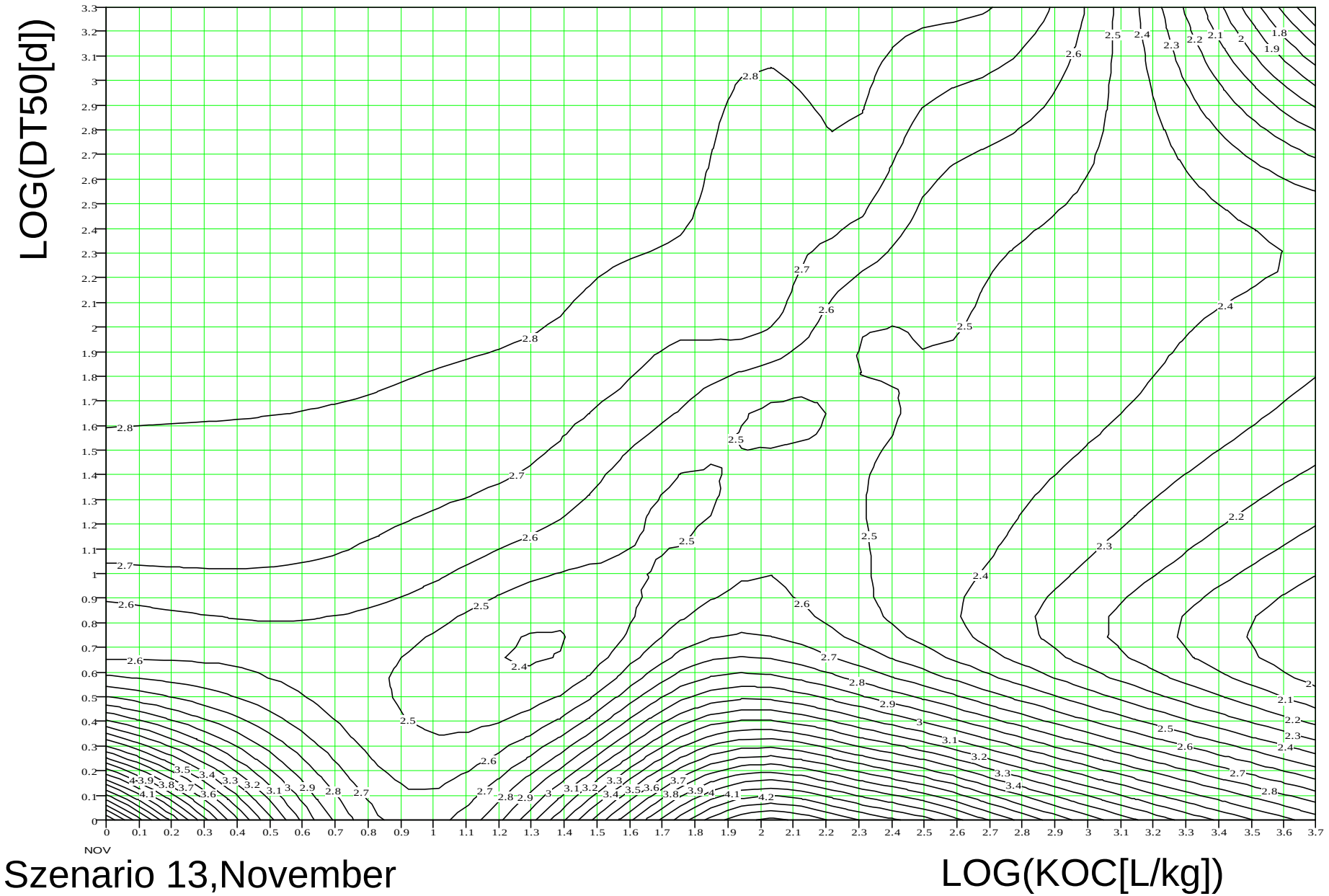


Bestimmung des Schwankungsfaktors S



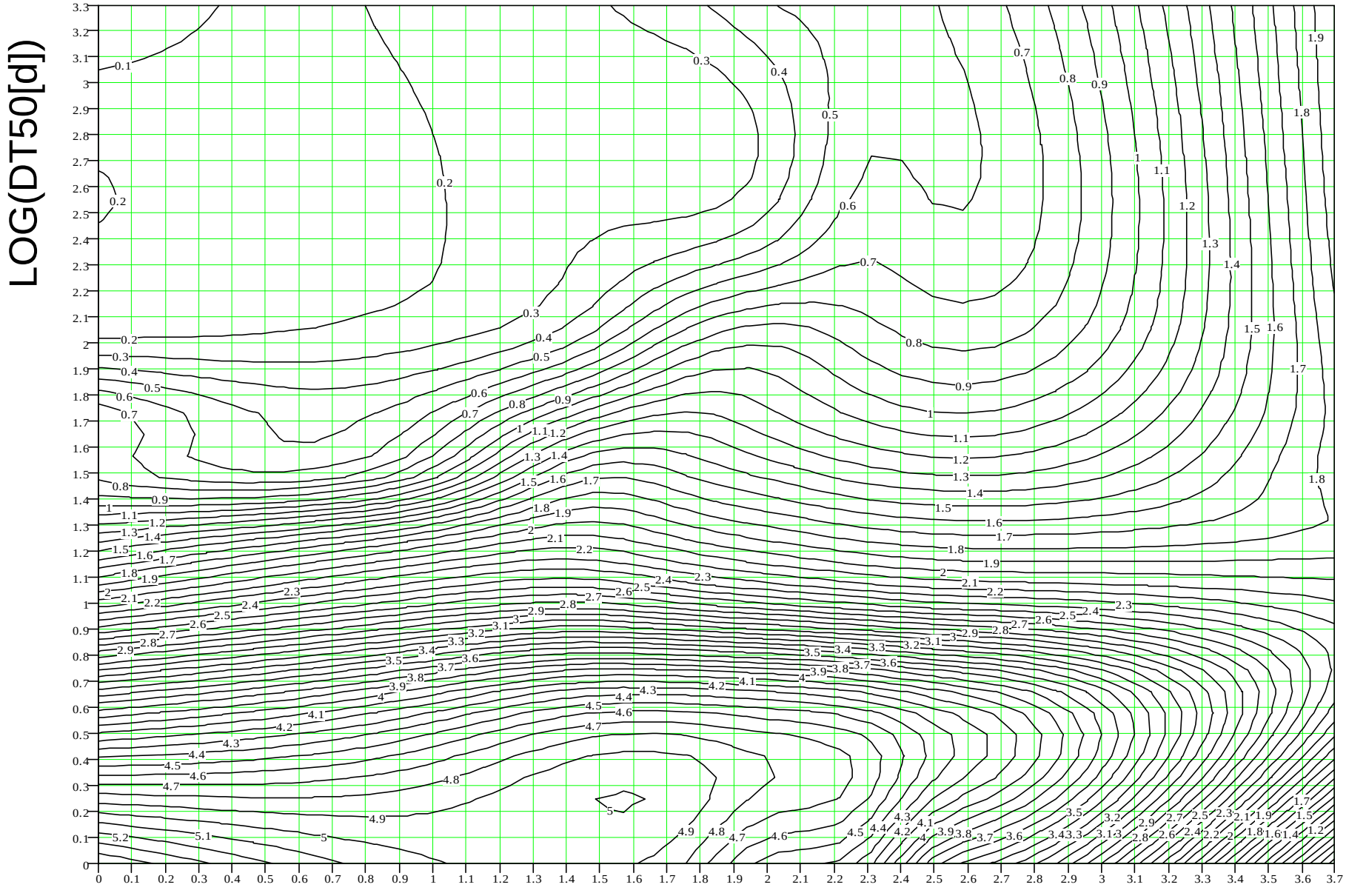
Szenario 13,Juli

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



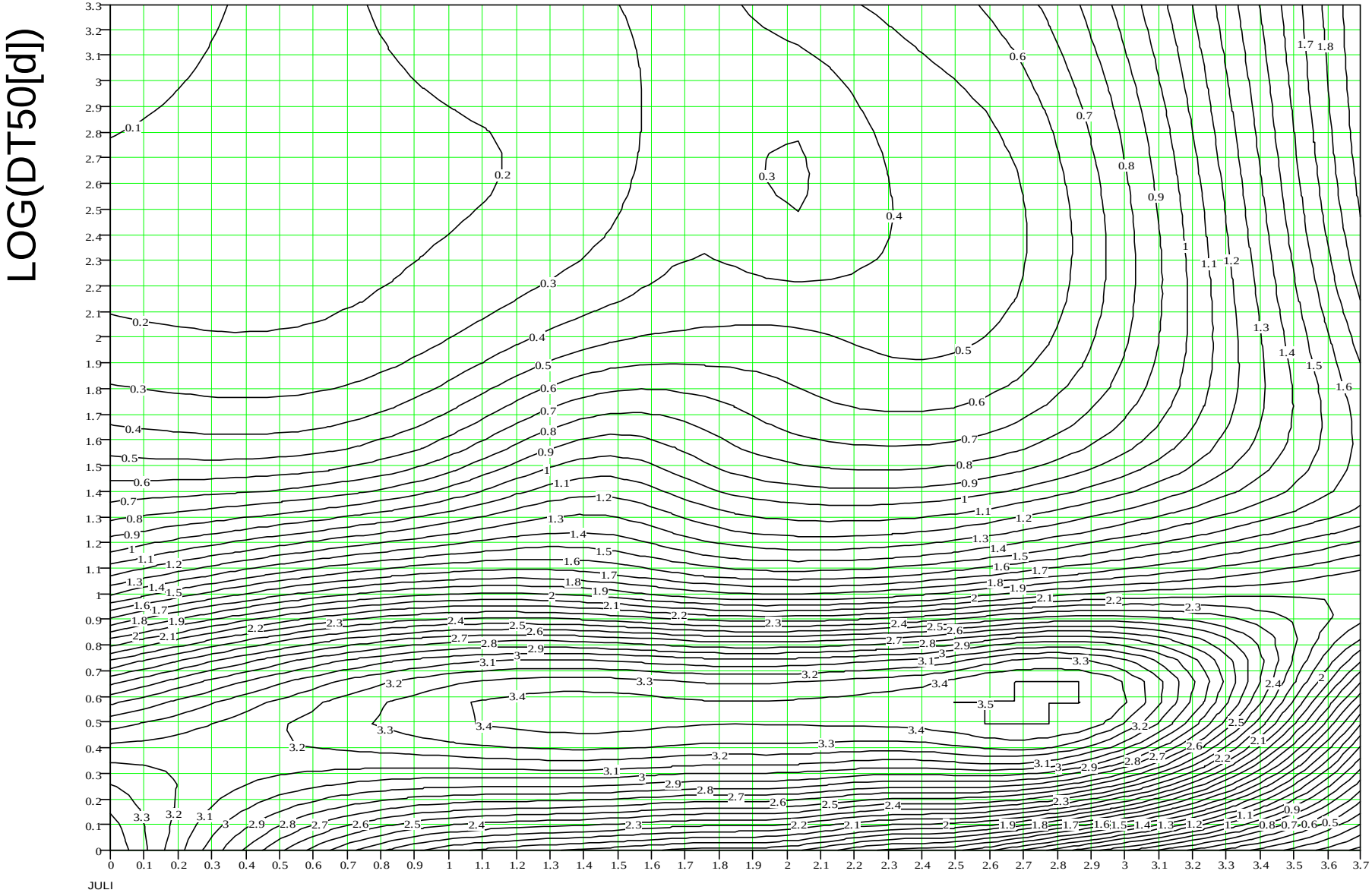
Szenario 13,November

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 14,Mai

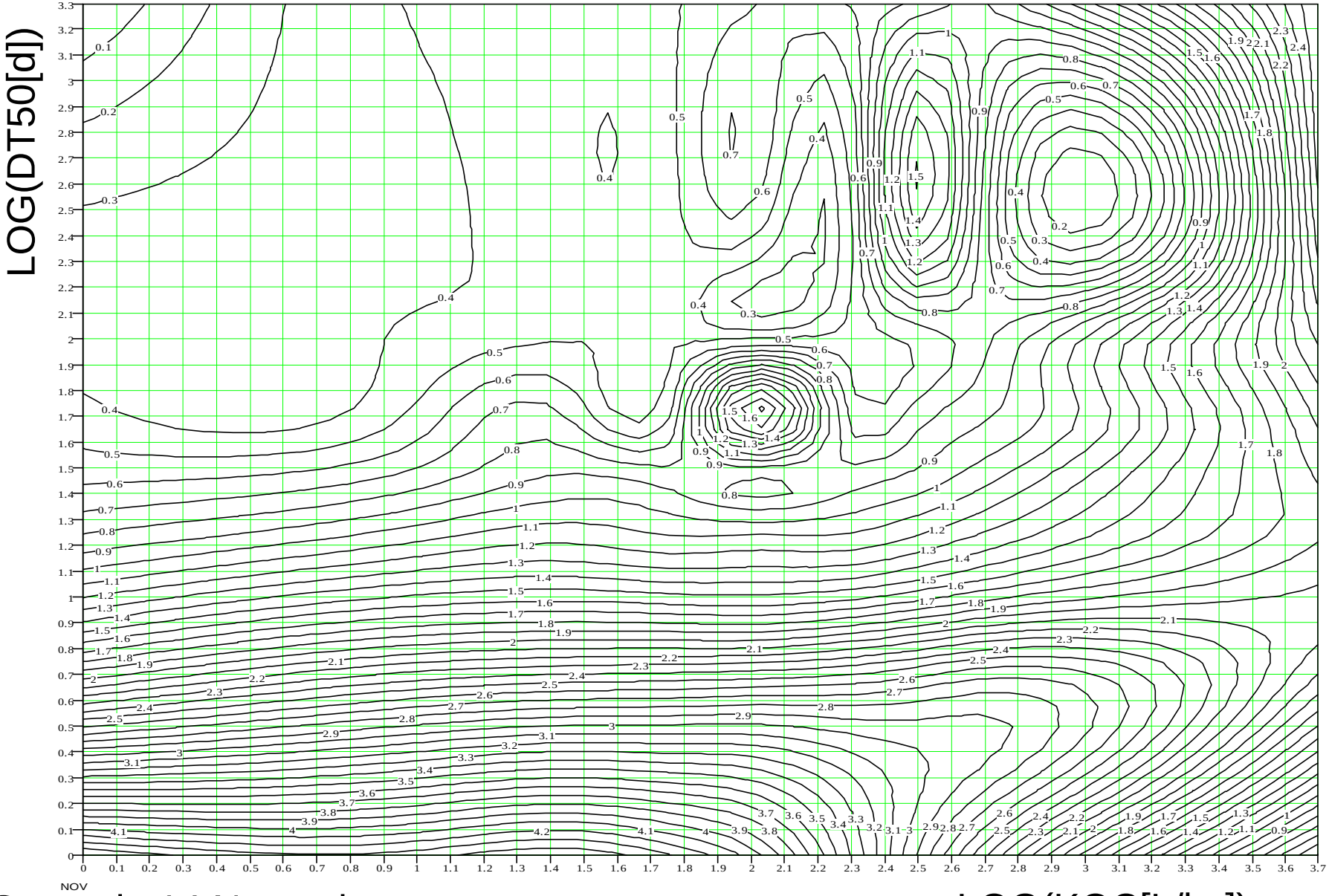
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 14,Juli

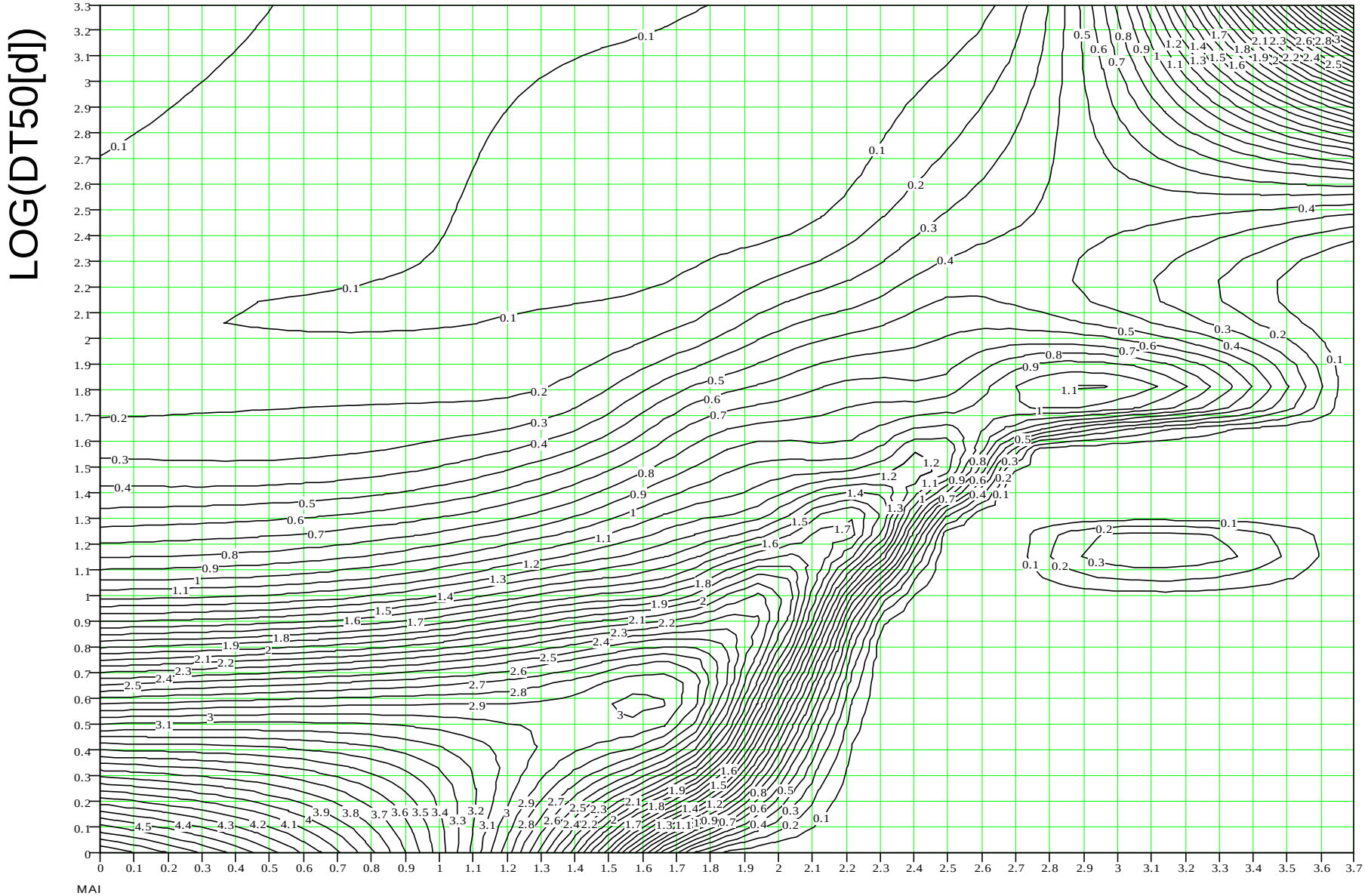
LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



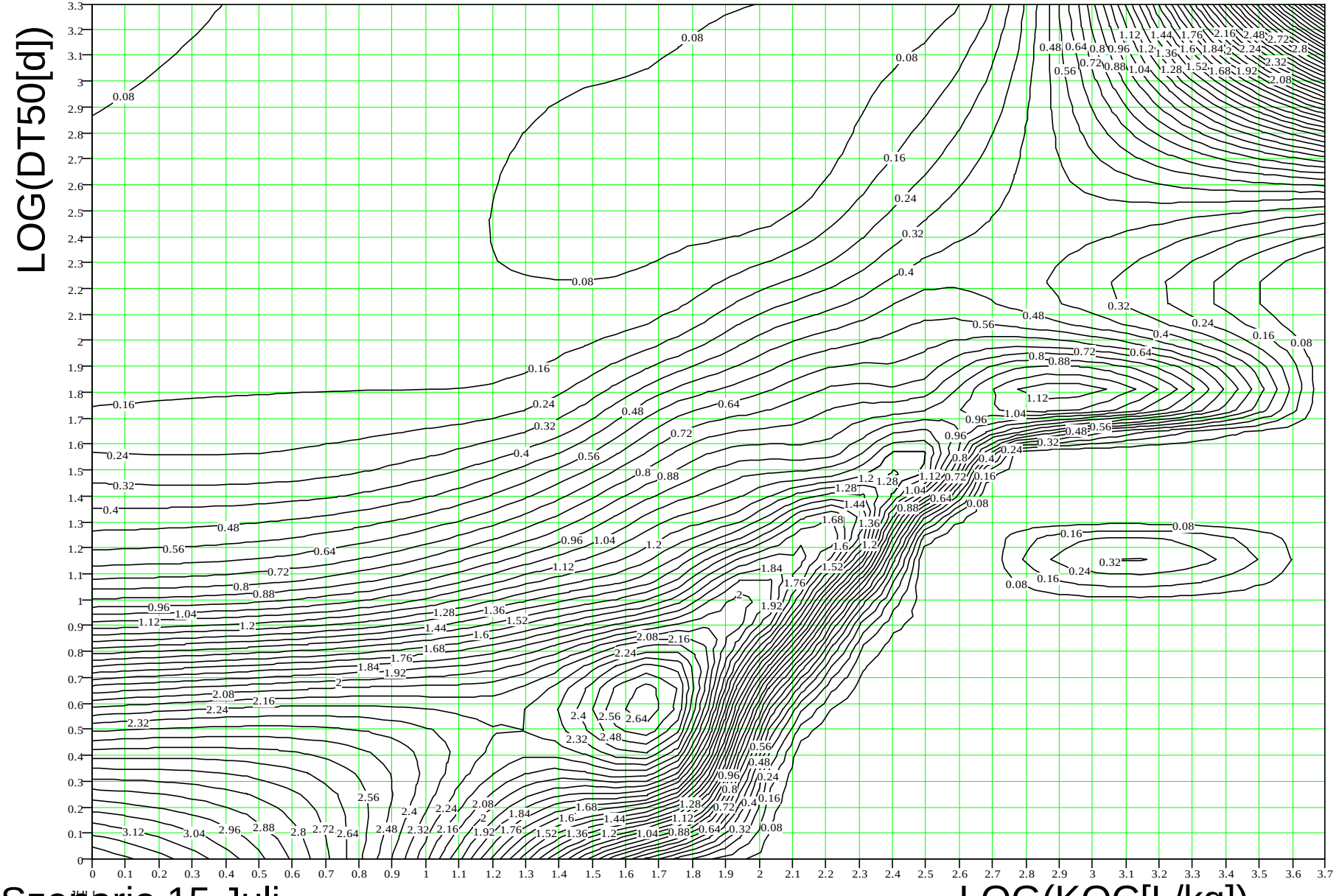
Szenario 14,November

Bestimmung des Schwankungsfaktors S

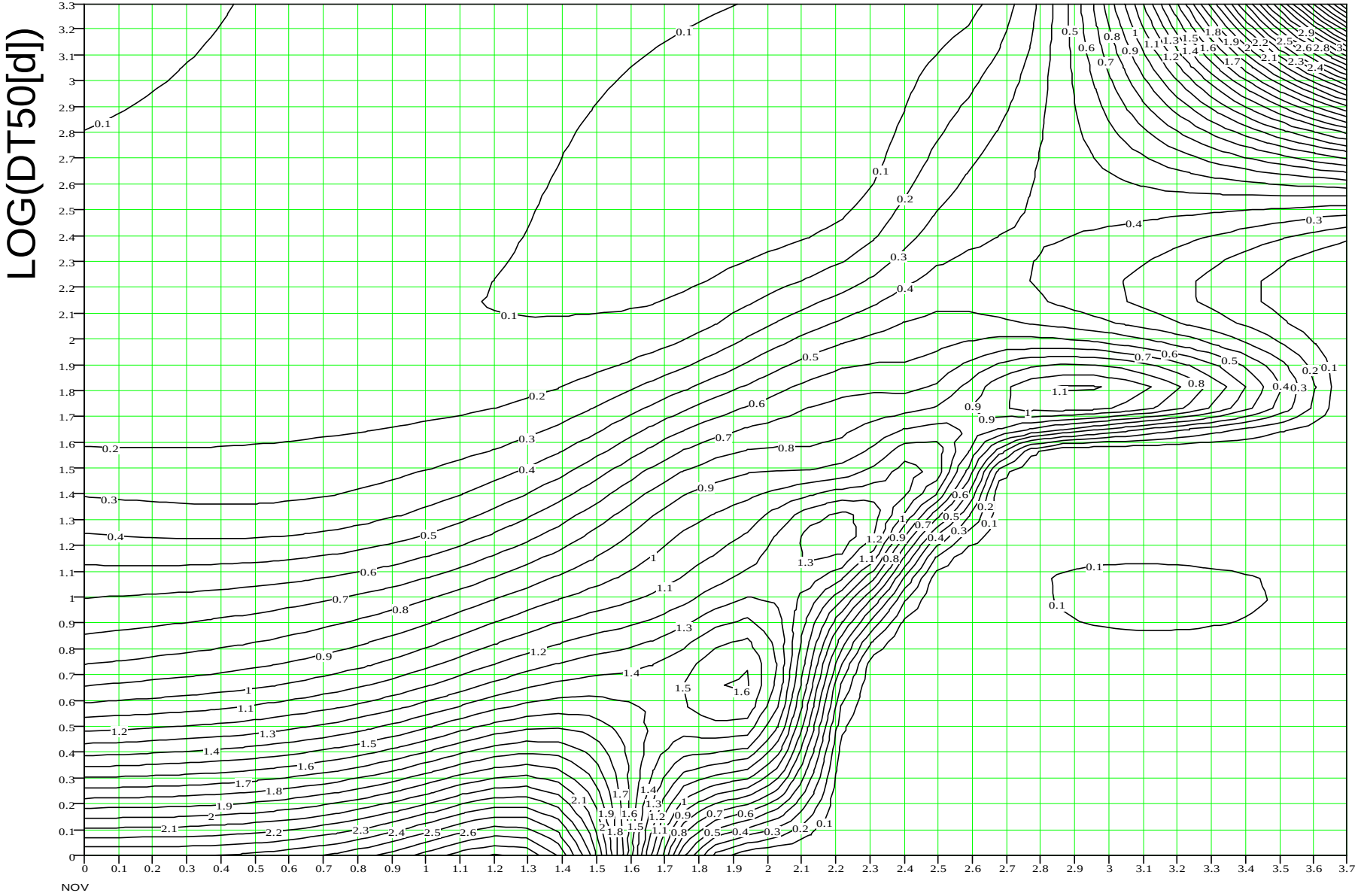


Szenario 15,Mai

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



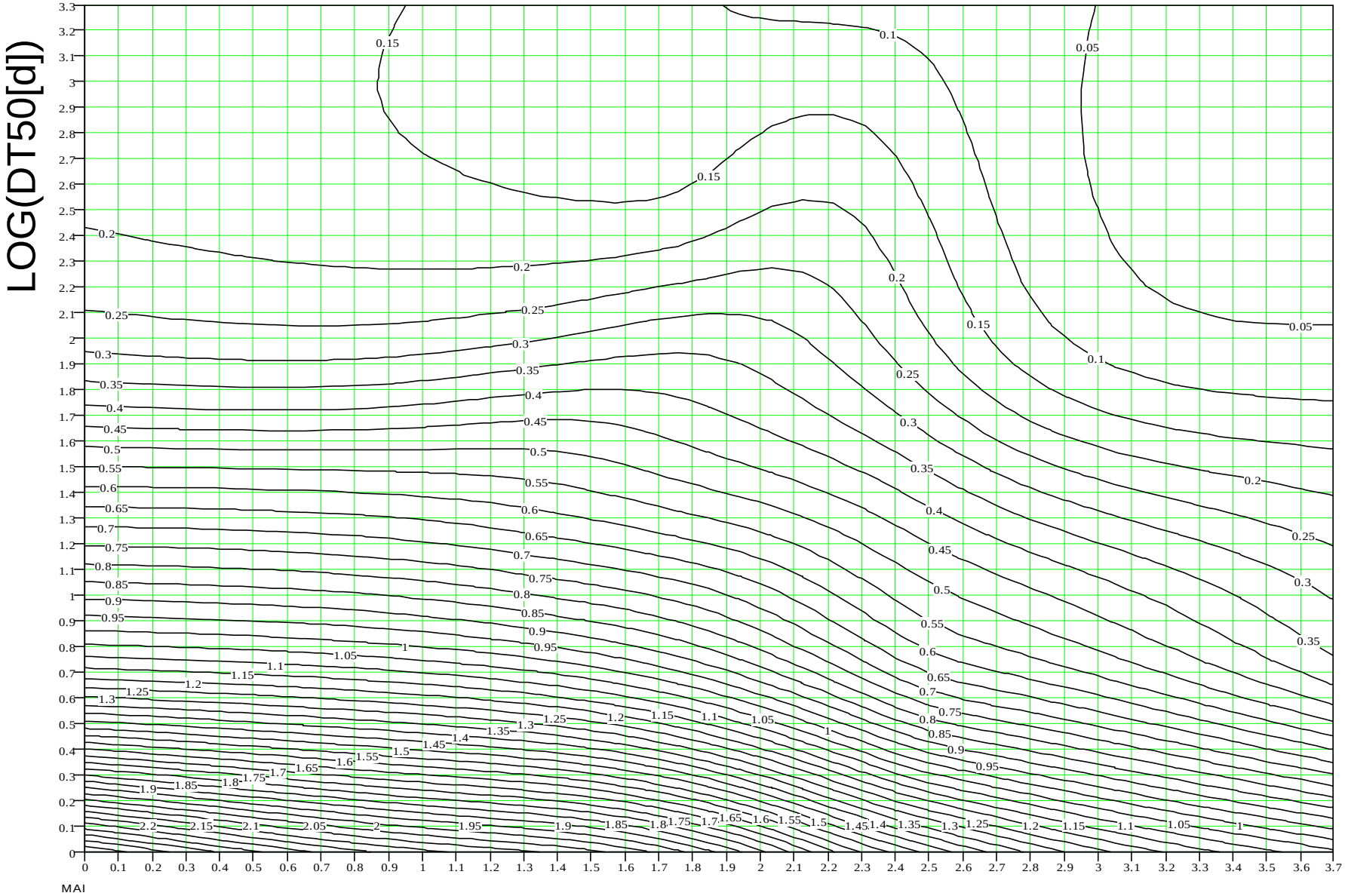
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 15,November

LOG(KOC[L/kg])

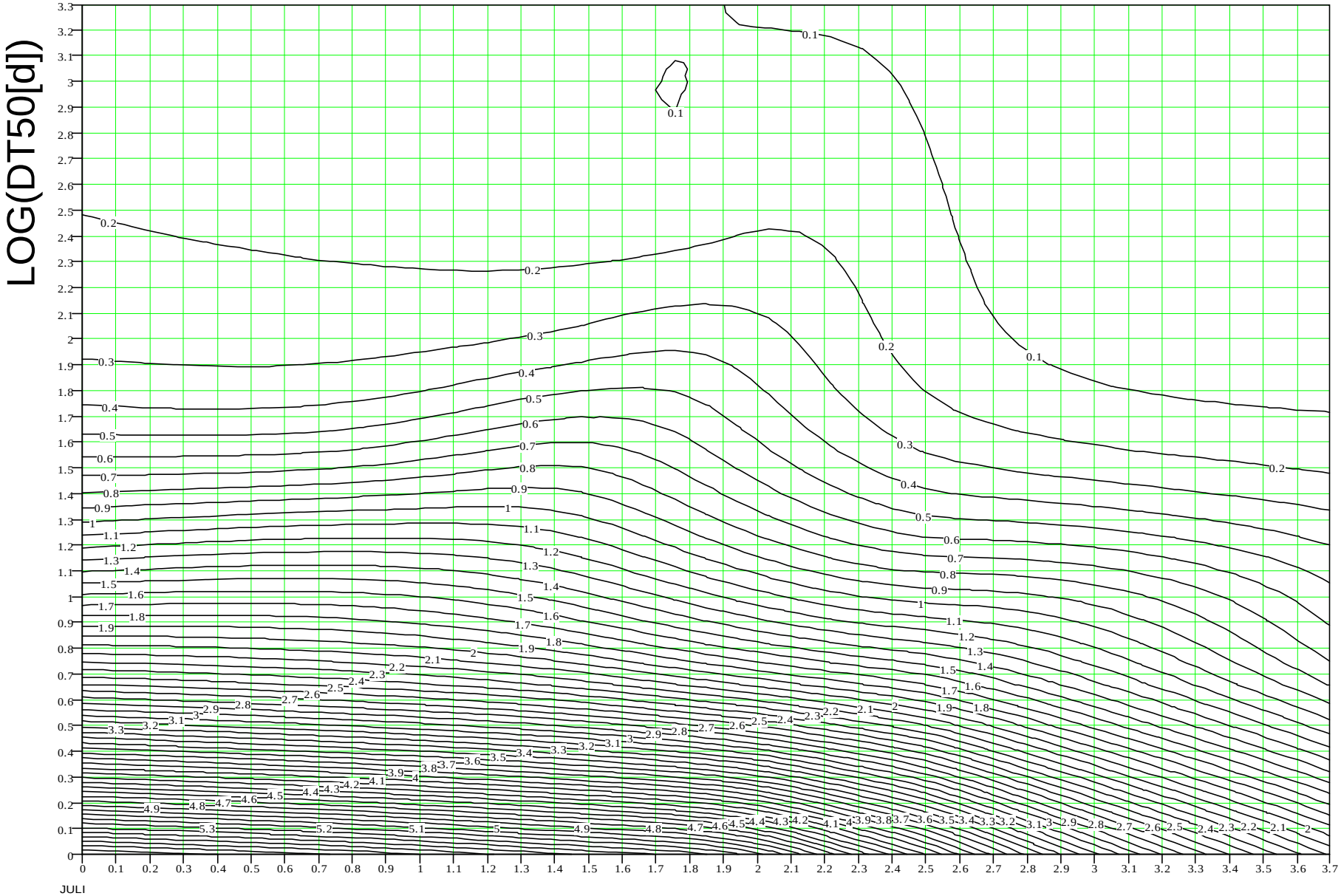
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



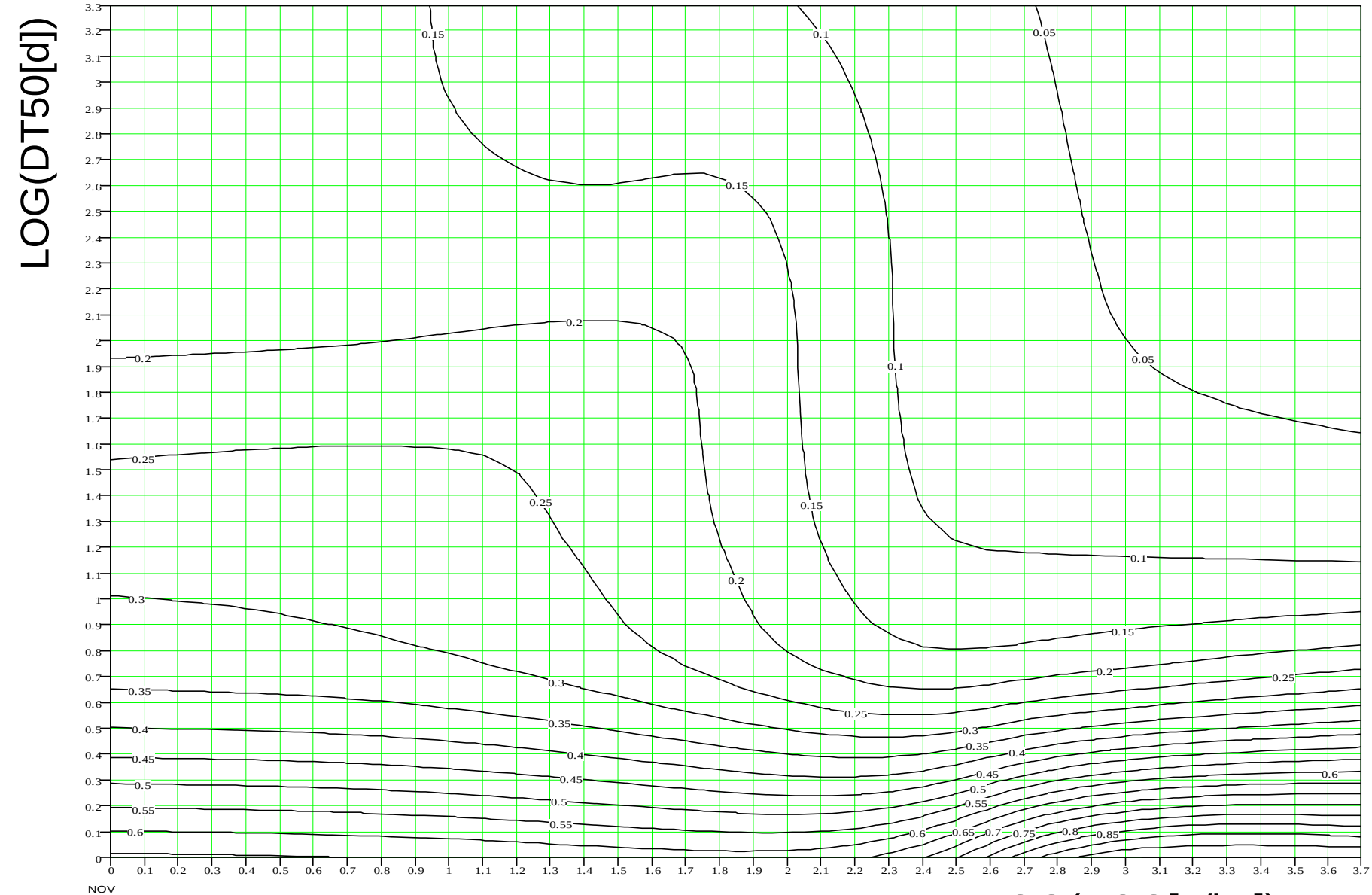
Szenario 16,Mai

LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Schwankungsfaktors S

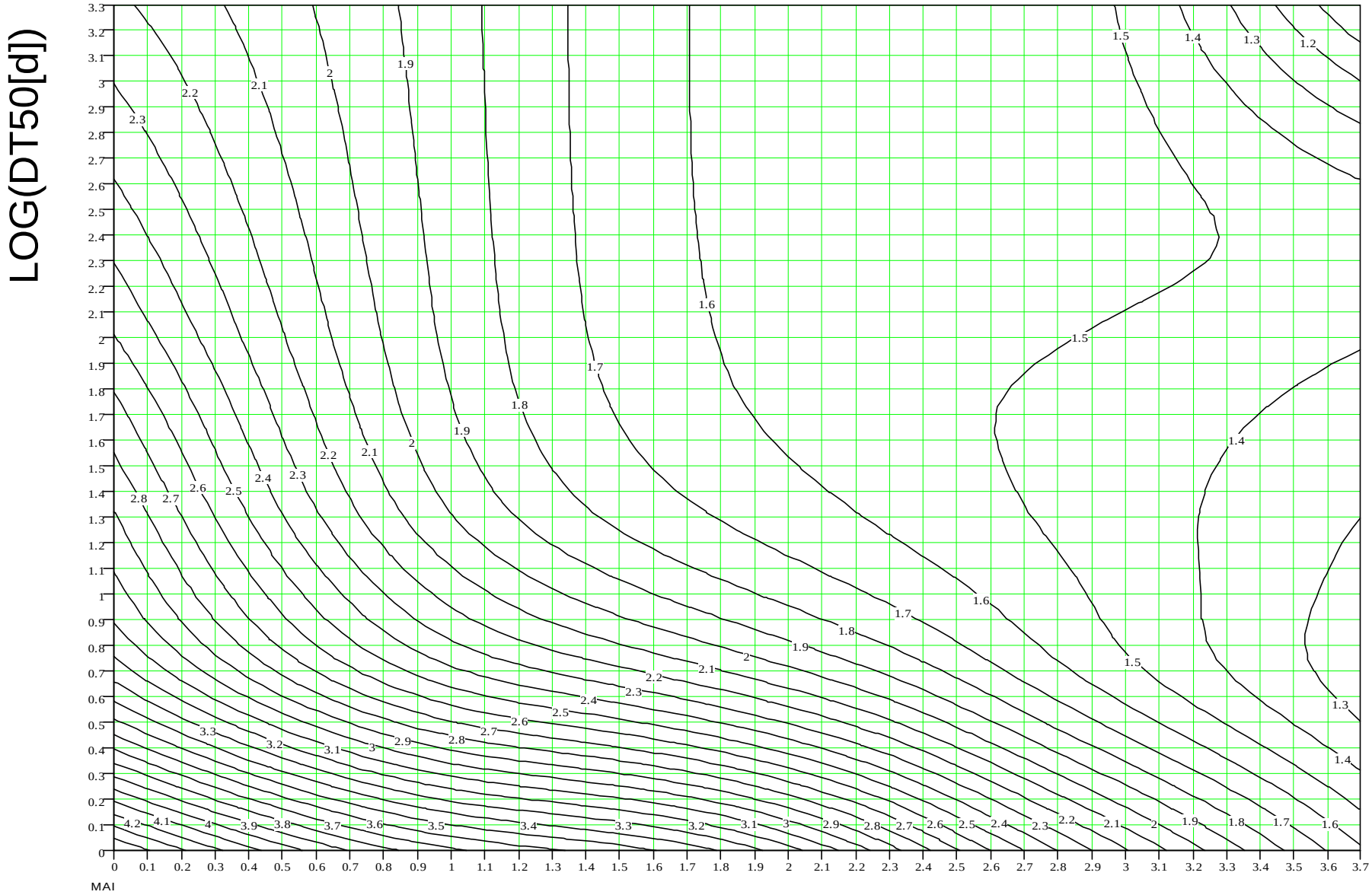


Bestimmung des Schwankungsfaktors S



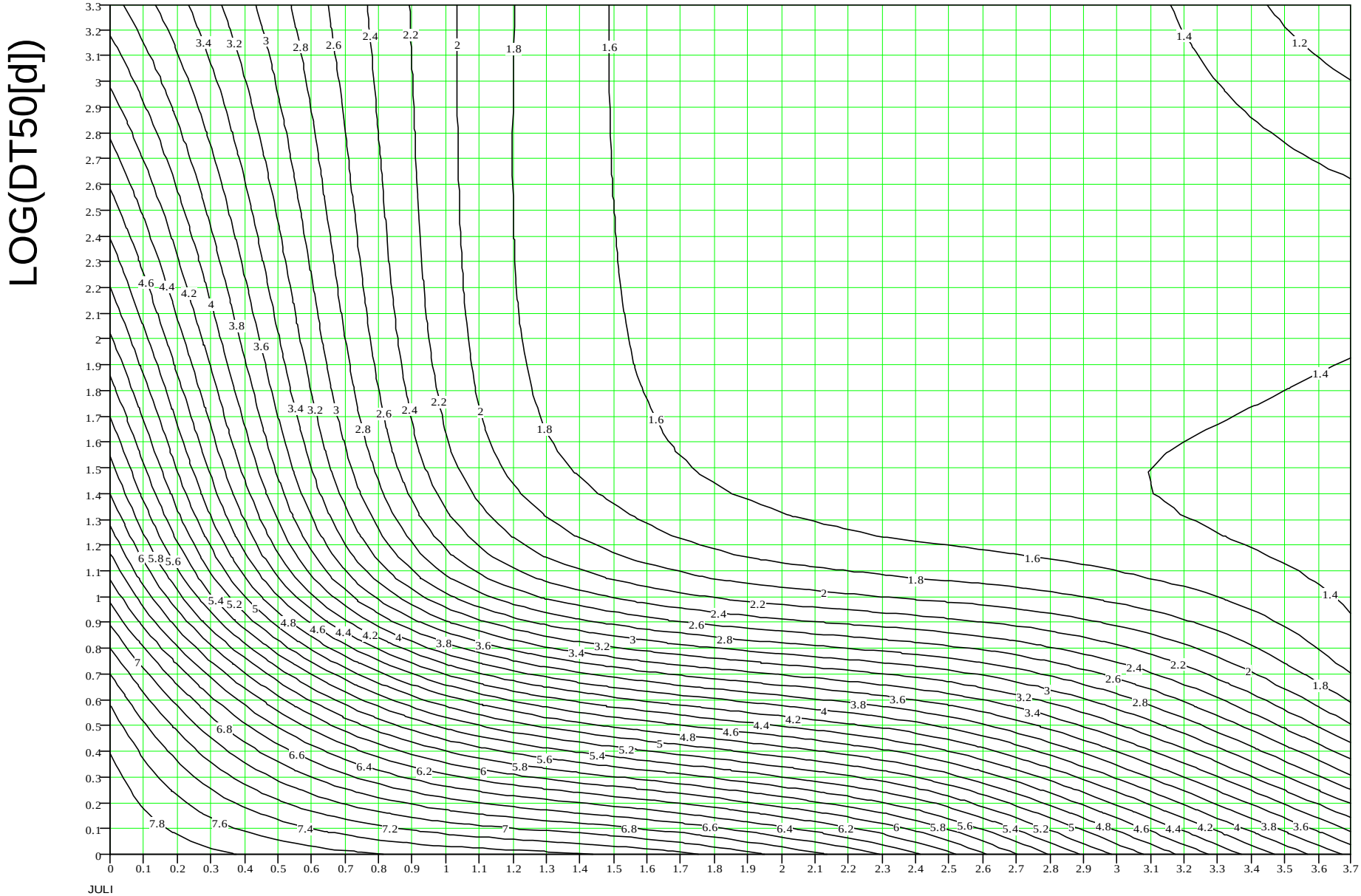
Szenario 16,November

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



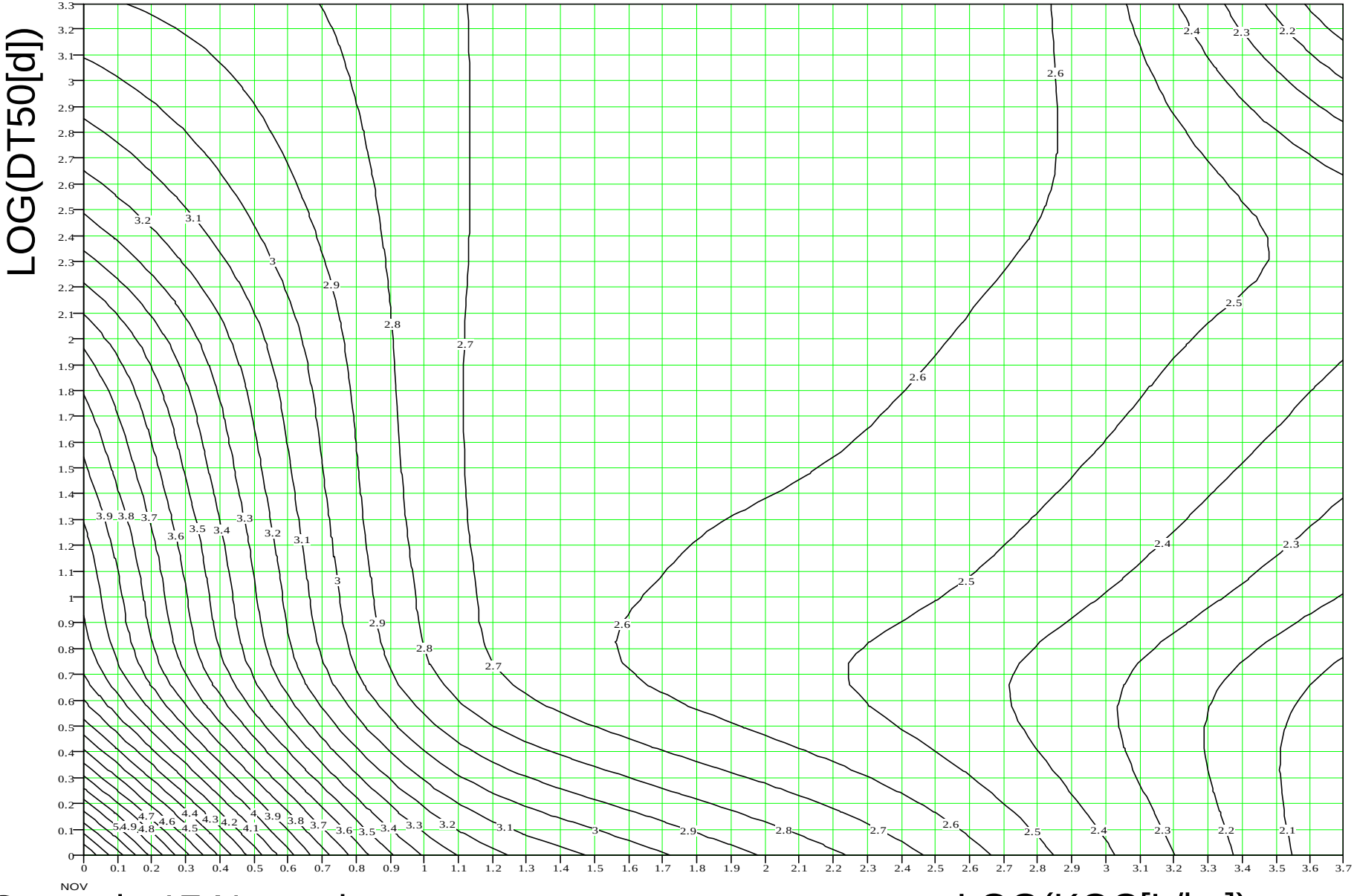
Szenario 17,Mai

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



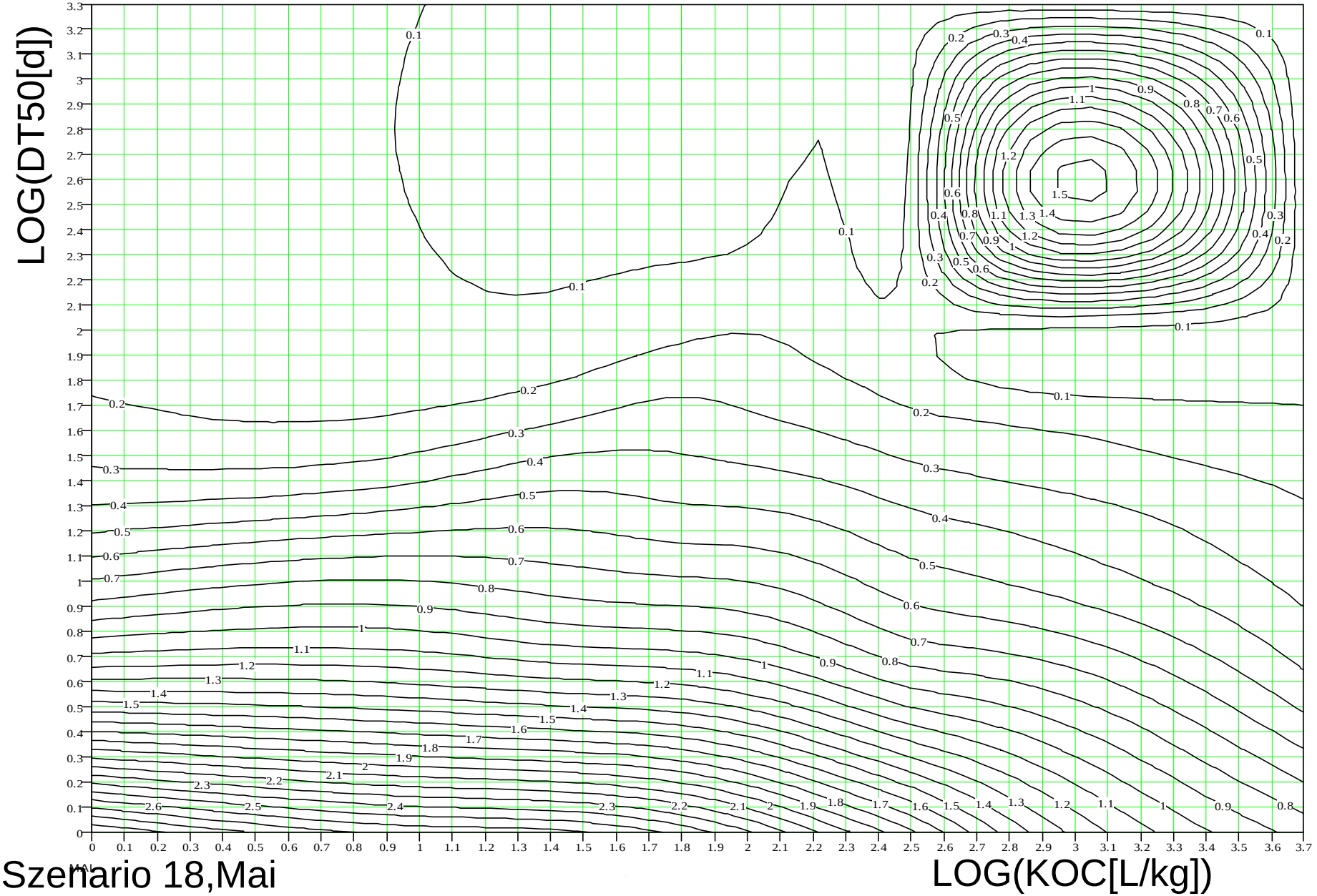
Szenario 17,Juli

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



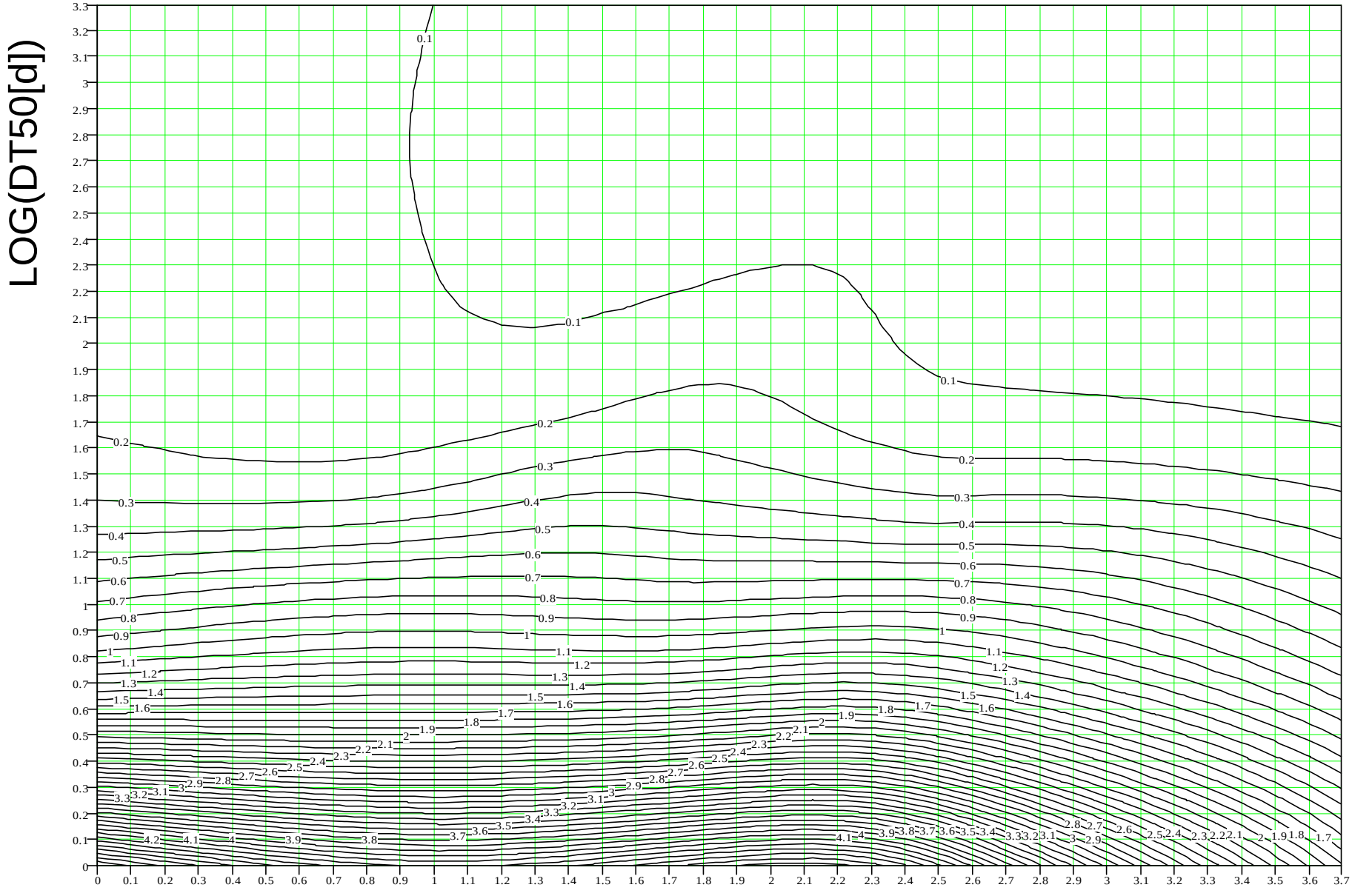
Szenario 17,November

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



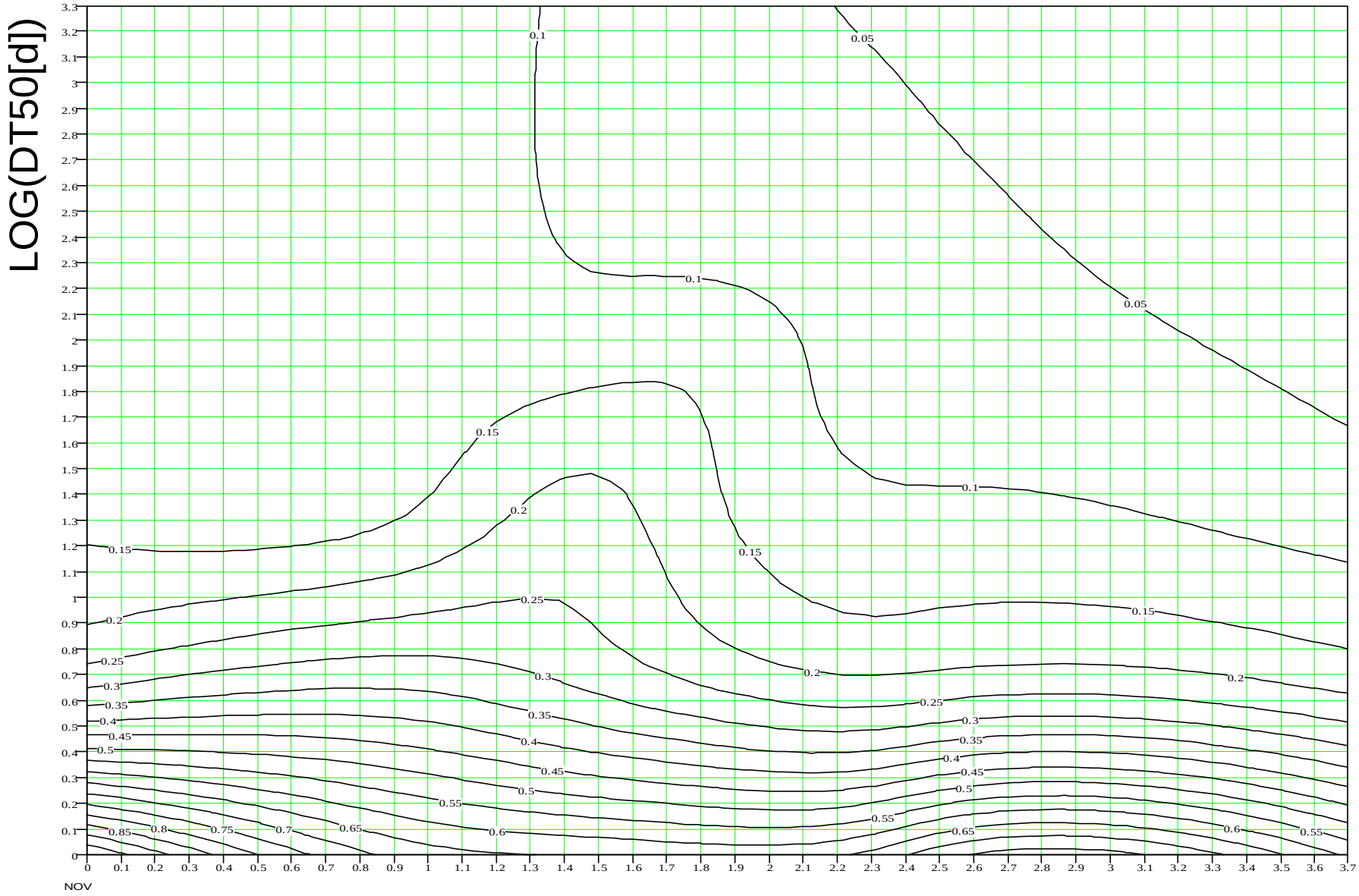
Szenario 18,Mai

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



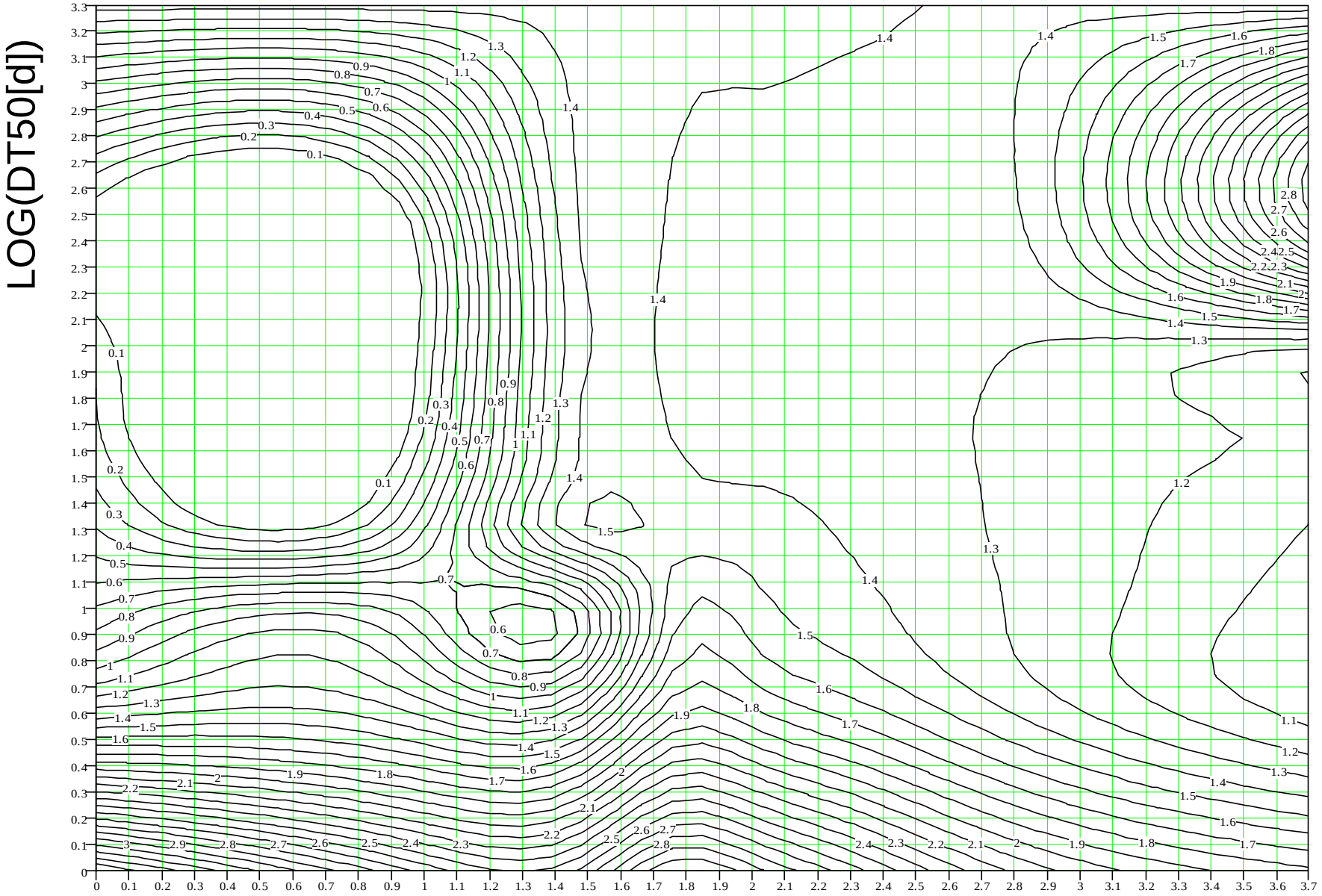
Szenario 18,Juli

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 18,November

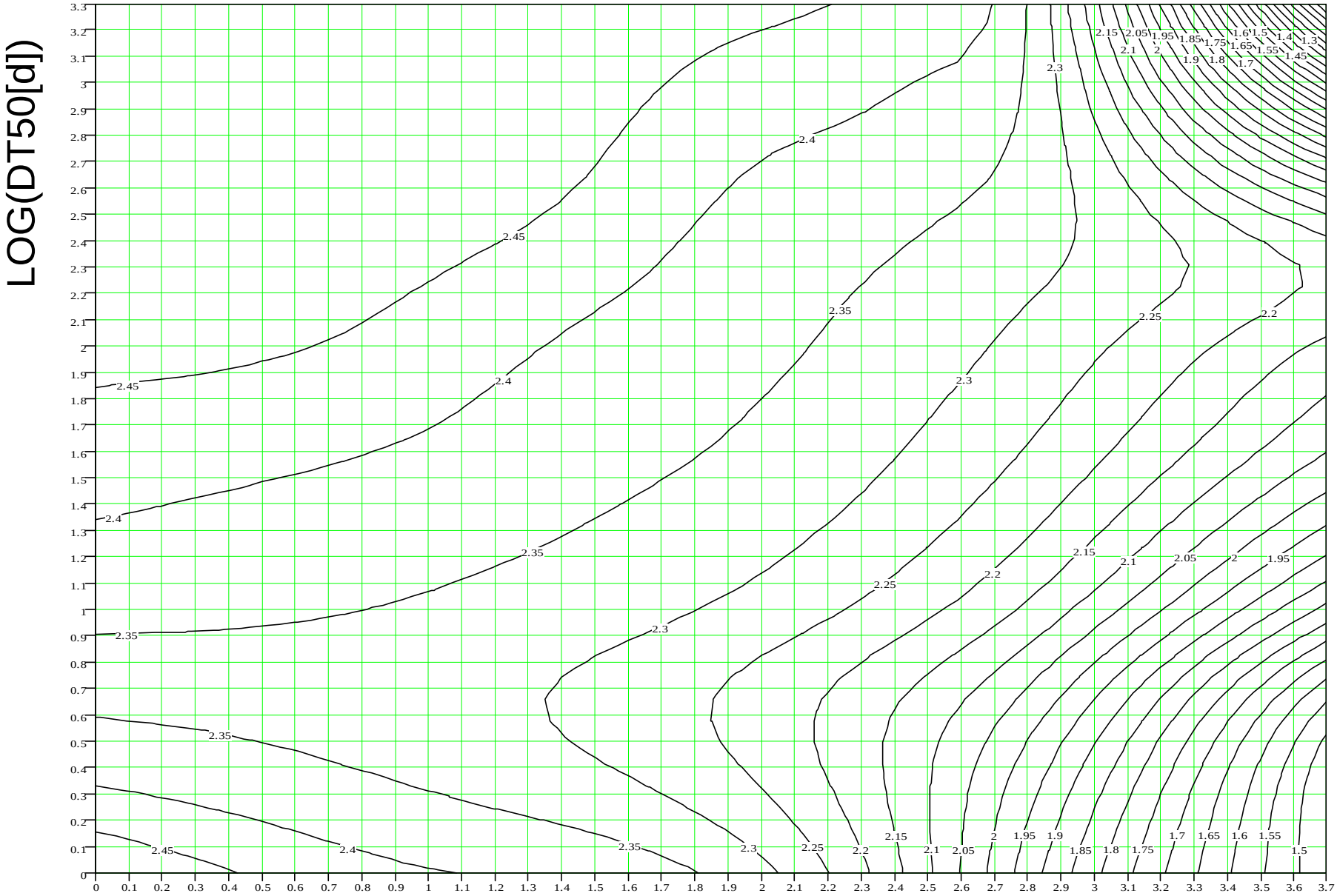
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



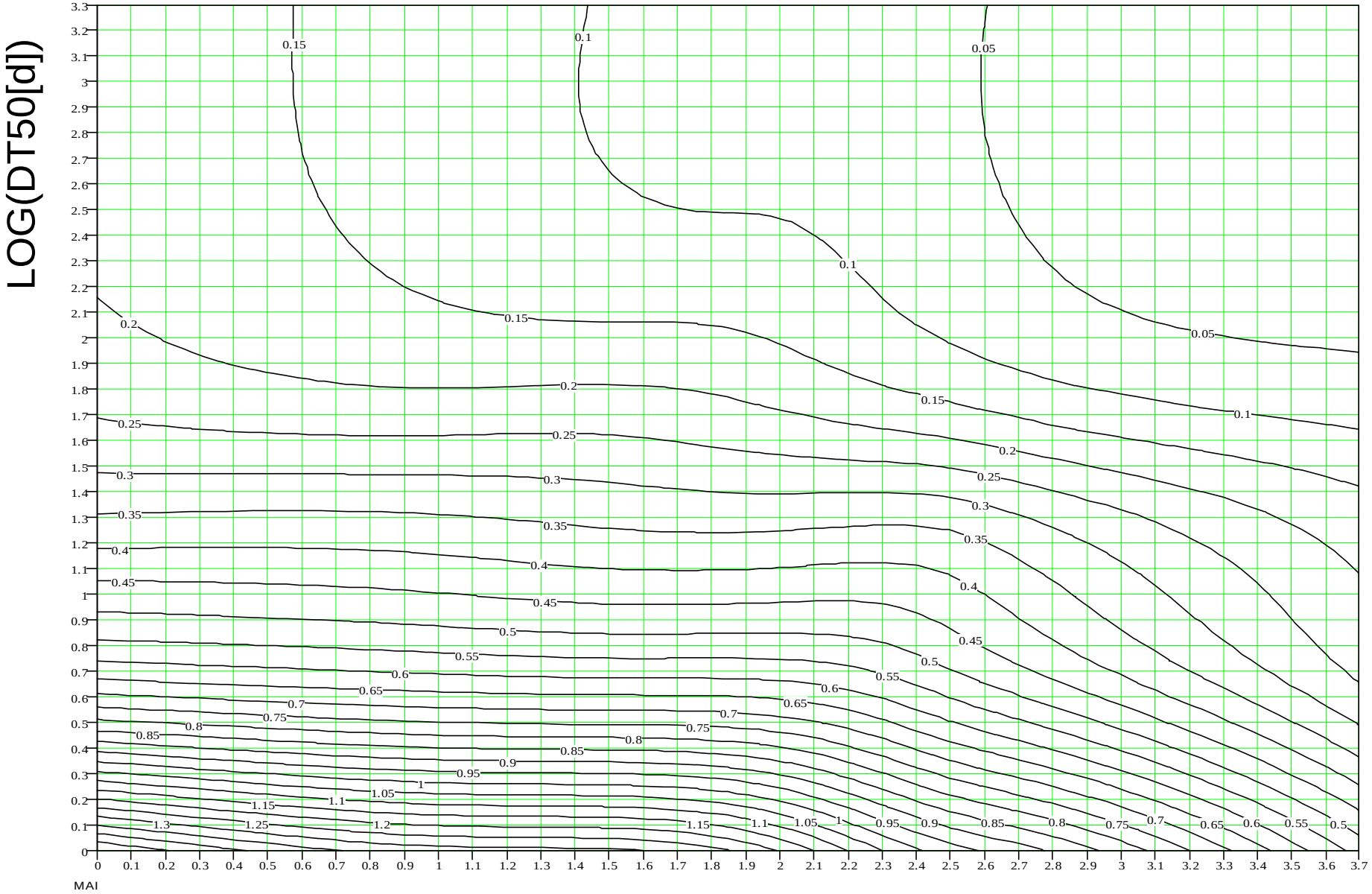
Szenario 19,Mai

Bestimmung des Schwankungsfaktors S

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



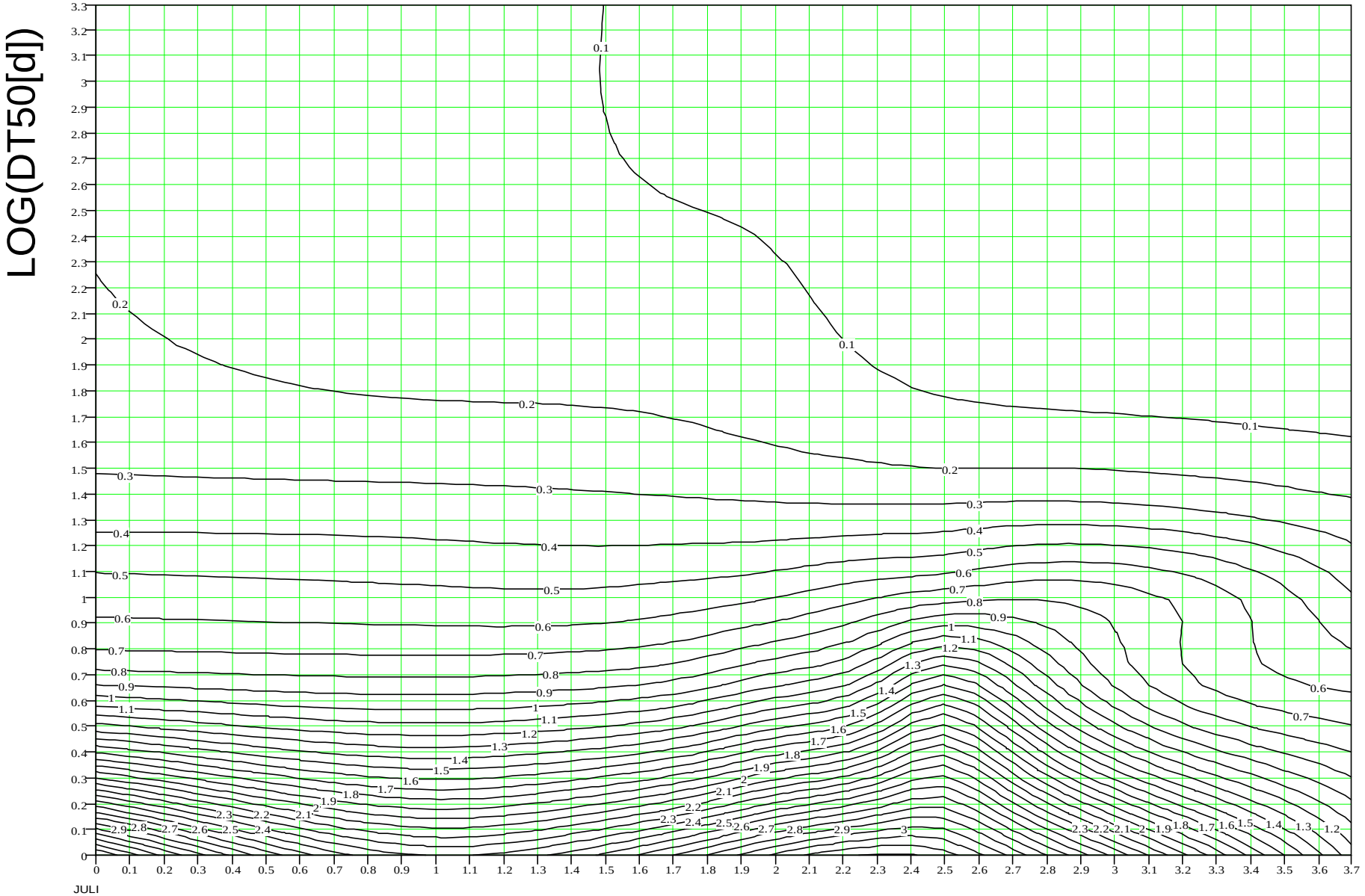
Bestimmung des Schwankungsfaktors S



Szenario 20,Mai

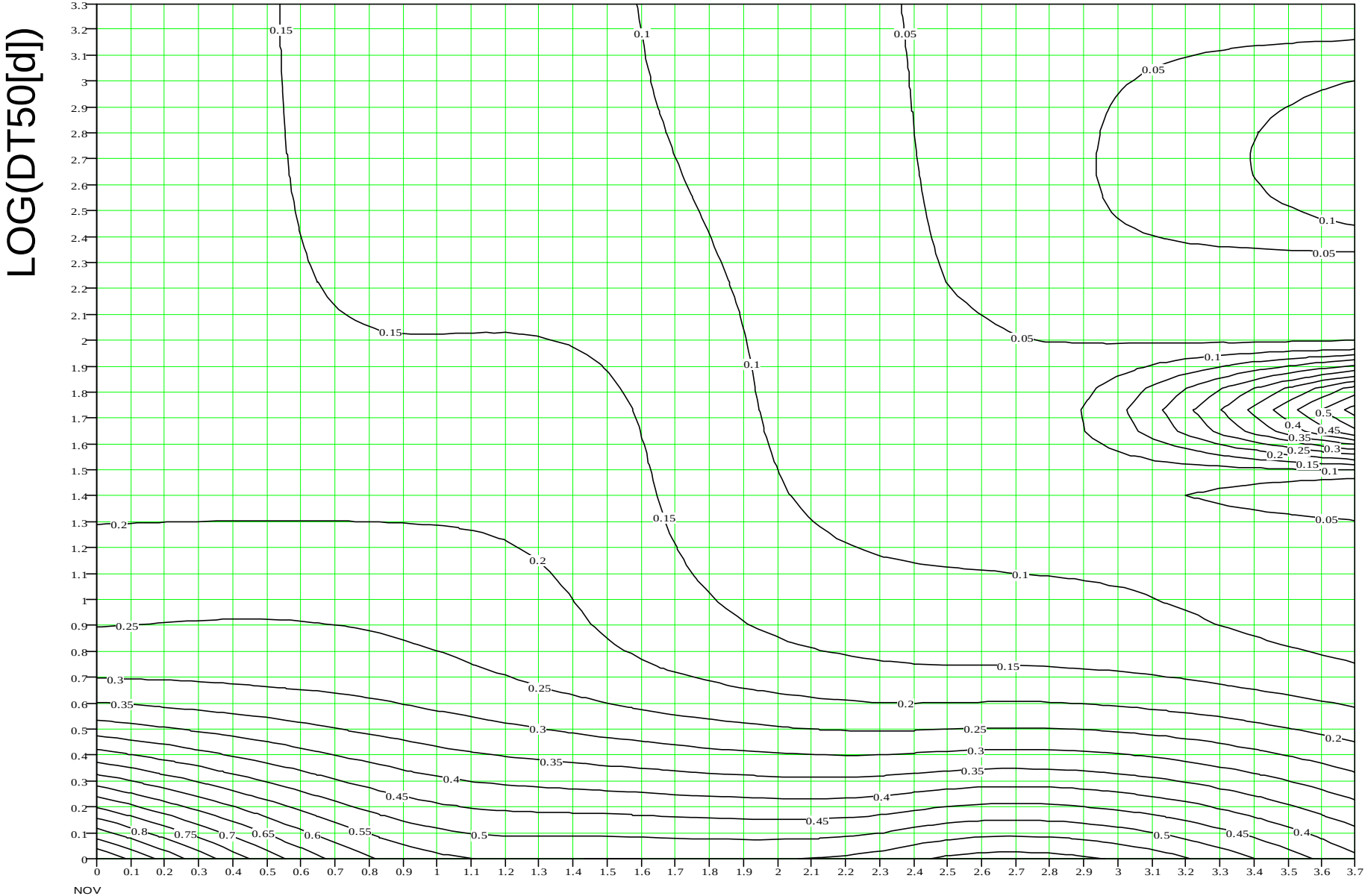
LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



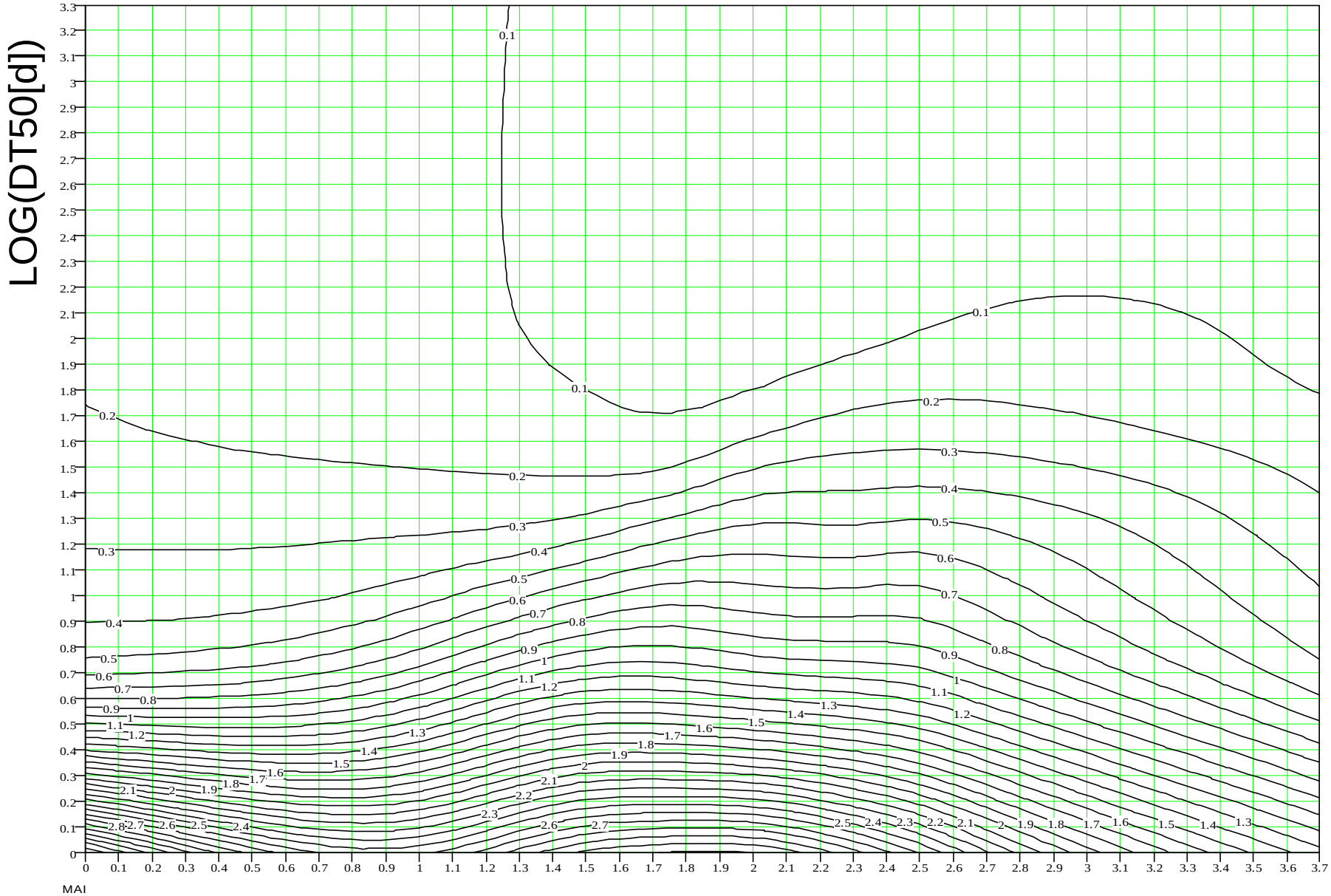
Szenario 20,Juli

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



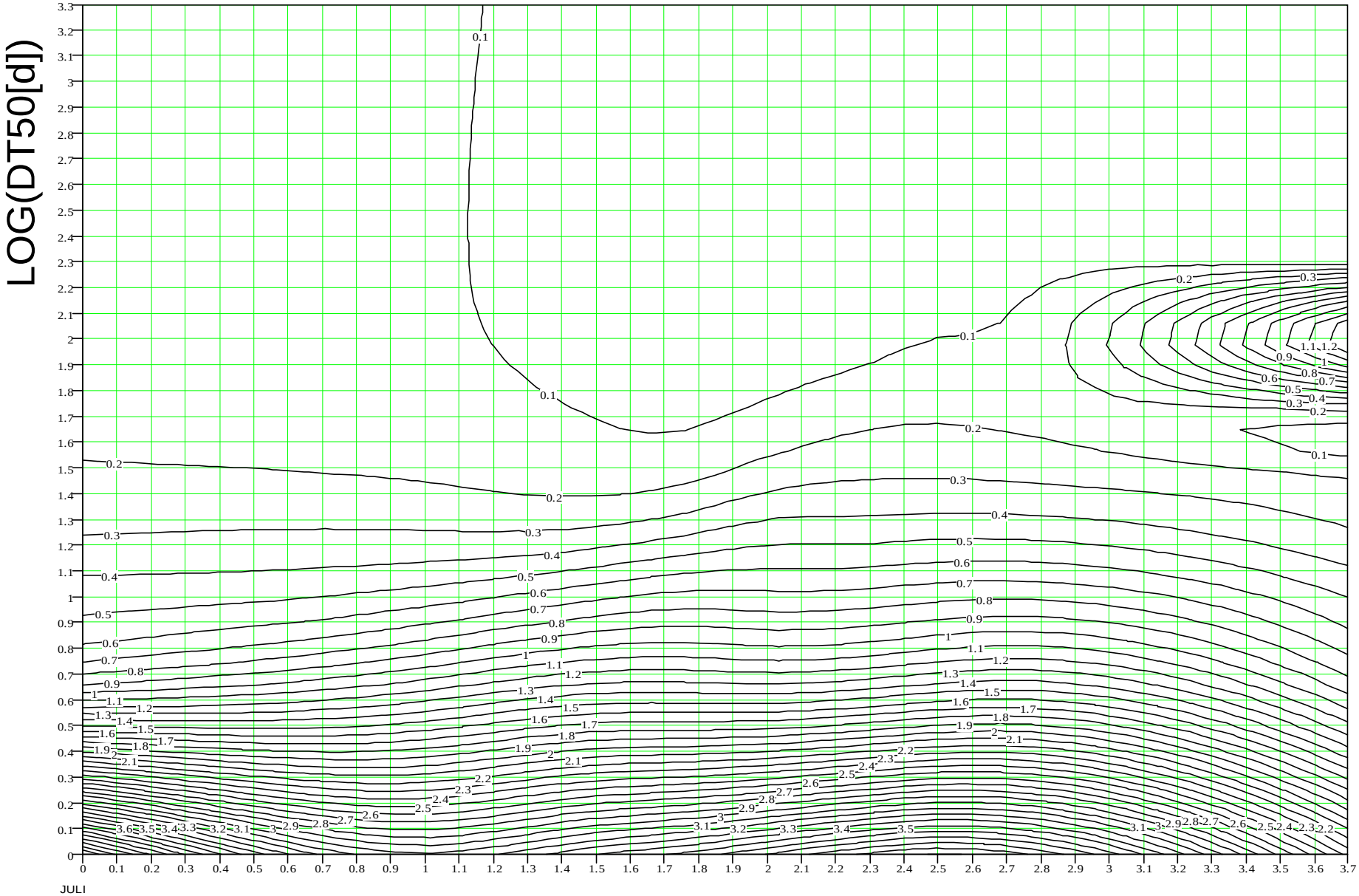
Szenario 20,November

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



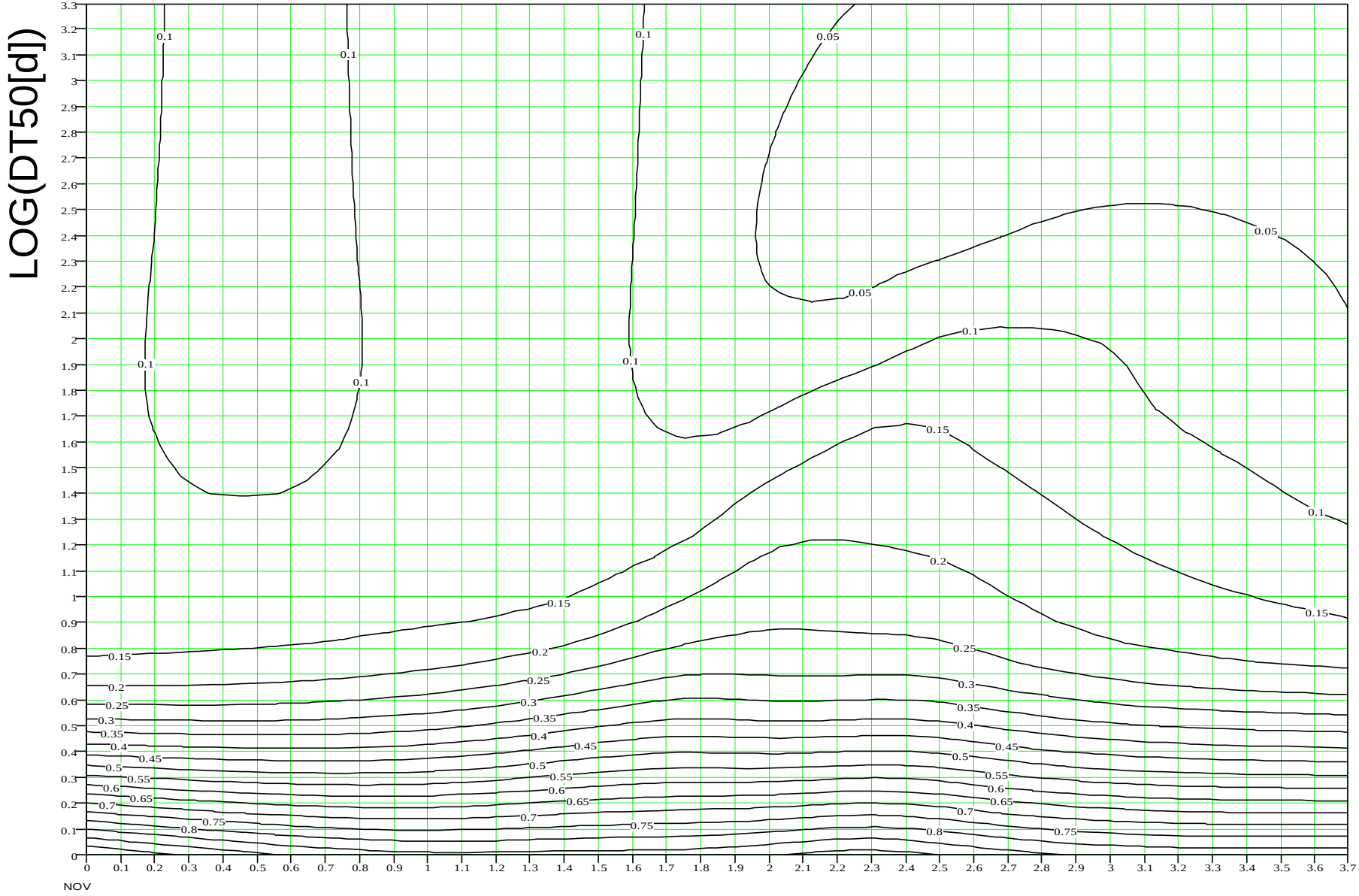
Szenario 21,Mai

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



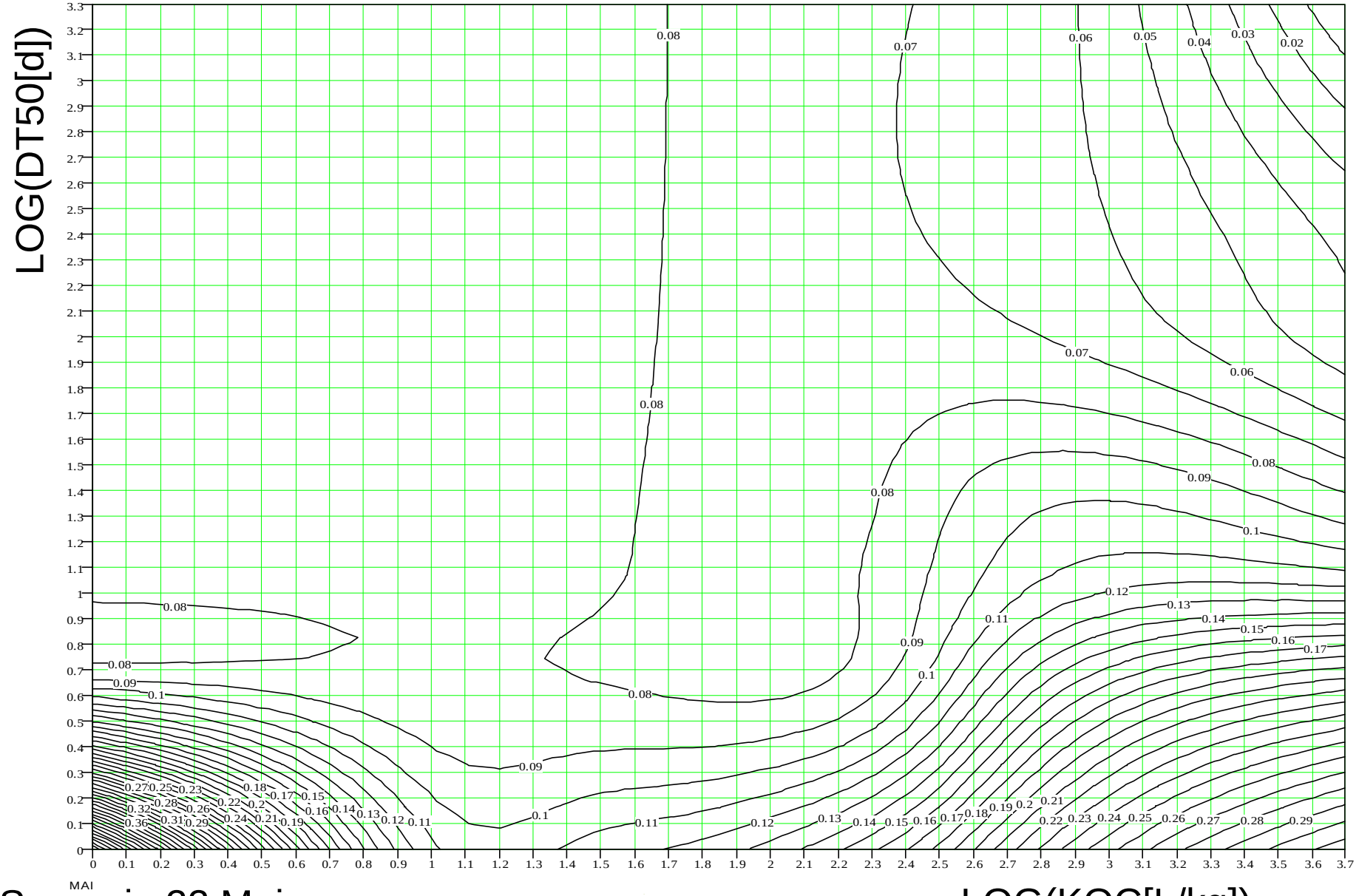
Szenario 21,Juli

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



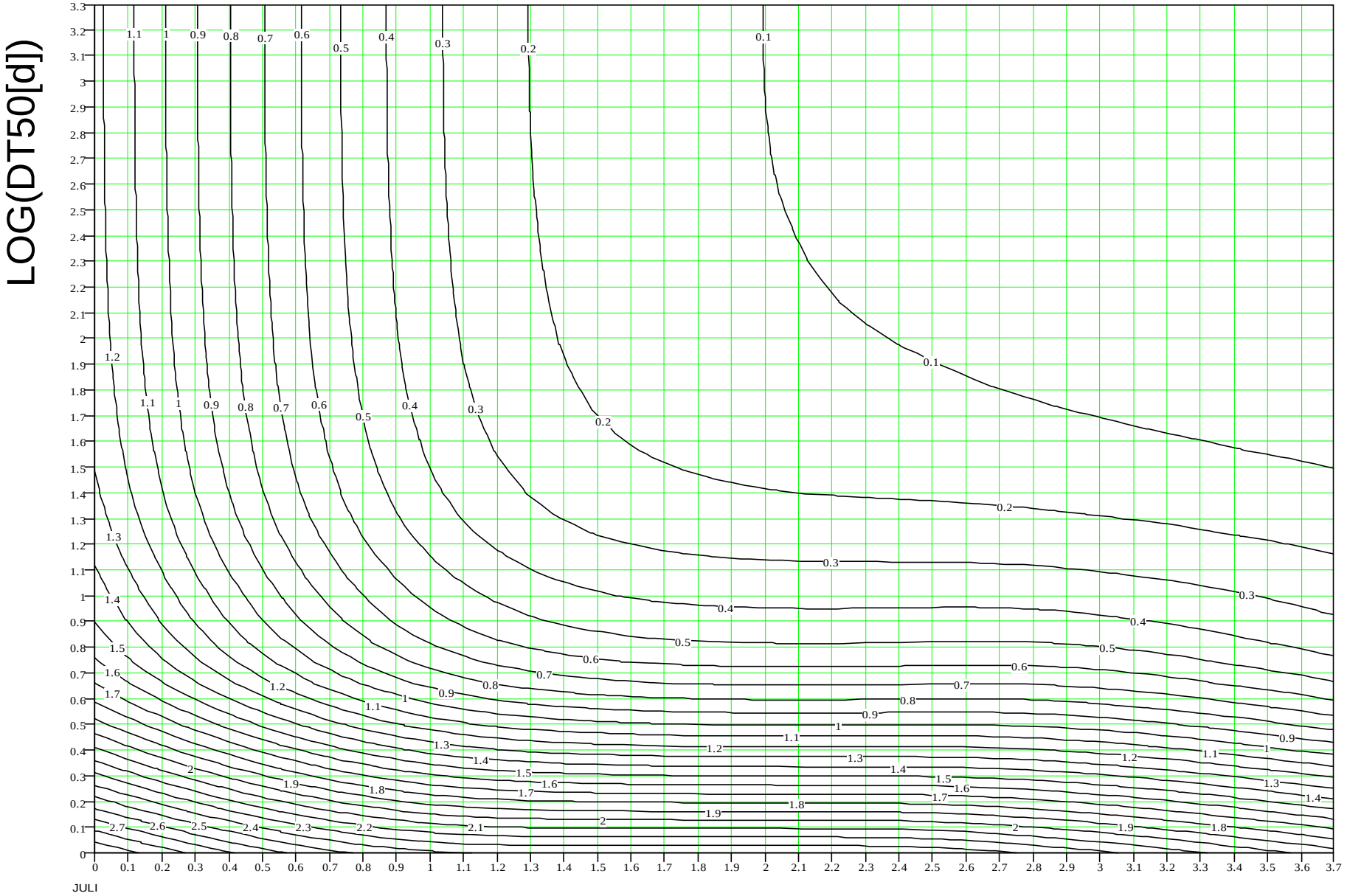
Szenario 21,November

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



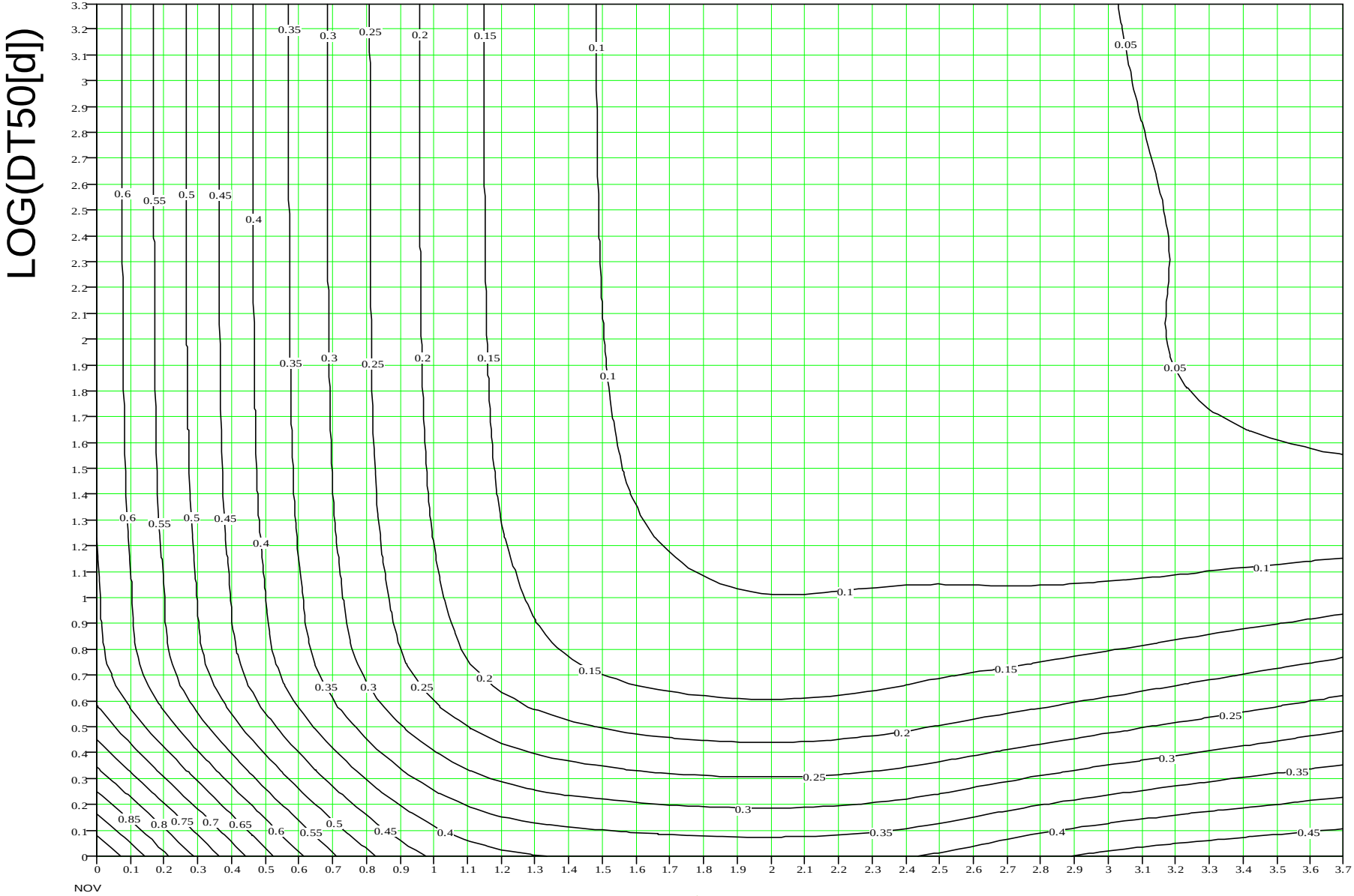
Szenario 22,Mai

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



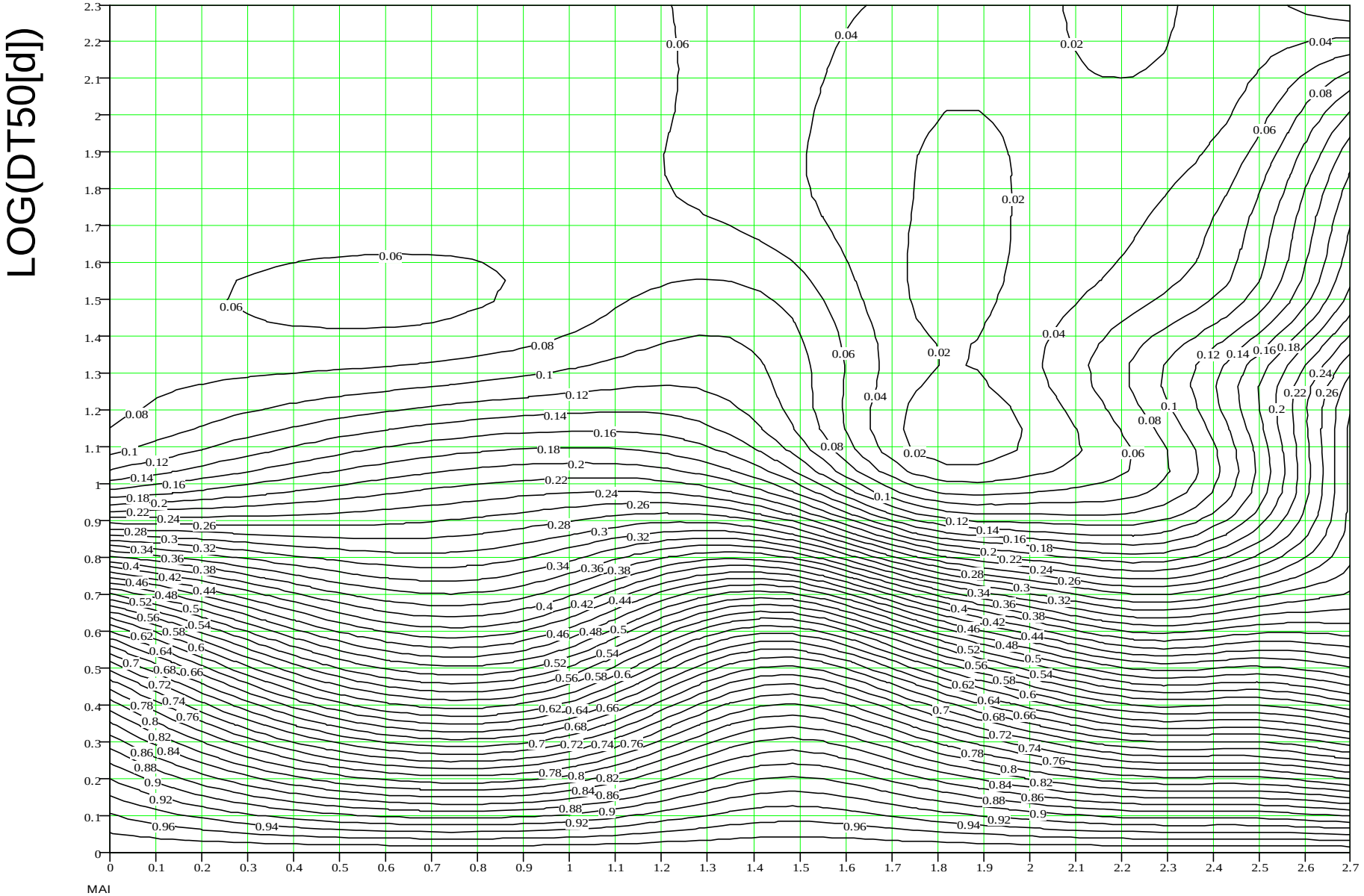
Szenario 22,Juli

Bestimmung des Schwankungsfaktors S



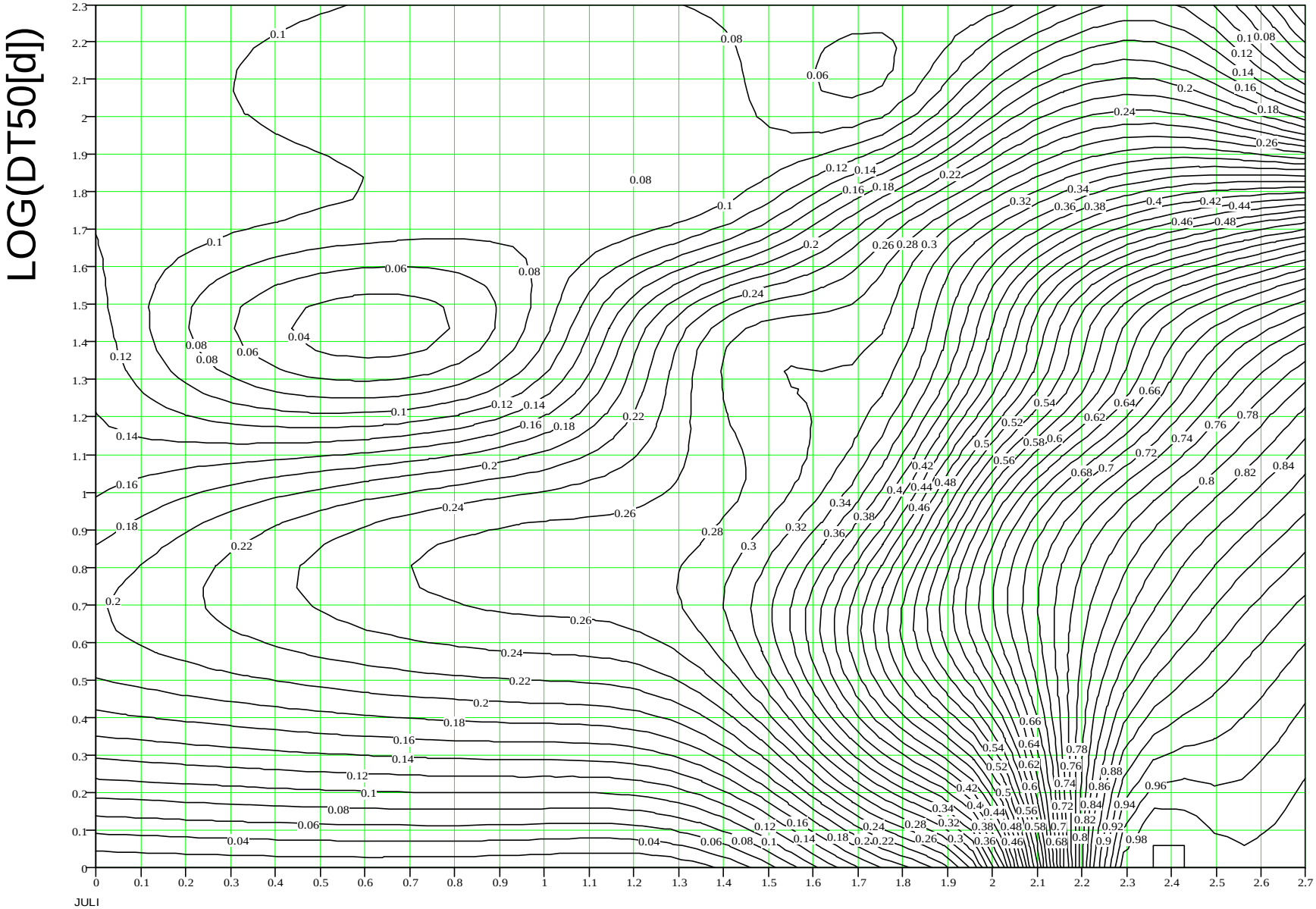
Szenario 22,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



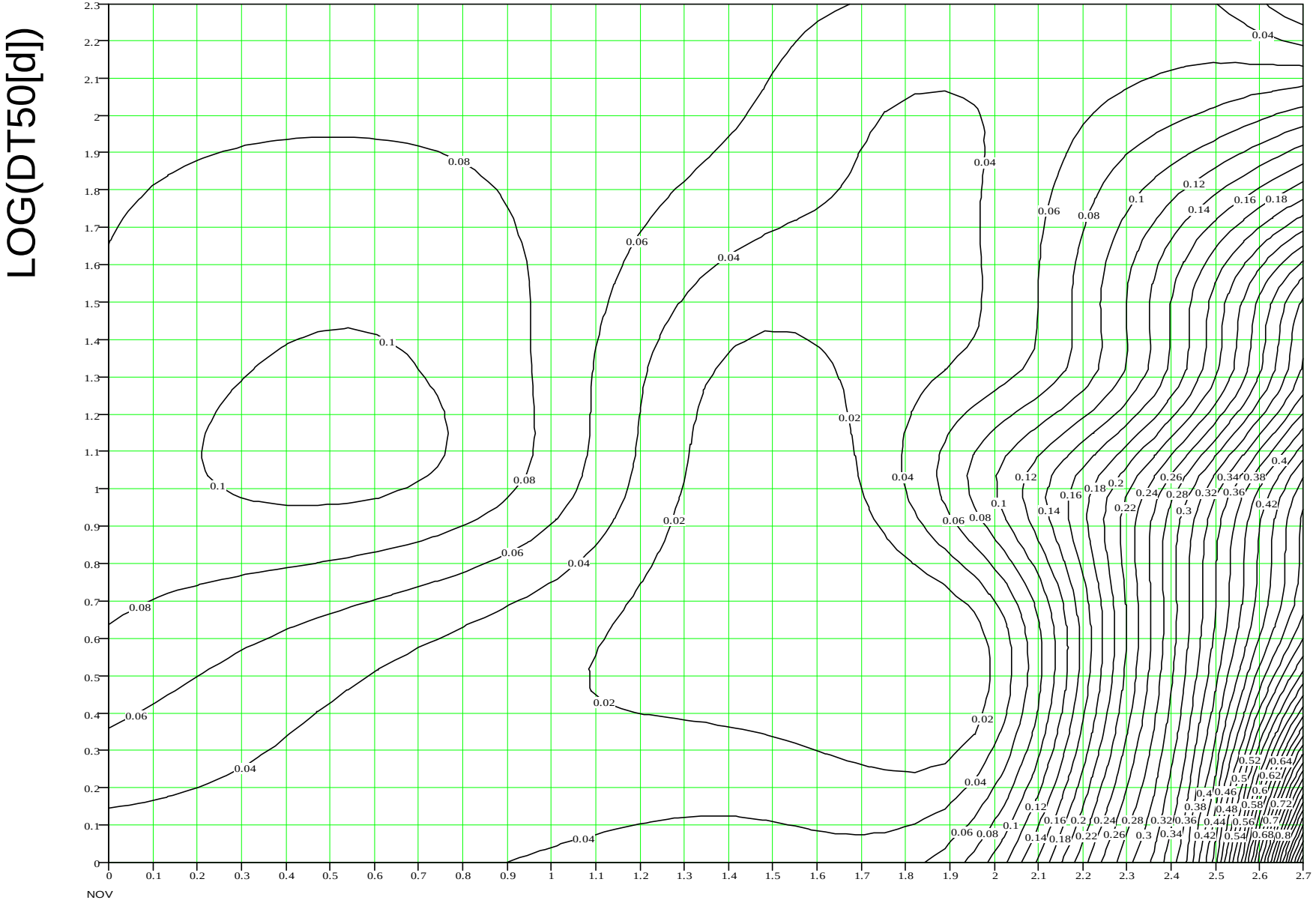
Szenario 1, Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



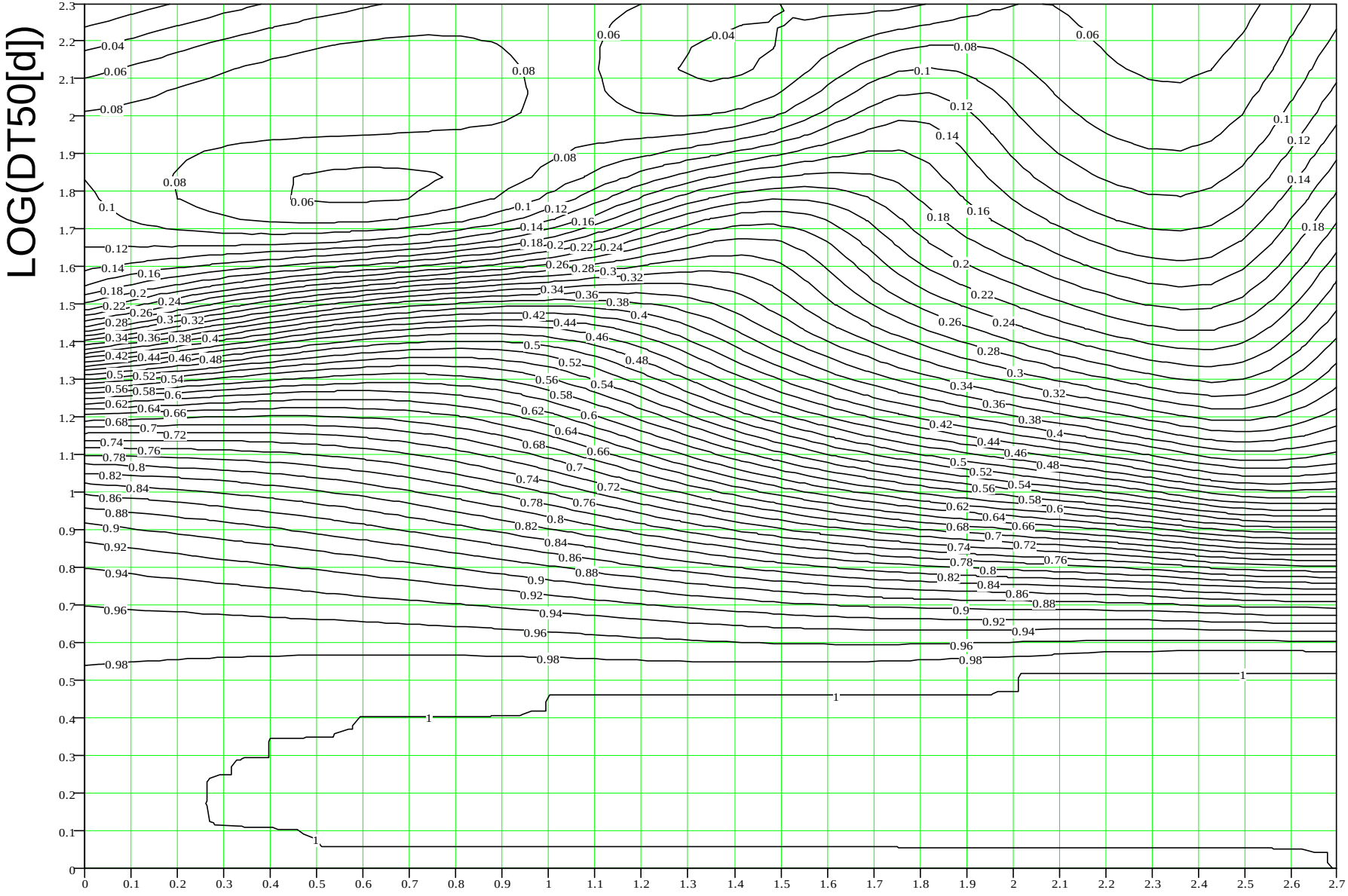
Szenario 1, Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



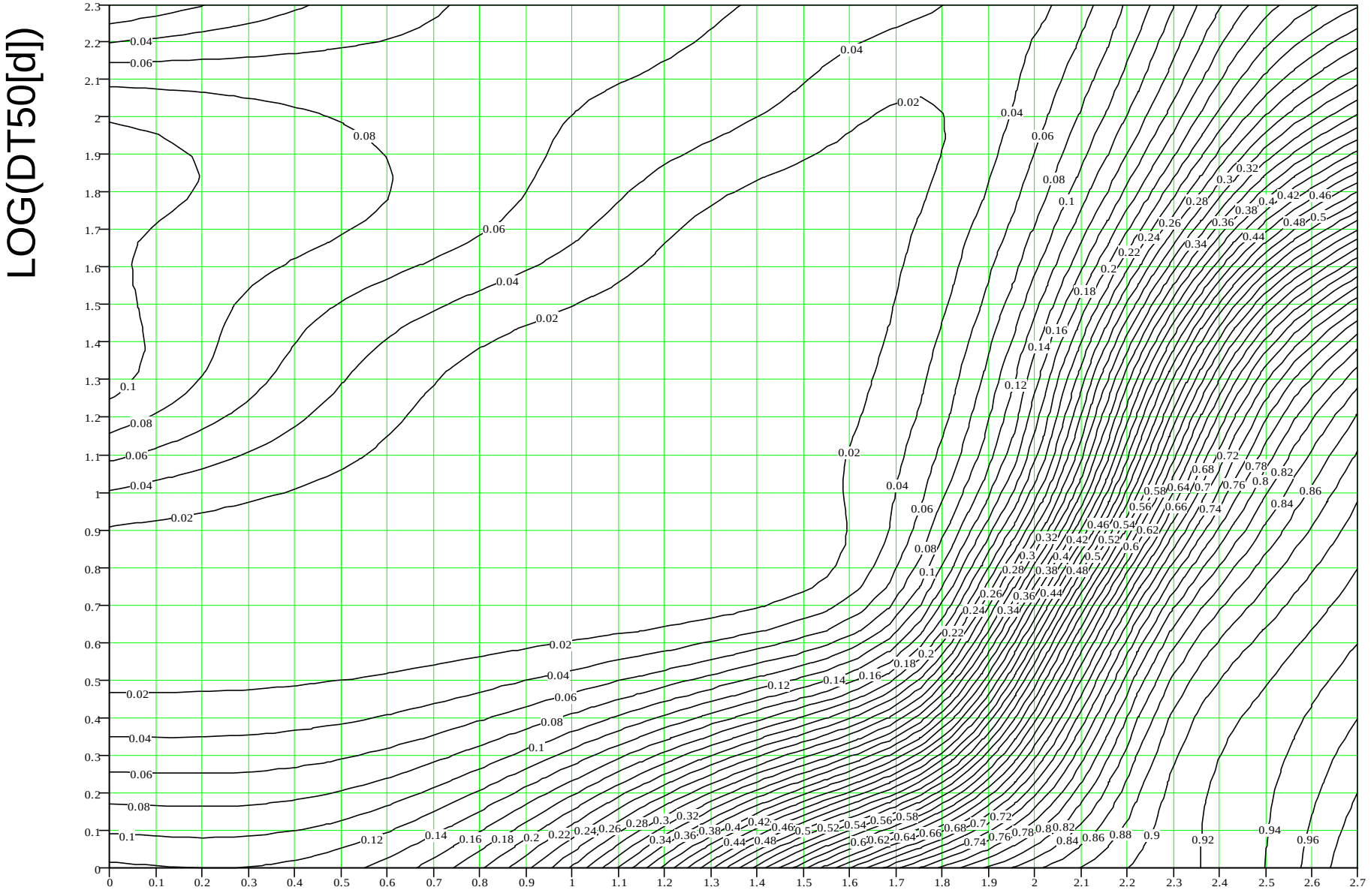
Szenario 1, November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



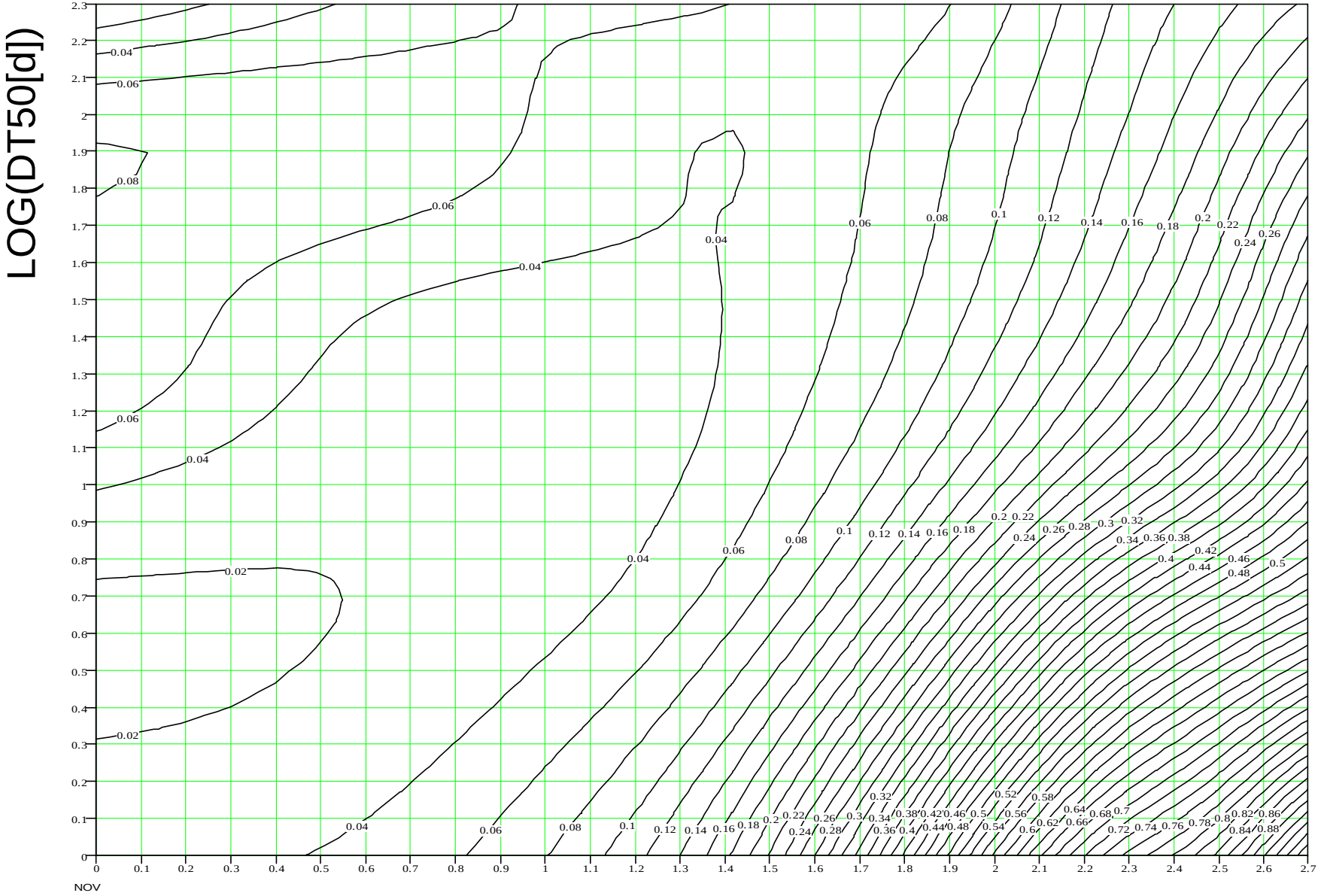
Szenario 2,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



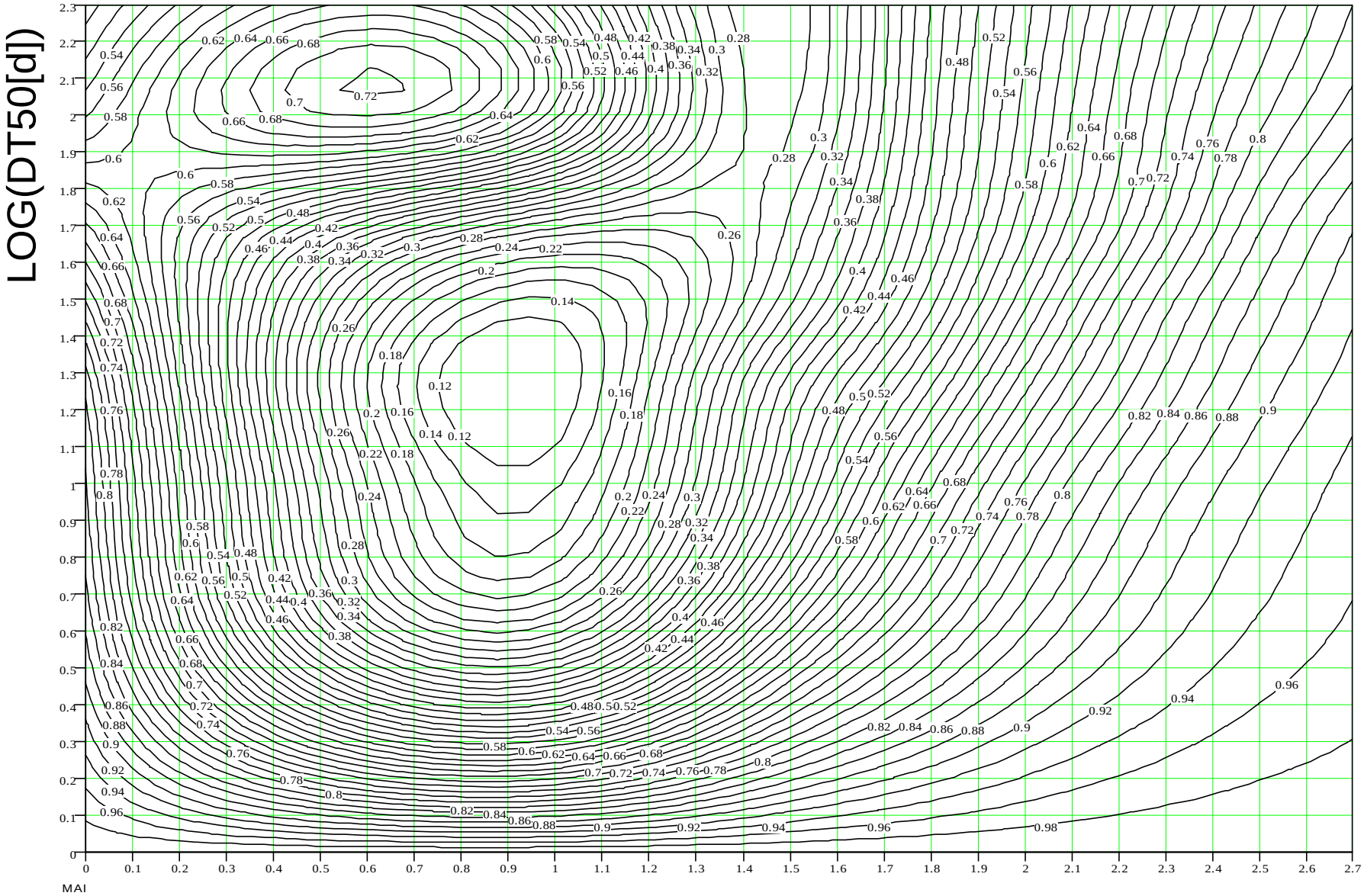
Szenario 2,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



Szenario 2, November

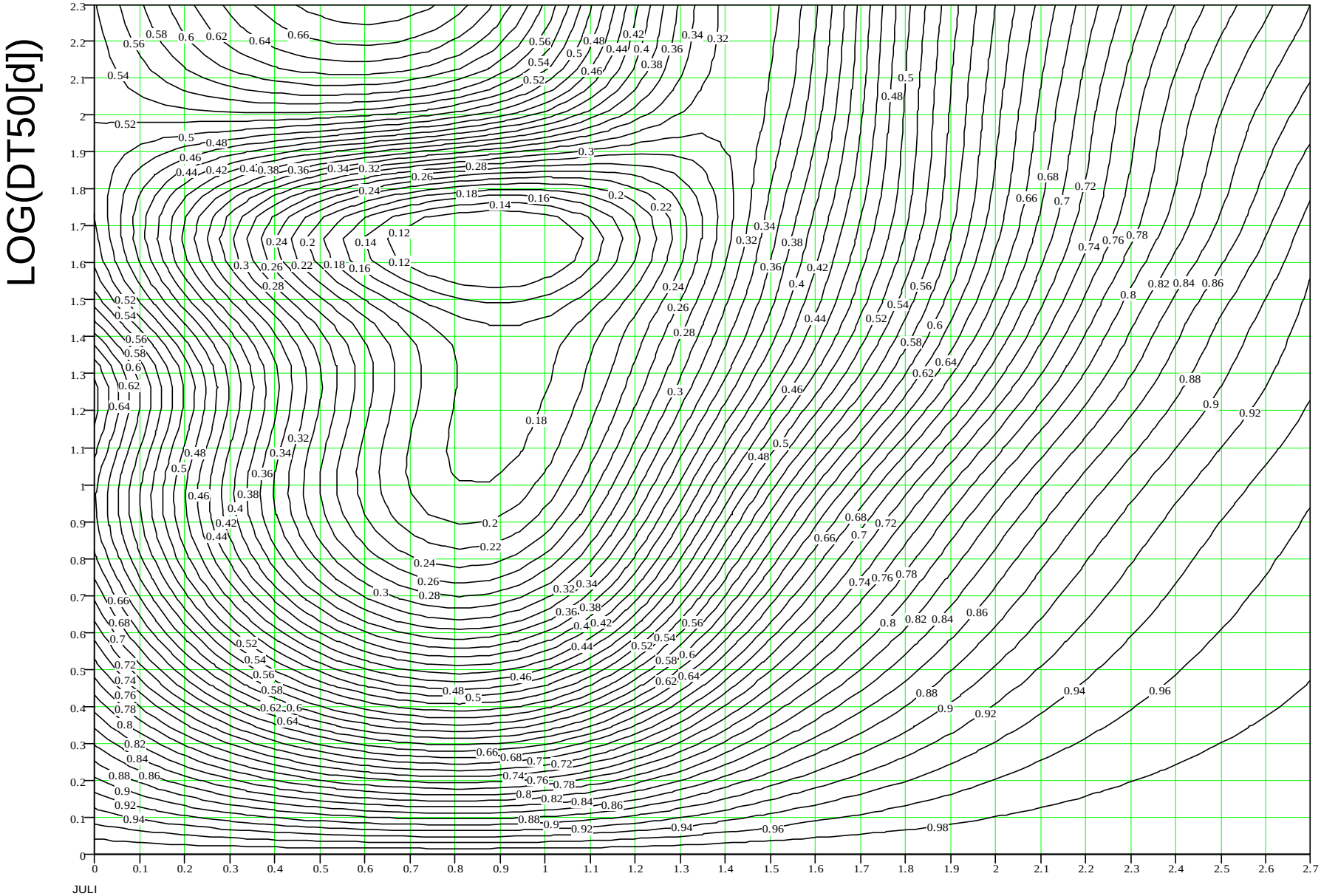
Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-6}$)



Szenario 3,Mai

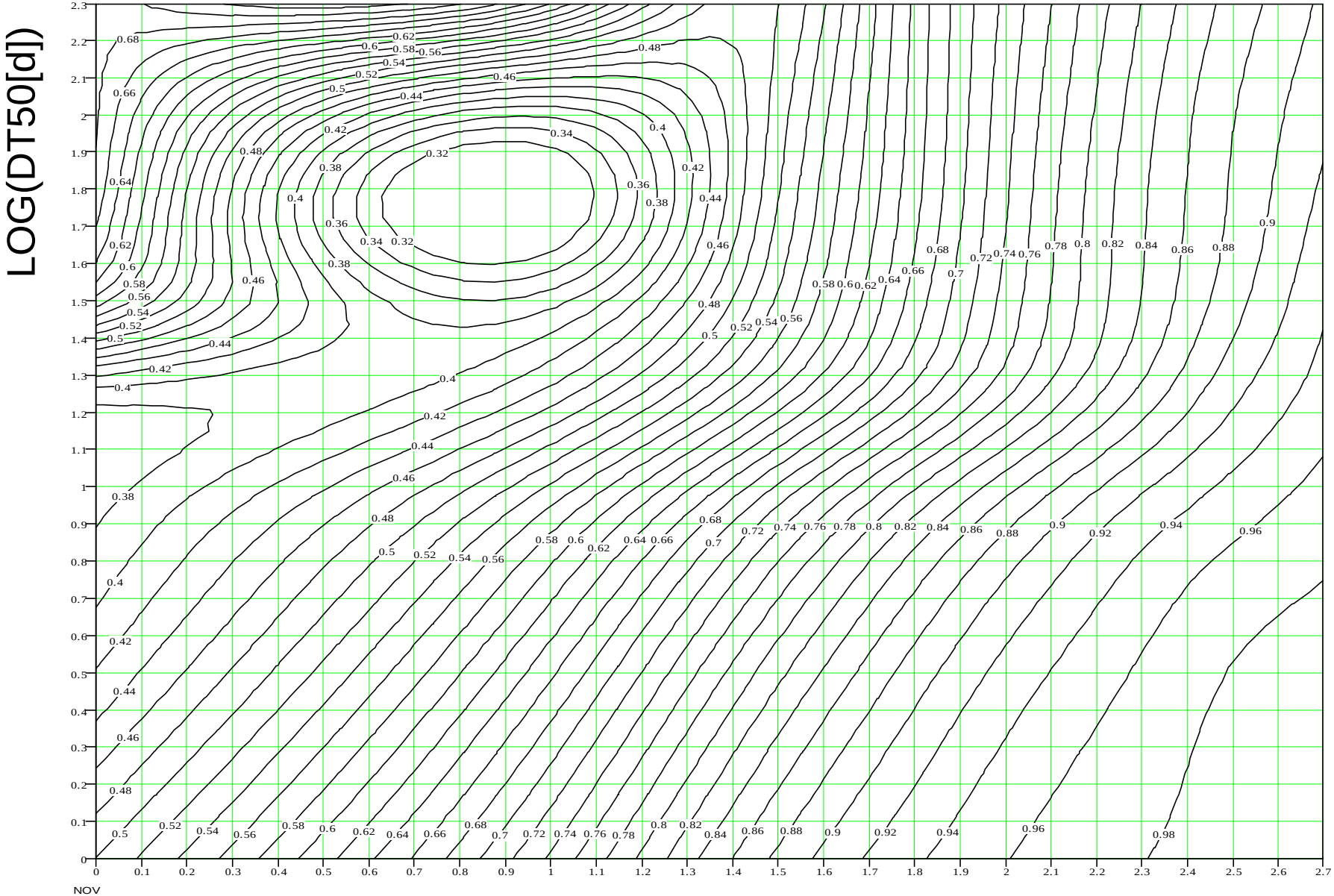
LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-6}$)



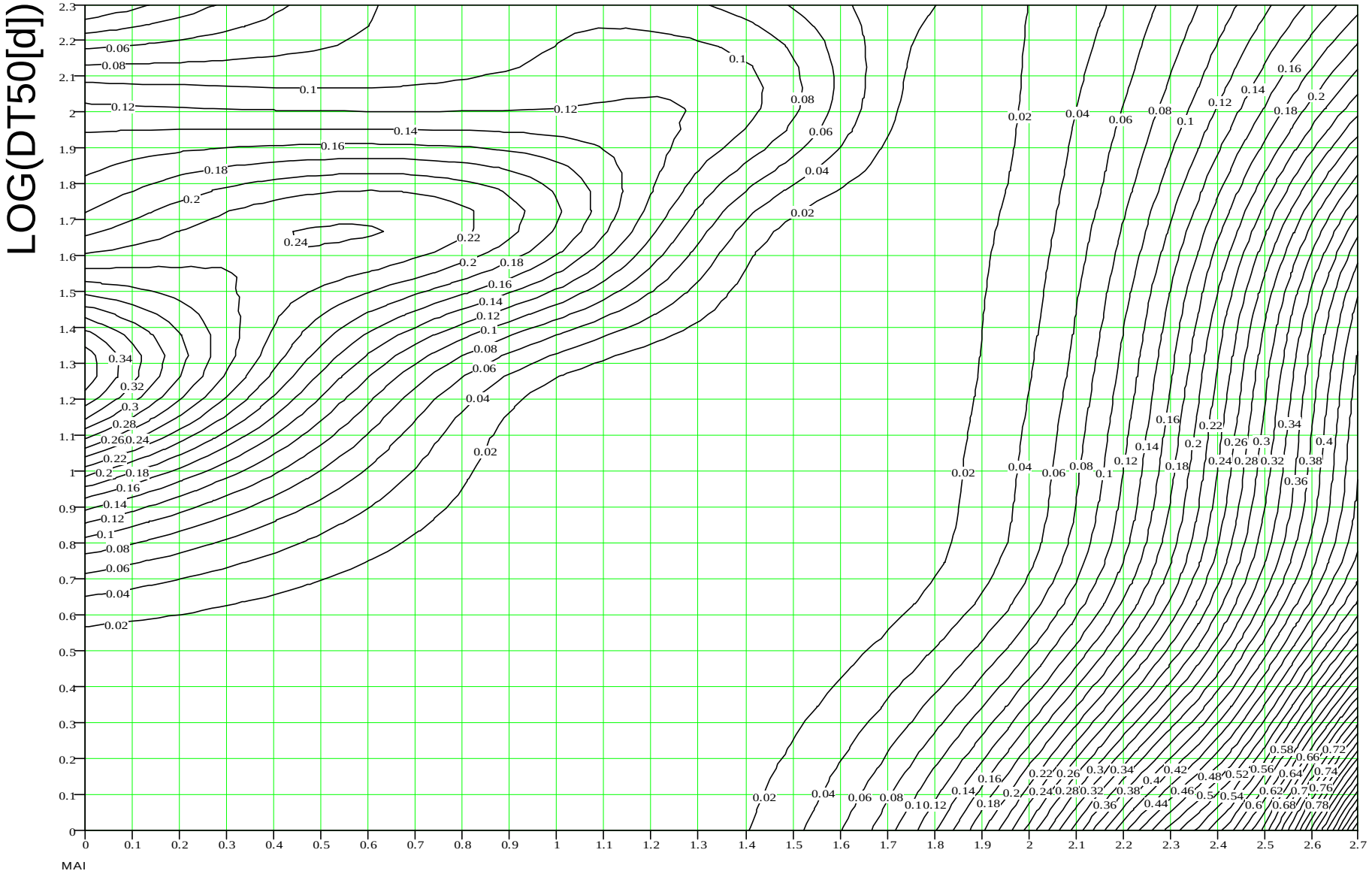
Szenario 3,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-6}$)



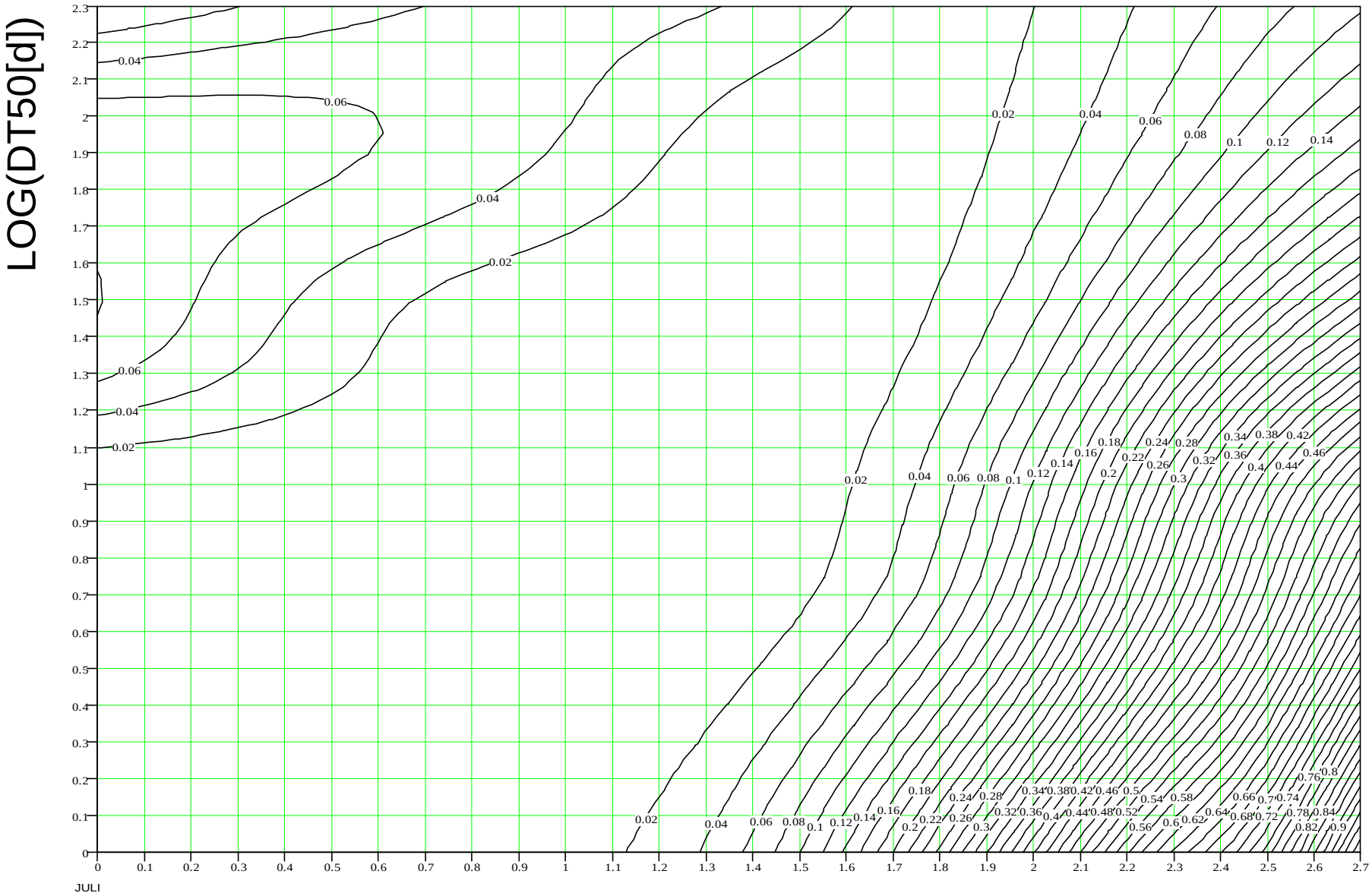
Szenario 3, November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



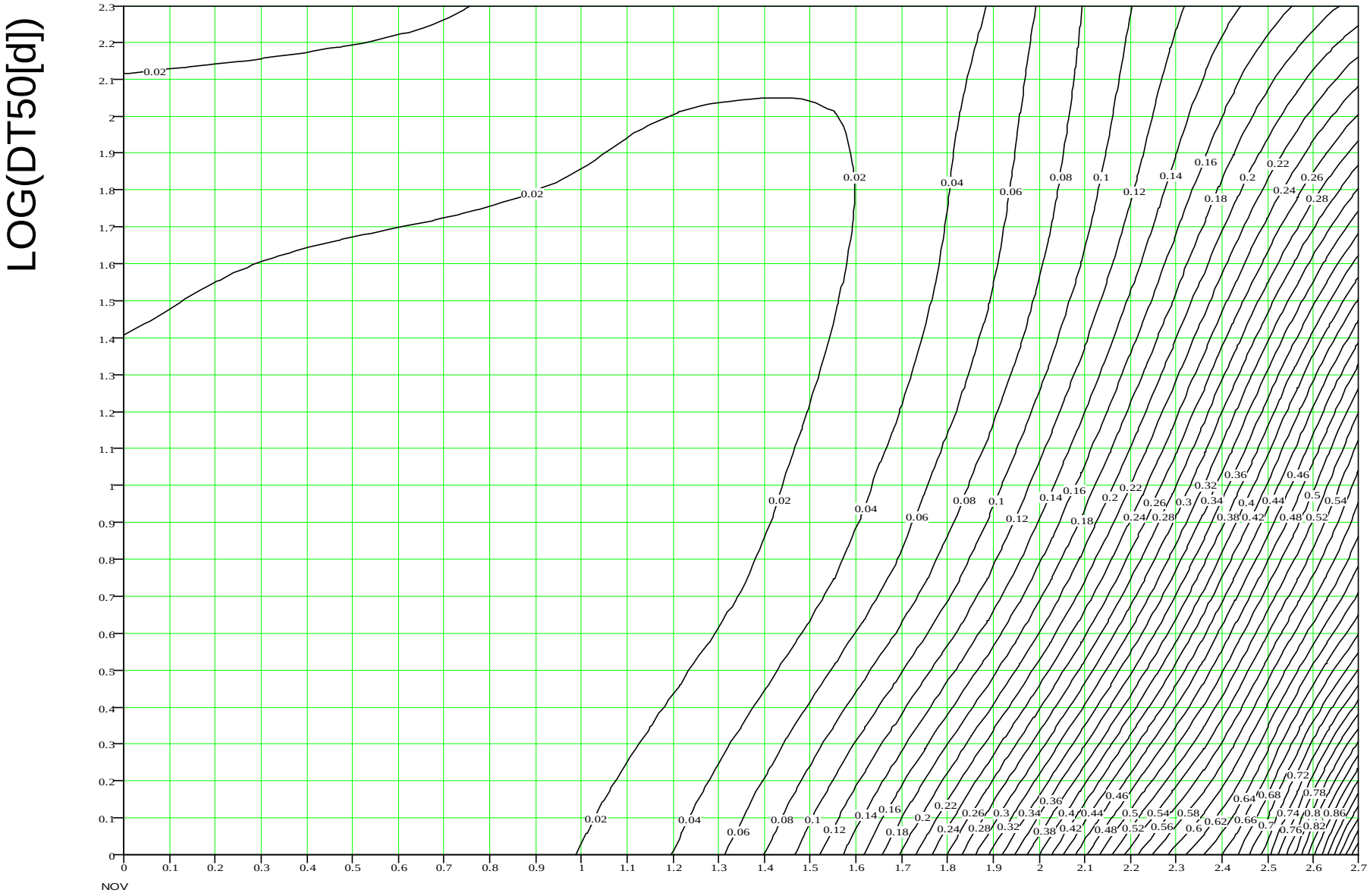
Szenario 4,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



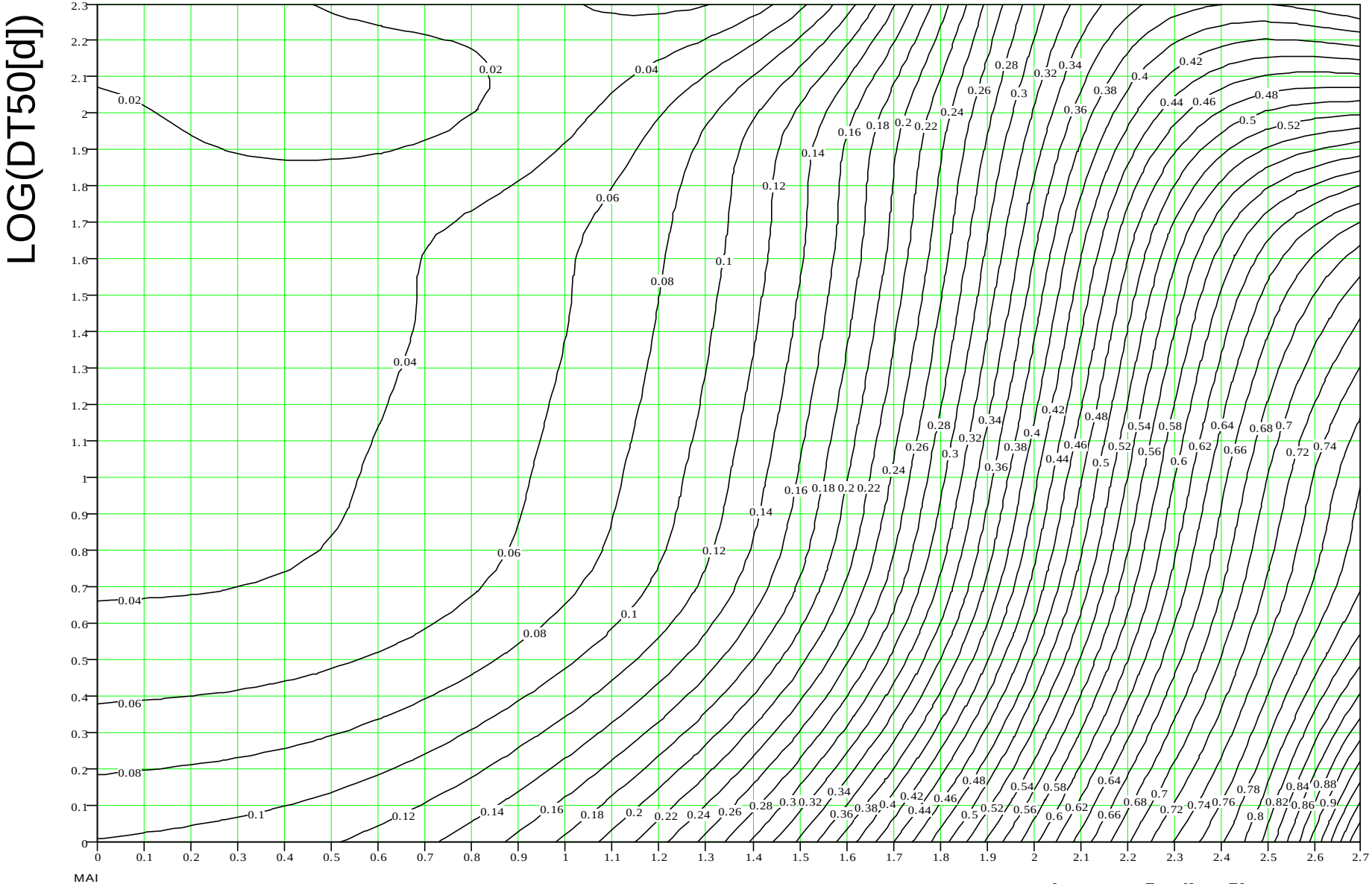
Szenario 4,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



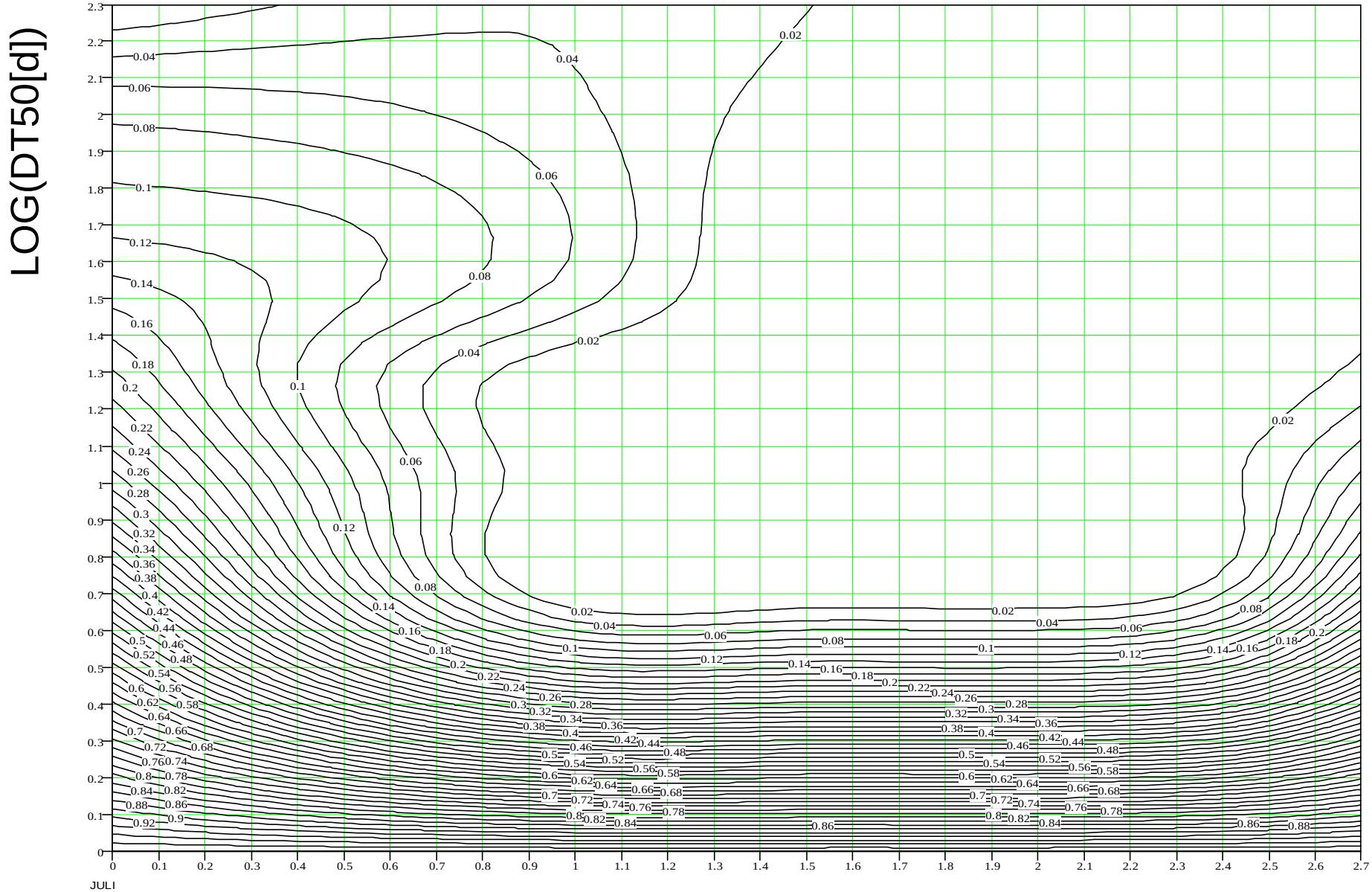
Szenario 4,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



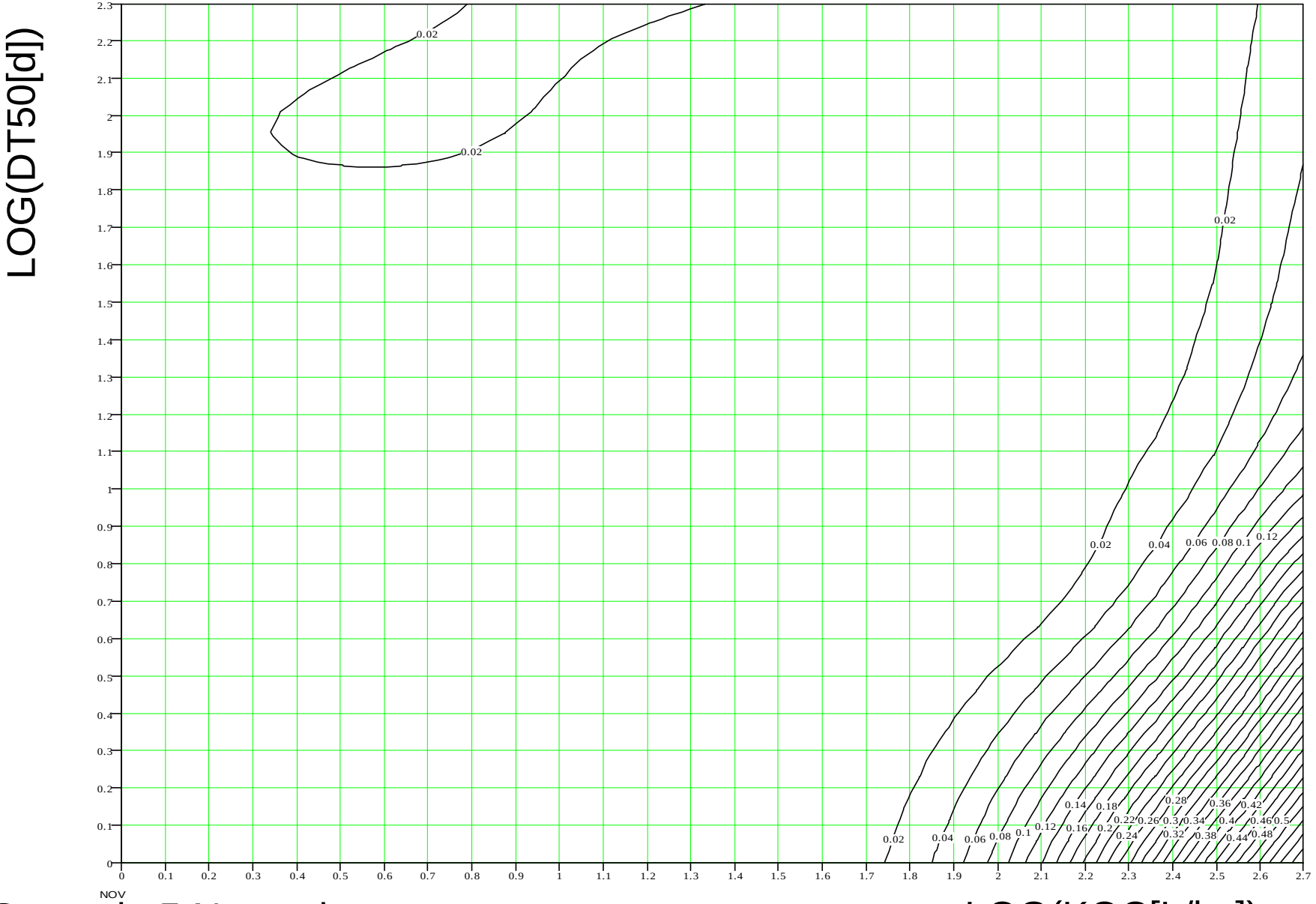
Szenario 5,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



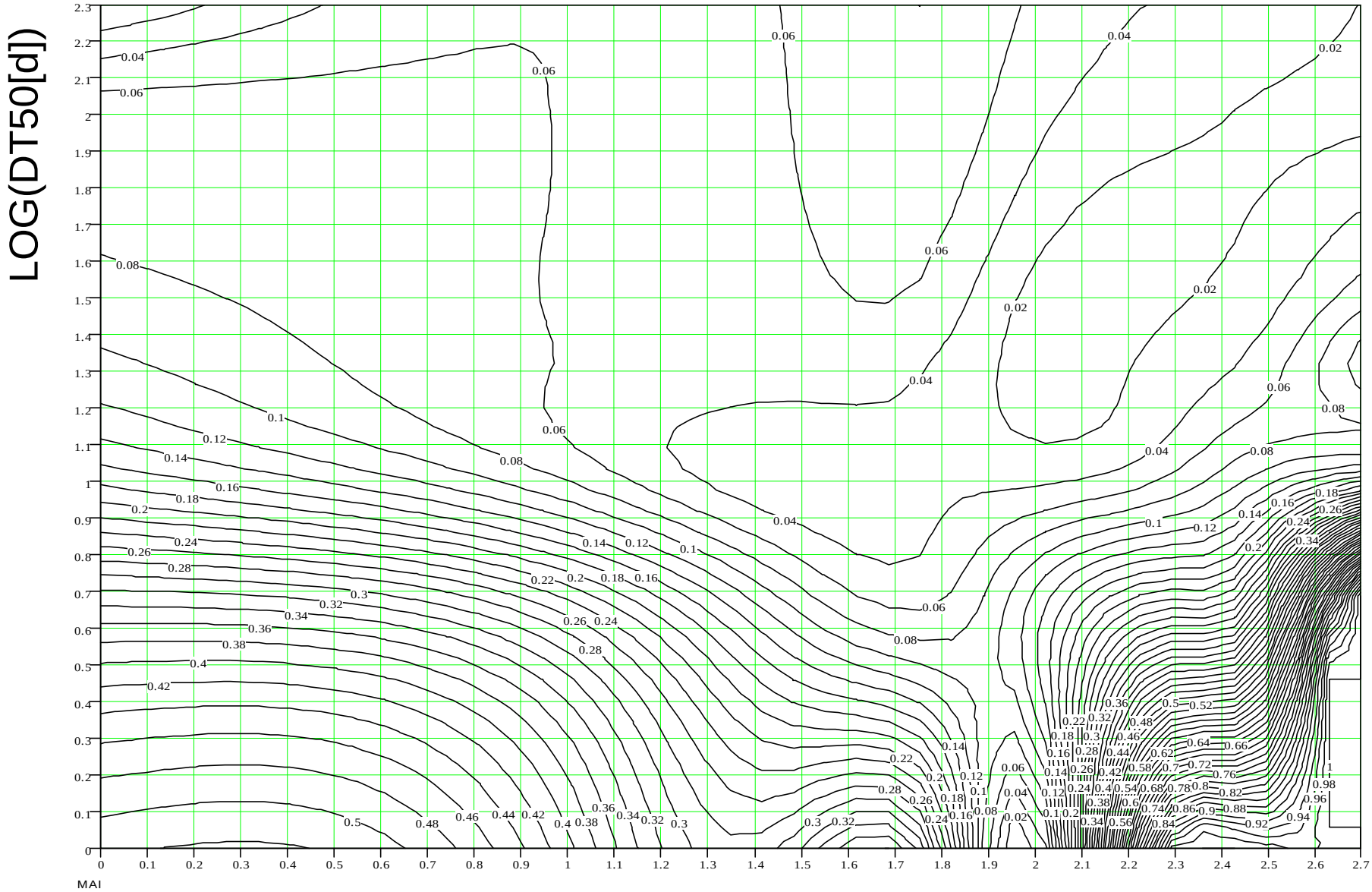
Szenario 5,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



Szenario 5,November

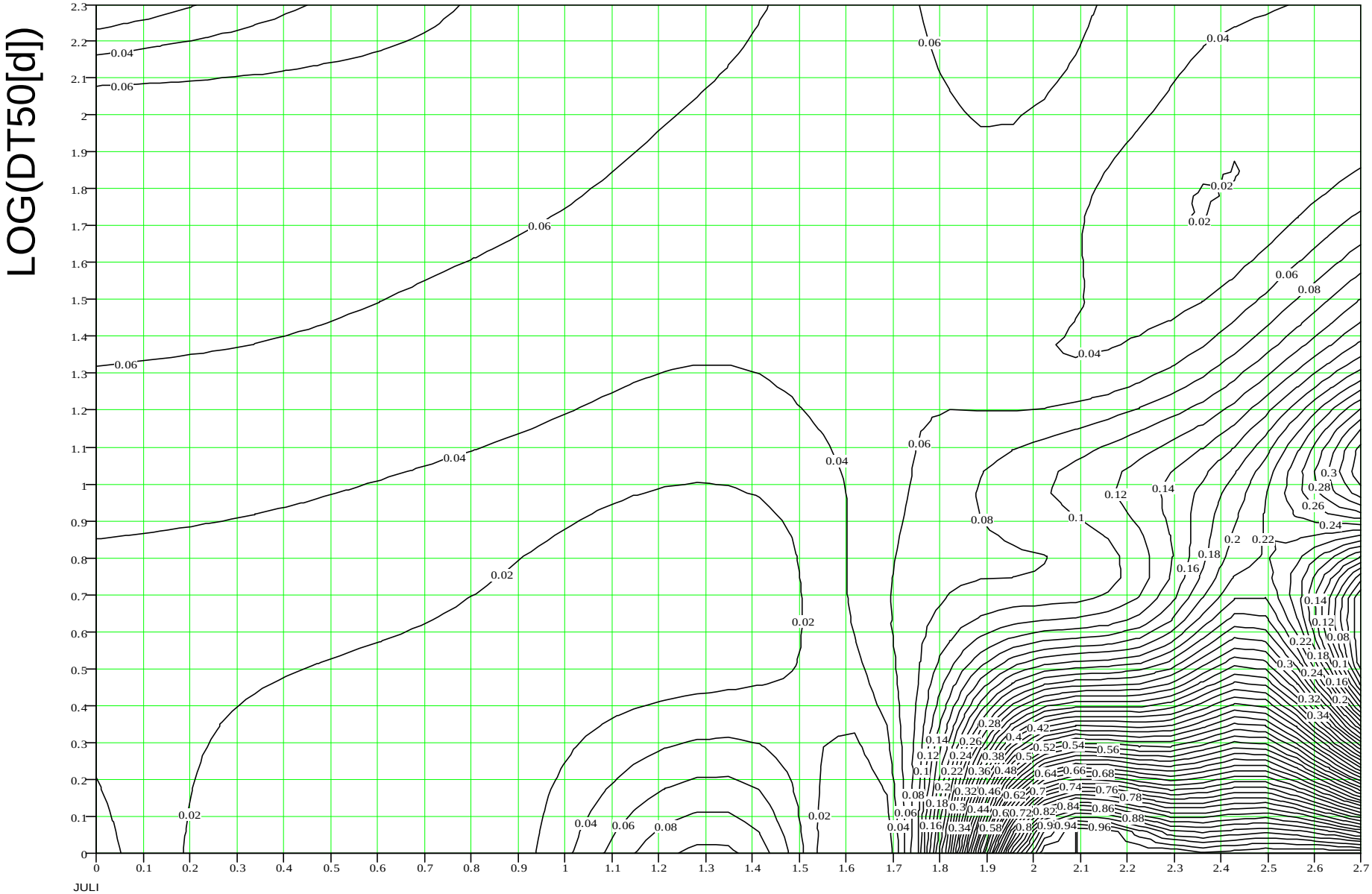
Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



Szenario 6,Mai

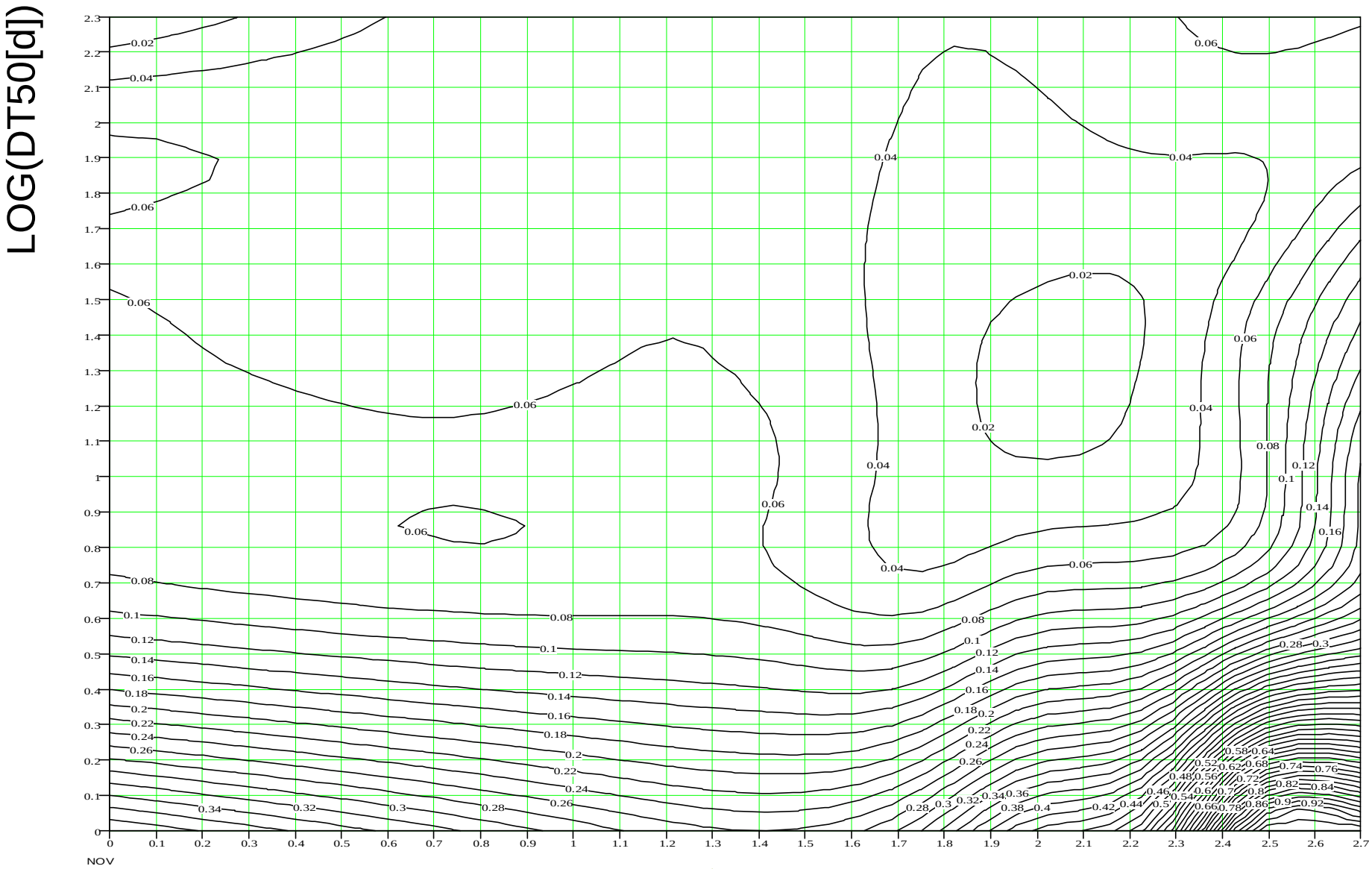
LOG(KOC[L/kg])

Bestimmung des Henryfaktors HF (H>10^{-4})



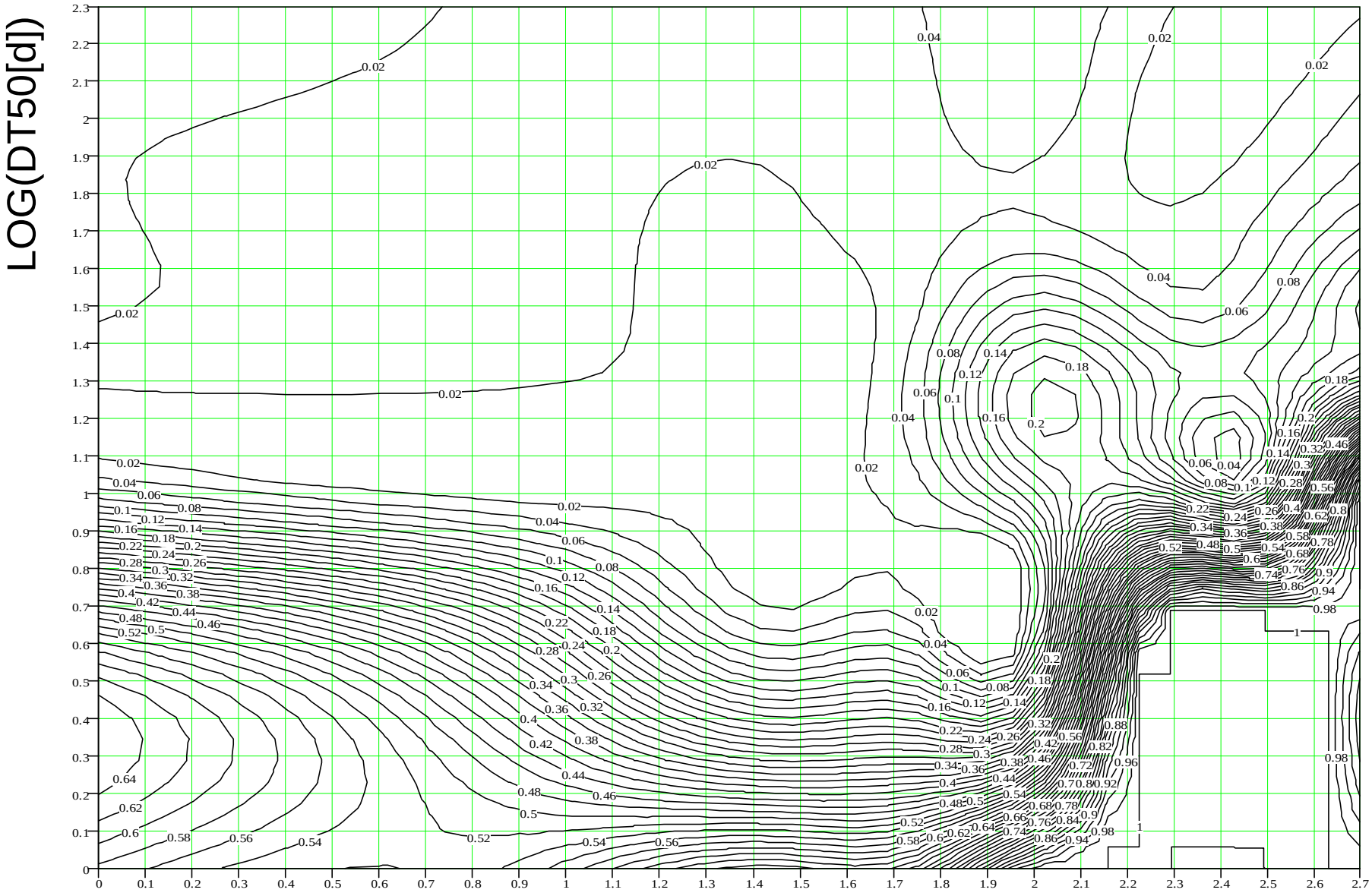
Szenario 6,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



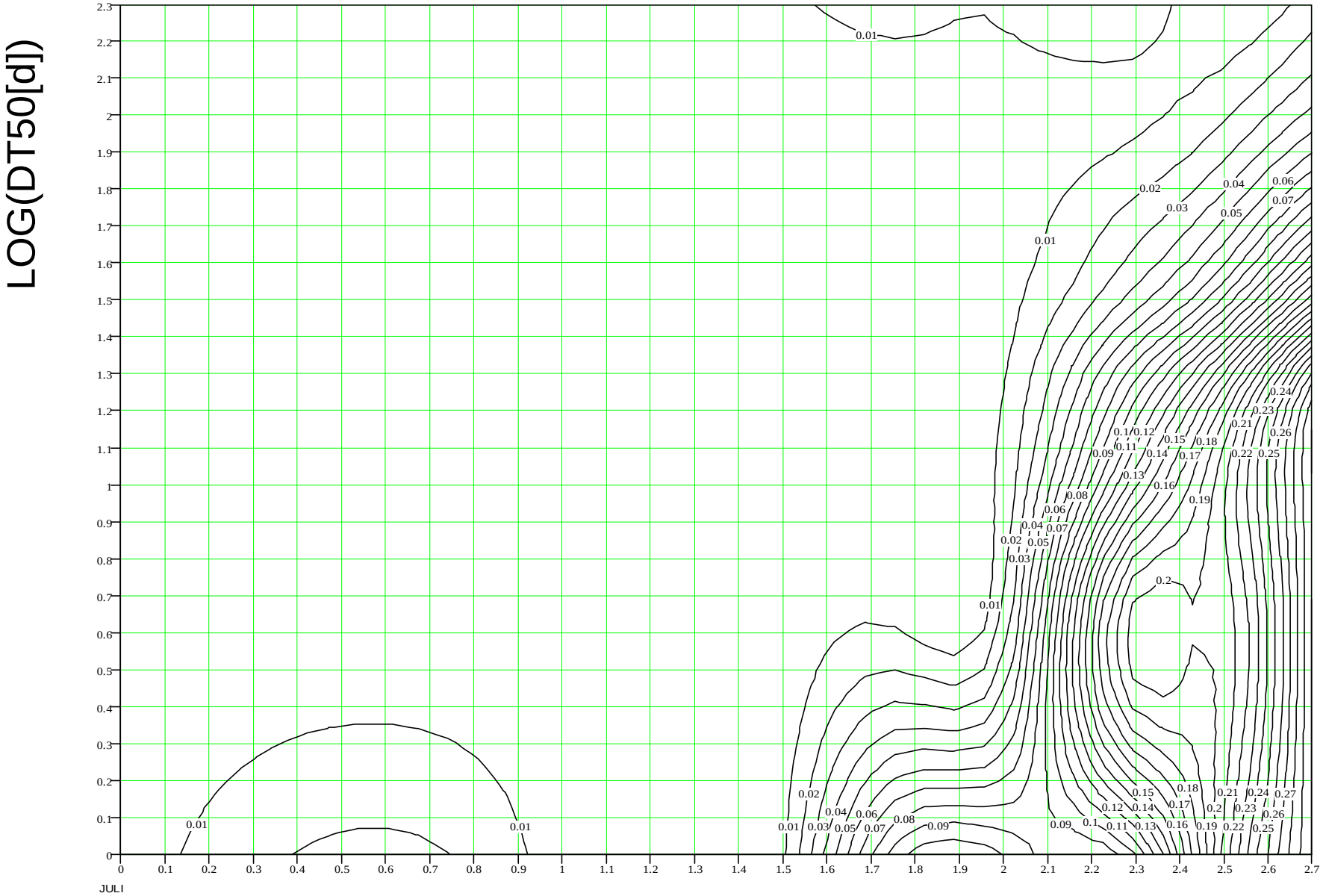
Szenario 6,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



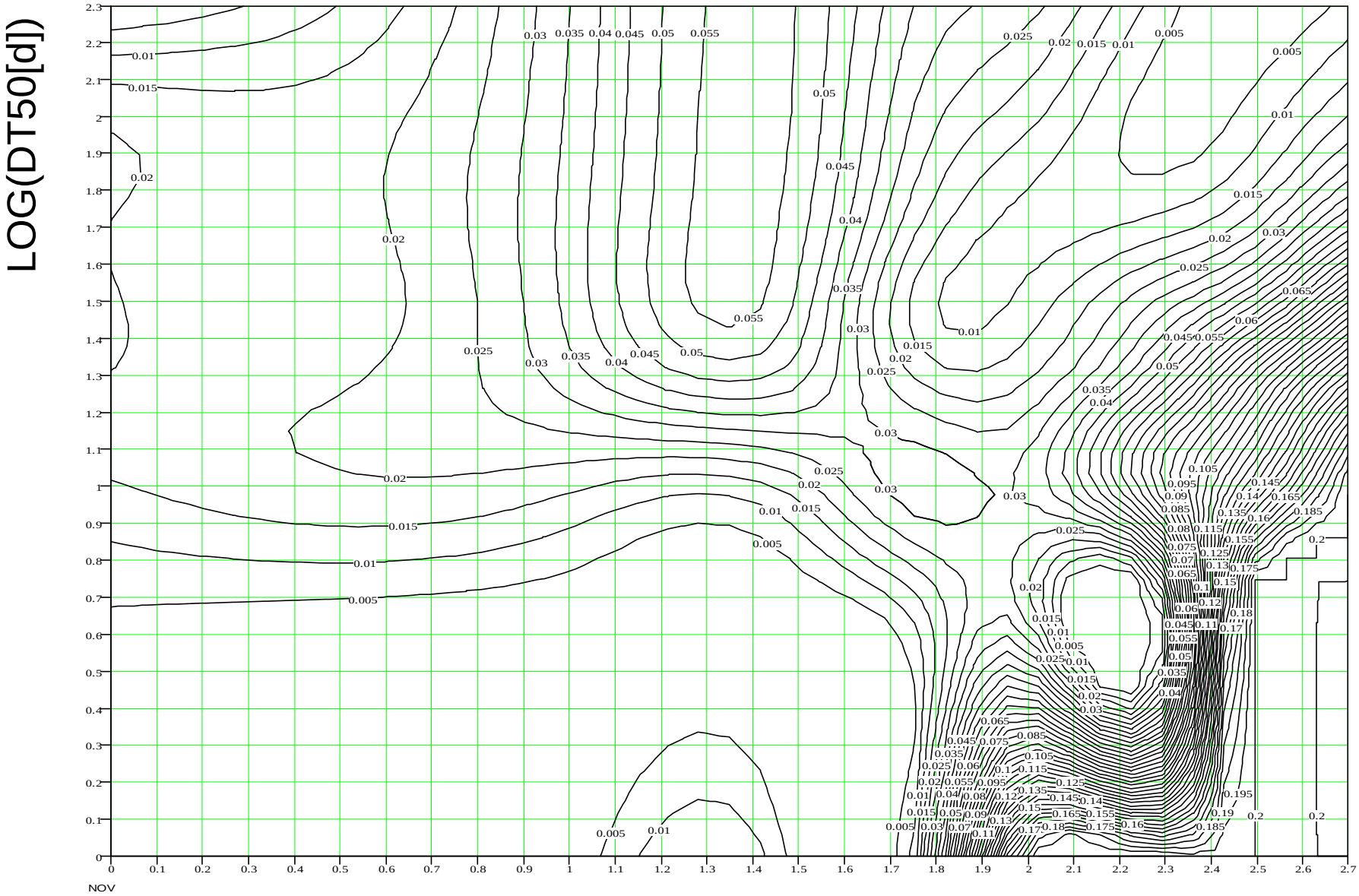
Szenario 7,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



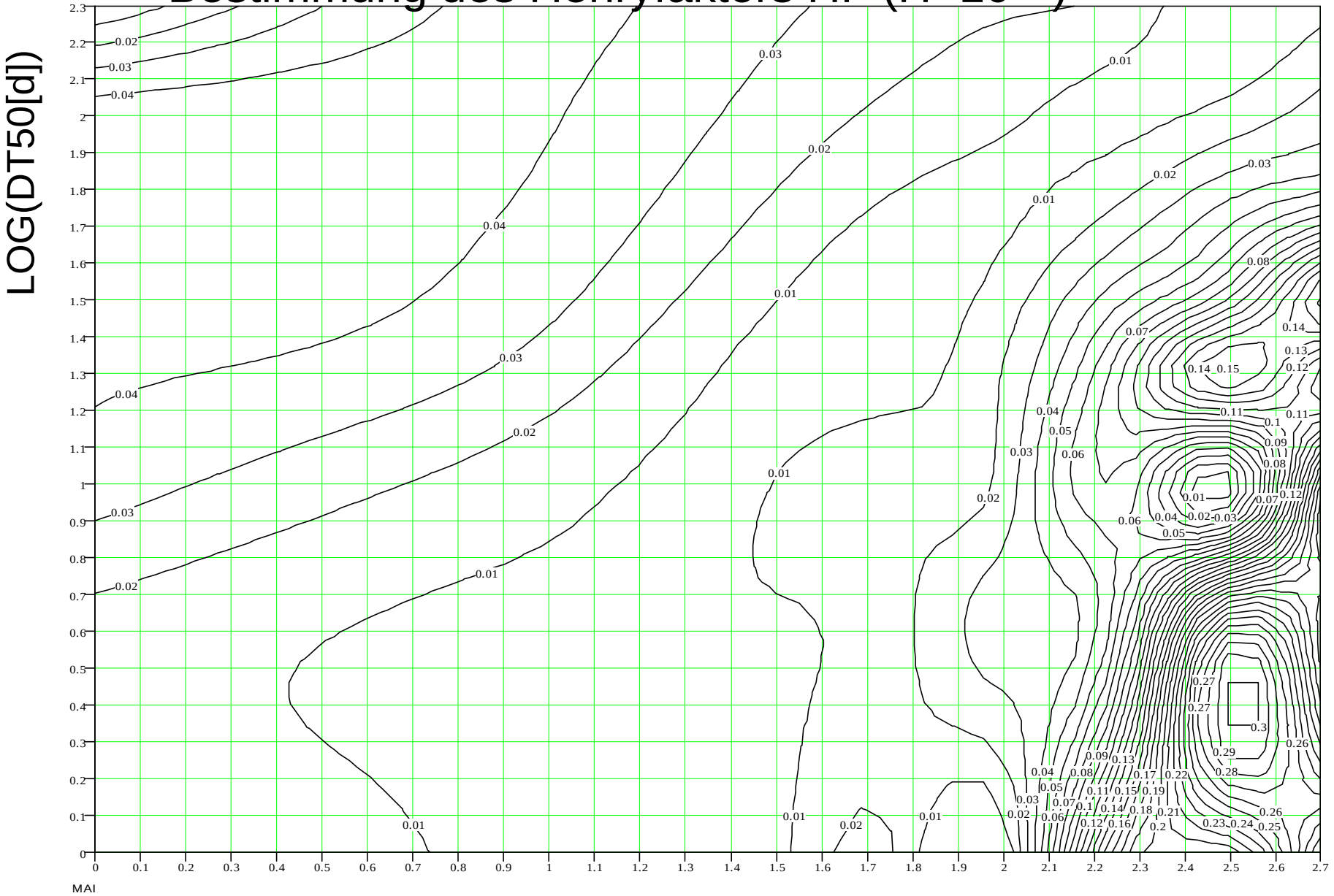
Szenario 7,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



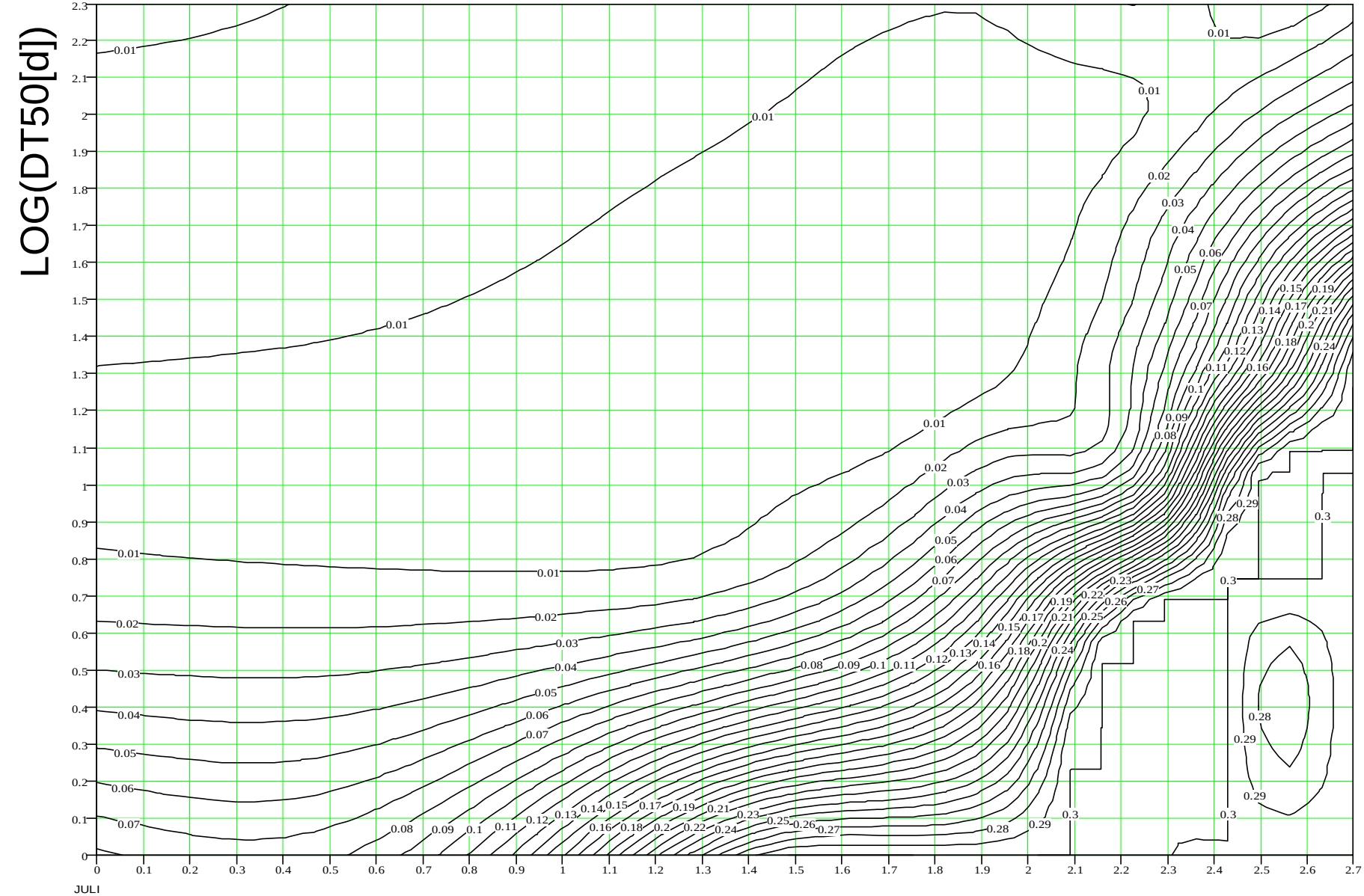
Szenario 7,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



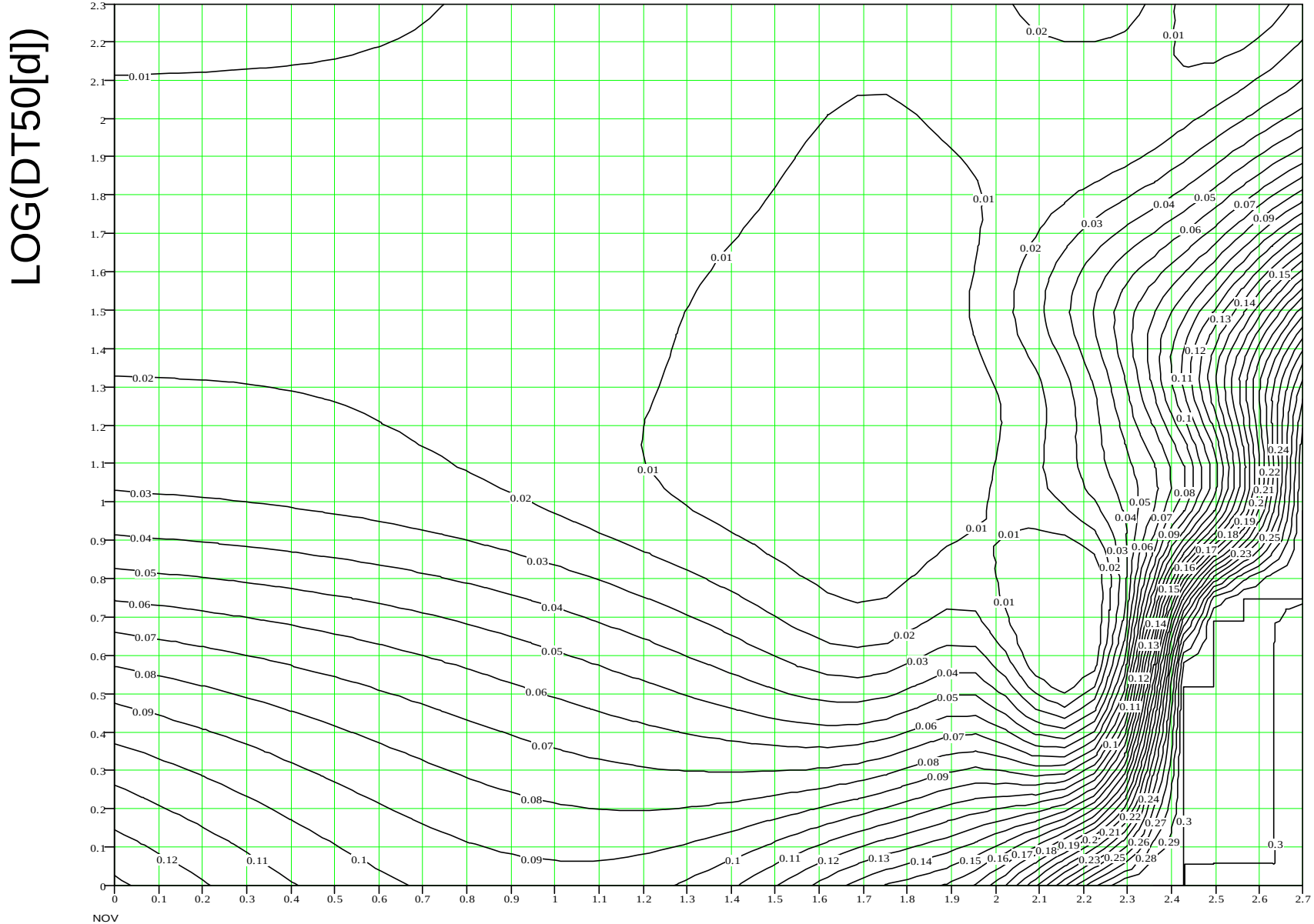
Szenario 8,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



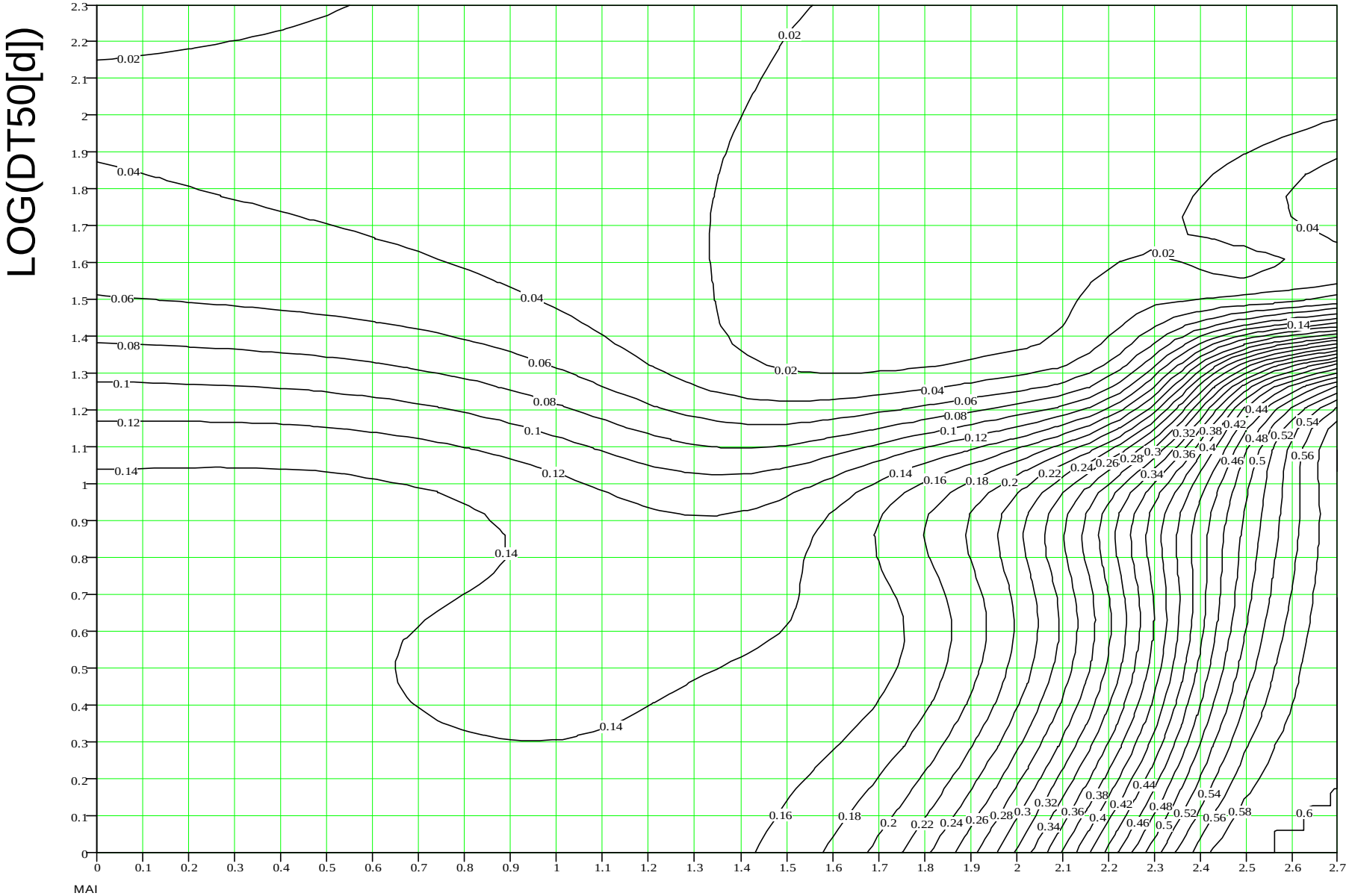
Szenario 8,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



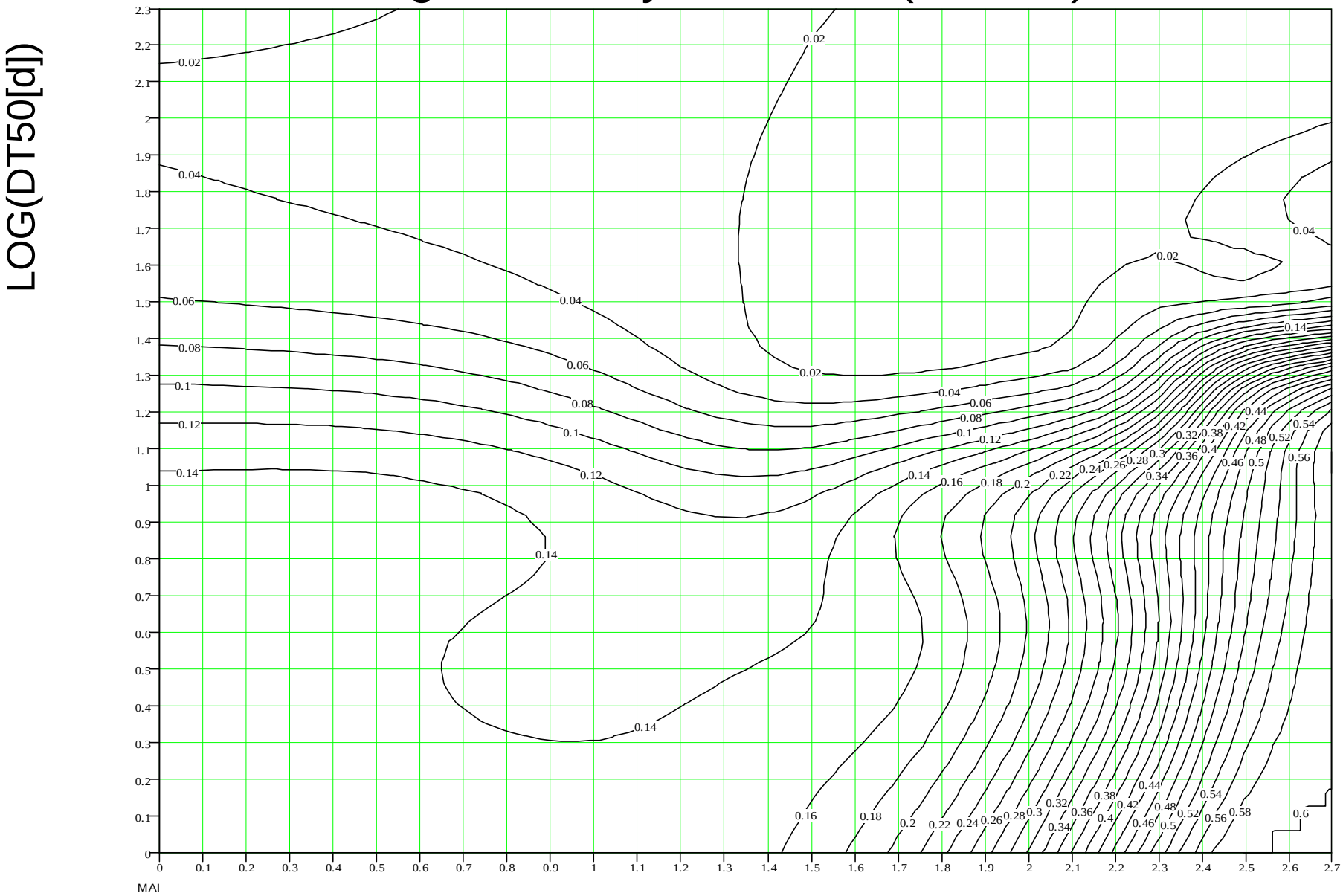
Szenario 8,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



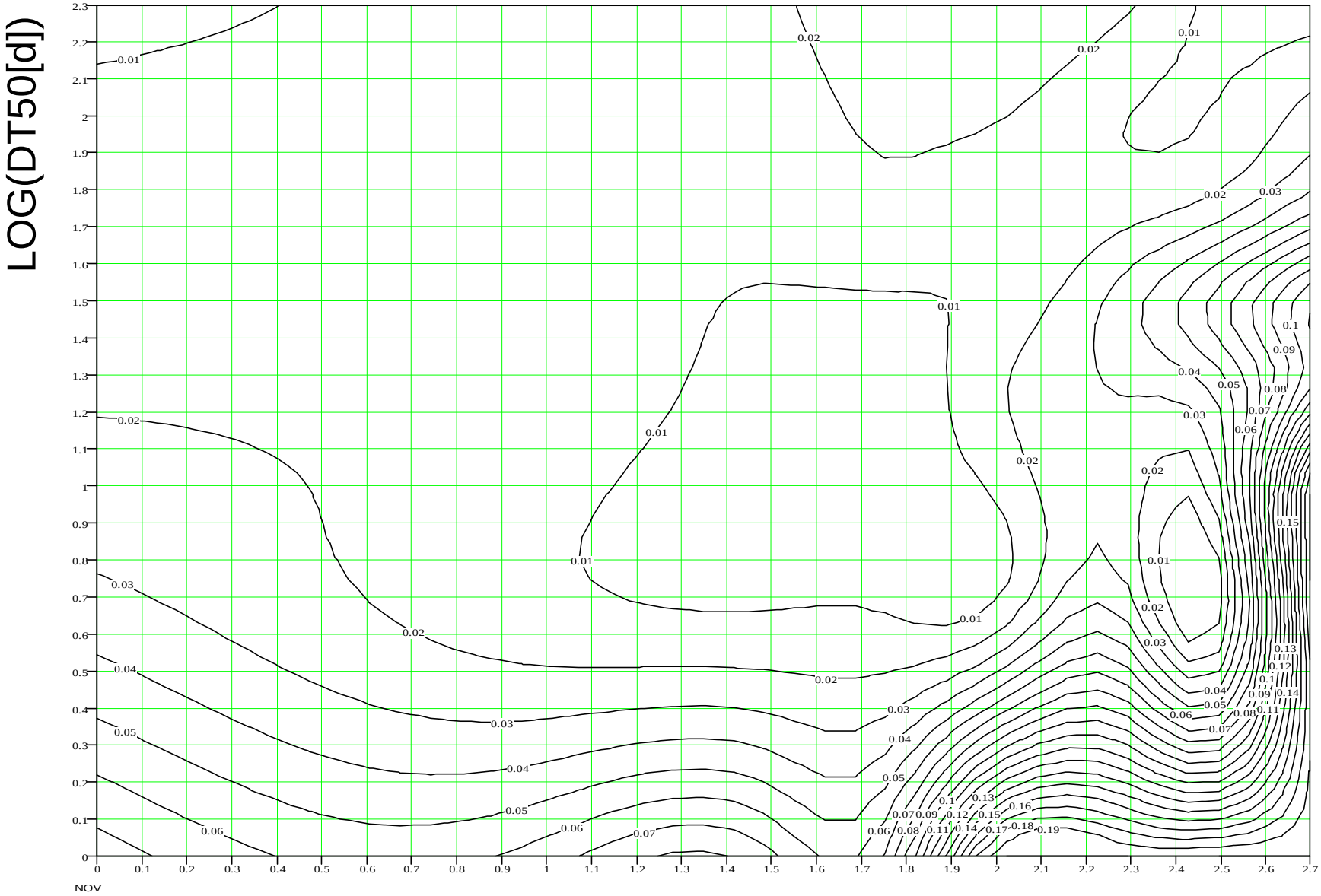
Szenario 9, Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



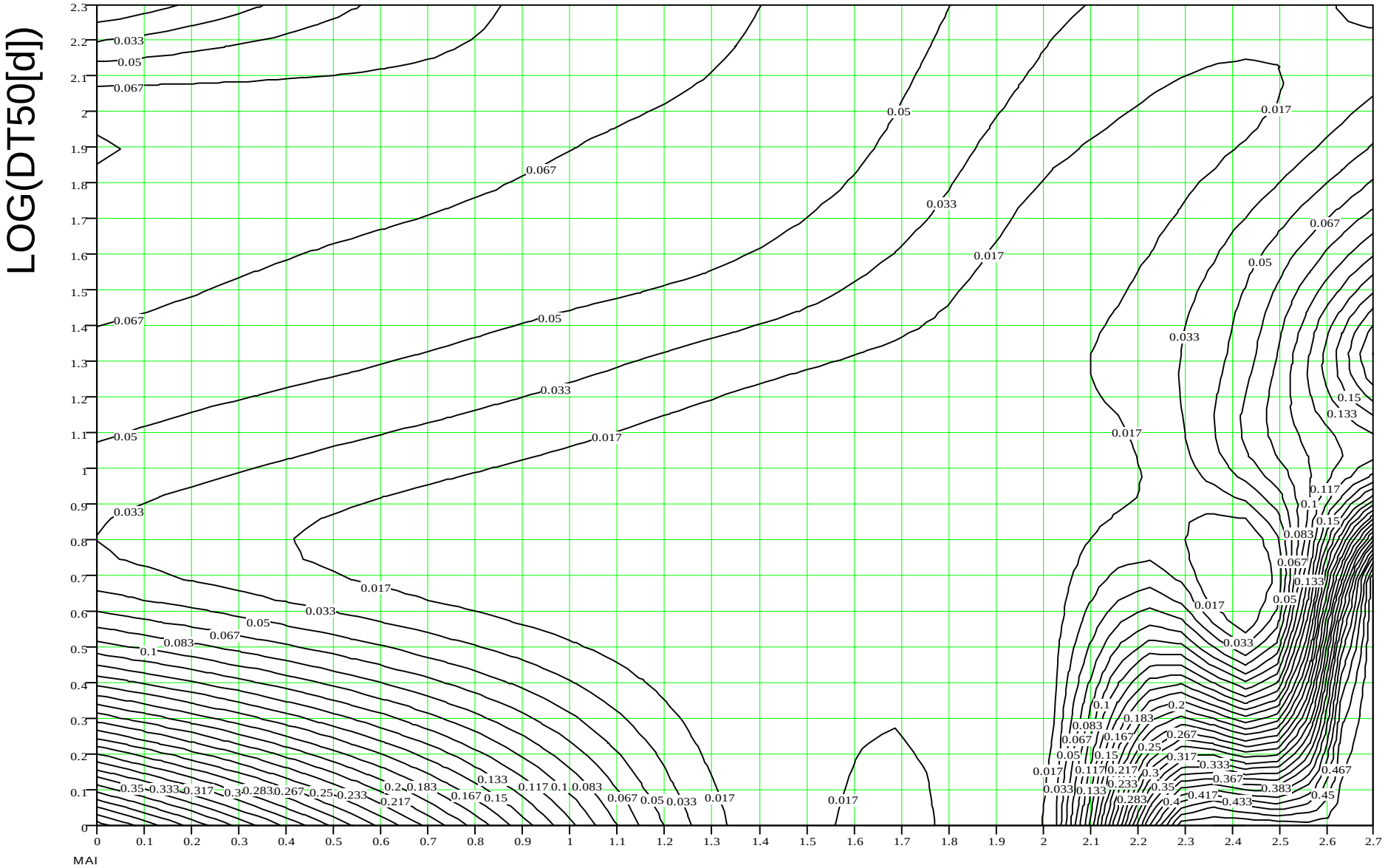
Szenario 9,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



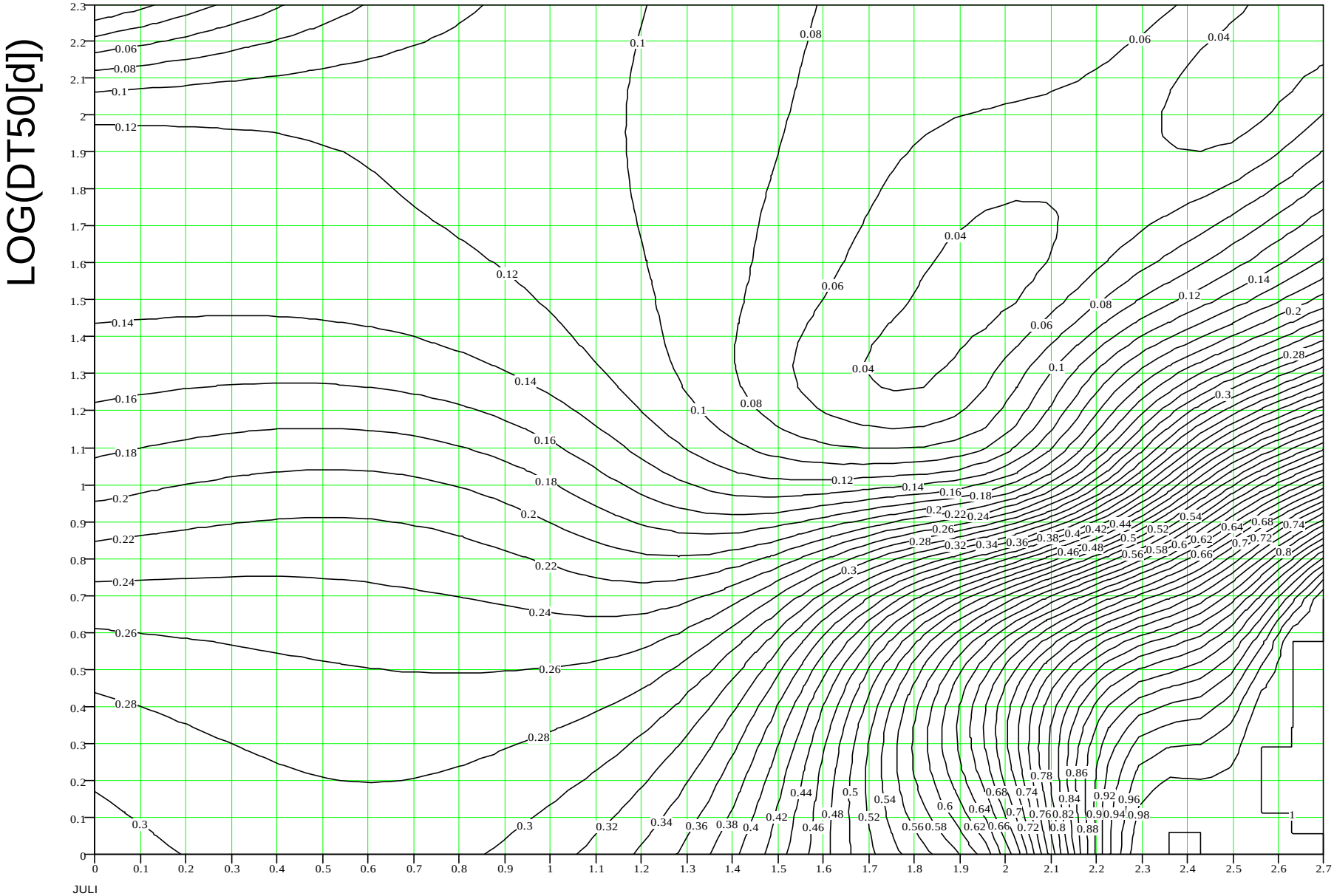
Szenario 9,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



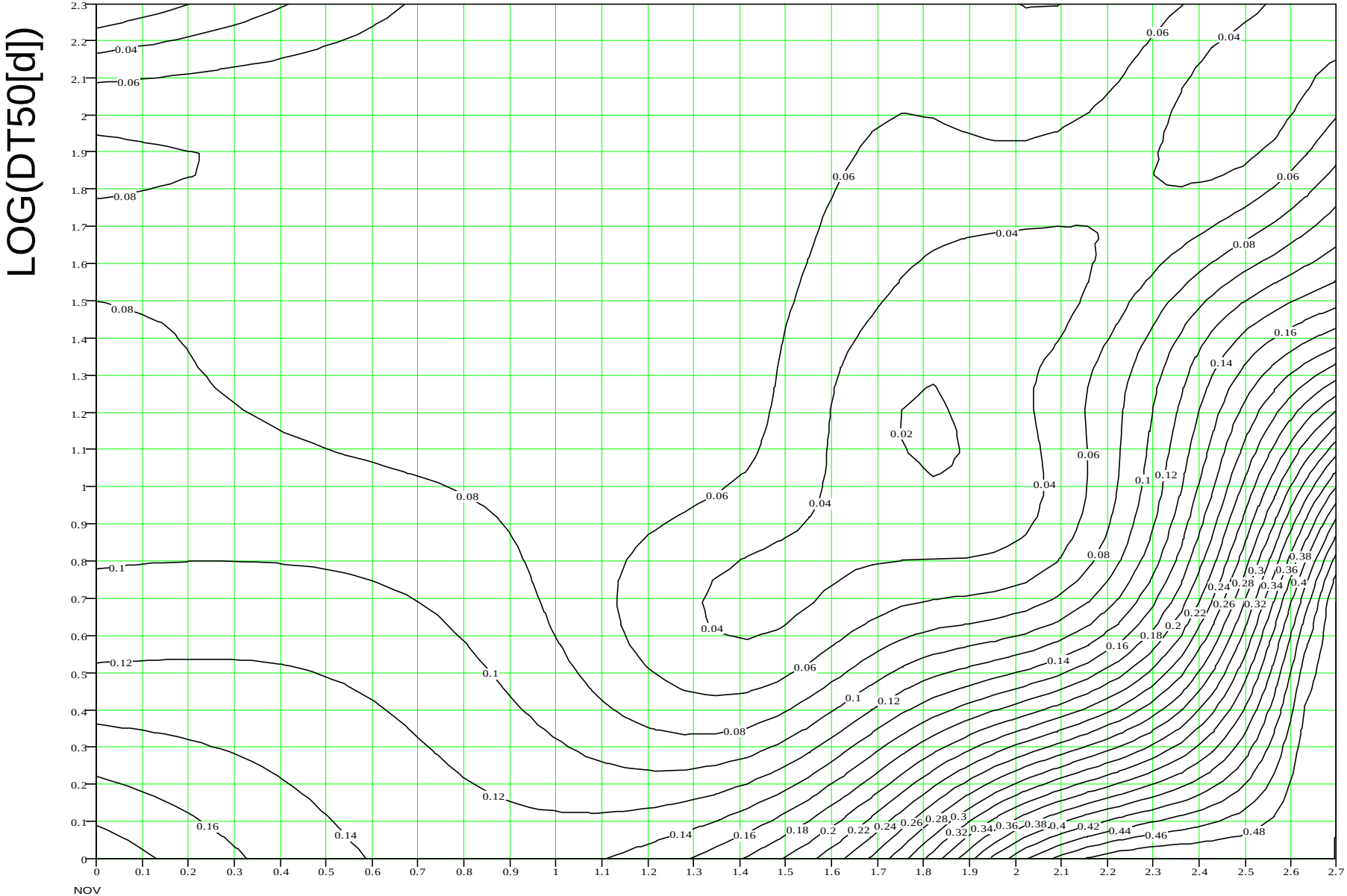
Szenario 10,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF (H>10^{-4})



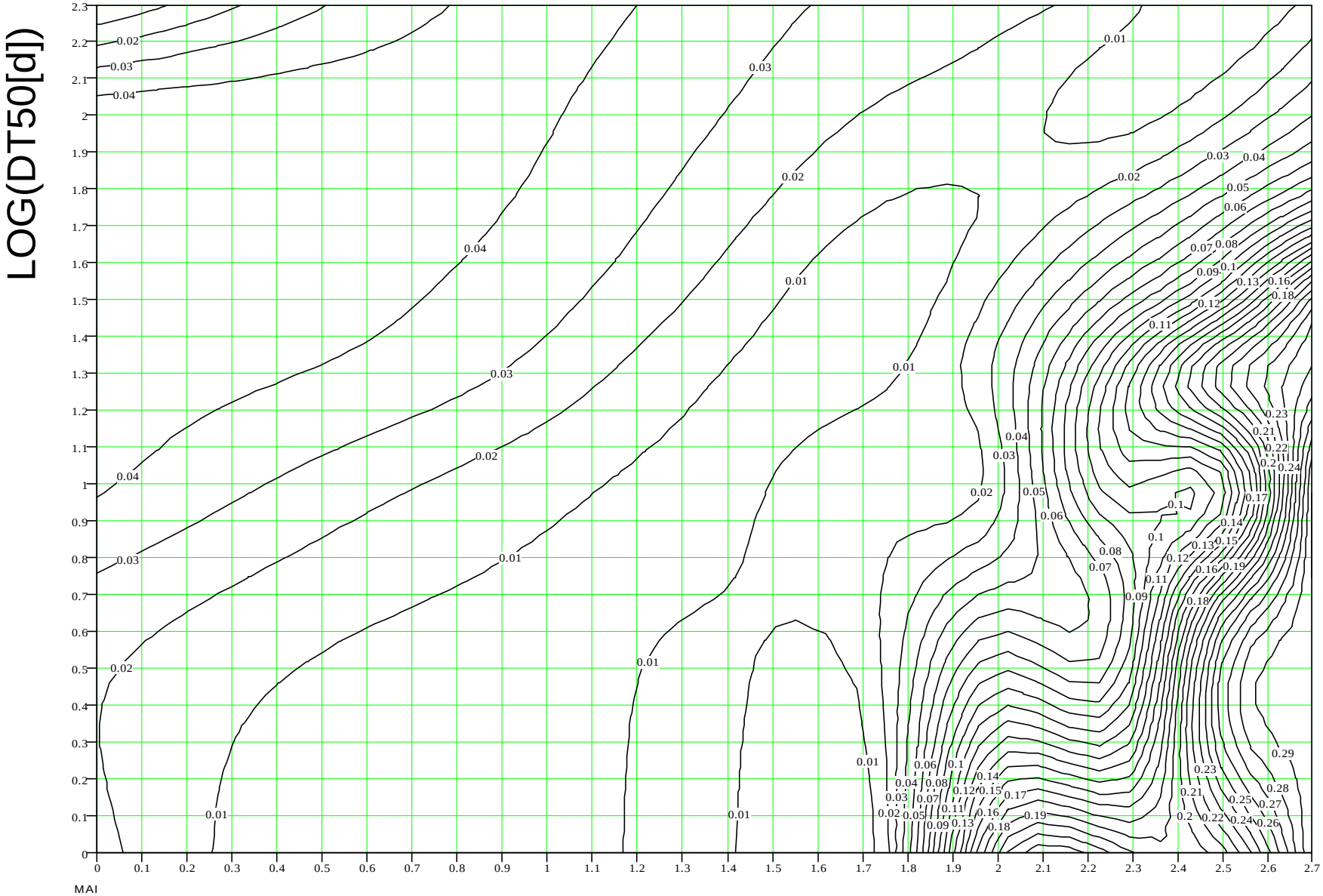
Szenario 10,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



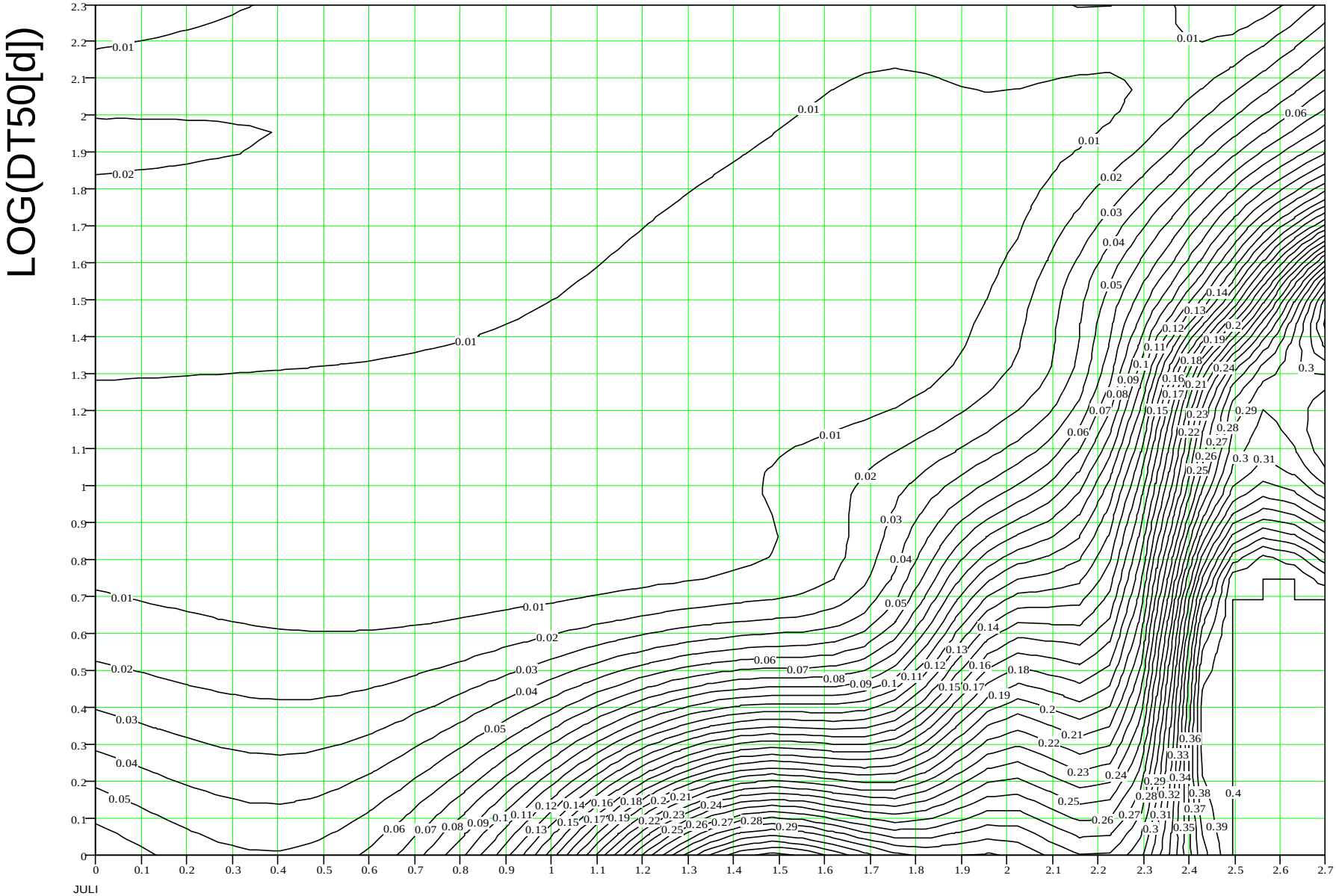
Szenario 10,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



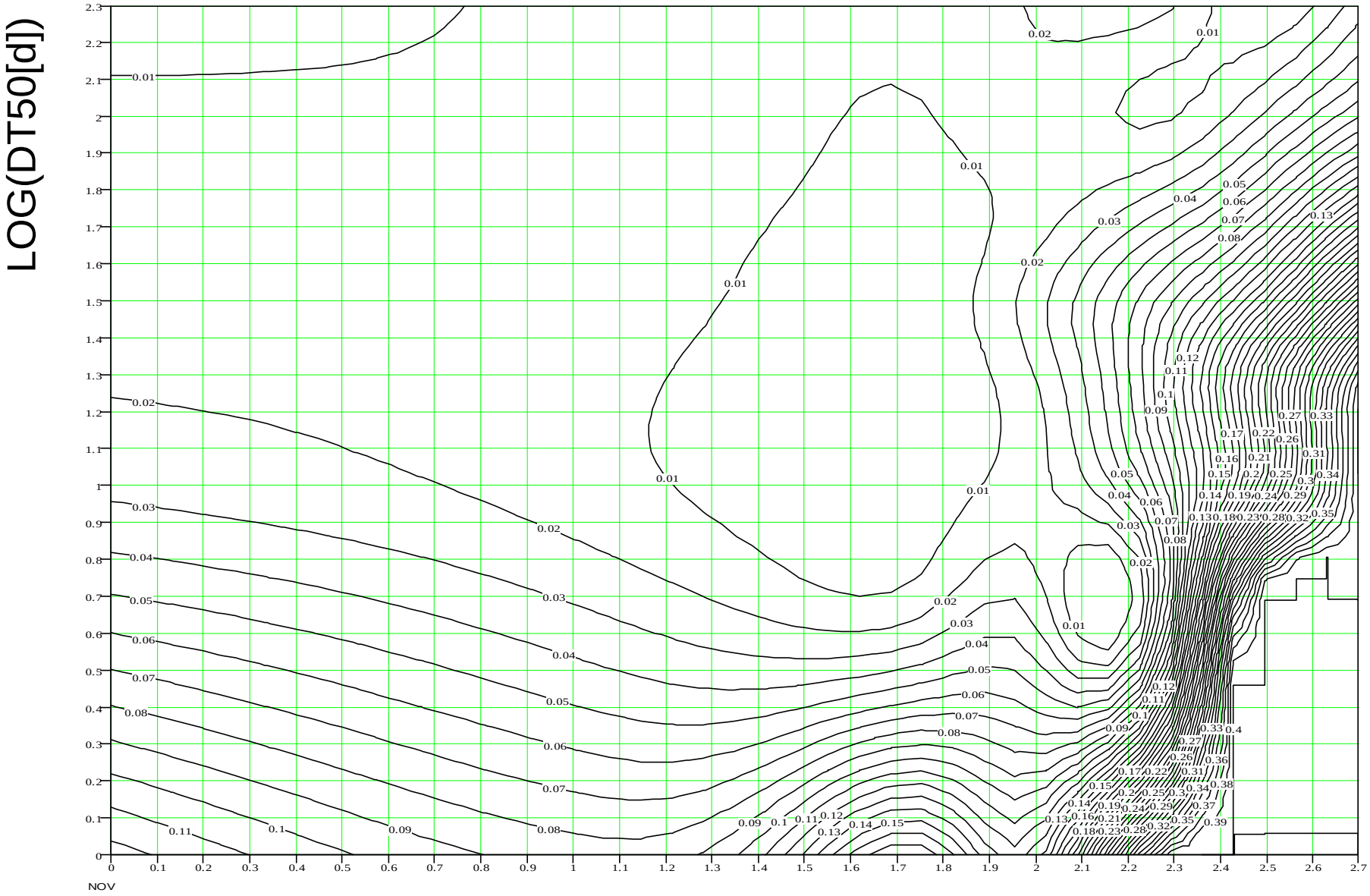
Szenario 11,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



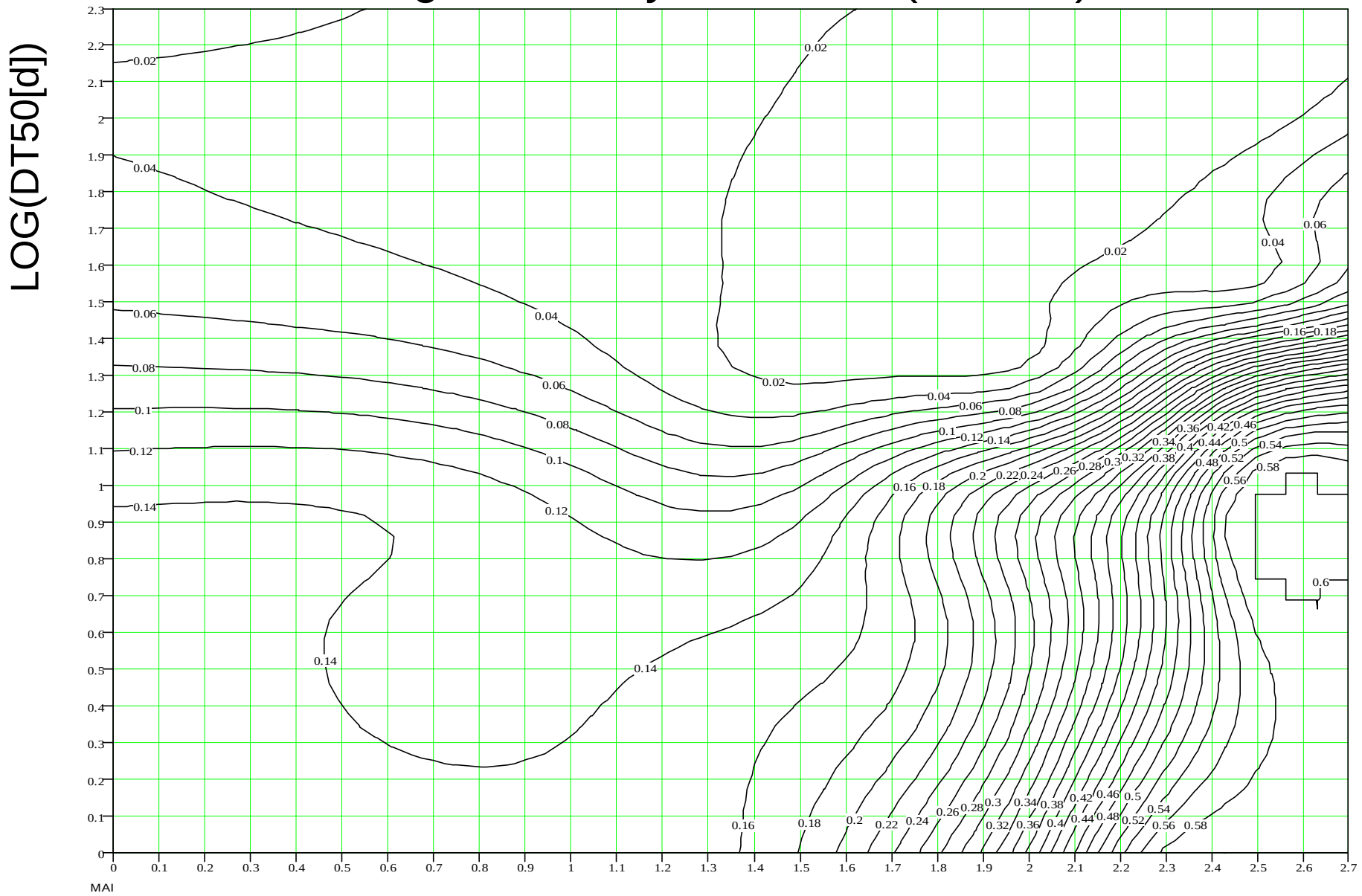
Szenario 11,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



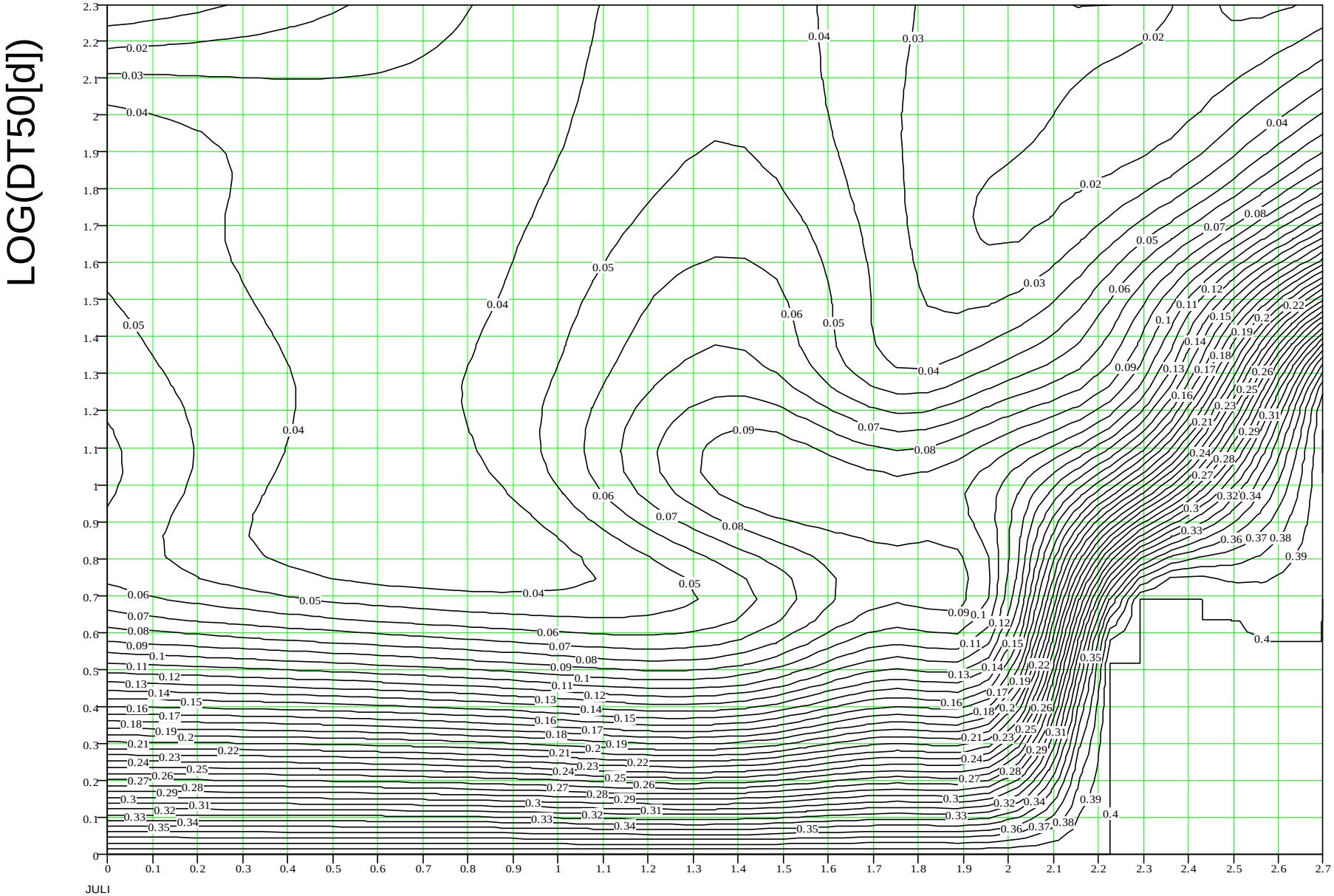
Szenario 11,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



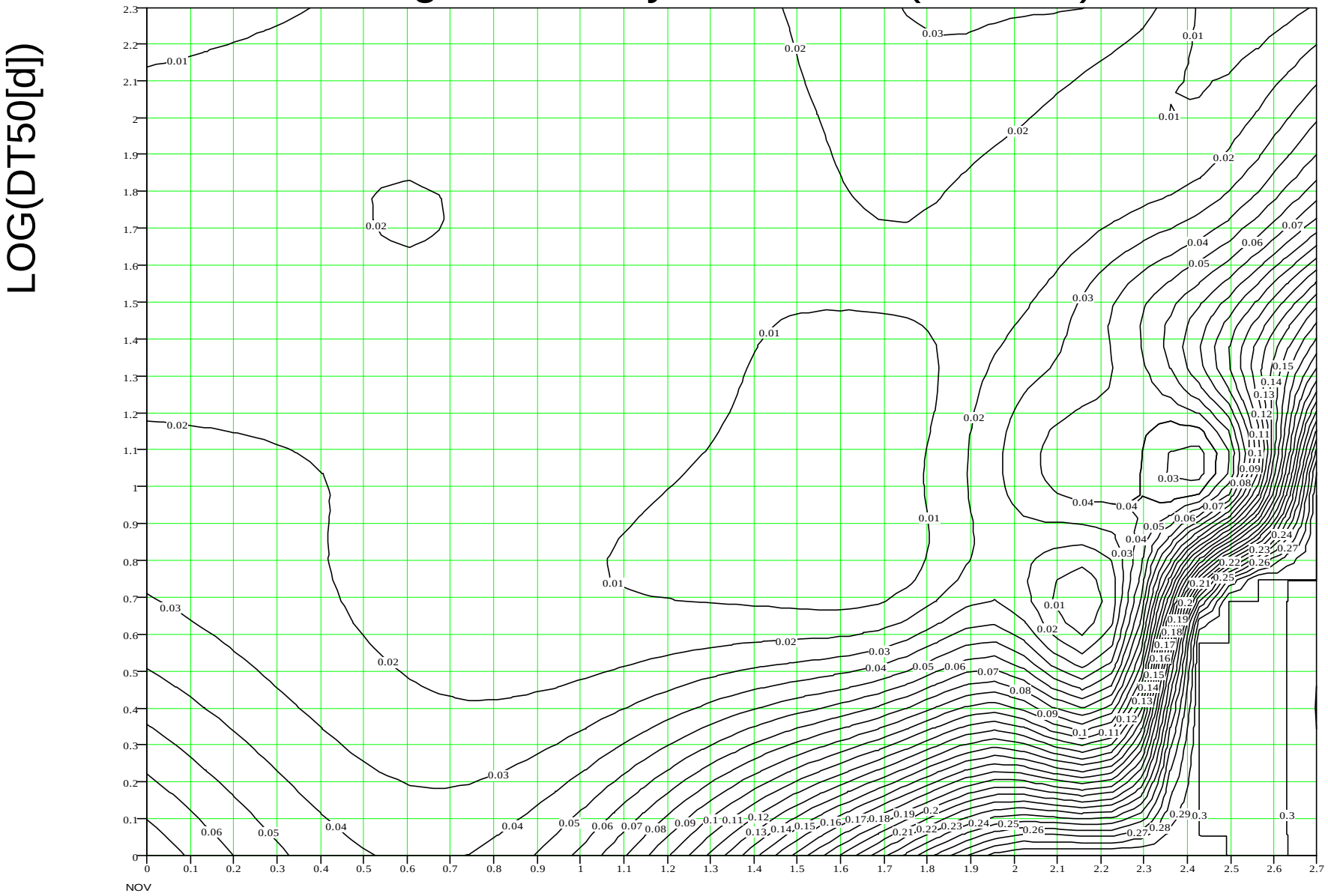
Szenario 12,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF (H>10^{-4})



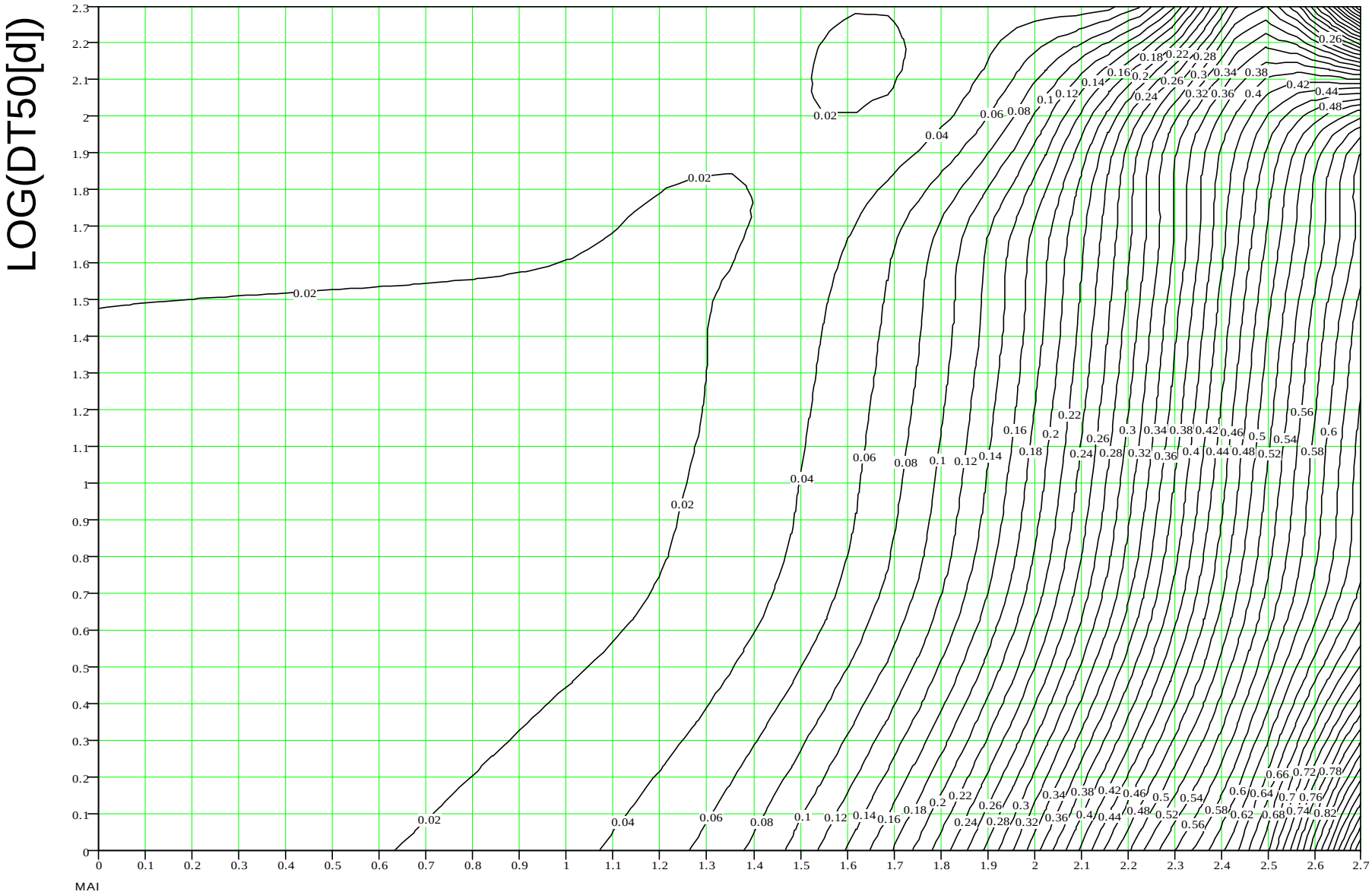
Szenario 12,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



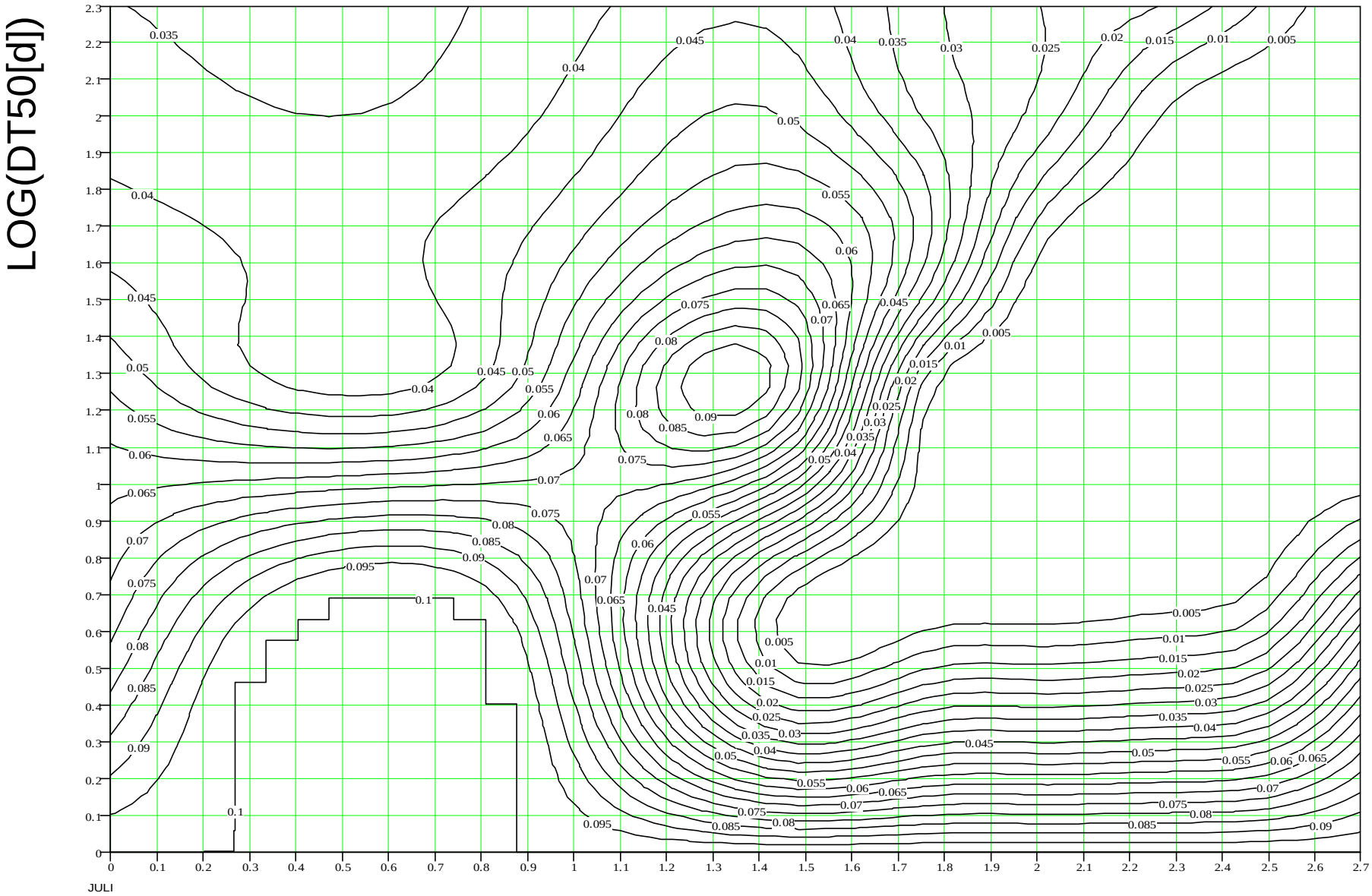
Szenario 12,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



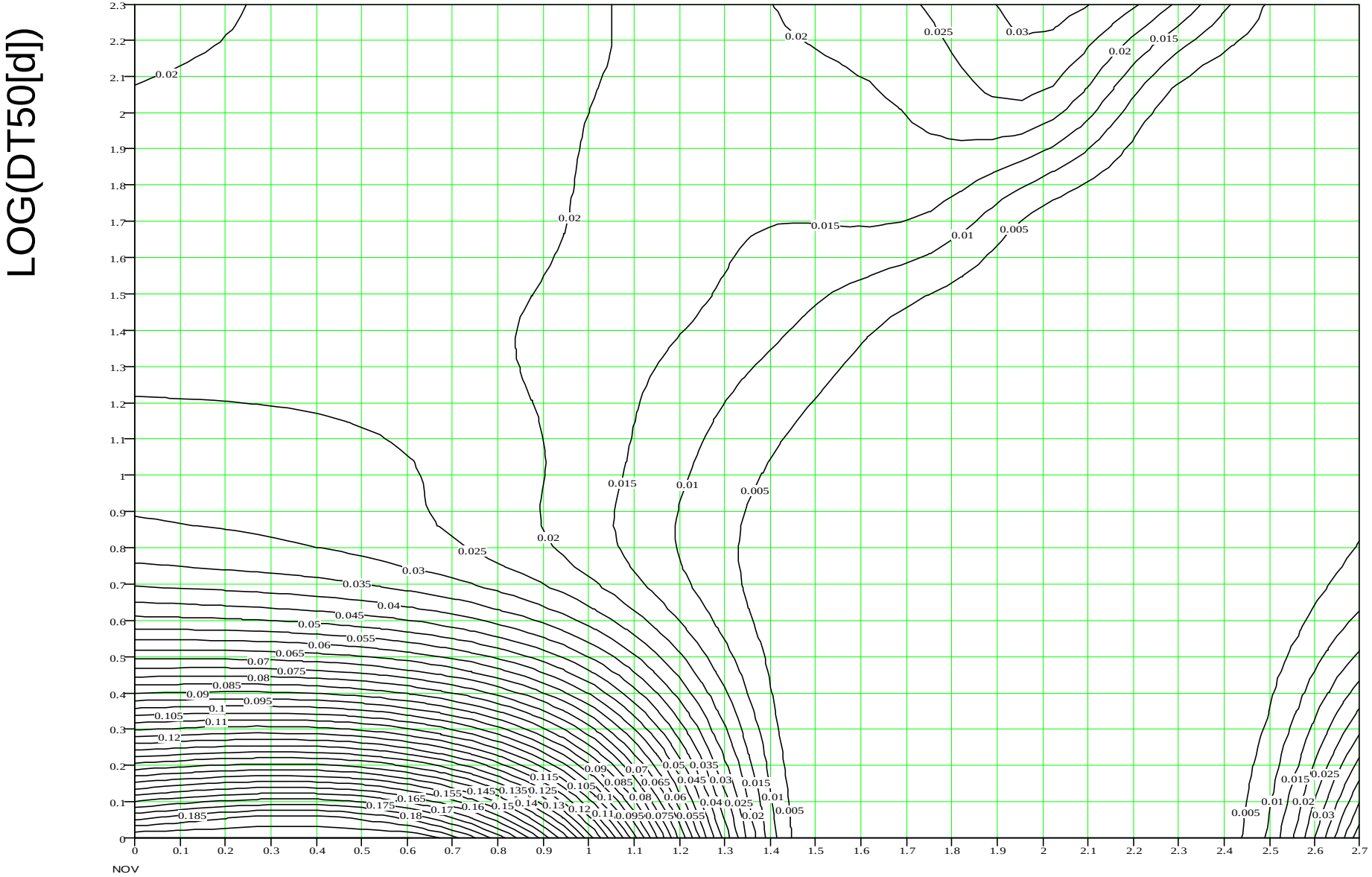
Szenario 13,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



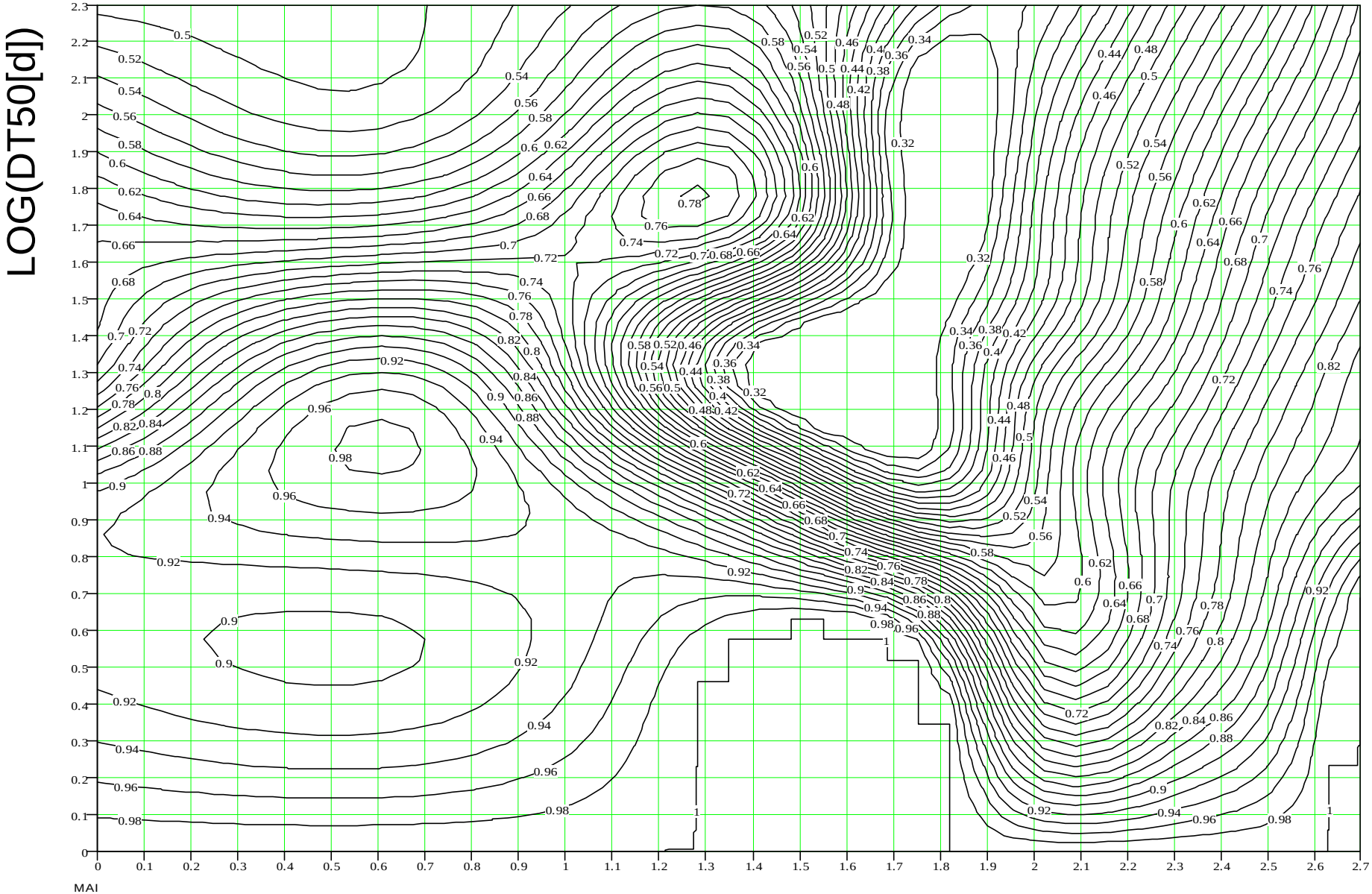
Szenario 13,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



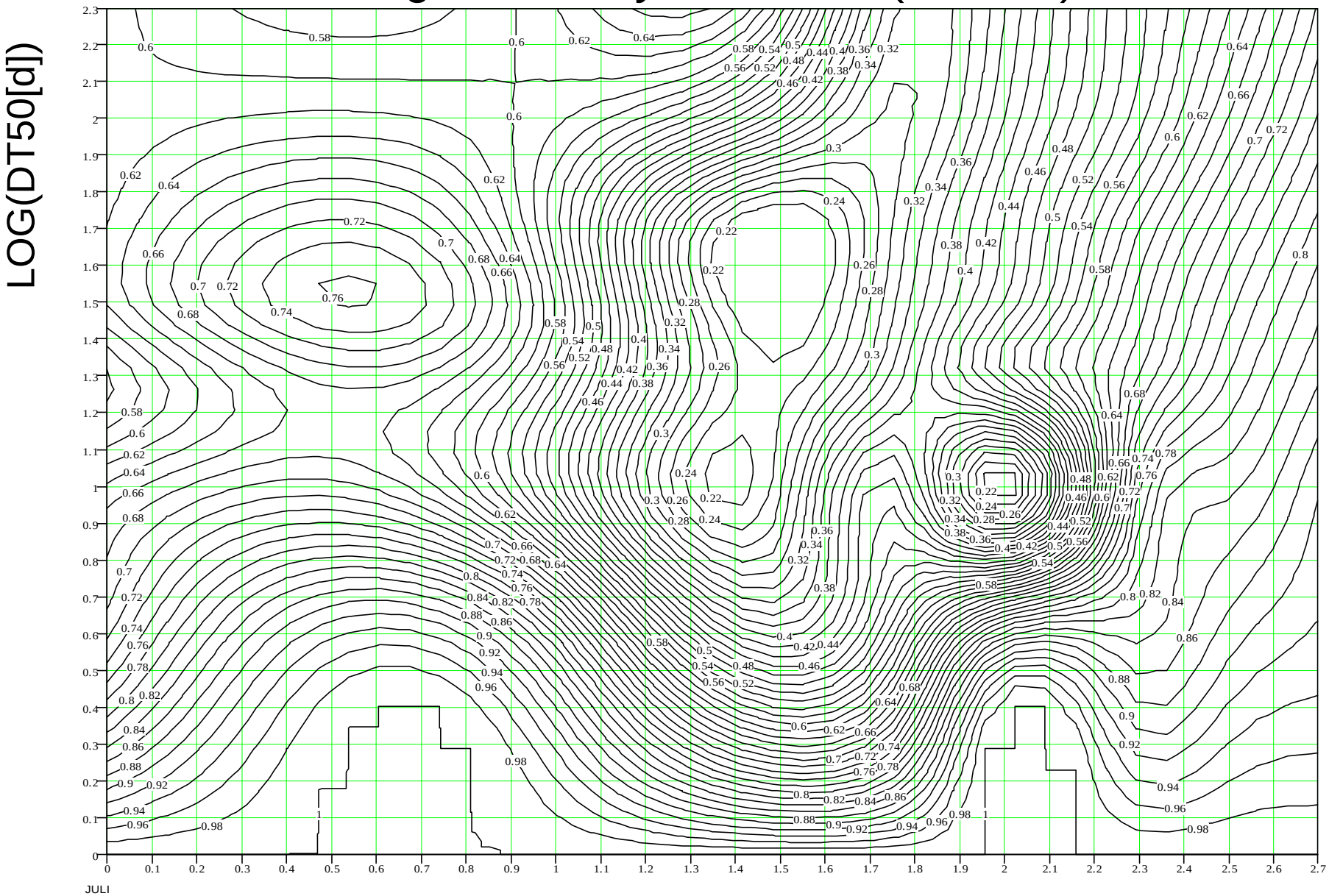
Szenario 13,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-6}$)



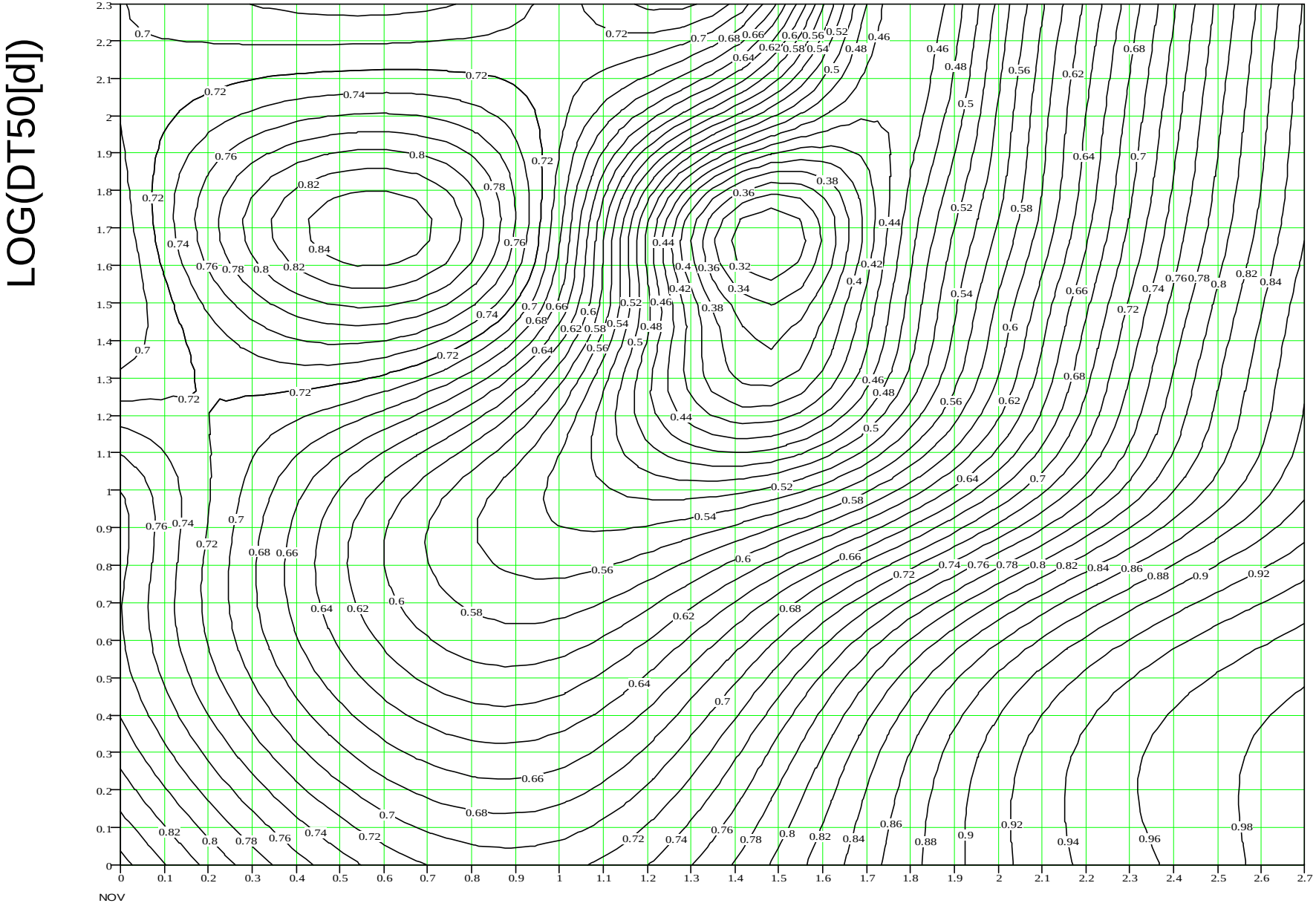
Szenario 14,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF (H>10^{-6})



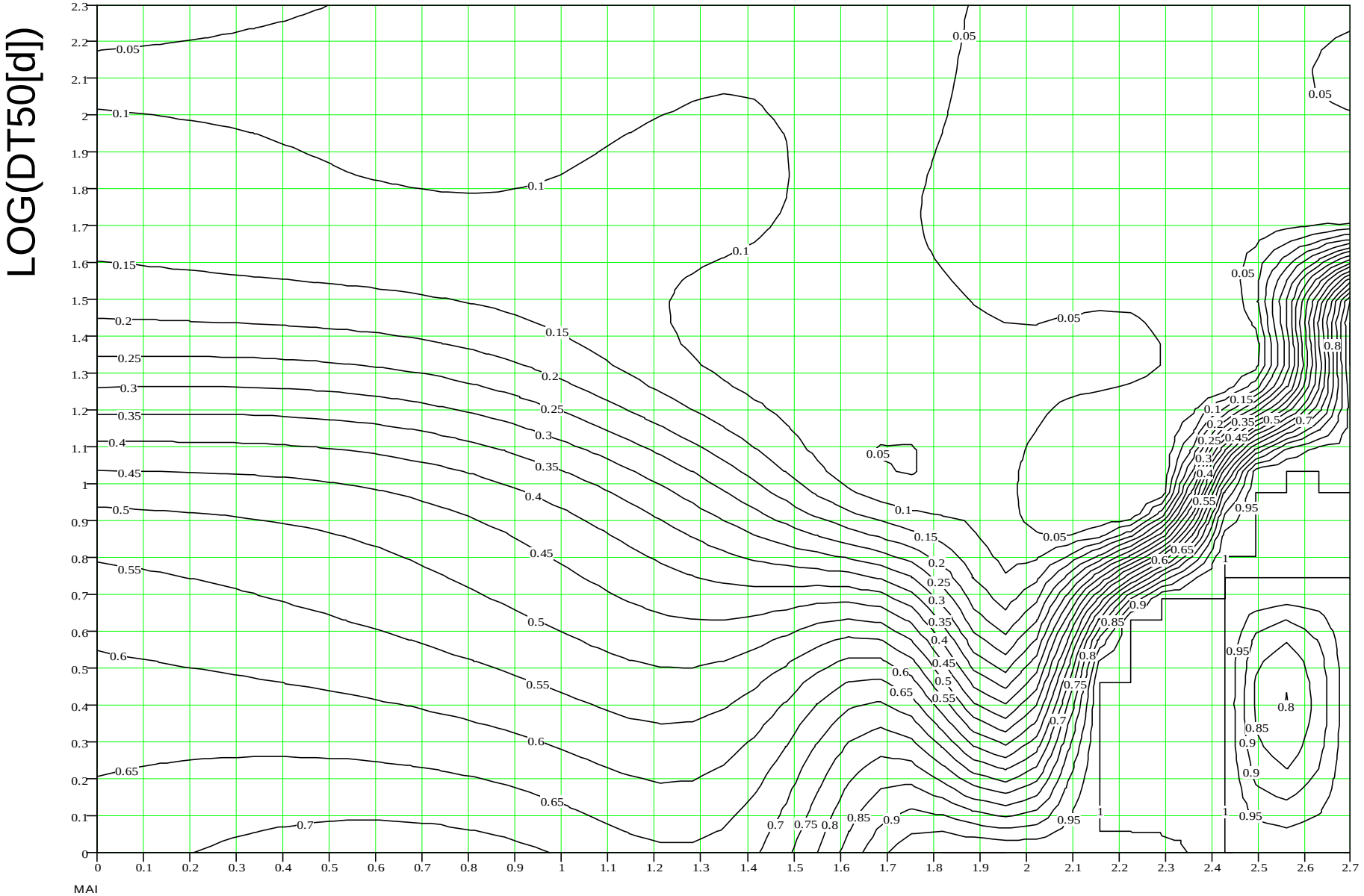
Szenario 14,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-6}$)



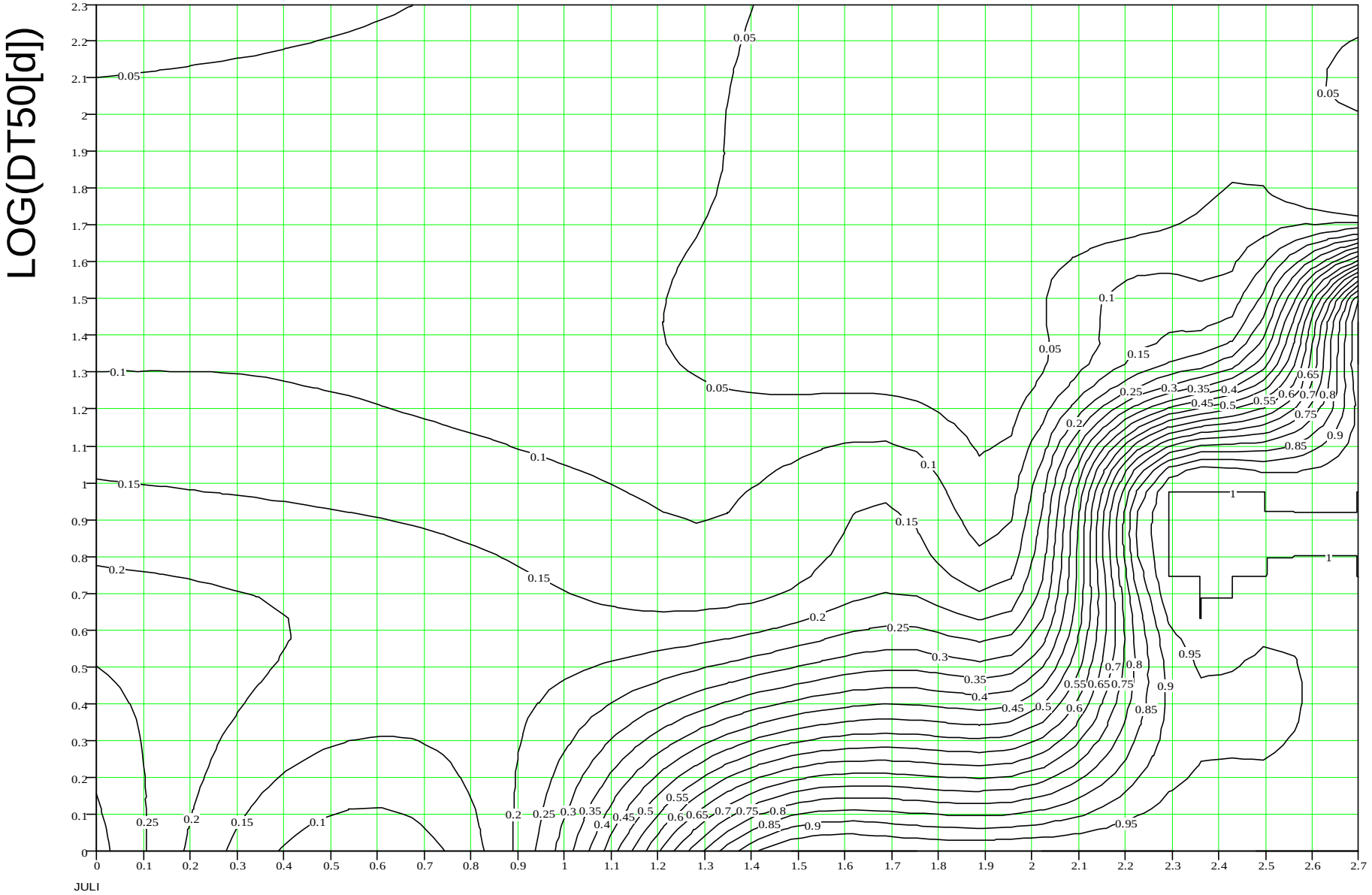
Szenario 14,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



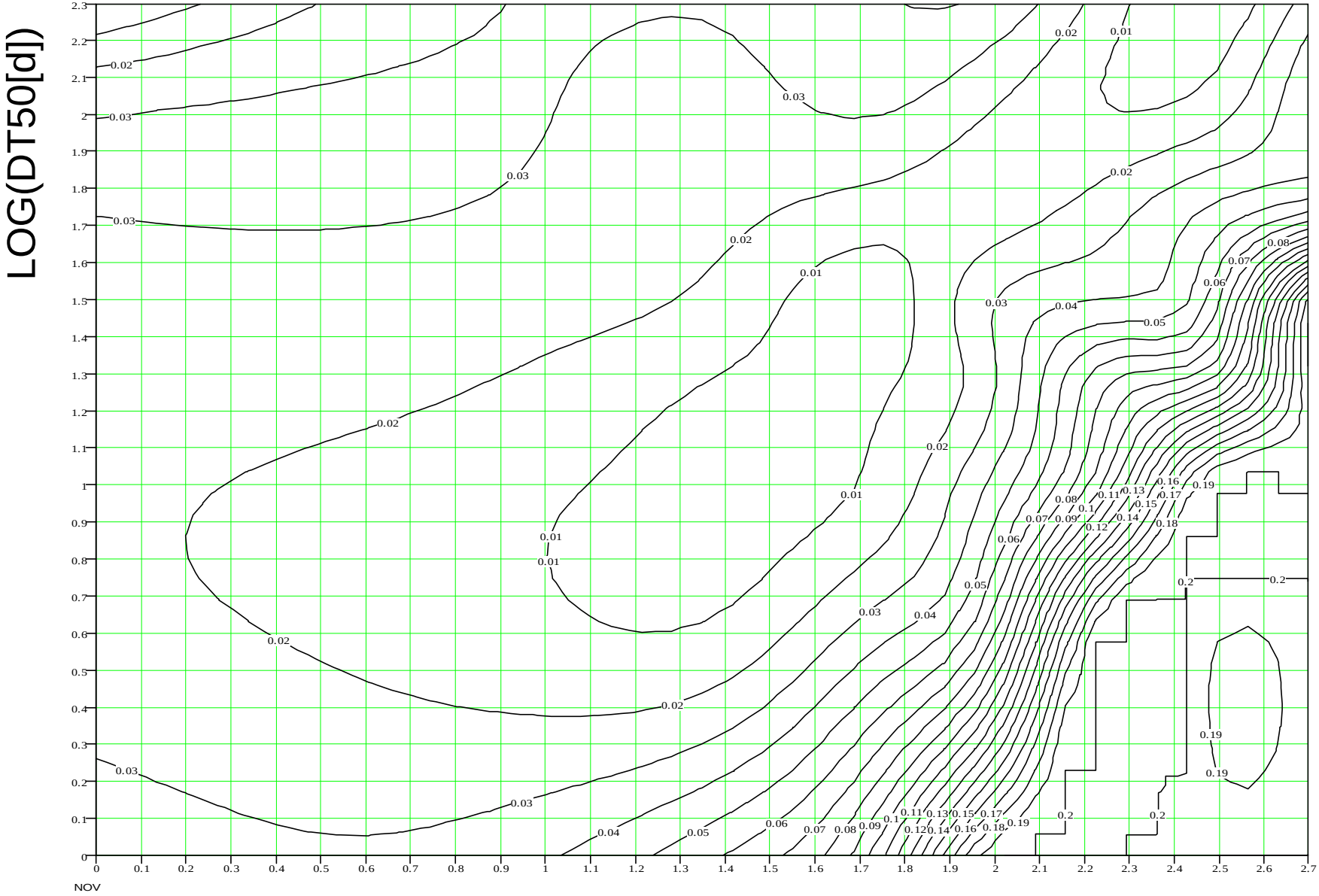
Szenario 15,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



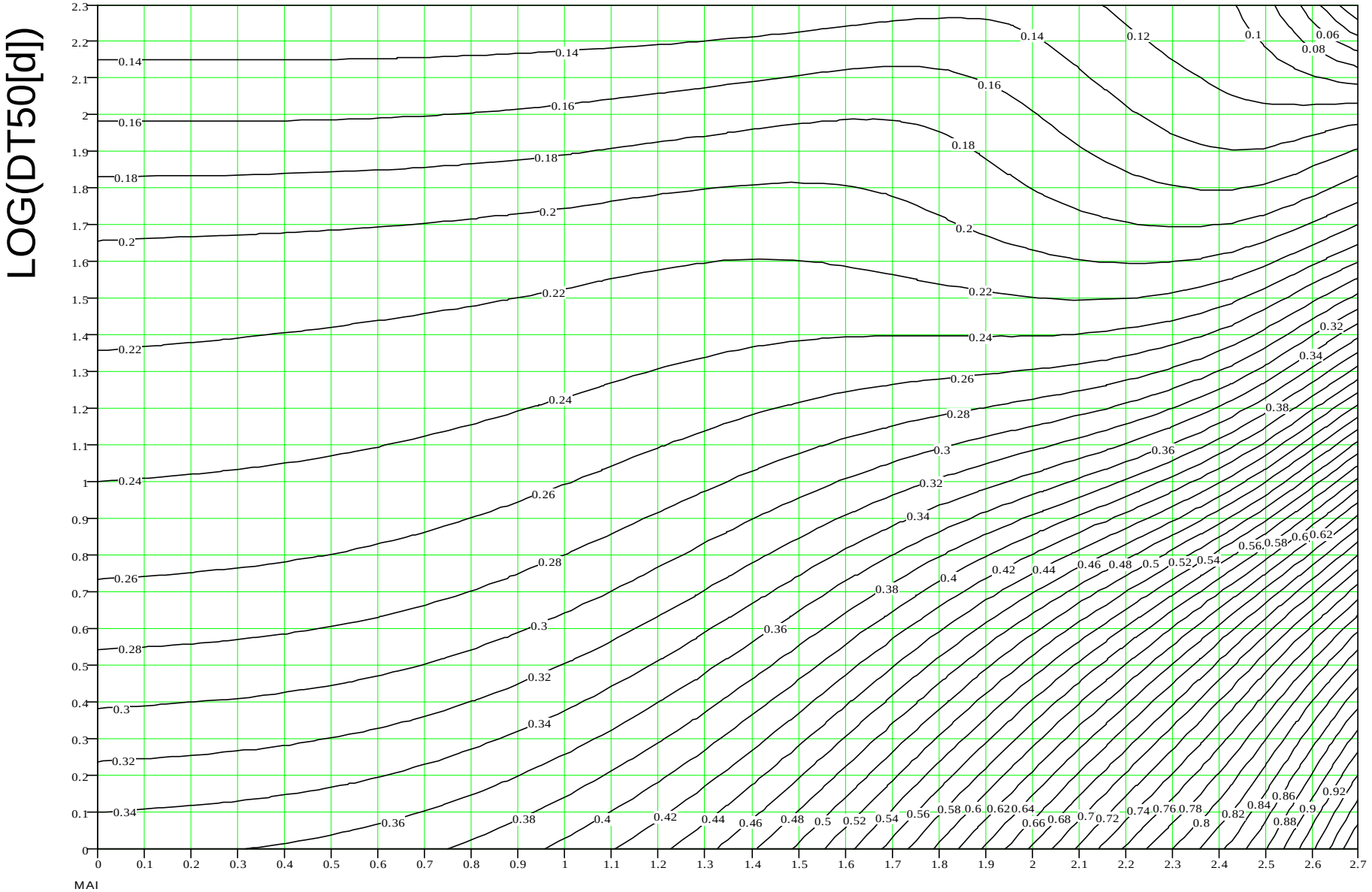
Szenario 15,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



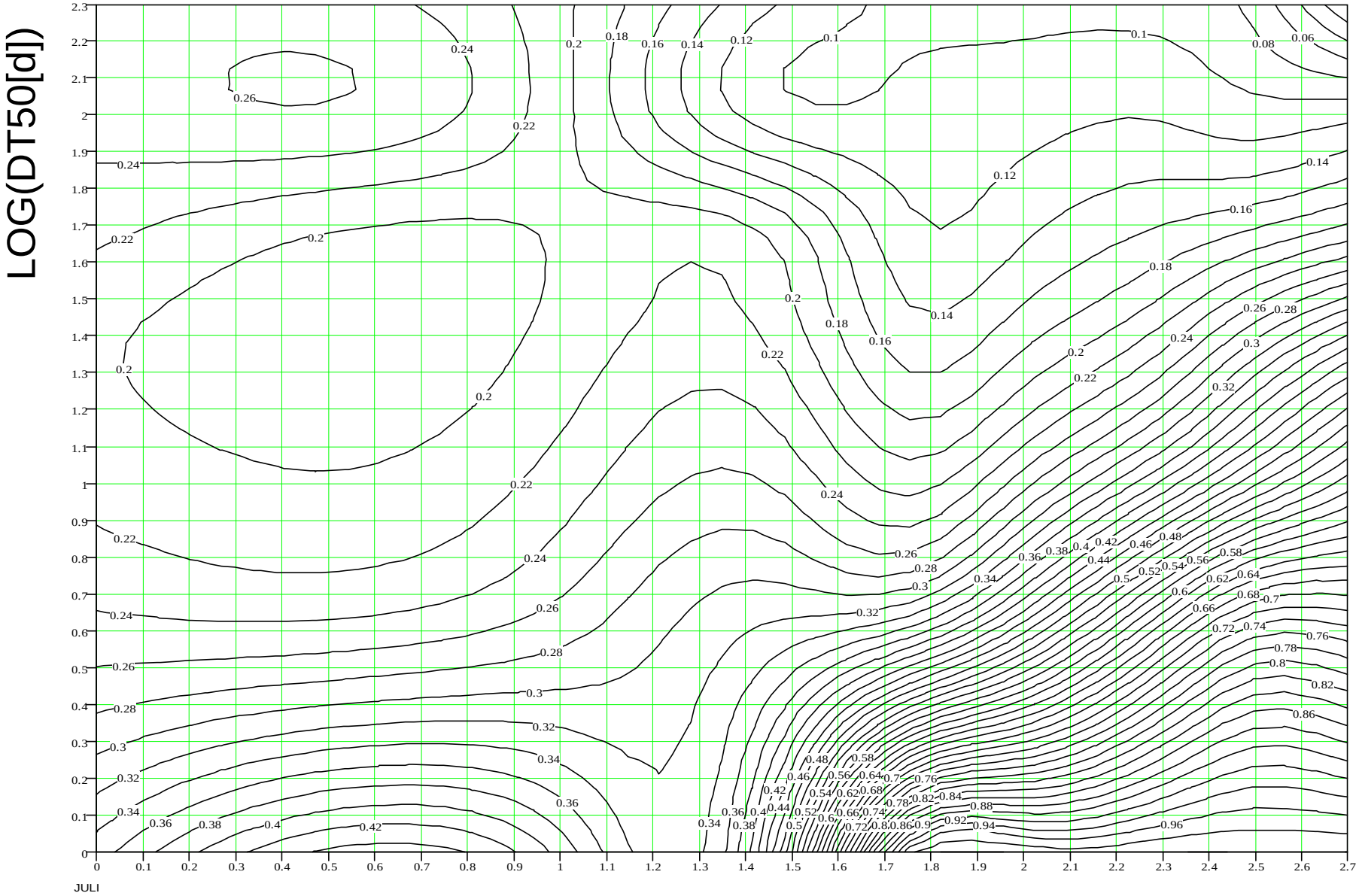
Szenario 15,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



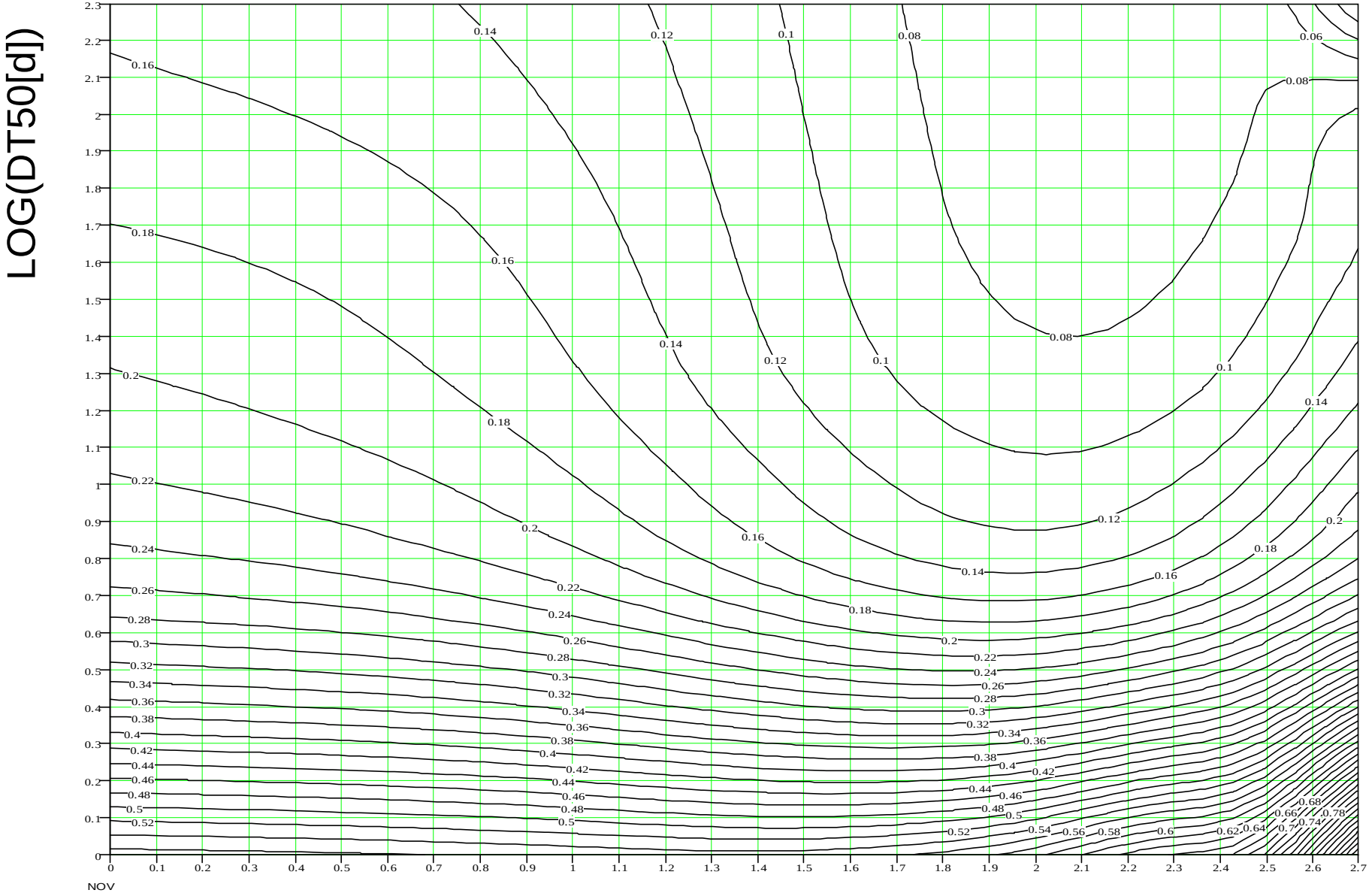
Szenario 16,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



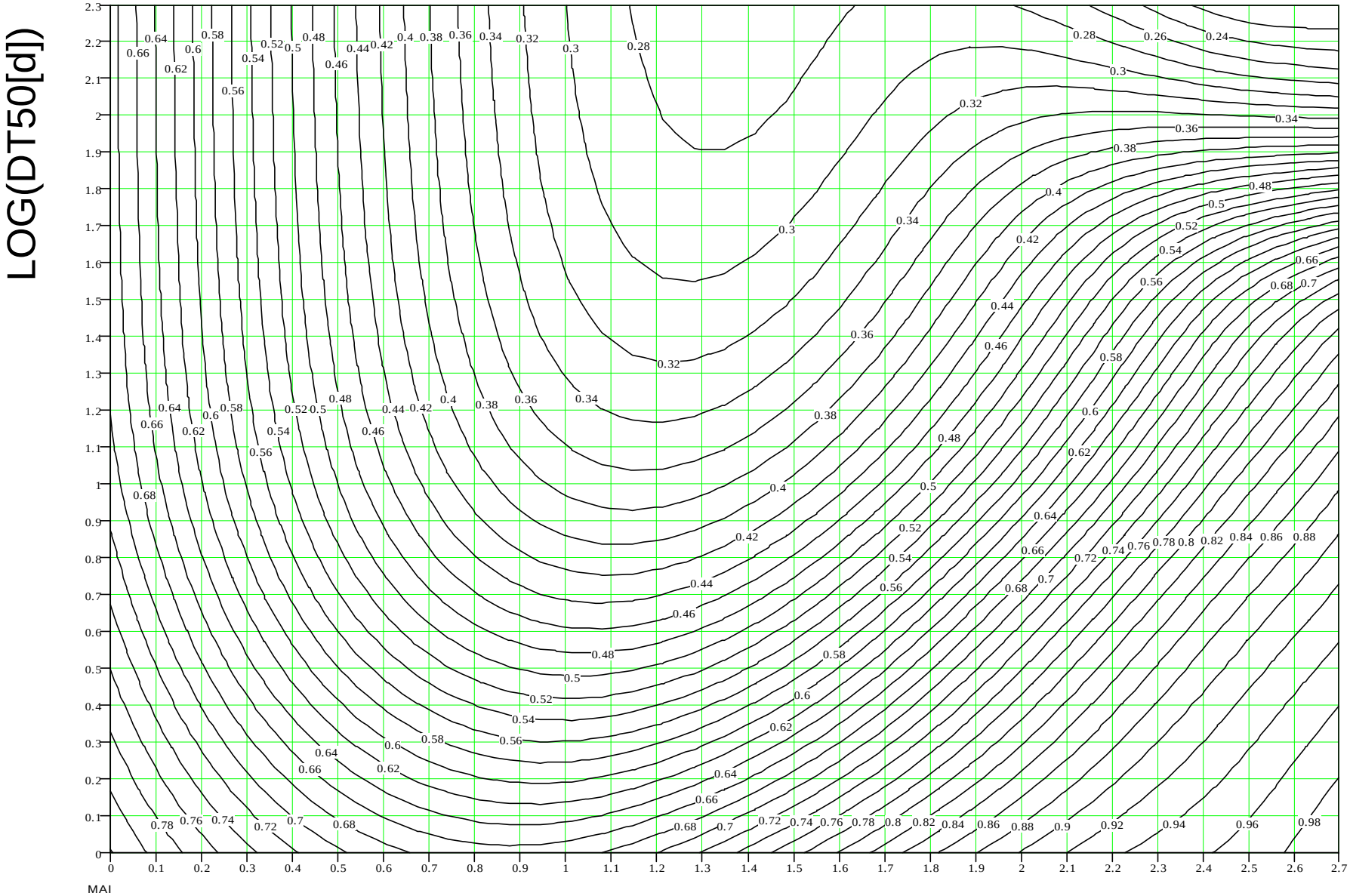
Szenario 16,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



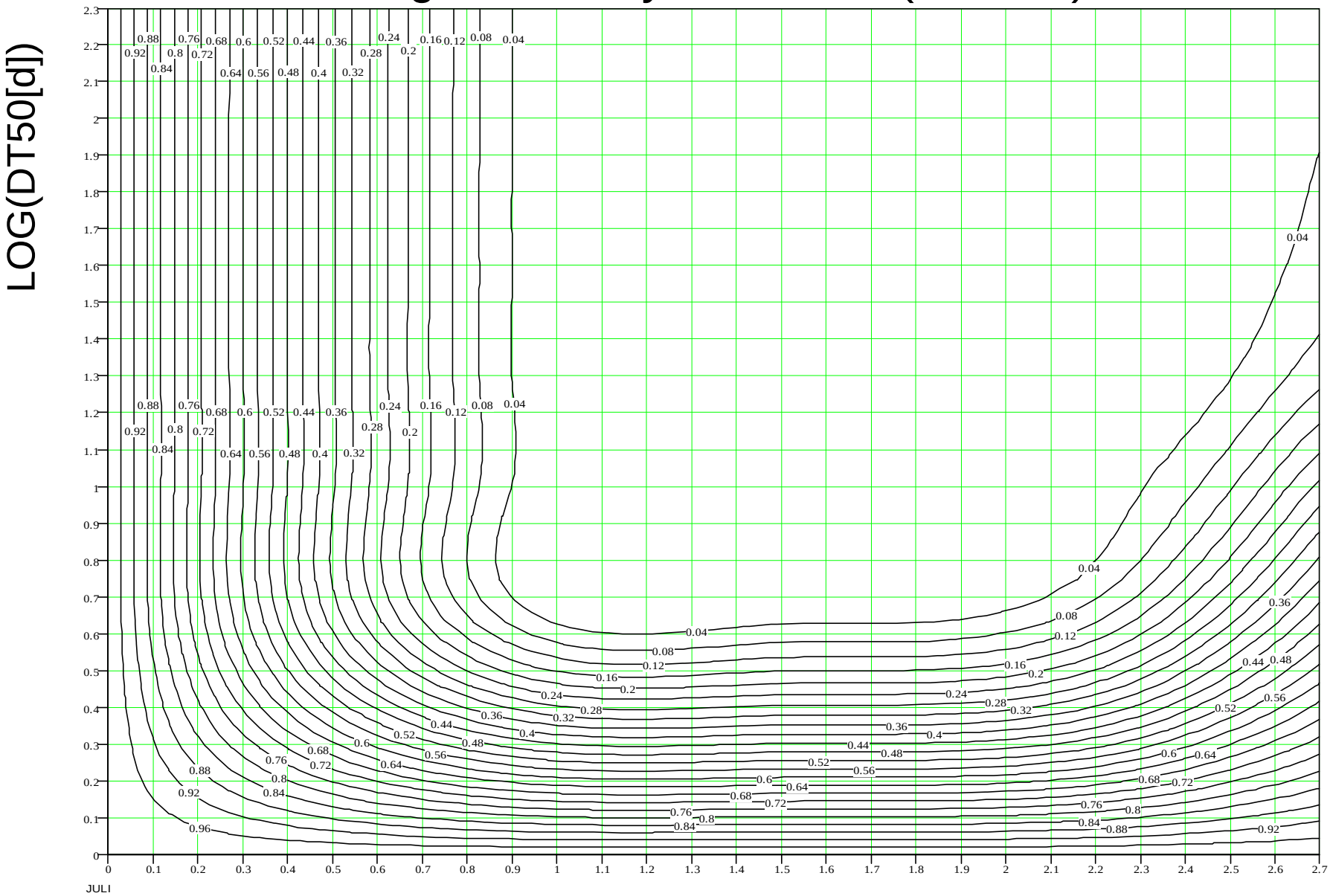
Szenario 16,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



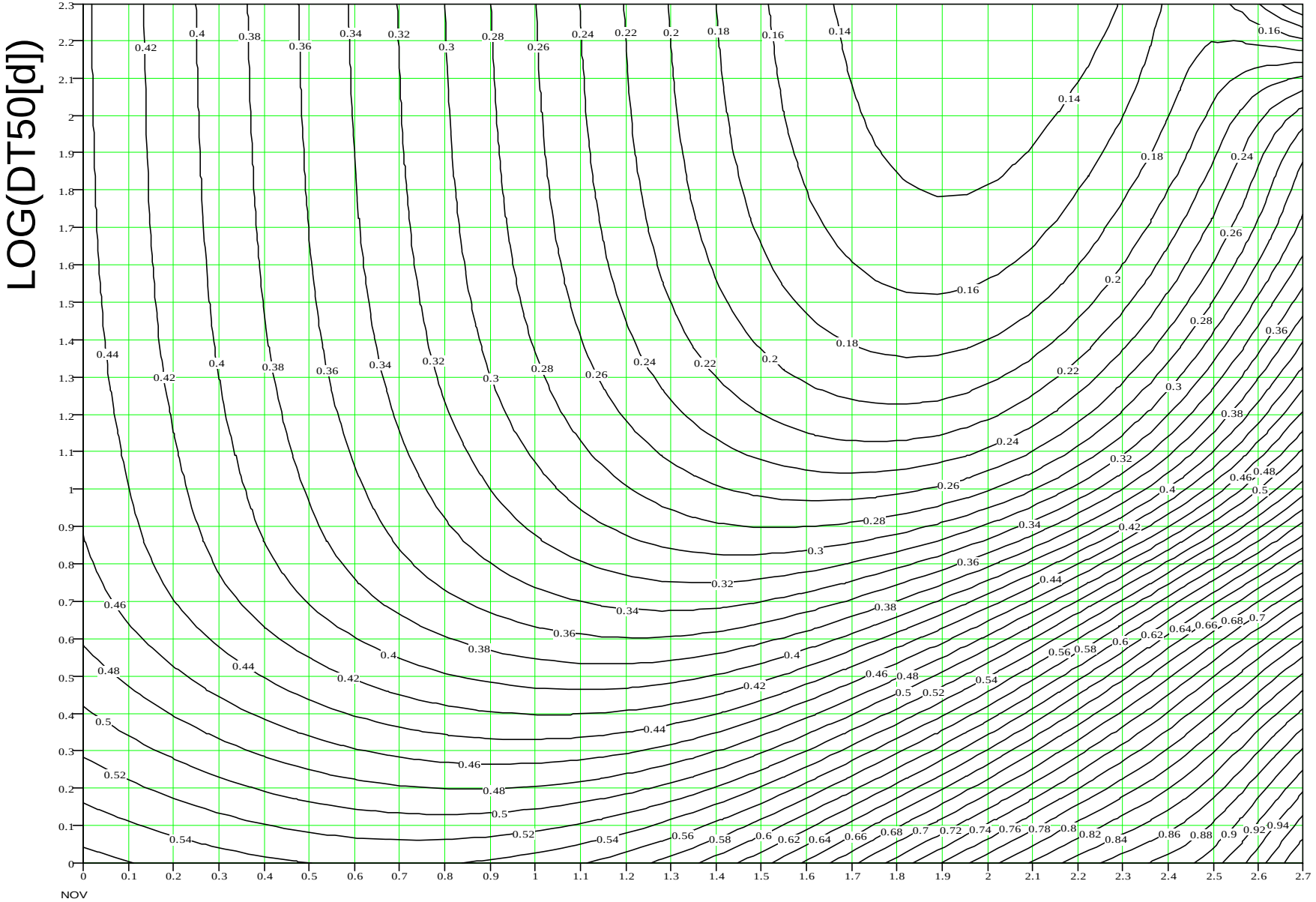
Szenario 17,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



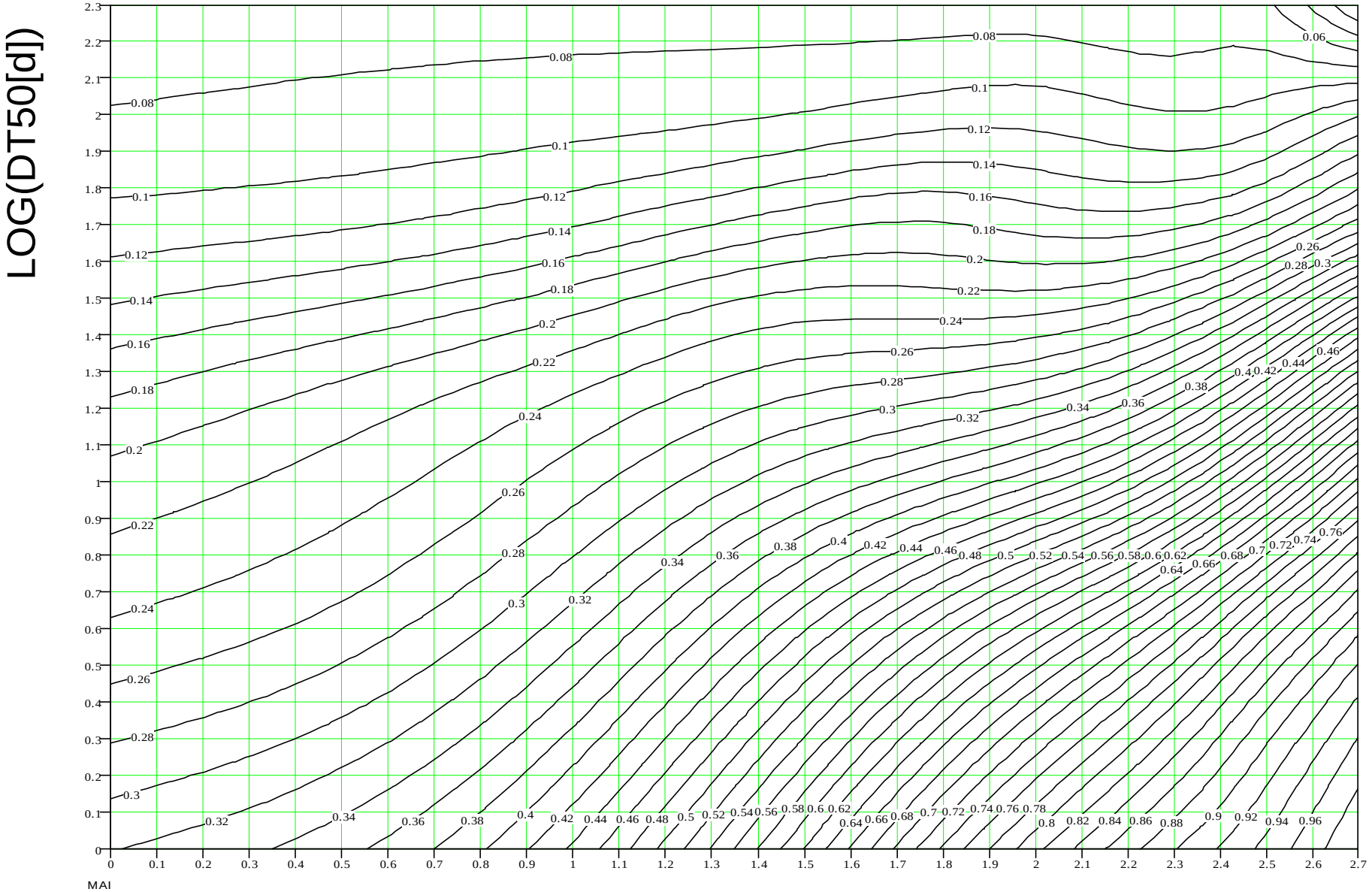
Szenario 17,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



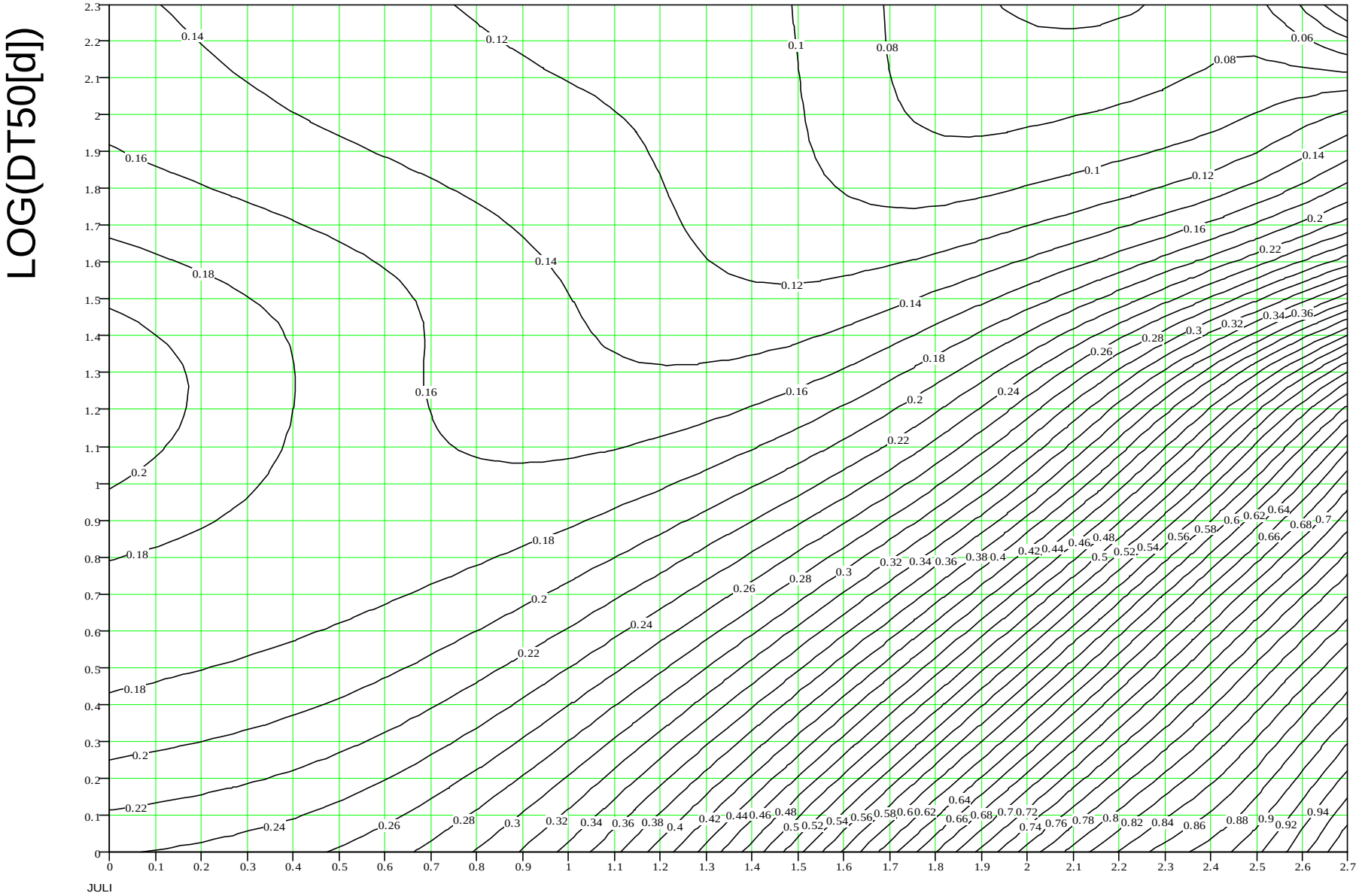
Szenario 17,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



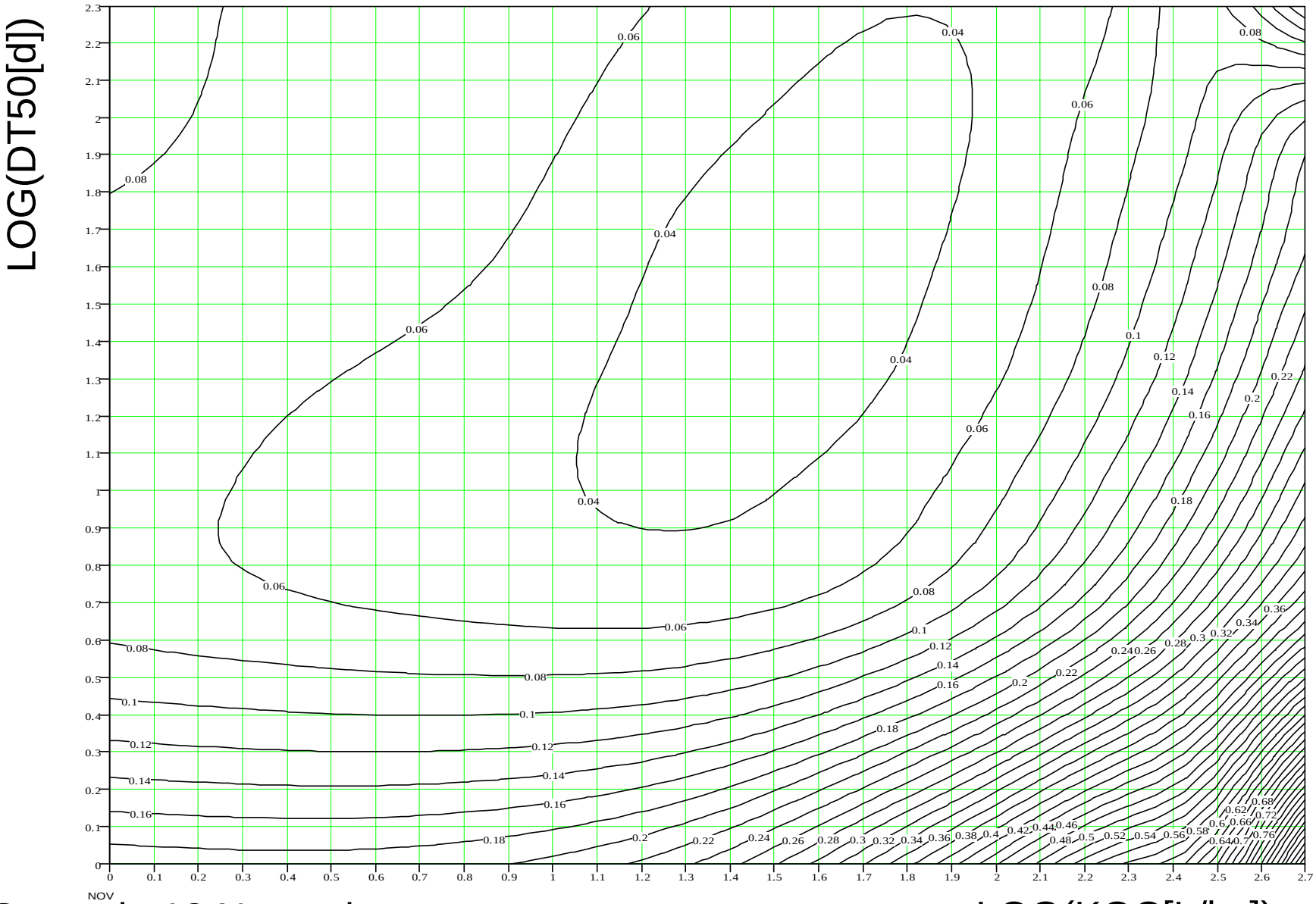
Szenario 18,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



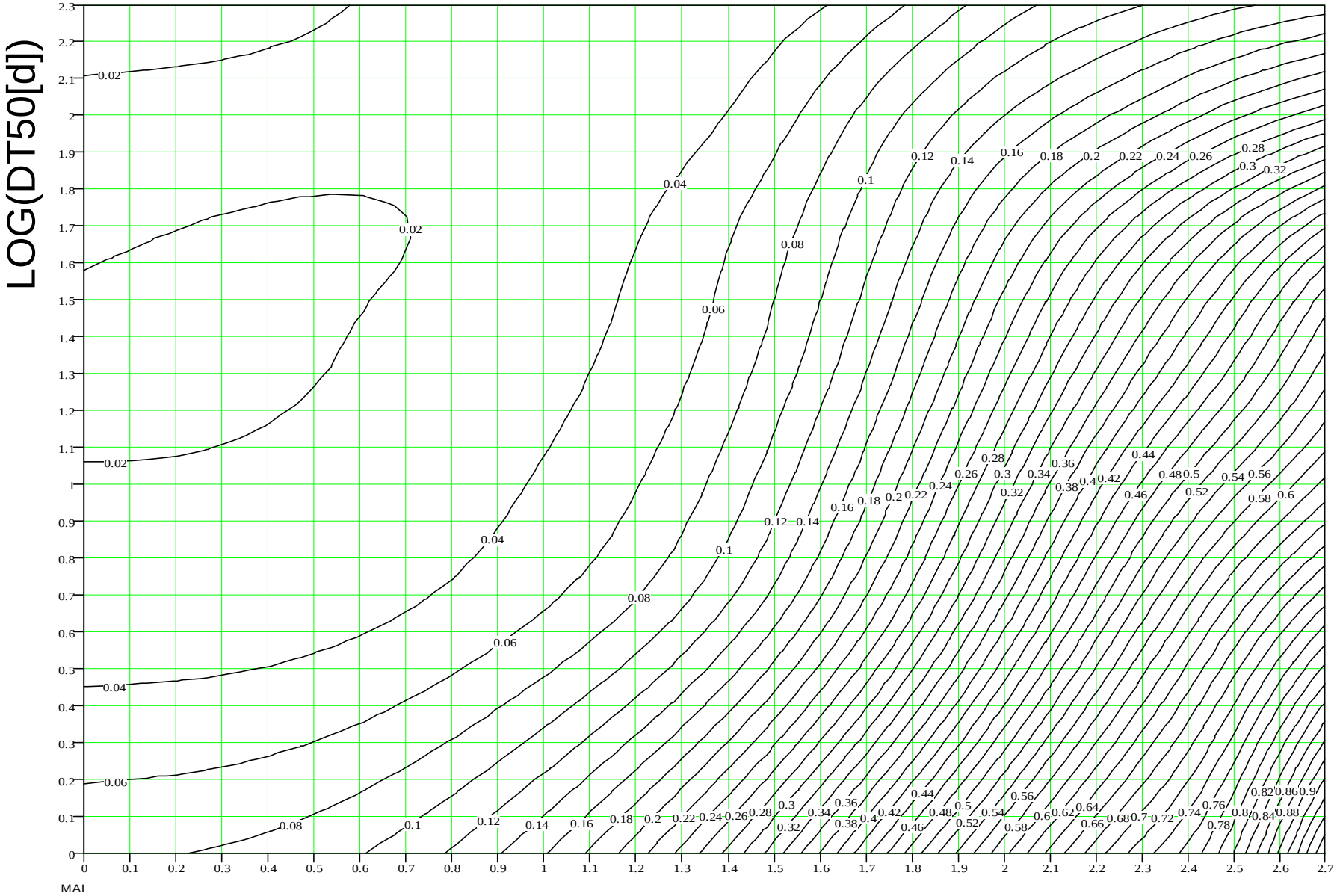
Szenario 18,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



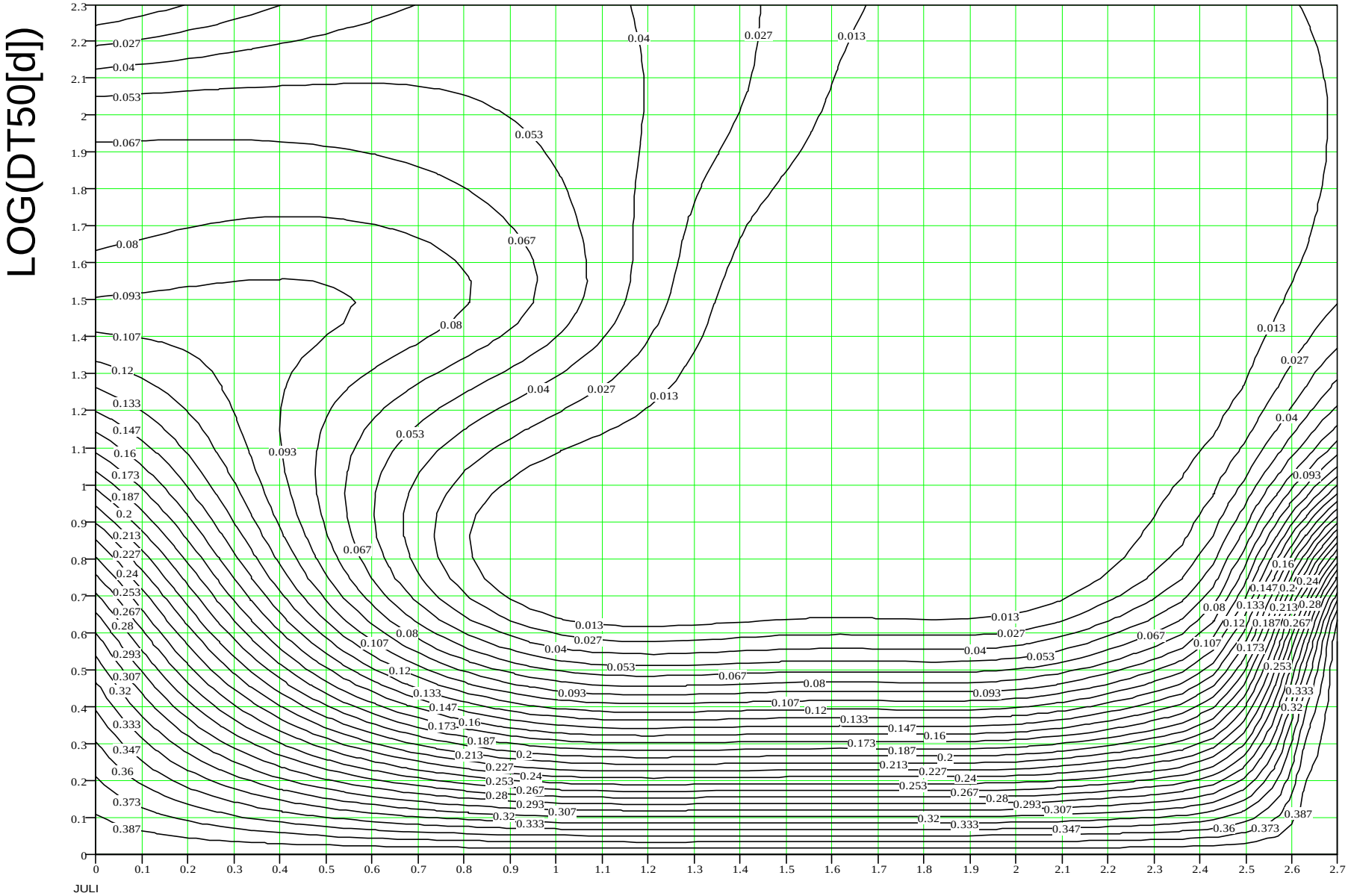
Szenario 18,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



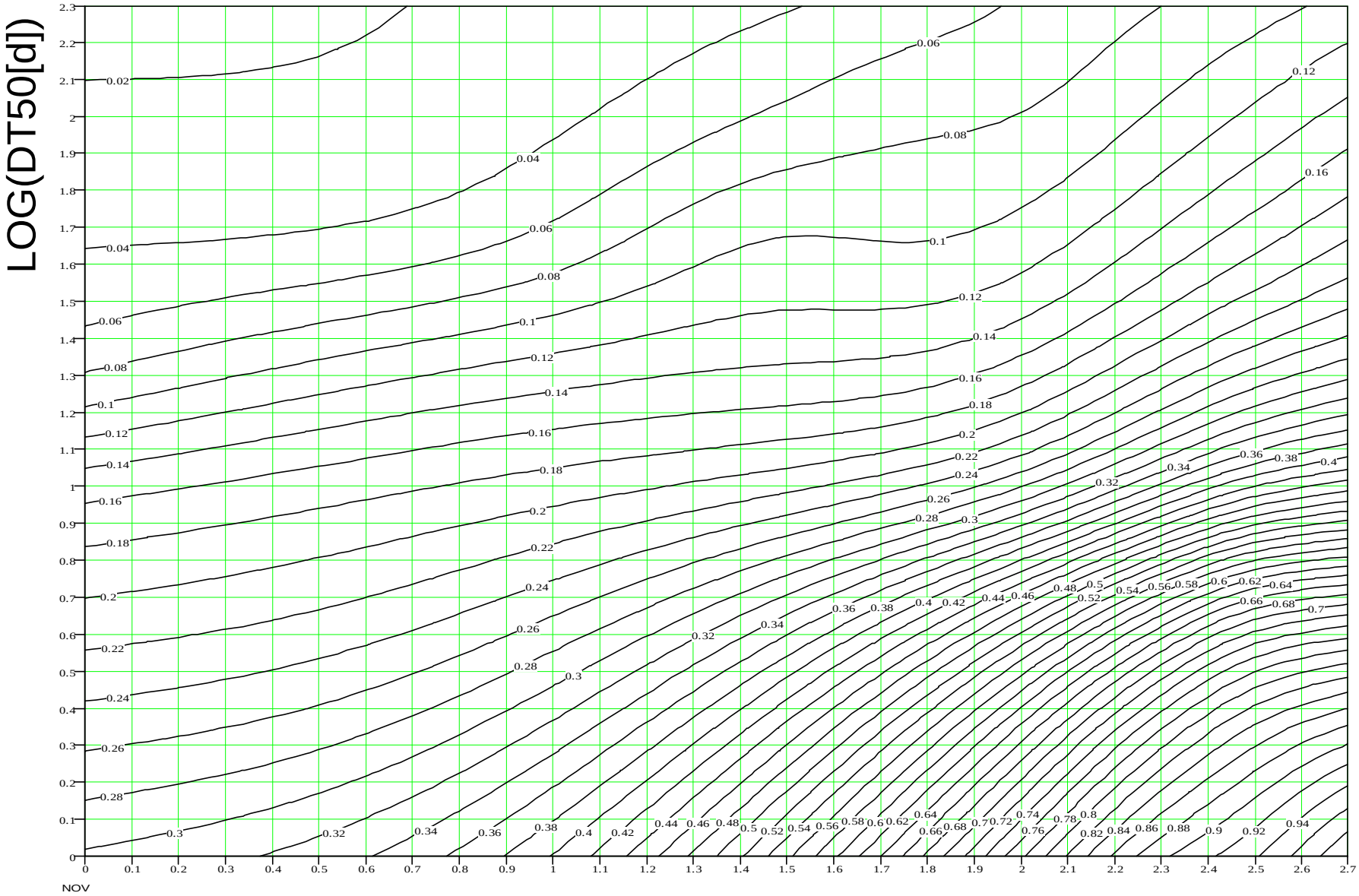
Szenario 19,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



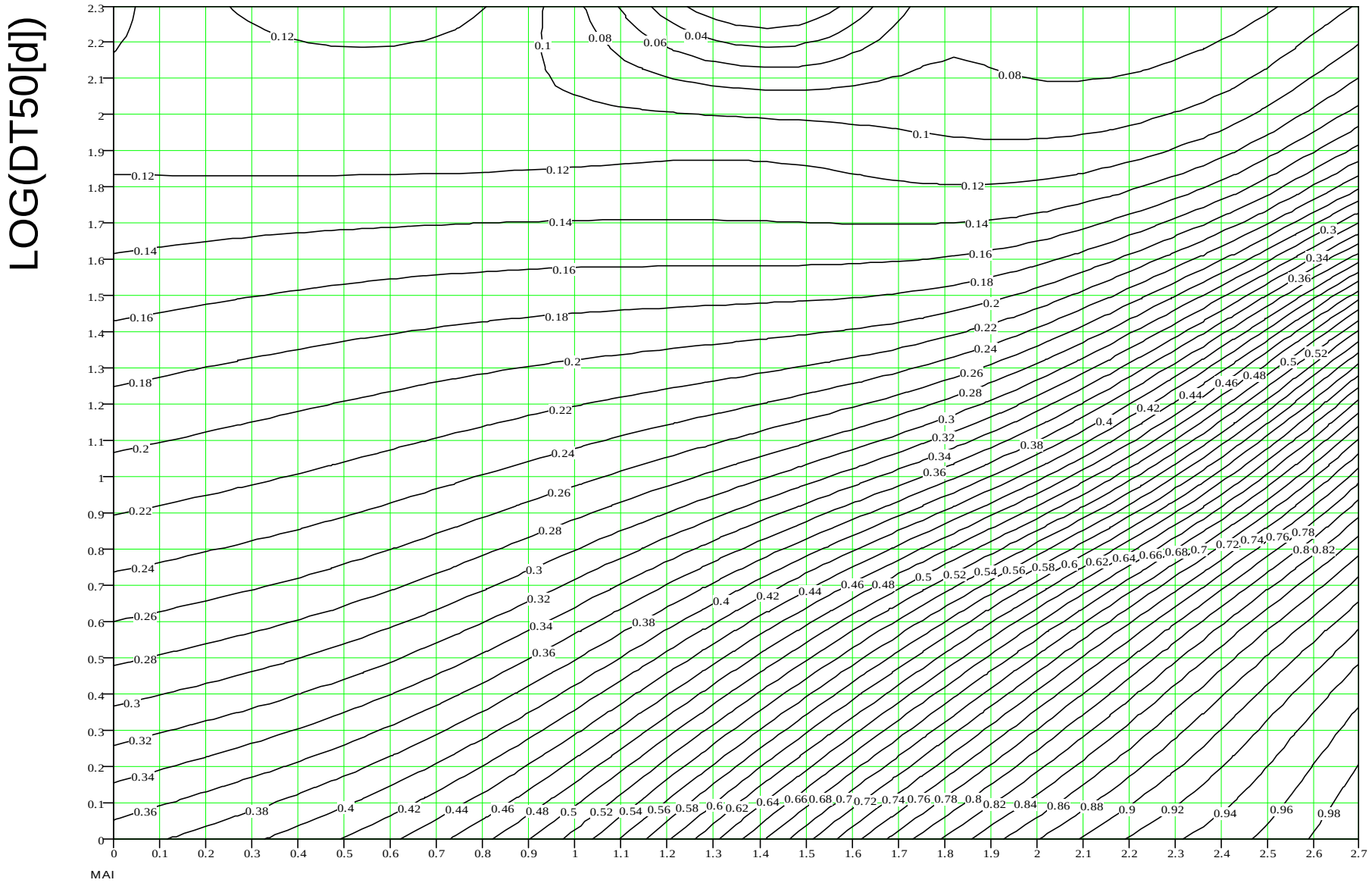
Szenario 19,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



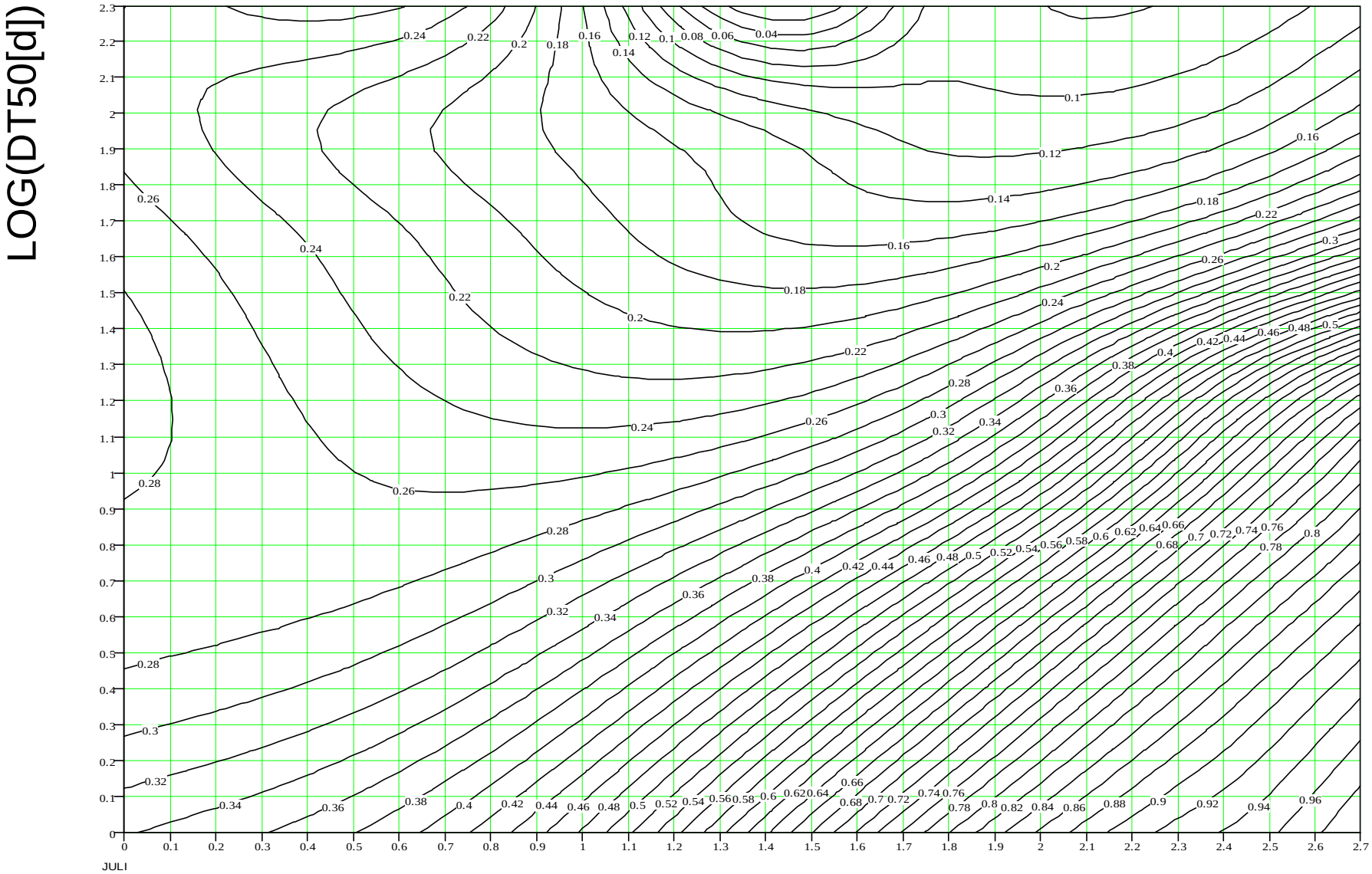
Szenario 19,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



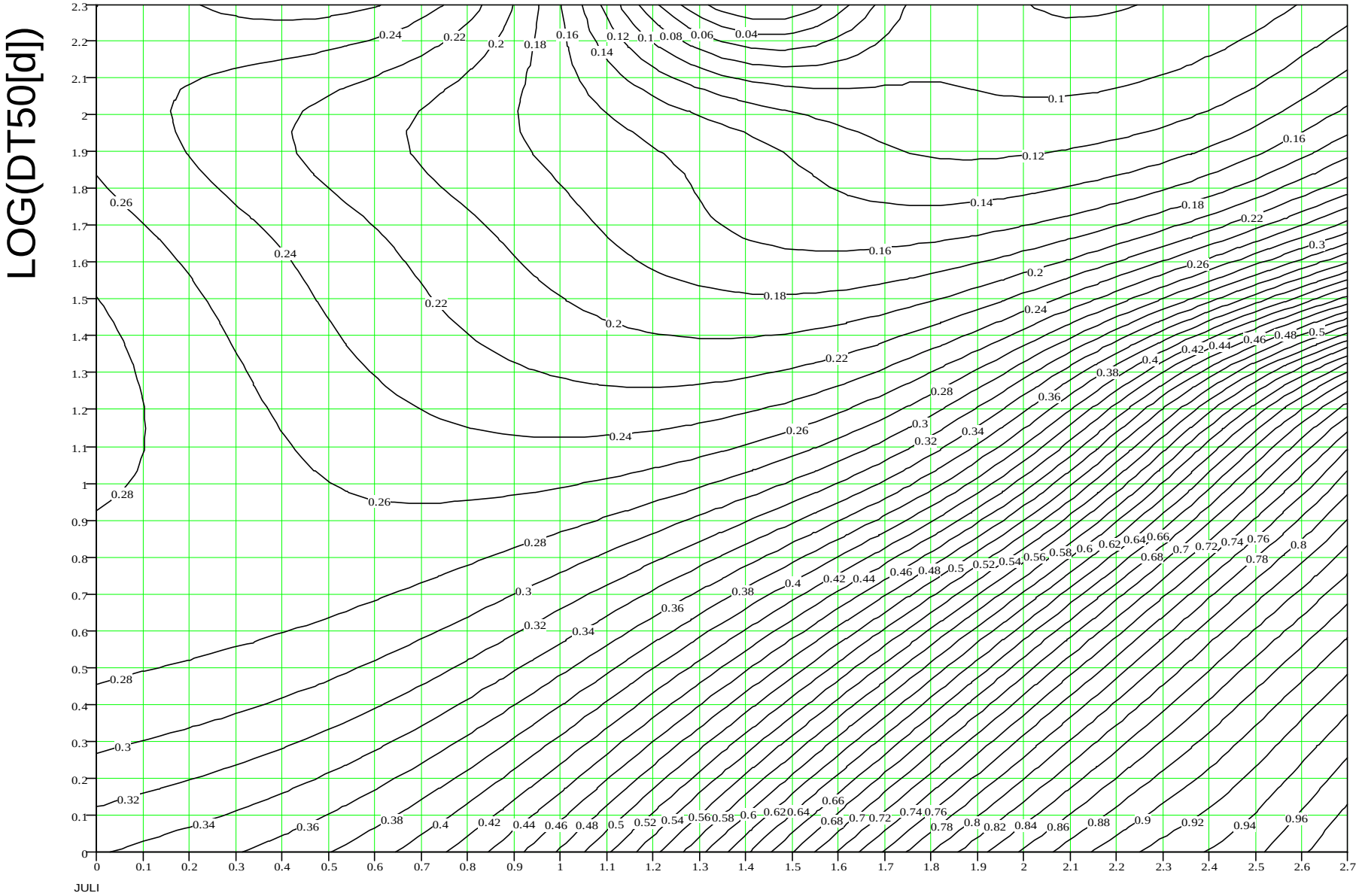
Szenario 20,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



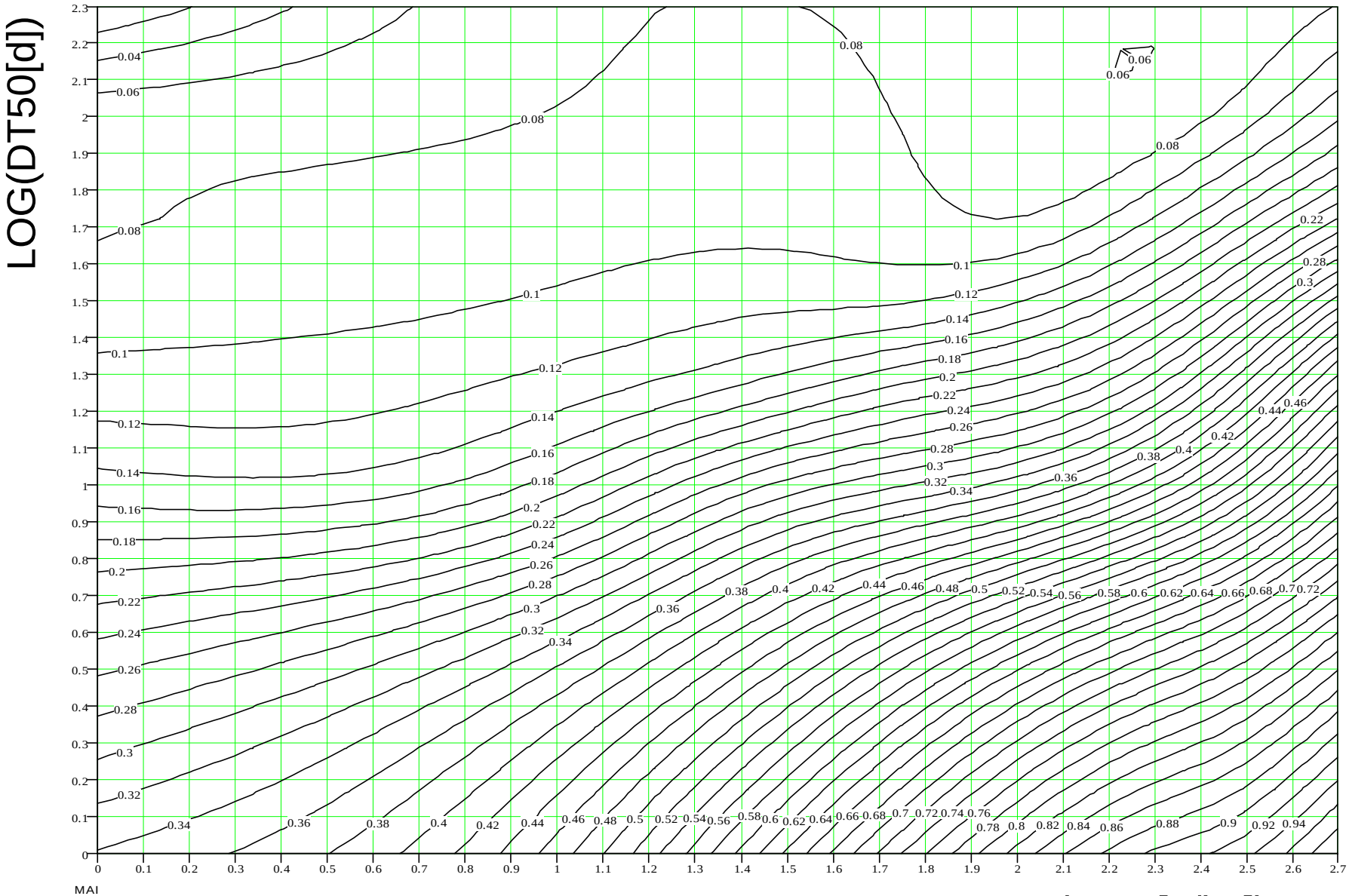
Szenario 20,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



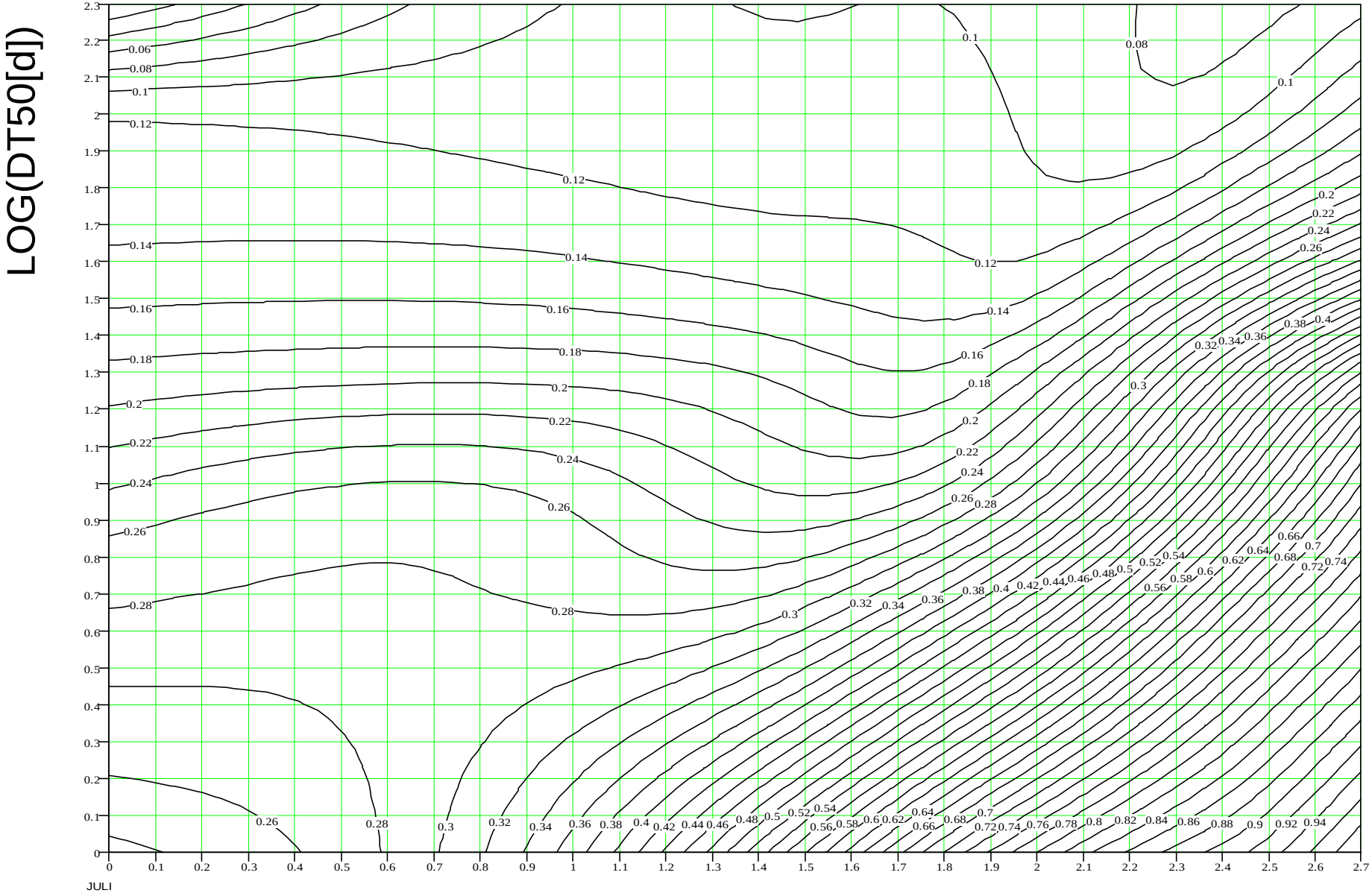
Szenario 20,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



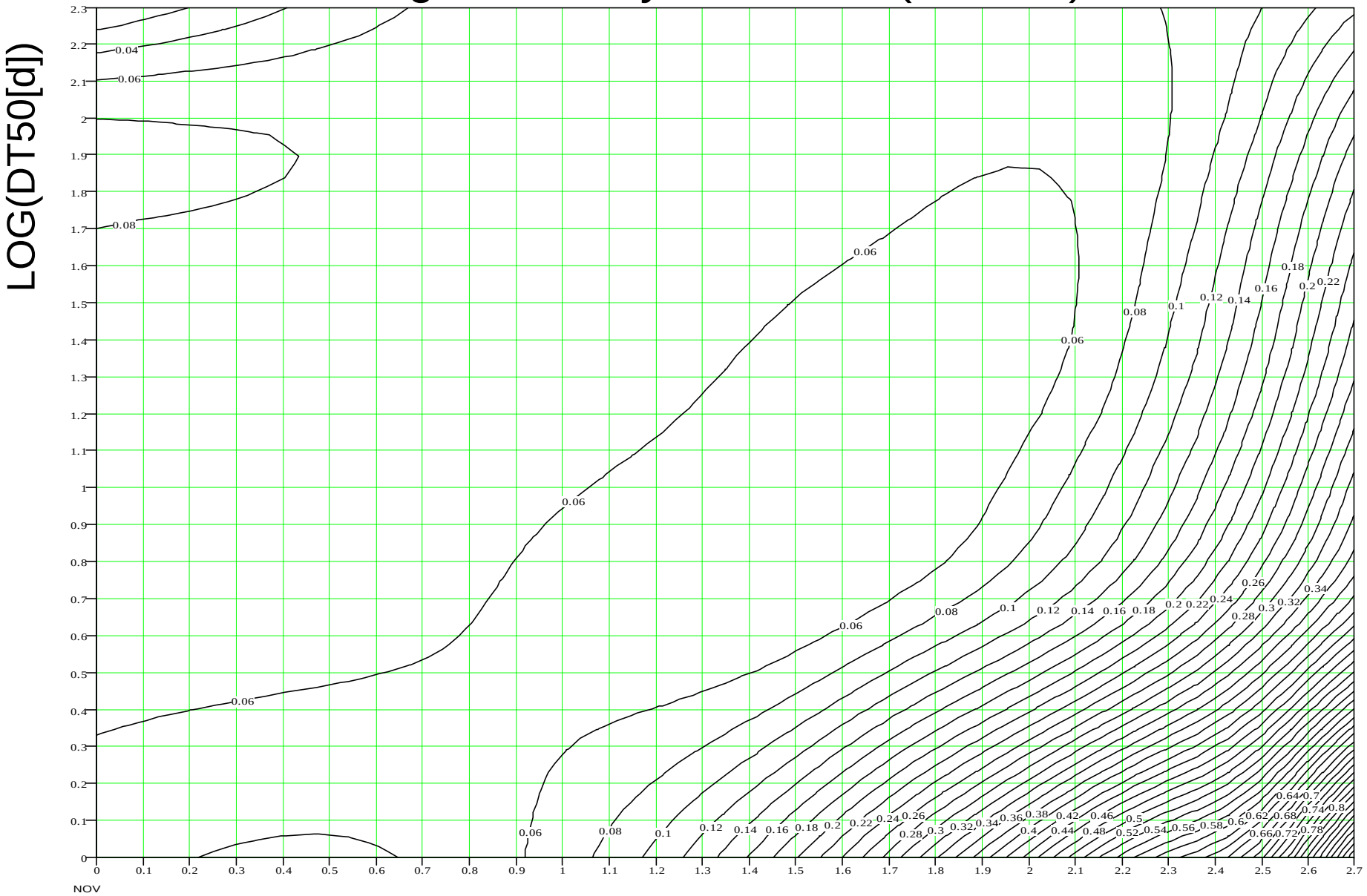
Szenario 21,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



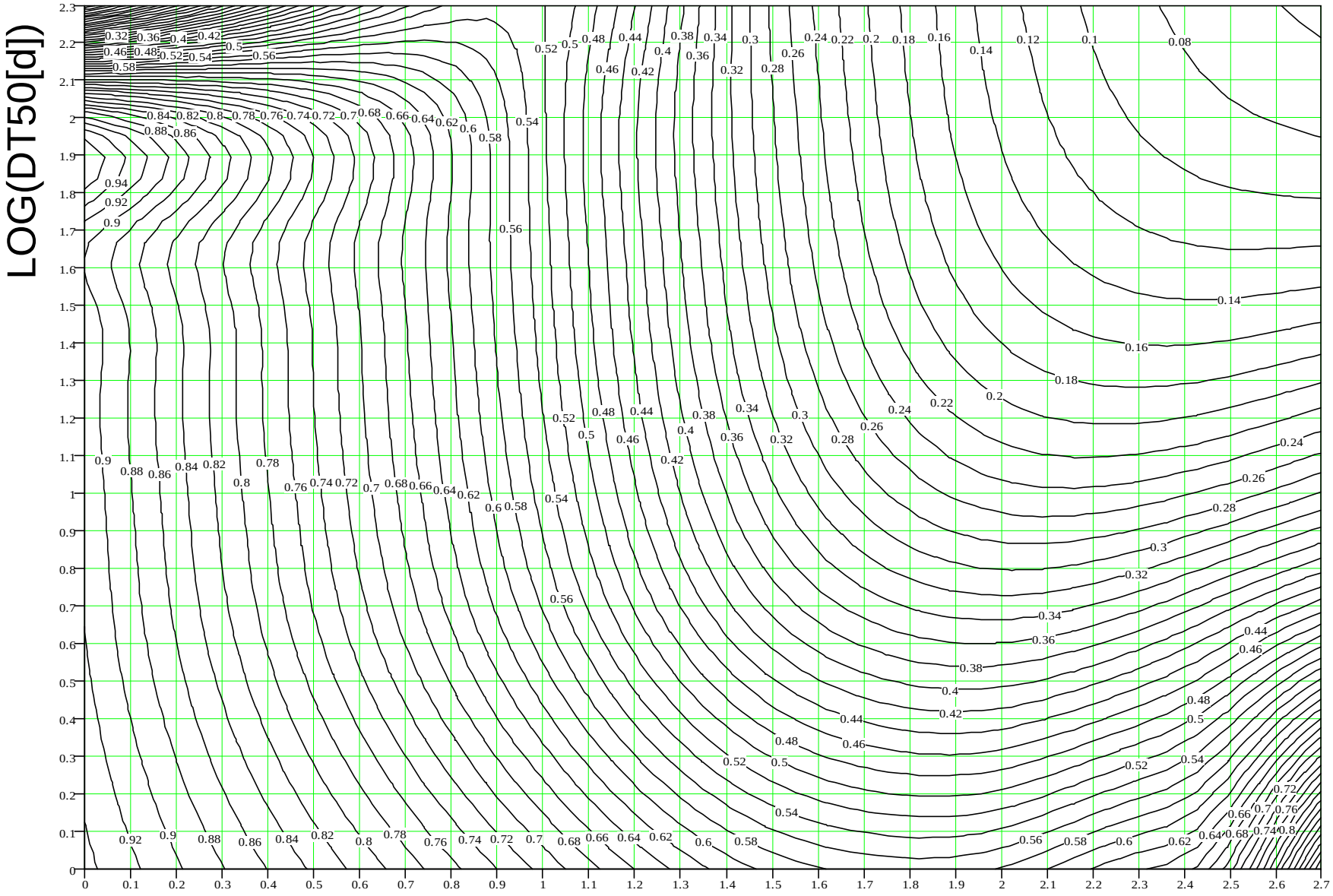
Szenario 21,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



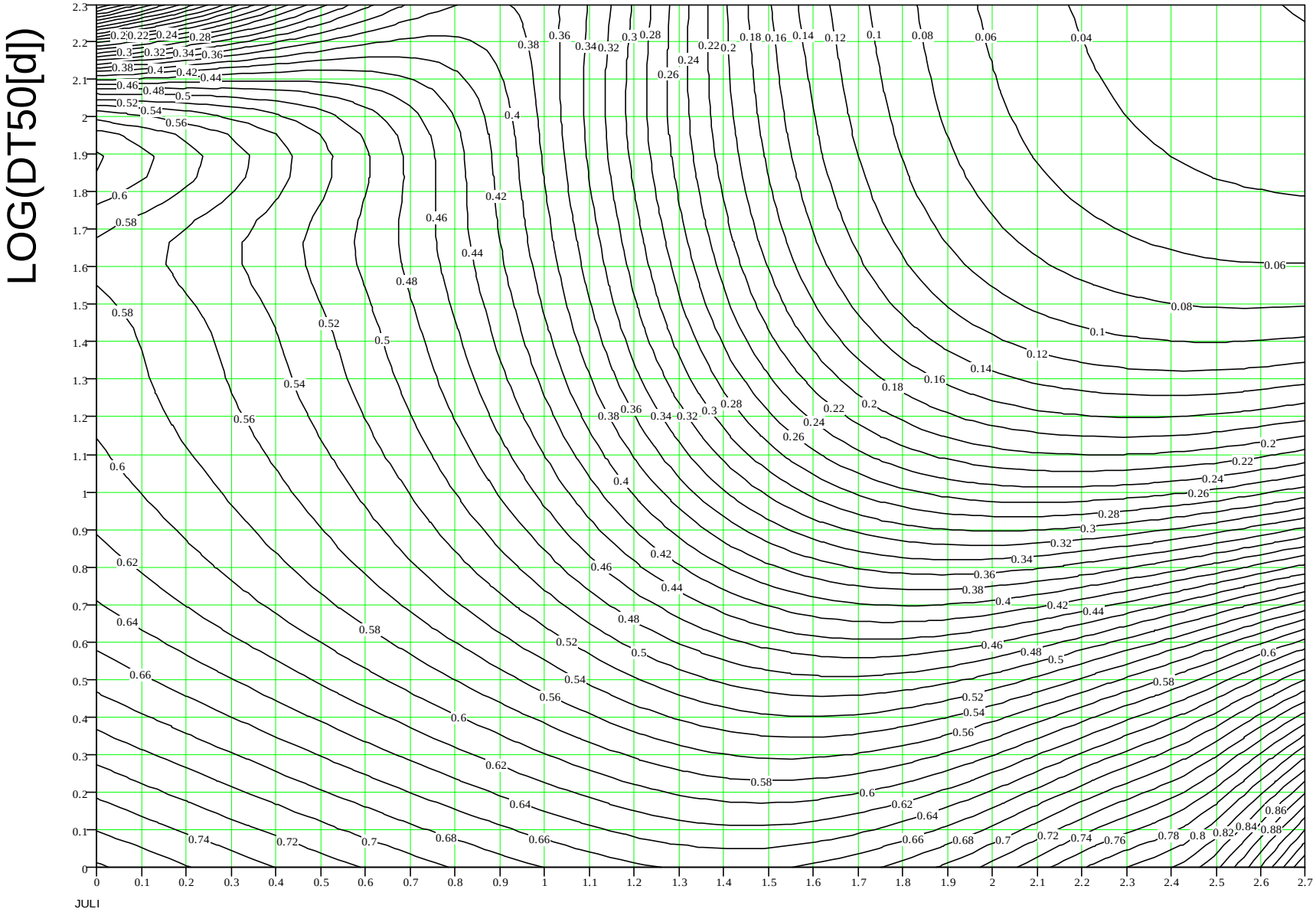
Szenario 21,November

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-3}$)



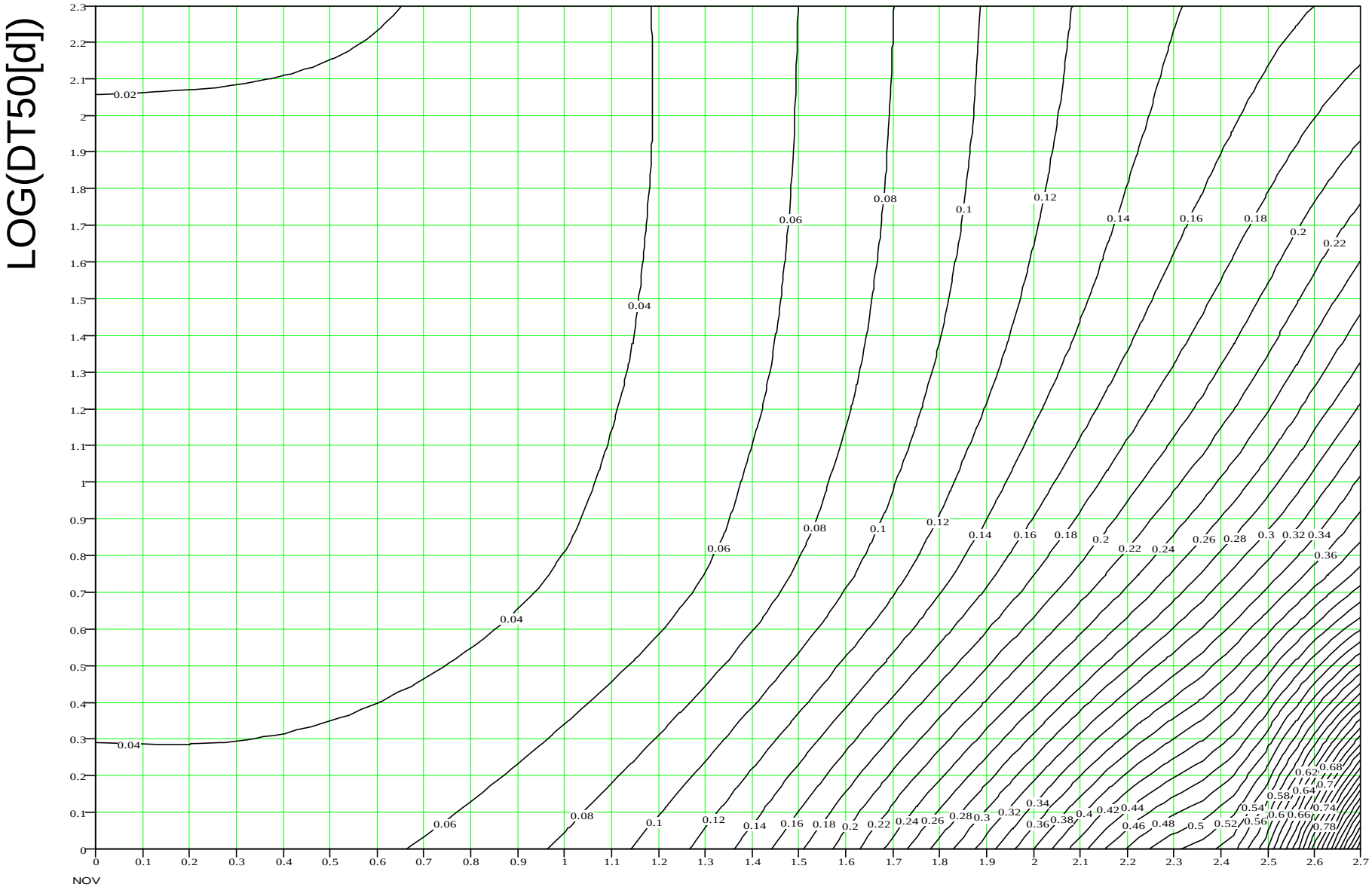
Szenario 22,Mai

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-3}$)



Szenario 22,Juli

Bestimmung des Henryfaktors HF ($H>10^{-4}$)



Szenario 22,November

Umweltforschungsplan
des Bundesministeriums für Umwelt,
Naturschutz und Reaktorsicherheit
Gewässergüte und Wasserwirtschaft

Förderkennzeichen (UFOPLAN) 297 23 663

Anwendung von Modellen zur Abschätzung der Grundwassergefährdung durch organische Stoffe aus Reststoffen

von

Dr. Michael Klein

Anhang 3

Benutzerhandbuch zu MCPELMO 2.0

Fraunhofer-Institut
für Umweltchemie und Ökotoxikologie
57392 Schmallenberg
Institutsleiter:
Prof. Dr. W. Klein

IM AUFTRAG
DES UMWELTBUNDESAMTES

Schmallenberg, 31. August 2000

Inhaltsverzeichnis

1 Hardware Voraussetzungen 3

2 Programminstallation 3

3 Kurze Beschreibung der Dateien von MCPELMO 2.0 4

4 Der Aufbau des Progamms 7

4.1 Das Startfenster von MCPELMO 2.0 7

4.2 Das Laden und Speichern von Daten 15

4.3 Die Karte der Szenarien“ 15

4.4 Das Fenster “Evaluation” 18

4.5 Die geografische Darstellung der Sickerwasserkonzentrationen 24

1 Hardware Voraussetzungen

Das Programm *MCPELMO 2.0* läuft auf Personalcomputern unter *MS-Windows 95* oder *MS-Windows 98.* Für die Installierung und die Durchführung von Simulationen sind etwa 20 Mbyte Festplattenspeicher erforderlich. Zur besseren Darstellung der verschiedenen Fenster auf dem Bildschirm ist eine höhere Auflösung als Standard-VGA (640 * 480, 16 Farben) zu empfehlen. Als Mindestauflösung werden 800*600 Pixel bei 256 Farben vorgeschlagen. Für eine adäquate Darstellung der geografischen Verteilung sind allerdings und 1024 * 768 Pixel und eine 16Bit-Farbtiefe (16384 Farben) wünschenswert Die Grafiken, die *MCPELMO 2.0* ausgibt, sind mehrfarbig. Daher ist es sinnvoll, einen Farbdrucker für direkte Ausgaben anzuschließen. Werden die Grafiken über die Zwischenablage in andere Anwendungen übertragen, können farbige Grafiken natürlich durch den Anwender in Schwarz-Weiß-Abbildungen umgewandelt werden.

2 Programminstallation

MCPELMO 2.0 muss direkt von *MS-Windows* aus installiert werden. Dazu muss die Installations-CD eingelegt werden. Normalerweise wird danach direkt das Installationsprogramm aufgerufen. Ist der Autostart-Modus des Computers deaktiviert, kann der Benutzer über das Start-Menü (Start – Ausführen) die Installationsroutine aufrufen (Befehl: *d:**setup.exe*, wenn das CD-ROM über den Laufwerksbuchstaben “d:” angesprochen wird.). Die weitere Installation erfolgt automatisch. Es wird das Verzeichnis *MCPELMO 2.0* für das Programm vorgeschlagen. Natürlich kann der Anwender auch ein alternatives Verzeichnis in einer anderen Festplattenpartition auswählen. Die Installation ist nach Anlage einer Programmgruppe inkl. Programmsymbol für *MCPELMO 2.0* abgeschlossen.

3 Kurze Beschreibung der Dateien von MCPELMO 2.0

Folgende Dateien sind nach erfolgreicher Installation in verschiedenen Verzeichnissen auf dem Computer gespeichert.

Programmverzeichnis von MCPELMO 2.0

Dateiname	Erweiterung	Erläuterung
MCPELMO	EXE	Ausführbares Programm
STOFFE	LST	Import-Beispielliste
MCPELMO	IN	Eingabedatei von MCPELMO
MCPELMO	OUT	Ergebnisdatei von MCPELMO

Unterverzeichnis DATA

Dateiname	Erw.	Erläuterung
NUTZUNG	ASC	Karte der Bodennutzung (als Textdatei)
SICK_REG	BIN	Karte der Versickerungsregionen (Binärdatei)
Distribution	bmp	Karte der Konzentrationsverteilung (Bitmap)
Legende	bmp	Legende für die grafische Abbildung (Bitmap)
soil_01	dat	Bodendaten für das Szenario 01
soil_02	dat	Bodendaten für das Szenario 02
soil_03	dat	Bodendaten für das Szenario 03
soil_04	dat	Bodendaten für das Szenario 04
soil_05	dat	Bodendaten für das Szenario 05
soil_06	dat	Bodendaten für das Szenario 06
soil_07	dat	Bodendaten für das Szenario 07
soil_08	dat	Bodendaten für das Szenario 08
soil_09	dat	Bodendaten für das Szenario 09
soil_10	dat	Bodendaten für das Szenario 10
soil_11	dat	Bodendaten für das Szenario 11
soil_12	dat	Bodendaten für das Szenario 12
soil_13	dat	Bodendaten für das Szenario 13
soil_14	dat	Bodendaten für das Szenario 14
soil_15	dat	Bodendaten für das Szenario 15
soil_16	dat	Bodendaten für das Szenario 16
soil_17	dat	Bodendaten für das Szenario 17
soil_18	dat	Bodendaten für das Szenario 18

soil_19	dat	Bodendaten für das Szenario 19
soil_20	dat	Bodendaten für das Szenario 20
soil_21	dat	Bodendaten für das Szenario 21
soil_22	dat	Bodendaten für das Szenario 22
weather_01	dat	Klimadaten für das Szenario 01
weather_02	dat	Klimadaten für das Szenario 02
weather_03	dat	Klimadaten für das Szenario 03
weather_04	dat	Klimadaten für das Szenario 04
weather_05	dat	Klimadaten für das Szenario 05
weather_06	dat	Klimadaten für das Szenario 06
weather_07	dat	Klimadaten für das Szenario 07
weather_08	dat	Klimadaten für das Szenario 08
weather_09	dat	Klimadaten für das Szenario 09
weather_10	dat	Klimadaten für das Szenario 10
weather_11	dat	Klimadaten für das Szenario 11
weather_12	dat	Klimadaten für das Szenario 12
weather_13	dat	Klimadaten für das Szenario 13
weather_14	dat	Klimadaten für das Szenario 14
weather_15	dat	Klimadaten für das Szenario 15
weather_16	dat	Klimadaten für das Szenario 16
weather_17	dat	Klimadaten für das Szenario 17
weather_18	dat	Klimadaten für das Szenario 18
weather_19	dat	Klimadaten für das Szenario 19
weather_20	dat	Klimadaten für das Szenario 20
weather_21	dat	Klimadaten für das Szenario 21
weather_22	dat	Klimadaten für das Szenario 22
Henry_01	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 01)
Henry_02	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 02)
Henry_03	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 03)
Henry_04	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 04)
Henry_05	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 05)
Henry_06	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 06)
Henry_07	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 07)
Henry_08	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 08)
Henry_09	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 09)
Henry_10	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 10)
Henry_11	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 11)

Henry_12	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 12)
Henry_13	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 13)
Henry_14	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 14)
Henry_15	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 15)
Henry_16	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 16)
Henry_17	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 17)
Henry_18	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 18)
Henry_19	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 19)
Henry_20	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 20)
Henry_21	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 21)
Henry_22	txt	Faktoren zur Berücksichtigung der Verflüchtigung (Szenario 22)
Regionen	txt	Namen der Versickerungsregionen
Szenario_01	txt	Nomogramme für das Szenario 01 (Textdatei)
Szenario_02	txt	Nomogramme für das Szenario 02 (Textdatei)
Szenario_03	txt	Nomogramme für das Szenario 03 (Textdatei)
Szenario_04	txt	Nomogramme für das Szenario 04 (Textdatei)
Szenario_05	txt	Nomogramme für das Szenario 05 (Textdatei)
Szenario_06	txt	Nomogramme für das Szenario 06 (Textdatei)
Szenario_07	txt	Nomogramme für das Szenario 07 (Textdatei)
Szenario_08	txt	Nomogramme für das Szenario 08 (Textdatei)
Szenario_09	txt	Nomogramme für das Szenario 09 (Textdatei)
Szenario_10	txt	Nomogramme für das Szenario 10 (Textdatei)
Szenario_11	txt	Nomogramme für das Szenario 11 (Textdatei)
Szenario_12	txt	Nomogramme für das Szenario 12 (Textdatei)
Szenario_13	txt	Nomogramme für das Szenario 13 (Textdatei)
Szenario_14	txt	Nomogramme für das Szenario 14 (Textdatei)
Szenario_15	txt	Nomogramme für das Szenario 15 (Textdatei)
Szenario_16	txt	Nomogramme für das Szenario 16 (Textdatei)
Szenario_17	txt	Nomogramme für das Szenario 17 (Textdatei)
Szenario_18	txt	Nomogramme für das Szenario 18 (Textdatei)
Szenario_19	txt	Nomogramme für das Szenario 19 (Textdatei)
Szenario_20	txt	Nomogramme für das Szenario 20 (Textdatei)
Szenario_21	txt	Nomogramme für das Szenario 21 (Textdatei)
Szenario_22	txt	Nomogramme für das Szenario 22 (Textdatei)

4 Der Aufbau des Progamms

Das Programm kann nur von *MS-Windows* aus aufgerufen werden. Nachdem das Programm vollständig geladen ist (dies kann je nach Rechnertyp etwa 10 Sekunden dauern), erscheint das Hauptfenster von *MCPELMO 2.0.*

Von diesem Fenster aus gehen alle weiteren Aktionen wie das Starten von Simulationen oder das Analysen von Ergebnissen aus. Während der Arbeit mit dem Programm werden in der Regel ausgehend vom Hauptfenster weitere Fenster geöffnet, die zusätzliche Informationen für den Anwender bereitstellen. Wie bei allen *Windows*-Programmen ist es jederzeit möglich, während der Arbeit mit *MCPELMO* in andere Programme zu wechseln und Daten über die Zwischenablage auszutauschen. Für alle Fenster von *MCPELMO* gelten die gleichen Steuerbefehle zum Vergrößern, Verkleinern oder Schließen von Fenstern, wie sie auch in anderen Windows-Anwendungen verwendet werden (z.B. ALT-F4 zum Schließen eines Fensters).

Im folgenden werden die verschiedenen Fenster, die zu *MCPELMO* gehören, beschrieben.

4.1 Das Startfenster von MCPELMO 2.0

Alle notwendigen Benutzereingaben zur Durchführung von stochastischen Simulationsrechnungen sind auf diesem Fenster zusammengestellt. Das Fenster ist in verschiedene Bereiche unterteilt:

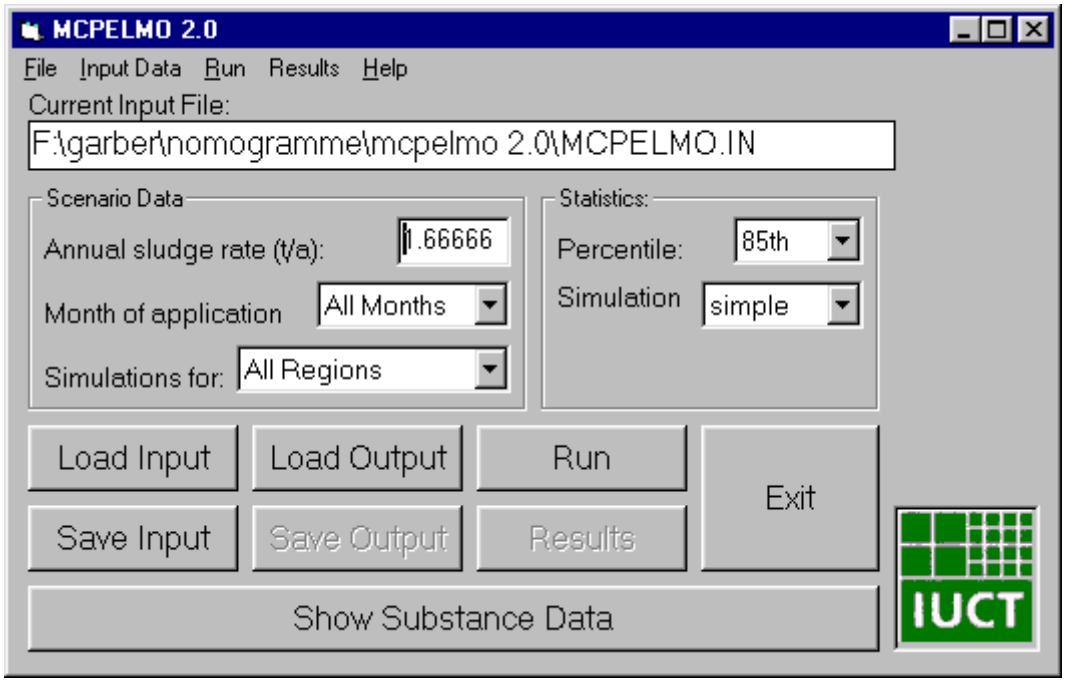


Abbildung 1: Das Startfenster von *MCPELMO 2.0*

- obere Menüleiste für die Steuerung des Programms,
- zwei Blöcke zur Festlegung der Szenariodaten und der Simulationsbedingungen,
- ein Block zur Eingabe und Modifizierung von Stoffdaten (beim Start zunächst nicht sichtbar),
- ein Block mit Programmtasten als direkten Zugang zu wichtigen Befehlen,

Obere Menüleiste

Die obere Menüleiste enthält fünf verschiedene Menüs, die durch Anklicken mit der Maus oder Aufruf mit ALT + Buchstabenkürzel aktiviert werden können. Nachdem ein Menüpunkt aus der Leiste selektiert wurde, öffnet sich jeweils ein weiteres Menü mit den möglichen Befehlen. Es folgt eine Beschreibung der über die Menüleiste zugänglichen Befehle:

- File - Load Input File
  Über diesen Menüpunkt kann eine in einer früheren Sitzung gespeicherte Eingabedatei in das Programm geladen werden. Es öffnet sich nach Anwahl dieses Menüpunkts ein neues Fenster, in der die Eingabedatei selektiert werden kann. Alternativ kann auch der Button “Load Input” verwendet werden. Das Programm erwartet als Dateierweiterung für Eingabedateien das Kürzel “in”. Die aktuell geladene Eingabedatei wird unterhalb der Menüleiste angezeigt.

- File - Save Input File
  Über diesen Menüpunkt können die aktuellen Eingabedaten und Programmeinstellungen für eine spätere Sitzung gespeichert werden. Der Anwender sollte die Dateierweiterung “in”, die das System vorschlägt akzeptieren, damit die Datei später leichter wiedergefunden werden kann. Alternativ kann auch der Button “Save Input” verwendet werden.

- File - Load Results
  Über diesen Menüpunkt können die in einer früheren Sitzung gespeicherten Ergebnisse in das Programm geladen werden. Es öffnet sich nach Anwahl dieses Menüpunkts ein neues Fenster, in der die Ergebnisdatei selektiert werden kann. Alternativ kann auch der Button “Load Results” verwendet werden. Das Programm erwartet als Dateierweiterung für Ergebnisdateien das Kürzel “out”.

- File - Save Results

  Über diesen Menüpunkt können die aktuellen Simulationsergebnisse und alle Programmeinstellungen für eine spätere Sitzung gespeichert werden. Der Anwender sollte die Dateierweiterung “out”, die das System vorschlägt akzeptieren, damit die Datei später leichter wiedergefunden werden kann. Alternativ kann auch der Button “Save Results” verwendet werden.

- File - Exit

  Nach Aufruf dieses Menüpunkts kann das Programm *MCPELMO 2.0* verlassen werden. Alternativ zu diesem Menüpunkt ist es möglich, das Programm mit der Tastenkombination ALT F4 oder mit der Programmtaste „Ende“ zu verlassen.

- Input Data – Edit Substance Data

  Nach Anwahl dieses Menüpunkts wird das Hauptfenster von *MCPELMO 2.0* erweitert und eine Maske mit Eingabefeldern für substanzabhängige Daten erscheint. Gleichzeitig wird in den Bearbeitungsmodus gewechselt, der durch die gelbe Farbe der Datenfelder gekennzeichnet ist. Alternativ zu diesem Menüpunkt können auch die Programmtasten “Show Substance Data” und danach “Edit” gedrückt werden.

- Input Data – View Scenarios

  Dieser Menüpunkt ermöglicht den Aufruf einer Karte, auf der die Versickerungsszenarien dargestellt sind. Mit Hilfe der Maus können die Szenarionamen sowie weitere Daten zu den Klima- und Bodeneigenschaften des jeweiligen Versickerungsszenarios sichtbar gemacht werden.

- Run

  Dieser Befehl veranlasst den Start einer Simulationsrechnung mit den aktuellen Eingabeaparametern, wie sie auf dem Hauptfenster zu sehen ist. Die Simulationsrechnung läuft im Vordergrund, es kann also für die Zeit der Simulation nicht mit dem Programm gearbeitet werden. Jedoch dauert eine Simulation je nach Umfang der Stoffliste nur Sekunden. Alternativ kann die Programmtaste “Run” zum Start einer Simulation verwendet werden.

- Results

  Durch diesen Befehl (aktiv nur bei vorheriger Simulationsrechnung bzw. nach Laden einer Ausgabedatei) wird ein Fenster (Titel: “Evaluation”) aufgerufen. Von diesem Fenster aus

können alle weiteren Analysen der Ergebnisse aus durchgeführt werden. Alternativ kann die Programmtaste “Results” auf dem Hauptfenster gedrückt werden.

- Help – About MCPELMO 2.0
  Es erscheint eine Info-Box zu diesem Programm und seine aktuelle Programmversion. Weitere Online-Hilfen sind zur Zeit nicht realisiert.

Zwei Blöcke zur Festlegung der Szenariodaten und der Simulationsbedingungen

In diesem Teil des Hauptfensters können einige wichtige Szenarioparameter und Programmeinstellungen für die Simulation eingestellt werden.

- *Annual Sludge Rate*: Hier wird die jährliche Ausbringungsrate für die Reststoffe (z.B. Klärschlamm) eingetragen. Das Programm geht davon aus, dass alljährlich die gleiche Menge aufgeben wird. Die Einheit für diesen Parameter ist Tonnen/Jahr.

- *Month of Application*: Hier wird eingetragen, in welchem Monat die Reststoffe auf die landwirtschaftliche Nutzfläche aufgebracht werden sollen. Es ist möglich, die Monate “Mai”, “Juli” und “November” auszuwählen. Aternativ kann auch eine Simulation für alle drei Monate durchgeführt werden.

- *Simulations for*: In diesem Feld können die gewünschten Szenarien für die Berechnung ausgewählt werden. Für den Simulatiosmodus “simple” werden Berechnungen stets für alle Versickerungsszenarien durchgeführt.

- *Percentile*: Hier wird die zur Berechnung der Streuung benötigte Perzentile angegeben. Wird durch den Anwender bespielsweise das 90. Perzentil eingetragen, so berechnet das Computerprogramm eine Sickerwasserkonzentration, die in 90 % der Fälle nicht überschritten wird.

- *Simulation mode*: Hier kann zwischen einem einfachen Berechnungsmodus und einem komplexen Berechnungsmodus (siehe Simulationen, Stufe 2) gewählt werden. Zur Zeit ist allerdings nur die Anwahl des einfachen Berechnungsmodus realisiert.

Die Eingabemaske für stoffspezifische Daten (Ansichtsmodus)

Um das Hauptfenster nicht mit Information zu überfrachten, ist die Eingabemaske für die stoffspezifischen Daten nicht nach dem Programmstart sichtbar, sondern muss erst durch Drücken

der Programmtaste “Show Substance Data” oder über den Menüpunkt “Input Data – Edit Input Data” aktiviert werden. Der Benutzer kann die Eingabemaske wieder vom Bildschirm entfernen, wenn er zweimal kurz mit der Maus auf den Block klickt.

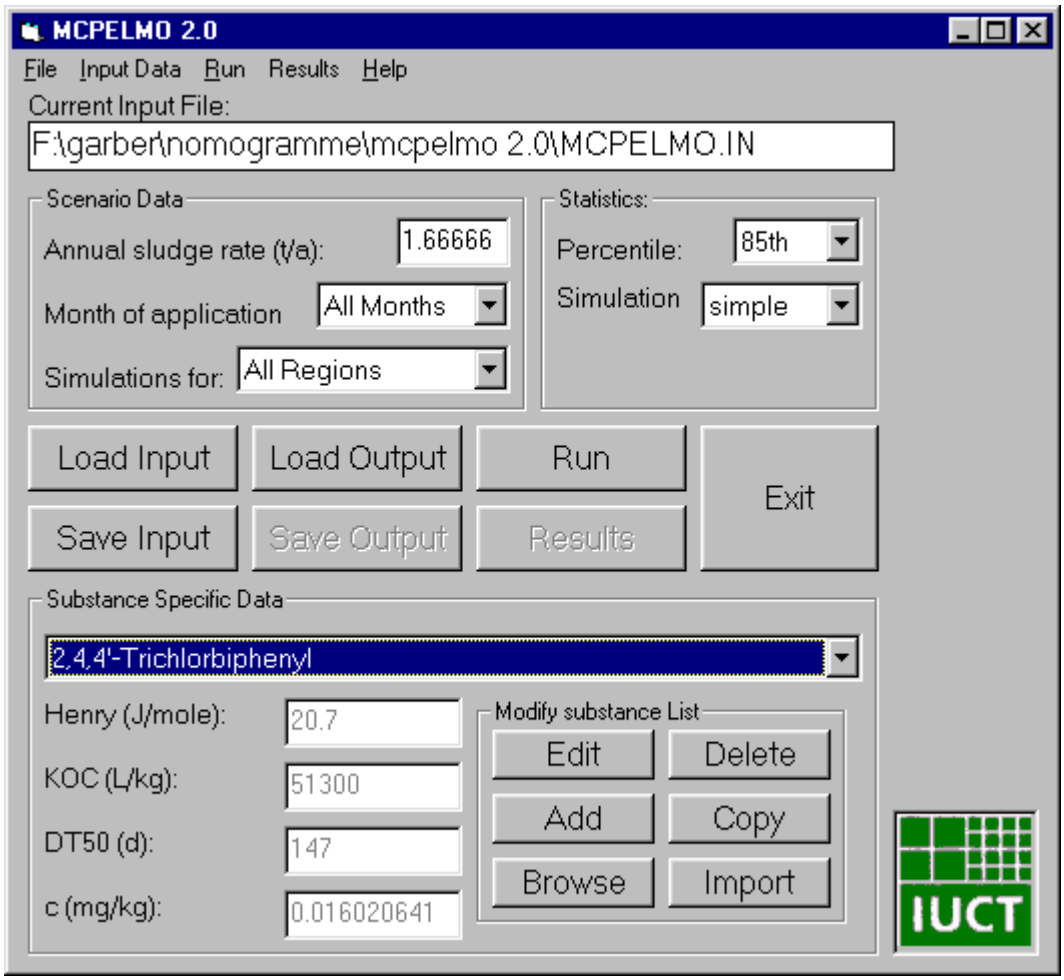


Abbildung 2: Das Startfenster von *MCPELMO 2.0* mit sichtbaren Substanzdatenfeldern

Der Eingabeblock besteht aus zwei Teilen, den Eingabefeldern und 6 Programmtasten zur Steuerung der Dateneingabe. Im Ansichtsmodus weisen die Eingabefelder eine weiße Hintergrundfarbe auf, und Daten können nur gelesen, nicht geschrieben werden. Mit Hilfe der aufklappbaren Listbox im oberen Teil des Blocks kann im Ansichtsmodus durch die aktuelle Stoffliste geblättert werden. Die Programmtasten im rechten Teil der Eingabemaske haben folgende Bedeutung:

- *Edit*: Nach Drücken dieses Schalters wird in den Bearbeitungsmodus gewechselt. Im Bearbeitungsmodus können die Daten des aktuellen Datenbankeintrags verändert werden.
- *Add*: Mit diesem Schalter wird ein neuer Datenbanksatz angelegt. Danach wird ebenfalls in den Bearbeitungsmodus gewechselt.

- *Delete*: Nach Drücken dieses Schalters wird der aktuelle Datensatz gelöscht und der nächste Datensatz angezeigt. Solange die Änderung nicht mit “Save Input” gespeichert wurde, können die ursprünglichen Daten mit “Load Input” wiederhergestellt werden.
- *Copy*: Der aktuelle Datensatz wird kopiert und an das Ende der Datenbank angehängt. Die aktuell angezeigten Daten beziehen sich auf die soeben erstellte Kopie des ursprünglichen Datensatzes..
- *Import*: Es können zusätzliche Stofflisten über eine ASCII-Datei eingelesen werden. Auf der Installationsdatei ist eine Beispieldatei gespeichert.
- *Browse*: Nach Drücken dieses Schalters wechselt das System in den “Browse-Modus”. Es wird dazu ein neues Fenster geöffnet, das die gesamte Stoffliste zeigt. Wie im Bearbeitungsmodus können im Browse-Modus die aktuellen Stoffdaten nicht nur betrachtet sondern auch modifiziert werden.

Die Eingabemaske für stoffspezifische Daten (Bearbeitungsmodus)

Der Benutzer erkennt den Bearbeitungsmodus an der gelben Hintergrundfarbe der Eingabefelder, der anzeigt, dass Daten nicht nur gelesen sondern auch geschrieben werden können. Allerdings ist die aufklappbare Listbox anders als im Ansichtsmodus nicht aktiv. Es kann also nicht durch die gelb markierte Stoffliste geblättert werden. Grundsätzlich gilt, dass der Benutzer zur Eingabe von Dezimalzahlen sowohl Kommata (deutsche Schreibung) als auch Punkte (amerikanische Schreibung) verwenden kann. Die Ausgabe von MCPELMO hängt von der akuellen Einstellung in der Systemsteuerung ab. Beim Einlesen von Datensätzen werden unabhängig von der Computereinstellung sowohl Punkte als auch Kommata akzeptiert.

Die Berücksichtigung der Verflüchtigung bei der Berechnung der Versickerungsneigung für Stoffe oberhalb eines KOC von 10000 L/kg (starke Sorption) ist mit einem erhöhten Fehler verbunden. Das Programm weist darauf durch eine Rotfärbung des Felds für die Henrykonstante hin, sobald der Benutzer eine Henrykonstante >0 eingegeben hat.

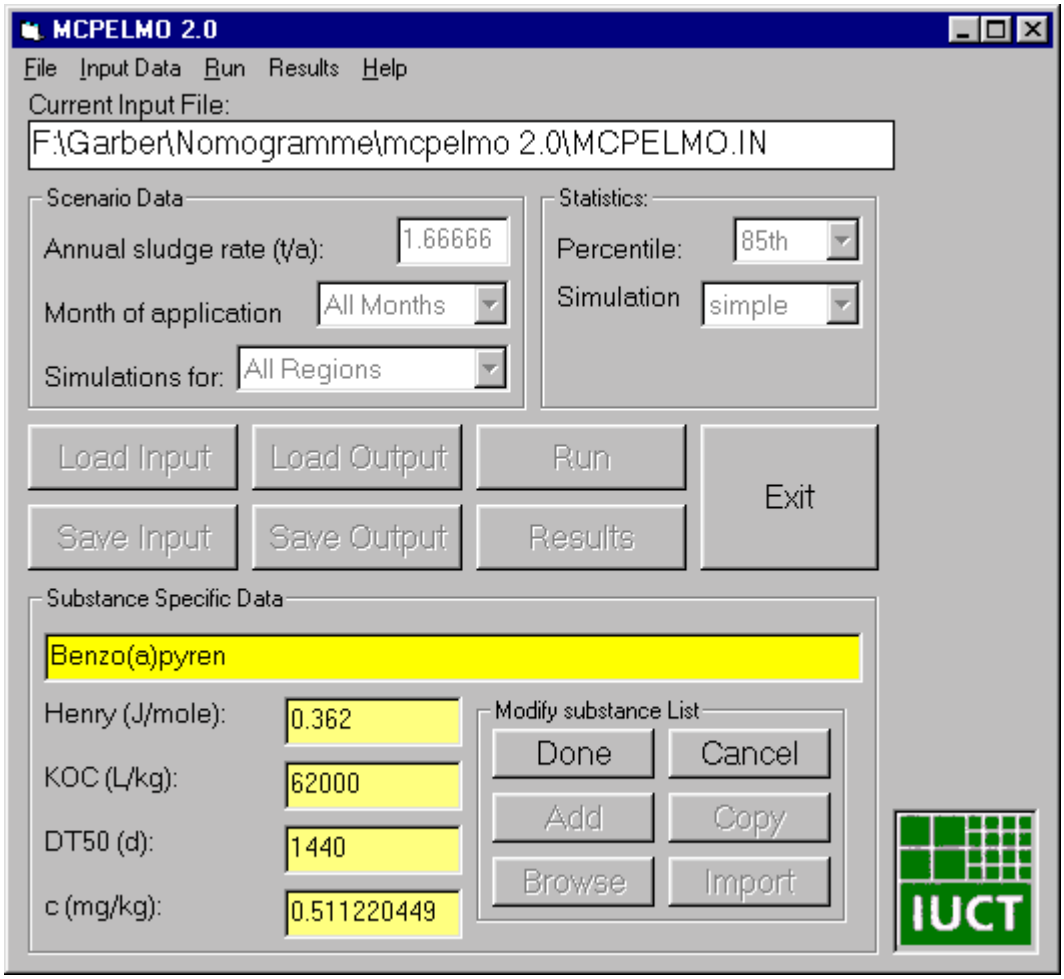


Abbildung 3: Das Startfenster von *MCPELMO 2.0* mit editierbaren Substanzdatenfeldern

Die beiden Programmtasten im rechten Teil der Eingabemaske haben folgende Bedeutung:

- *Done*: Es wird zurück in den Ansichtsmodus gewechselt; die Änderungen werden in die Stoffliste übernommen. Solange die Änderung nicht mit “Save Input” gespeichert wurde, können die ursprünglichen Daten mit “Load Input” wiederhergestellt werden.
- *Cancel*: Es wird zurück in den Ansichtsmodus gewechselt; die Änderungen werden verworfen.

<u>Die Eingabemaske für stoffspezifische Daten (Browse-Modus)</u>

Im Browse-Modus können alle Eingabefelder bearbeitet werden.

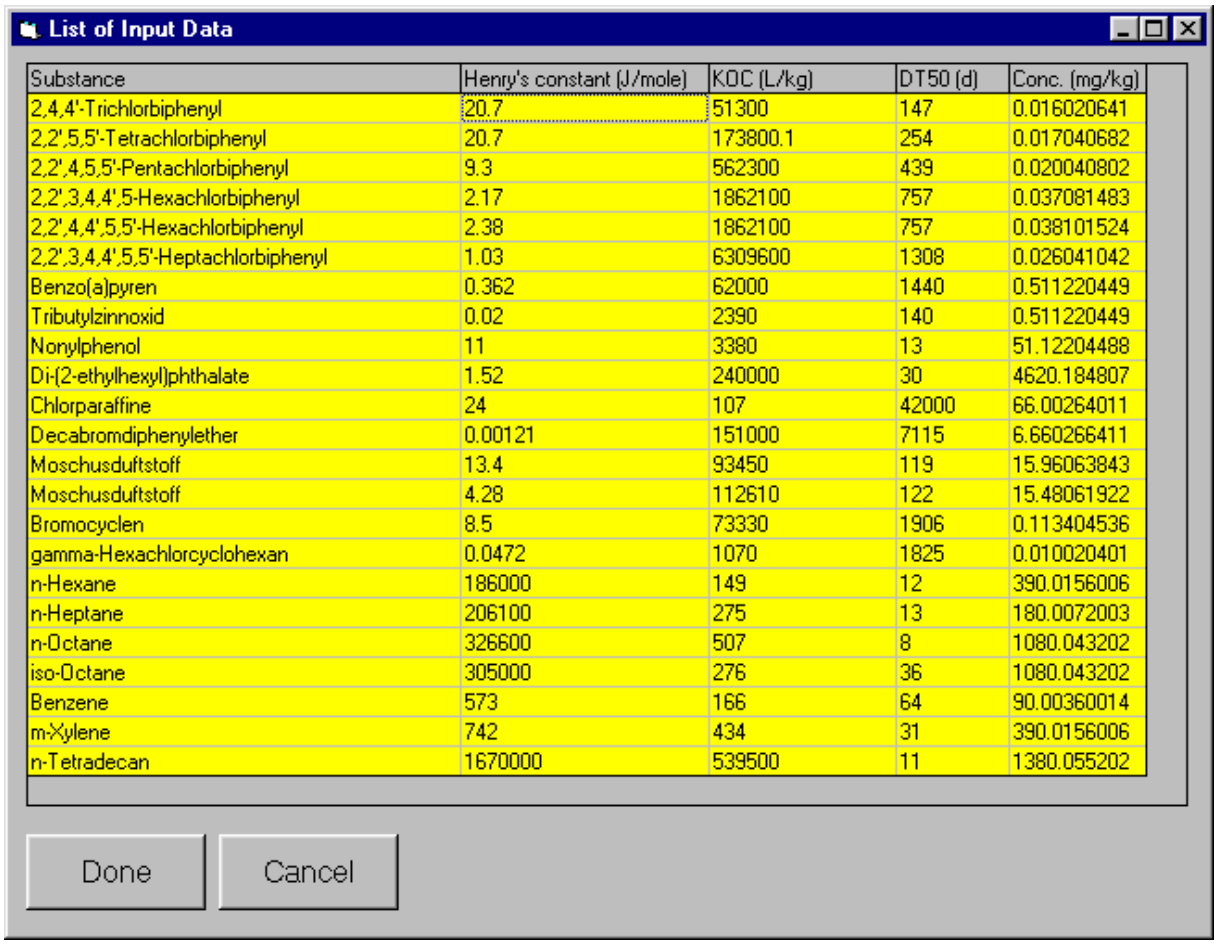


Abbildung 4: Die Eingabemaske für Stoffdaten von *MCPELMO 2.0* (Browse-Modus)

Die beiden Programmtasten unterhalb der Eingabemaske haben folgende Bedeutung:

- *Done*: Es wird zurück in den Ansichtsmodus gewechselt; die Änderungen werden in die Stoffliste übernommen. Solange die Änderung nicht mit “Save Input” gespeichert wurde, können die ursprünglichen Daten mit “Load Input” wiederhergestellt werden.
- *Cancel*: Es wird zurück in den Ansichtsmodus gewechselt; die Änderungen werden verworfen.

4.2 Das Laden und Speichern von Daten

Wenn vom Hauptfenster aus eine Lade- oder Speicheroperation aufgerufen wurde, öffnet sich ein neues Fenster, in dem der Anwender den Namen der zu ladenden oder zu speichernden Datei festlegen kann. Die Operation wird durchgeführt, nachdem die Bildschirmtaste “OK” gedrückt wurde. Das Fenster wird geschlossen, ohne das die Datei geladen bzw. gespeichert wird, wenn mit der Maus auf die Bildschirmtaste “Cancel” geklickt wird.

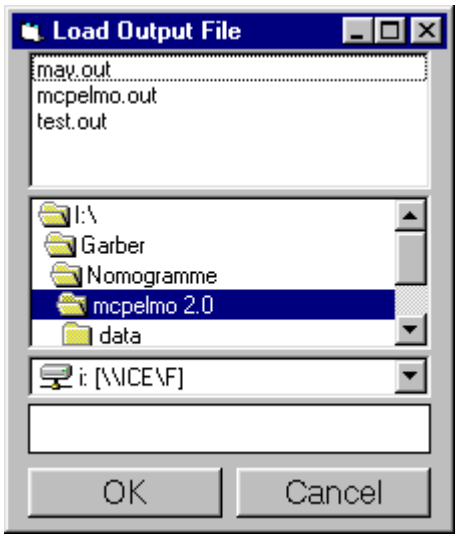


Abbildung 5: Durchführen von Dateioperationen

4.3 Die Karte der Szenarien“

Ausgehend vom Hauptfenster kann mit *MCPELMO 2.0* über den Befehl „Input data – View Scenarios” eine Karte mit den Flächen der Szenarien, die für die Simulationen eingesetzt werden, aufgerufen werden.

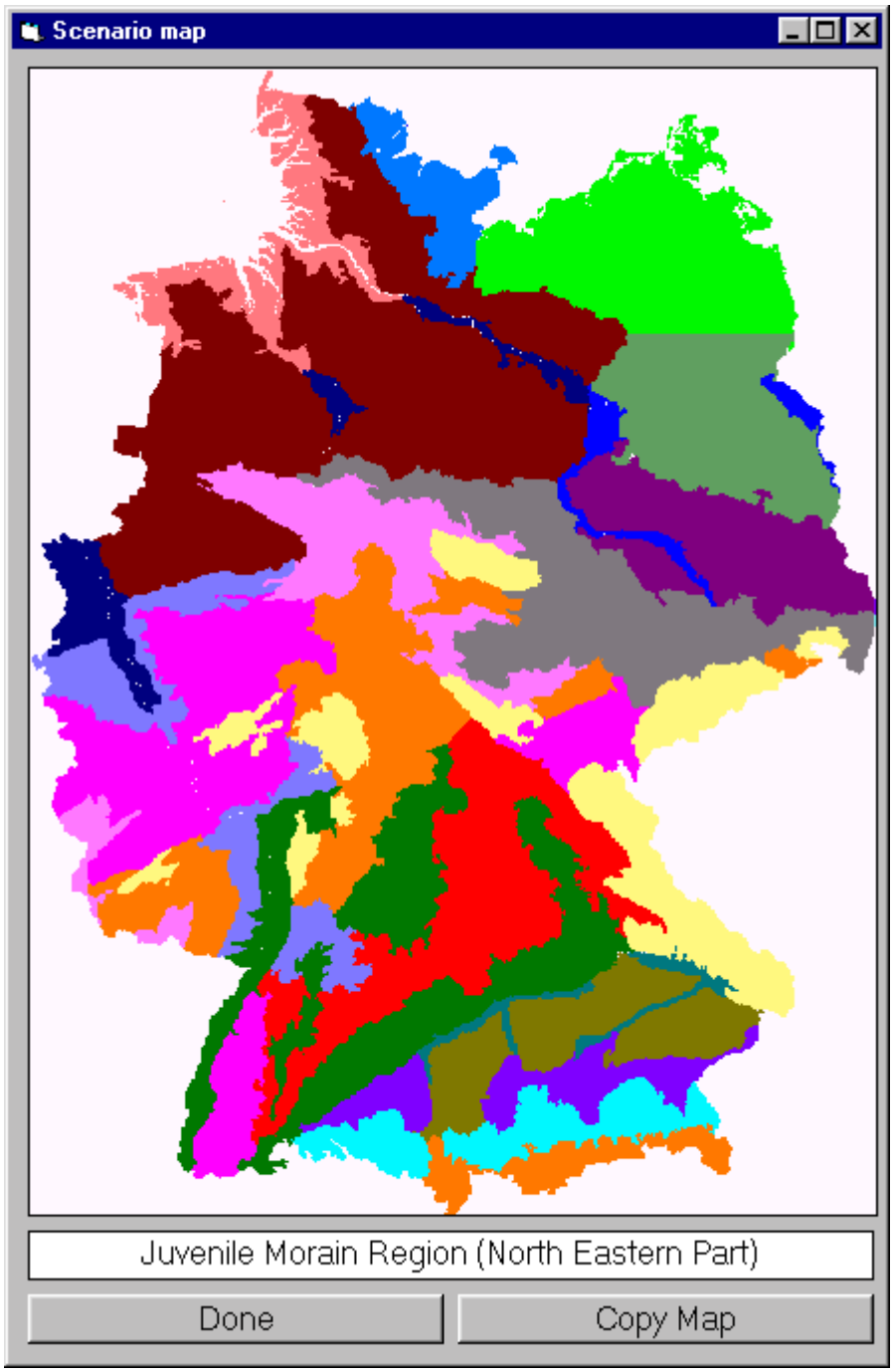
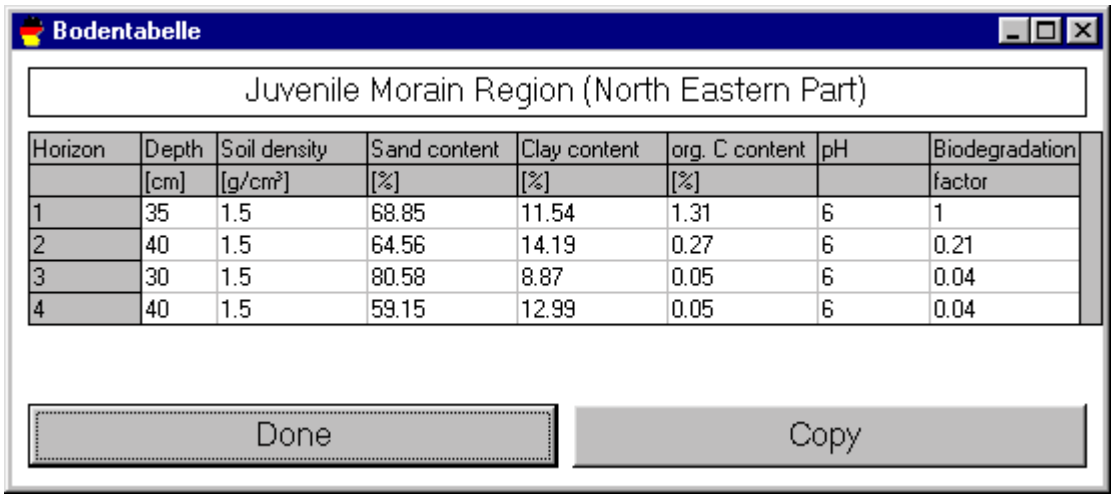


Abbildung 6: Karte der Versickerungsszenarien

(Aufruf über den Befehl: Input Data – View Scenarios)

Die Karte kann mit Hilfe der Programmtaste “Copy” in die *Windows-Zwischenablage* übertragen werden. Dort ist sie anderen Anwendungen (Grafikprogramme, Textverarbeitung) zugänglich. Mit Hilfe der Maus sind weitere Informationen zu den Szenarien abrufbar:
Zunächst erscheint der Name des betreffenden Szenarios im unteren Teil des Fensters, wenn der Anwender den Mauszeiger in der entsprechenden Fläche bewegt wird.
Nach Anklicken eines Szenarios auf der Karte mit der rechten Maustaste werden Informationen zum Bodenprofil dieses Szenarios in einem Fenster zusammengestellt (siehe das Beispiel in Abbildung 7).



Horizon	Depth [cm]	Soil density [g/cm³]	Sand content [%]	Clay content [%]	org. C content [%]	pH	Biodegradation factor
1	35	1.5	68.85	11.54	1.31	6	1
2	40	1.5	64.56	14.19	0.27	6	0.21
3	30	1.5	80.58	8.87	0.05	6	0.04
4	40	1.5	59.15	12.99	0.05	6	0.04

Abbildung 7: Bodendaten für ein Versickerungsszenario

Die Tabelle kann mit Hilfe der Programmtaste “Copy” in die *Windows-Zwischenablage* übertragen werden. Dort ist sie anderen Anwendungen (Grafikprogramme, Textverarbeitung) zugänglich. An dieser Stelle muss der Anwender das Fenster zunächst mit dem Done -Schalter (oder einer anderen Schließoperation z.B. ALT F4) entfernen. Erst danach können andere Klima- oder Bodendaten eingesehen werden.

Nach einem Doppelklick eines Szenarios auf der Karte mit der linken oder rechten Maustaste werden Klimadaten zu diesem Szenario in einem Fenster zusammengestellt (siehe das Beispiel in Abbildung 8).

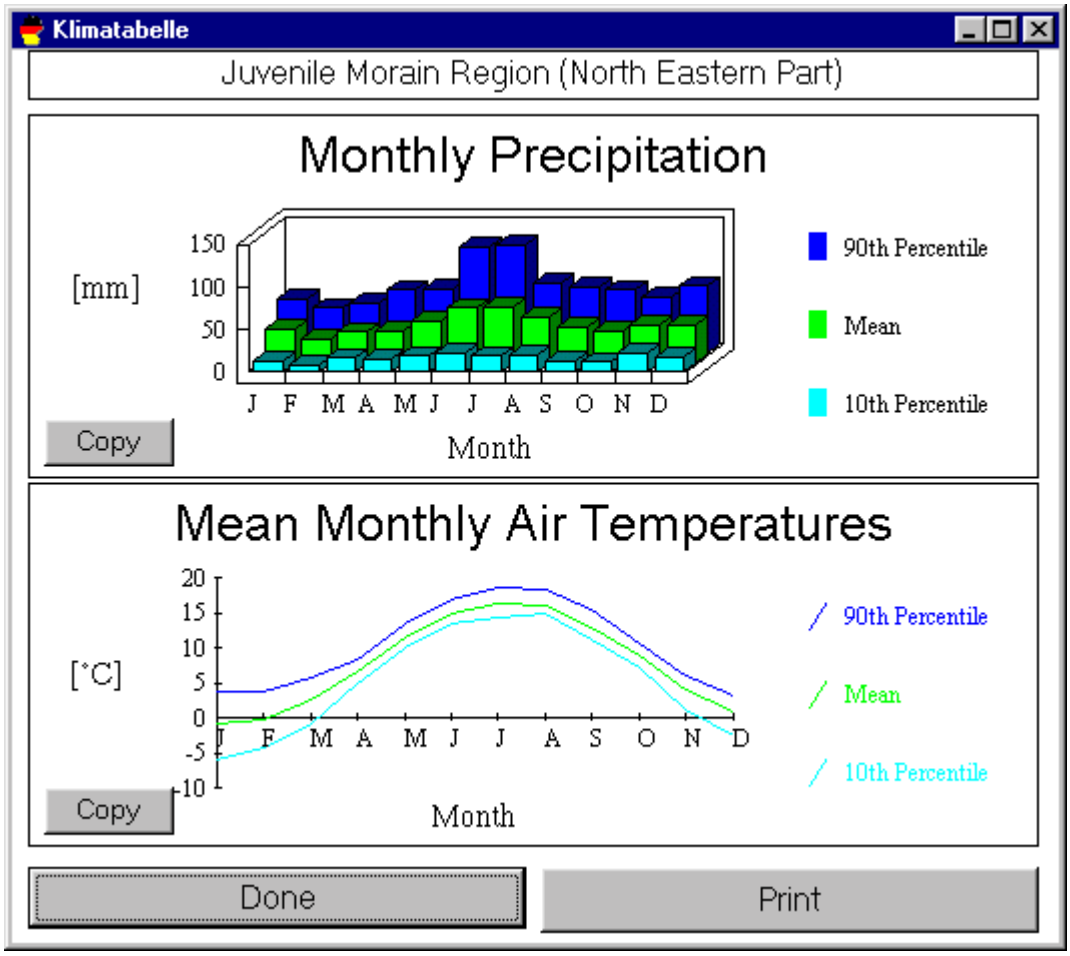


Abbildung 8: Klimadaten für ein Versickerungsszenario

Die Diagramme können mit Hilfe der beiden Programmtasten “Copy” in die *Windows-Zwischenablage* übertragen werden. Dort sind sie anderen Anwendungen (Grafikprogramme, Textverarbeitung) zugänglich. An dieser Stelle muss der Anwender das Fenster zunächst mit dem Done -Schalter (oder einer anderen Schließoperation z.B. ALT F4) entfernen. Erst danach können andere Klimadaten eingesehen werden. Dieses Fenster kann außerdem über den Befehl “Print” direkt an den Druckmanager weitergegeben werden. Er wird dann auf dem aktuellen Standarddrucker ausgedruckt.

4.4 Das Fenster “Evaluation”

Die Ergebnisse von *MCPELMO 2.0* können mit Hilfe des Fensters “Evaluation” analysiert werden. Das Fenster wird erscheint, wenn über die Menüleiste der Befehl “Results” angeklickt wird. Alternativ kann auch die Programmtaste “Results” gedrückt werden. Von diesem Fenster können nicht nur die aktuellen Simulationsergebnisse betrachtet werden, sondern es werden weitere

Auswertungen in grafischer Form angeboten. Nach Aufruf des Fensters wird jedoch zunächst eine einfache Ergebnisliste ausgegeben (siehe die Abbildung 9).

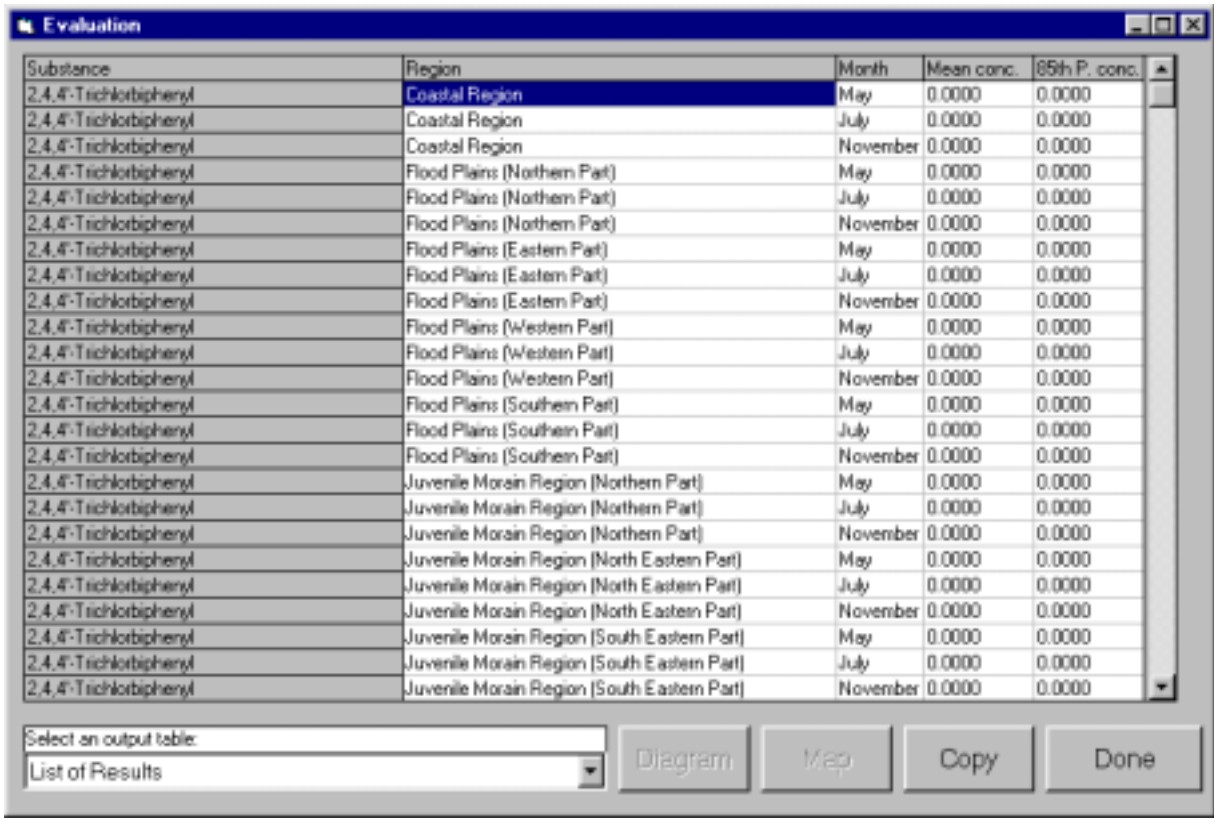


Abbildung 9: Die einfache Ergebnisliste im Fenster „Evaluation“

In dieser Liste werden die mittleren Sickerwasserkonzentrationen und die (vor der Berechnung) festgelegte Perzentilen für alle Substanzen und für alle Kombinationen von Szenarien und Anwendungszeiten zusammengestellt. Die Ergebnisse können für andere Anwendungen in die Zwischenablage kopiert oder auch ausgedruckt werden. Diagramme oder geografische Darstellungen sind ohne weitere Angaben des Benutzers nicht möglich (Die entsprechenden Programmtasten sind deaktiviert). In der aufklappbaren Listbox ist diese Liste mit “List of Results” gekennzeichnet.

Für weitere Auswertungen kann der Anwender eine von sechs Tabellen über die Listbox aufrufen. In diesen Tabellen werden die Ergebnisse nicht linear untereinander angeordnet, sondern in einer Matrix zusammengestellt, in der die einzelnen Substanzen in Zeilen und die Versickerungsszenarien in Spalten erscheinen. Bei den sechs Varianten dieser Darstellung handelt es sich um drei Tabellen mit den mittleren Sickerwasserkonzentrationen für die Ausbringungszeiten “Mai”, “Juli” und “September” und analog drei Tabellen mit den extremen Sickerwasserkonzentrationen (vor der Simulation festgelegtes Perzentil). In der Abbildung 10 ist

beispielhaft die Tabelle mit den mittleren Konzentrationen für den Ausbringungsmonat “Mai” dargestellt.

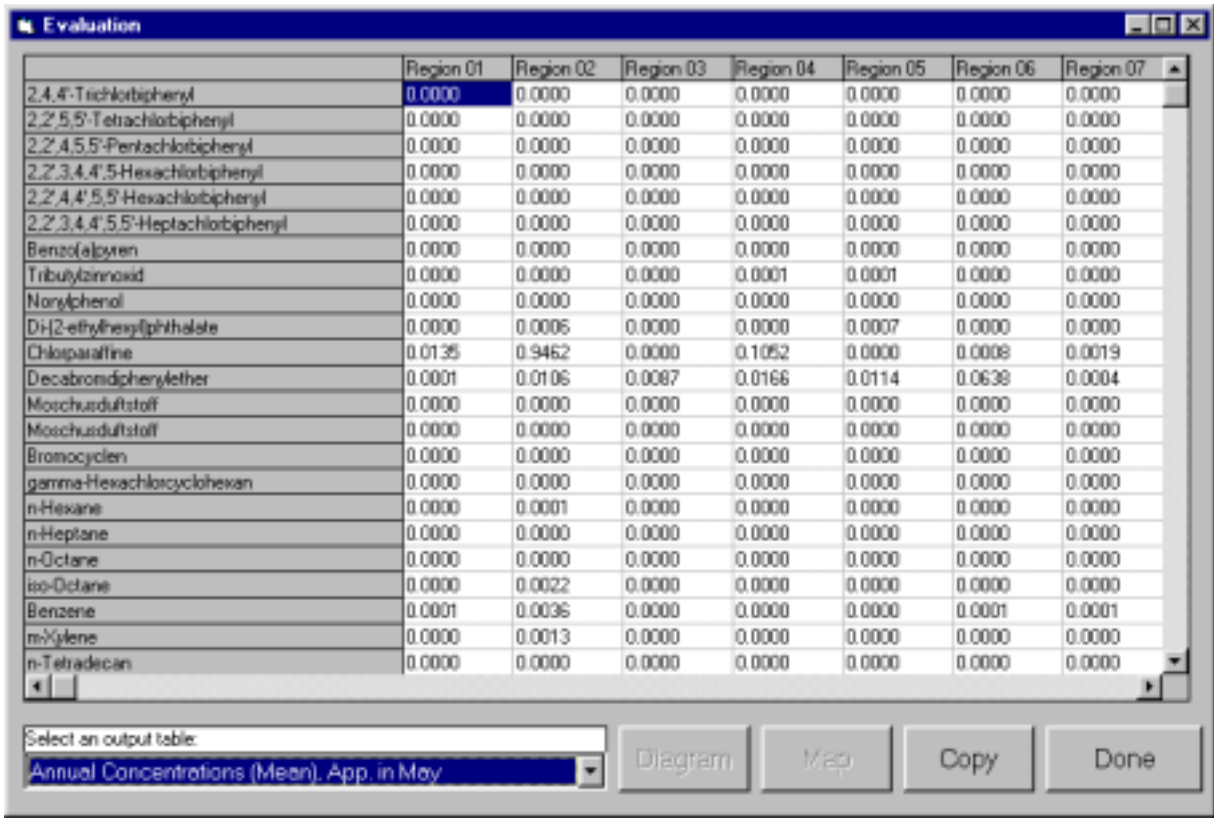


Abbildung 10: Zusammenstellung der mittleren Sickerwasserkonzentrationen für den Ausbringungsmonat „Mai“ (Fenster „Evaluation“)

Die Tabelle kann ebenfalls mit Hilfe der Copy-Bildschirmtaste über die Zwischenablage in andere Anwendungen übertragen werden. Für eine grafische Ausgabe der Daten in der Tabelle muss der Anwender zunächst eine Spalte oder eine Zeile selektieren, indem er mit der Maus im grauen Bereich eine Substanz oder eine bestimmte Versickerungsregion auswählt. In der
Abbildung 11 ist beispielhaft die Region 5 ausgewählt worden. Aus Platzgründen konnten die Namen der Regionen nicht in die erste Spalte aufgenommen werden; der vollständige Name der Region wird aber in einer kleinen Box (Hintergrundfarbe orange) für etwa zwei Sekunden eingeblendet, wenn der Anwender mit der Maus eine Region ausgewählt hat. Sobald eine Region selektiert wurde (im Beispiel die Region 16) wird die Programmtaste “Diagram” aktiv, und der Anwender kann eine Zusammenstellung aller Ergebnisse zu dieser Region in grafischer Form aufrufen.

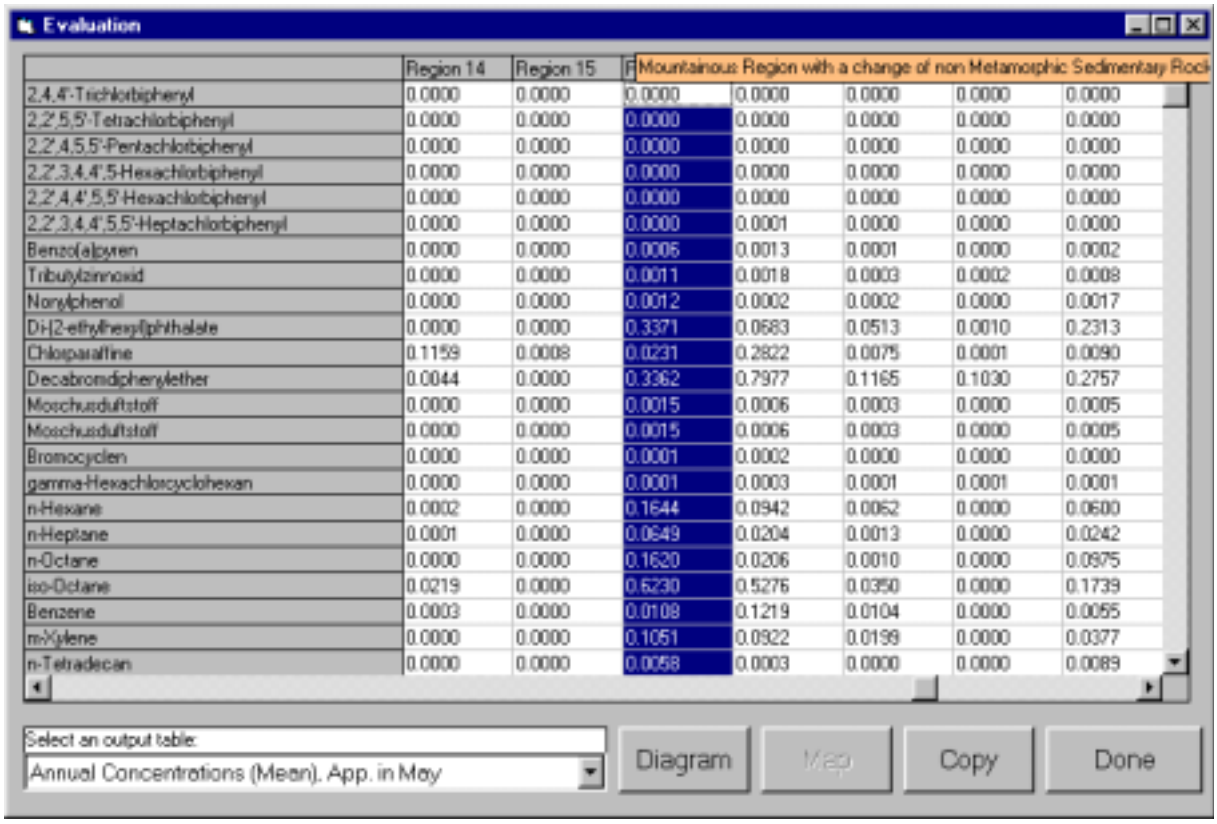


Abbildung 11: Zusammenstellung der mittleren Sickerwasserkonzentrationen für den Ausbringungsmonat „Mai“ nach Auswahl einer Region (Fenster „Evaluation“)

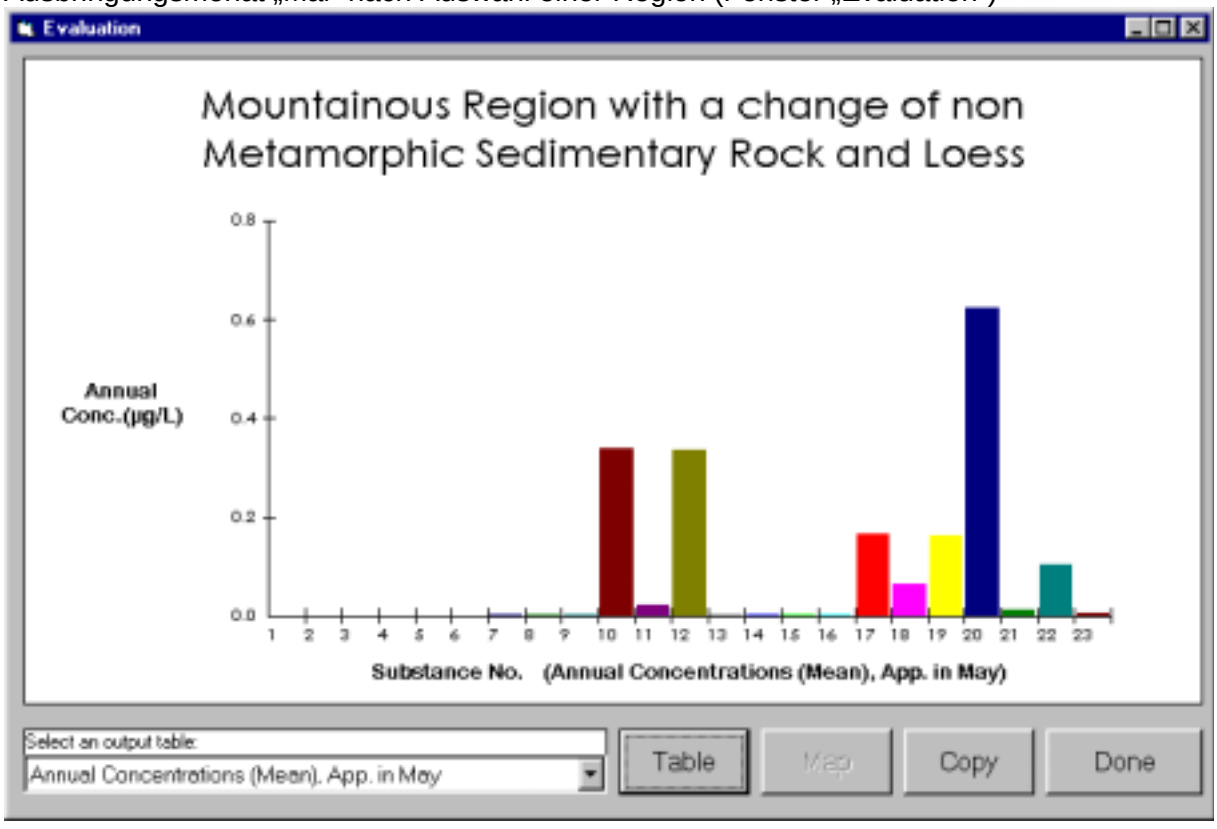


Abbildung 12: Grafische Darstellung der mittleren Sickerwasserkonzentrationen für den Ausbringungsmonat „Mai“ und der Sickerwasserregion 16

Auch diese Grafik kann über die Zwischenablage in andere Anwendungen übertragen werden (Bildschirmtaste: "*Copy*"). Der Anwender kann zu der tabellarischen Darstellung zurückkehren, wenn er die Taste "Table" auf dem Fenster anklickt oder aber eine neue Tabelle in der Listbox auswählt.

Falls der Anwender nicht eine Region, sondern eine Substanz aus der Tabelle auswählt (siehe Abbildung 13) wird die Bildschirmtaste "Diagram" ebenfalls aktiviert und es kann eine grafische Darstellung der Sickerwasserkonzentrationen einer Substanz (im Beispiel Decabromdiphenylether) in den verschiedenen Regionen aufgerufen werden.

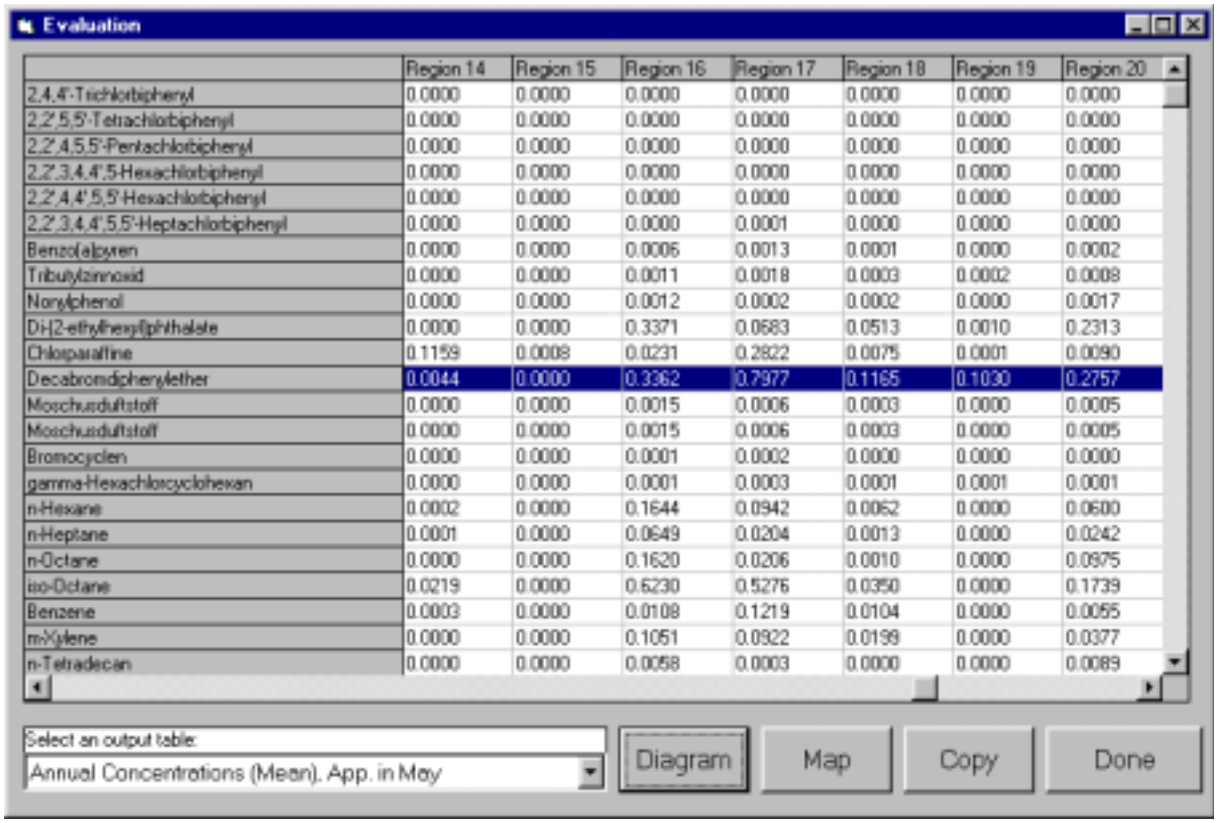
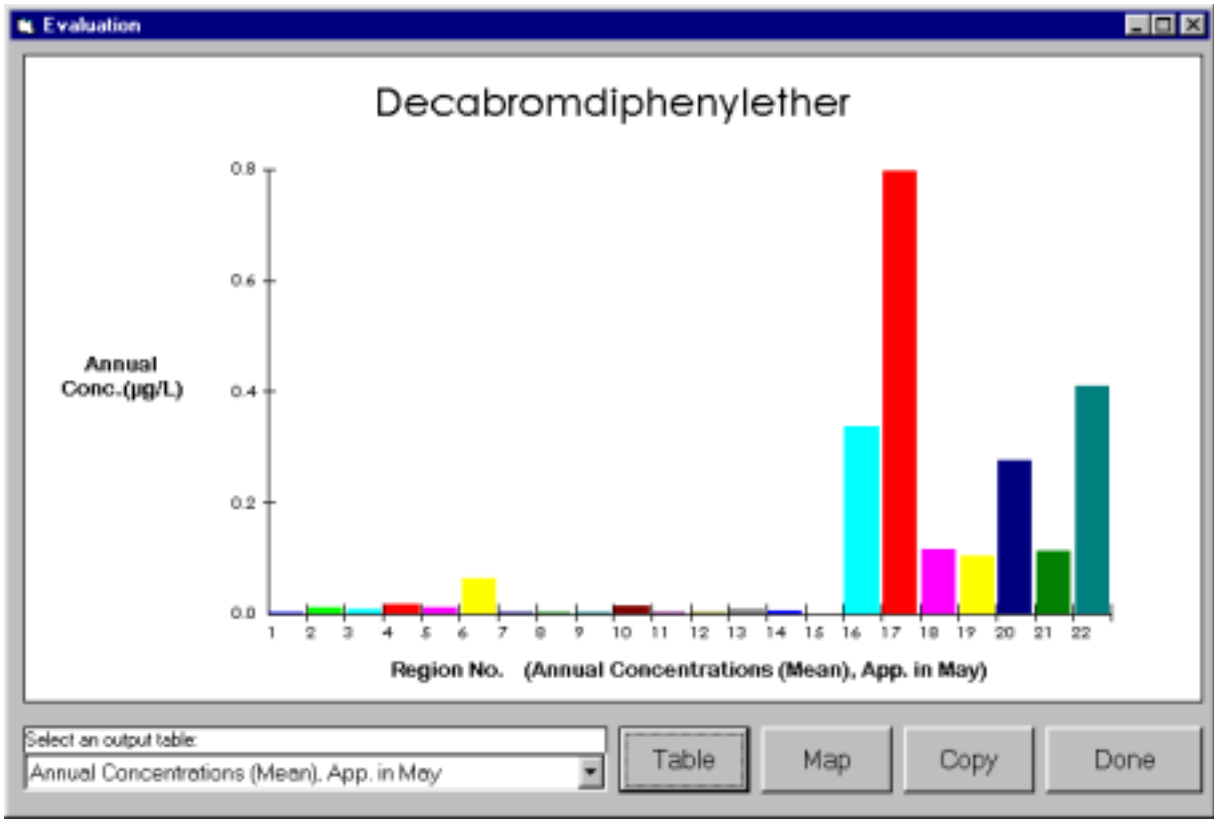


Abbildung 13: Zusammenstellung der mittleren Sickerwasserkonzentrationen für den Ausbringungsmonat „Mai" nach Auswahl einer Substanz (Fenster „Evaluation")

In der Asbbildung 14 ist das entsprechende Diagramm dargestellt.



Asbbildung 14: Grafische Darstellung der mittleren Sickerwasserkonzentrationen von Decabromdiphenylether für alle Regionen (Ausbringungsmonat “Mai”)

Wenn der Benutzer eine Substanz selektiert hat, wird neben der Bildschirmtaste “*Diagram”* zuzätzlich auch die Bildschirmtaste “*Map*” aktiv. Mit dieser Taste kann in einem neuen Fenster eine thematische Deutschlandkarte mit den verschiedenen Sickerwasserkonzentrationen geladen werden. Im Kapitel 4.5 “Die geografische Darstellung der Sickerwasserkonzentrationen” (ab Seite 24) wird erläutert, wie der Benutzer die Karte individuell bearbeiten kann.

Mit der Bildschirmtaste “*Done*” kann das Fenster “Evaluation” geschlossen werden, und der Anwender gelangt wieder zum Startfenster von *MCPELMO 2.0*.

4.5 Die geografische Darstellung der Sickerwasserkonzentrationen

In diesen Teil des Programms gelangt der Benutzer, wenn er die Bildschirmtaste “MAP” ausgehend vom Fenster “Evaluation” gedrückt hat.

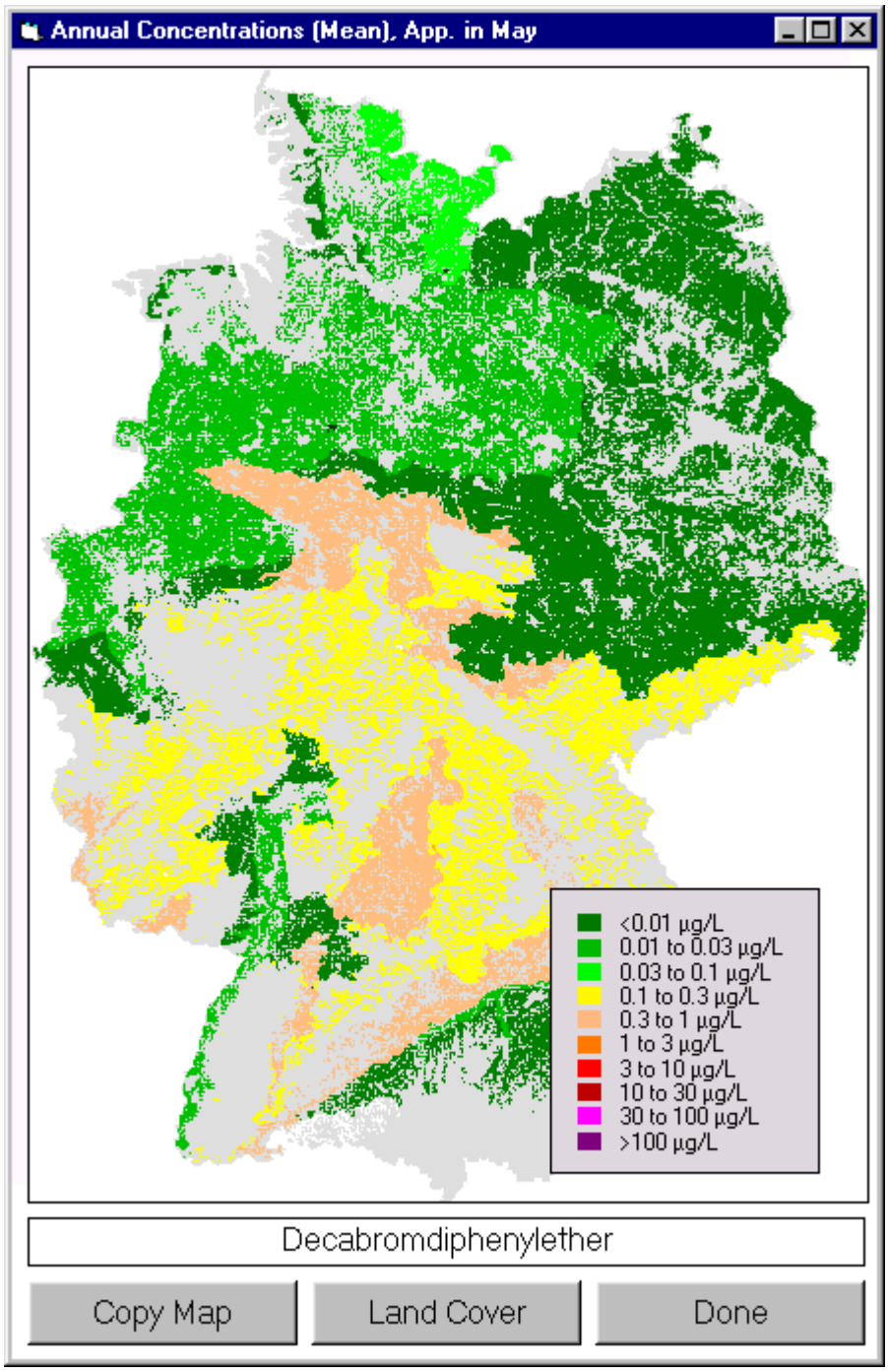


Abbildung 15: Geografische Darstellung der Verteilung der mittleren Sickerwasserkonzentrationen für eine Beispielsubstanz (Decabromdphenylether)

Der Benutzer kann die Karte mit folgenden Operationen individuell bearbeiten:

- Anzeigen der Namen der Versickerungsregionen

  Durch Anklicken der Karte mit der rechten Maustaste wird für jeden Punkt der Namen der jeweiligen Versickerungsregion in einer kleinen Box angezeigt (siehe Abbildung 16). Die Einblendung der Szenarionamen wird beendet, nachdem der Anwender erneut die rechte Maustaste gedrückt hat.

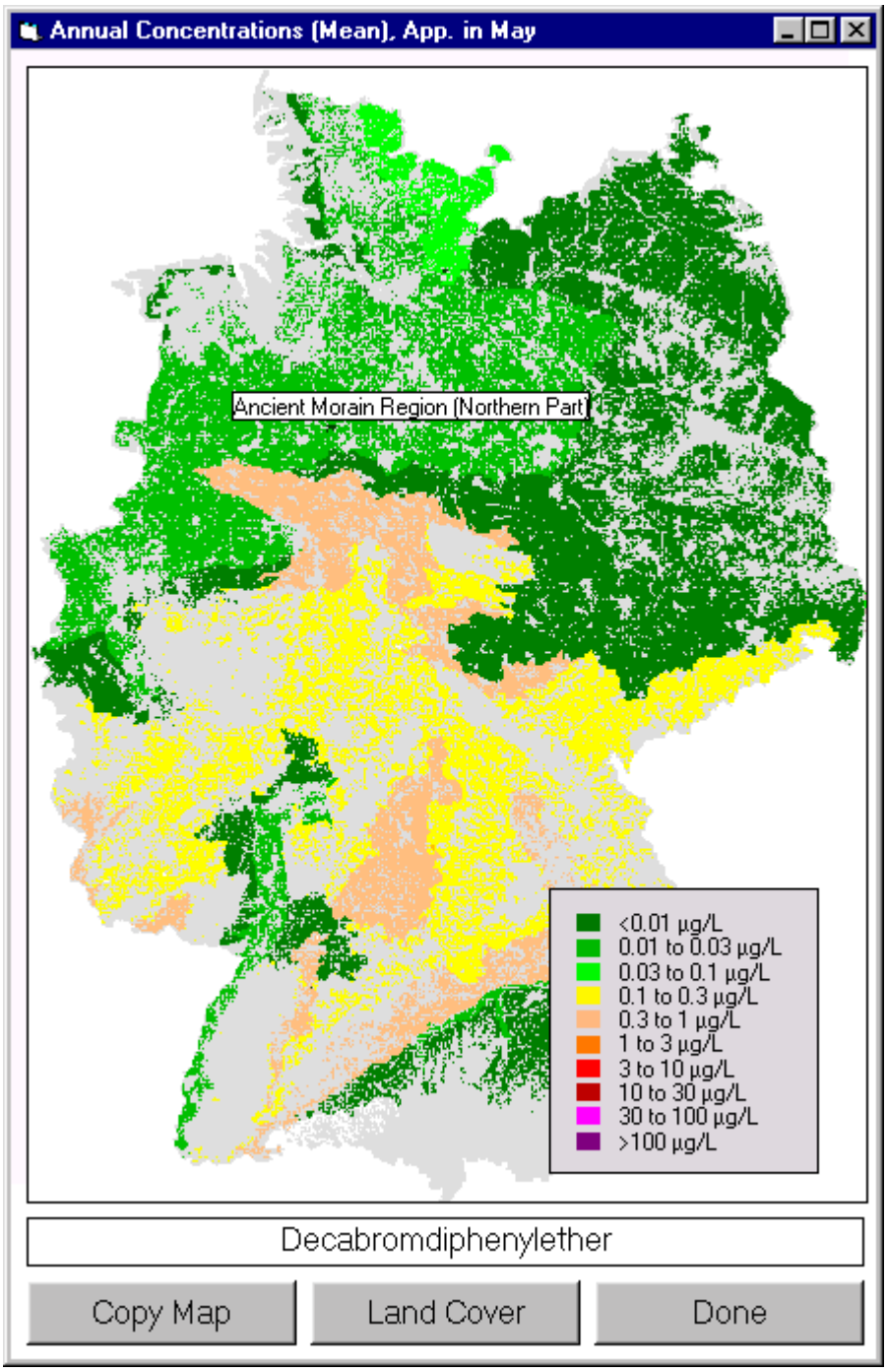


Abbildung 16: Geografische Darstellung der Verteilung der mittleren Sickerwasserkonzentrationen mit aktiviertem Anzeigemodus für die Szenarionamen

- Verschieben der Legendenposition

Als weitere Manipulationsmöglichkeit kann der Anwender die Position der Legende auf der Karte verändern. Dazu muss er die Legende mit der linken Maustaste anklicken und bei gedrückter Maustaste die Legende an eine beliebige andere Position verschieben. Nach einem Doppelklick mit der Maus auf die Legende verschwindet sie vom Bildschirm. Sie wird wieder sichtbar, wenn der Anwender zweimal kurz hintereinander die Karte anklickt.

- Berücksichtigung verschiedener Landnutzungen bei der Ausbringung

  Wie die Abbildung 16 deutlich macht werden die Sickerwasserkonzentrationen nicht für die gesamte Fläche der Bundesrepublik angezeigt. Aufgrund der Voreinstellung des Programms *MCPELMO 2.0* wird nur die Ackerbauflächen (*arable land*) berücksichtigt. Allerdings kann der Anwender auch Sickerwasserkonzentrationen für Flächen unter anderer Nutzung ausgeben lassen. Dazu dient die Bildschirmtaste *"Land Cover"*. Nachdem diese Taste vom Benutzer angeklickt wurde, öffnet sich ein neues Fenster, in dem die gewünschte Landnutzung zusammengestellt werden kann (siehe Abbildung 17).

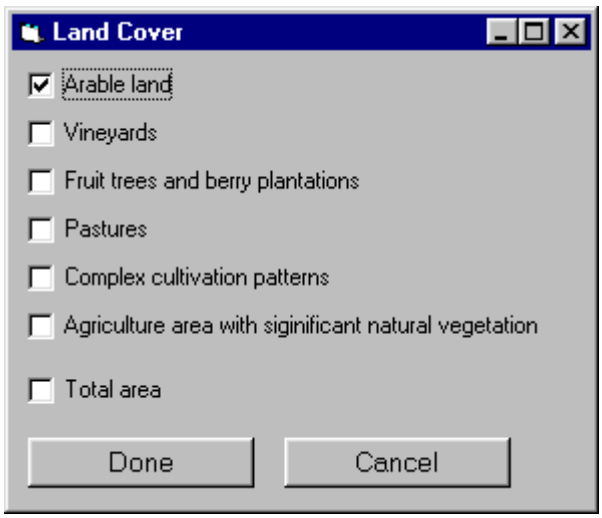


Abbildung 17: Eingabe der Landnutzung für die geografische Verteilung der Sickerwasserkonzentrationen

Das Fenster wird geschlossen nachdem die Bildschirmtasten *"Done"* (Bestätigung der Änderungen) oder "*Cancel"* (Verwerfen der Änderungen) gedrückt wurde. In der Abbildung 18 ist die Sickerwasserkonzentration für die gesamte Fläche der Bundesrepublok ("*Total area*") dargestellt

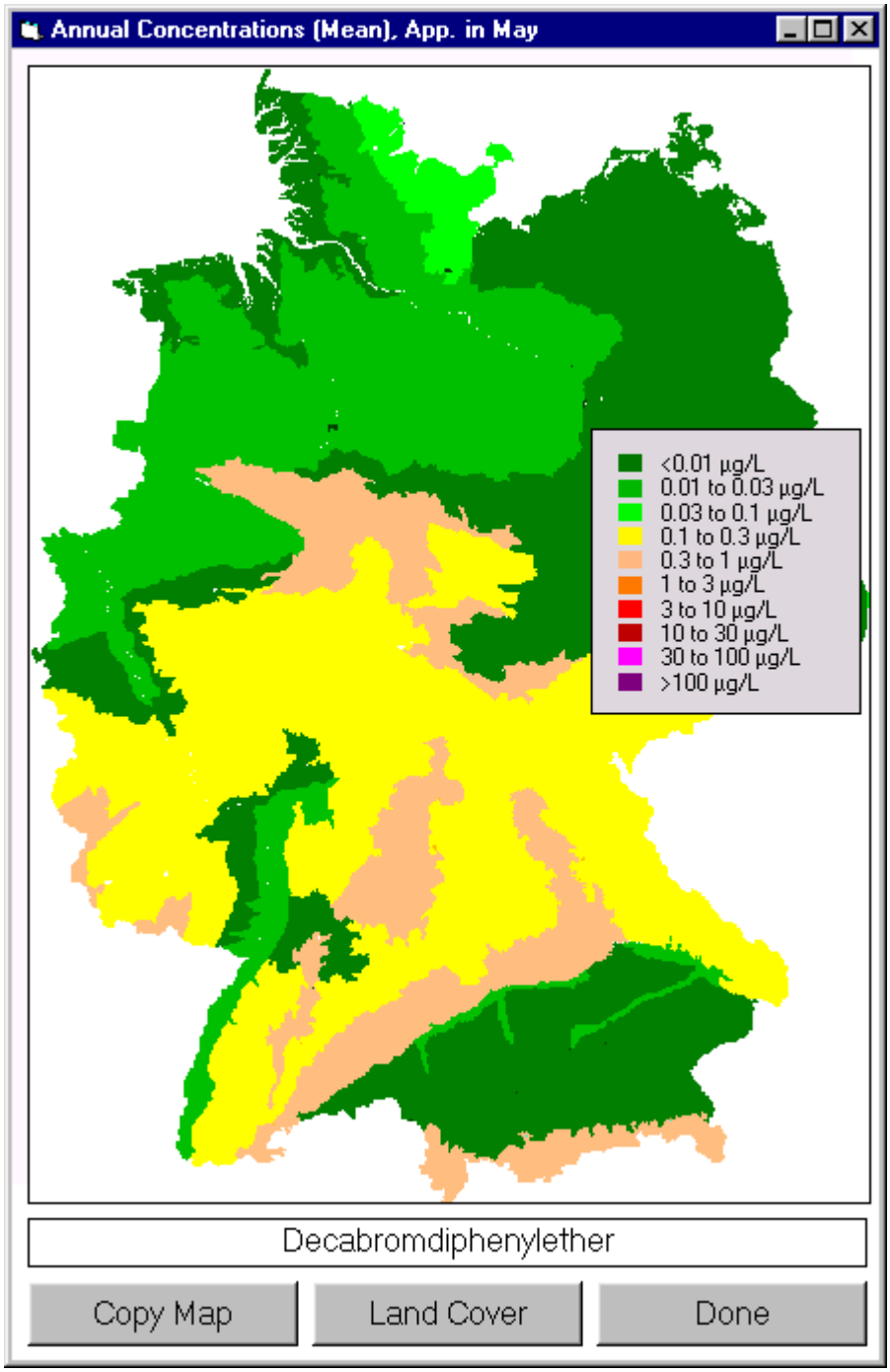


Abbildung 18: Geografische Darstellung der Verteilung der mittleren Sickerwasserkonzentrationen für die gesamte Fläche der Bundesrepublik

Mit der Bildschirmtaste “*Done*” kann das Fenster geschlossen werden, und der Anwender gelangt wieder zum Fenster “Evaluation” von *MCPELMO 2.0*.