

## 6.13 Benzotrifluoride

Vorhergehende Berichte: HLfU 1997 (für 1994-1996), S. 114-115  
 Tabellen: HLUG 2003b, Tab. 74-76

### I. Allgemeine Angaben

Im Rahmen der Orientierenden Messungen wurden 1994-1996 folgende Benzotrifluoride im Wasser hessischer Oberflächengewässer sowie im Ablauf (Wasser) kommunaler und industrieller Kläranlagen untersucht:

Benzotrifluorid		
2-Chlorbenzotrifluorid	3-Chlorbenzotrifluorid	4-Chlorbenzotrifluorid
2,4-Dichlorbenzotrifluorid	2,5-Dichlorbenzotrifluorid	3,4-Dichlorbenzotrifluorid

Benzotrifluorid und die Chlorbenzotrifluoride sind industrielle Zwischenprodukte, die für aquatische Organismen toxisch sind, denen abgesehen von potentiellen Belastungen am Arbeitsplatz aber keine große Umweltrelevanz beigemessen wird, weil sie nur in geschlossenen Verfahren hergestellt und eingesetzt werden. Für diese Verbindungen gibt es keine Zielwerte.

### II. Verfügbare Messdaten

Übersicht 6.13.1: Benzotrifluoride – Messdaten 1994-1996			
Probenahmeort: Ortstyp/Matrix	Stoffgruppe /Parameter	Jahre	Anmerkungen
1. <b>Oberflächen- Gewässer:</b> Wasser	Benzotrifluoride	1994-1996	1994 8, 1995 9, 1996 11 Gewässer, davon 7 durchgängig
2. <b>Kommunale Kläranlagen:</b> Ablauf (Wasser)	Benzotrifluoride	1994-1996	1994 6, 1995 8, 1996 9 KKA, davon 6 durchgängig
3. <b>Industrielle Kläranlagen:</b> Ablauf (Wasser)	Benzotrifluoride	1994-1996	1994 3, 1995 4, 1996 6 IKA, davon 3 durchgängig

### III. Herkunft – Umweltverhalten – Toxizität

Zu Benzotrifluorid und 4-Chlorbenzotrifluorid liegen ältere, von der Firma Hoechst erstellte Datensätze vor (zusammengefasst in HLfU 1997). Darüber hinaus sind Toxikologische Bewertungen der BG Chemie verfügbar zu Benzotrifluorid sowie zu 2-, 3- und 4-Chlorbenzotrifluorid (BG Chemie 1990, 1993, 1995, 1997). Zu den übrigen chlorierten Benzotrifluoriden lagen keine näheren Informationen vor.

#### 1. Umwelteinträge und Vorkommen

Benzotrifluorid sowie die o.a. Mono- und Dichlorbenzotrifluoride sind fluorierte bzw. fluoriert-chlorierte Benzolderivate, die im wesentlichen als Zwischenprodukte im Bereich der Farbstoff-, Pestizid- und Pharmazeutika-Synthese dienen. Benzotrifluoride

können auch als Lösungsmittel für Lacke eingesetzt werden, doch spielt dies in der Bundesrepublik keine Rolle. Nach Herstellerangaben für Anfang der 90er Jahre (Broecker 1991) erfolgt die Herstellung von 4-Chlorbenzotrifluorid im geschlossenen System; der Eintrag in Abwasser bzw. Gewässer ist nach dieser Angabe zu vernachlässigen. Am Standort Frankfurt/M.-Griesheim werden seit Ende der 90er Jahre keine Benzotrifluoride mehr hergestellt; eingesetzte Zwischenprodukte sind Importware (Clariant 2004).

## *2. Stoffeigenschaften, Toxizität*

Benzotrifluorid und 2-, 3- und 4-Chlorbenzotrifluorid sind nur in geringem Maße wasserlöslich. Sie haben einen mittleren Dampfdruck (zwischen 5 und 43 hPa). Die Octanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten ( $\log K_{ow}$ ) von Benzotrifluorid und 4-Chlorbenzotrifluorid betragen 3 bzw. 3,7. Demnach ist Bioakkumulation nicht auszuschließen bzw. zu erwarten; Rhodia gibt für Benzotrifluorid aber einen niedrigen BCF von 58 an (nicht bioakkumulativ; Rhodia 2004). Benzotrifluorid ist ebenso wie 4-Chlorbenzotrifluorid nicht leicht biologisch abbaubar. 4-Chlorbenzotrifluorid hat hohe Toxizität für aquatische Organismen (Broecker 1991). Die niedrigsten aquatischen Effektkonzentrationen liegen für beide Stoffe bei 1-4 mg/L ( $EC_{0}$ , Daphnie). Für Benzotrifluorid wird ein  $EC_{50}$ -Wert bei Daphnien von 7-11  $\mu\text{g/L}$  (24h) genannt, für Fisch von 28 mg/L (24h) (Rhodia 2004).

Die akute Toxizität von Benzotrifluorid und 2-, 3- und 4-Chlorbenzotrifluorid sowie 3,4-Dichlorbenzotrifluorid im Test mit Säugern ist gering (Broecker 1991; BG Chemie 1993, 1997). In Untersuchungen zur chronischen Toxizität (Säuger) von 4-Chlorbenzotrifluorid und 3,4-Dichlorbenzotrifluorid ergaben 28- bzw. 90-d-Studien einen NOEL (no effect level) von 5-10 mg/kg KG, was auf hohe chronische Toxizität hinweist. Auf Grund der chemischen Strukturverwandtschaft ist ähnliche chronische Toxizität auch für die anderen Chlorbenzotrifluoride anzunehmen. (BG Chemie 1995, 1997). Angaben zur Kanzerogenität liegen nicht vor. Bei 4-Chlorbenzotrifluorid besteht Verdacht auf schwache gentoxische Wirkung (BG Chemie 1995).

Benzotrifluorid ist nach der EG-Richtlinie von 1991 als umweltgefährlich und als giftig für Wasserorganismen eingestuft. Benzotrifluorid ist in Wassergefährdungsklasse 1 (schwach wassergefährdend), 4-Chlorbenzotrifluorid ebenso wie 2,4-Chlorbenzotrifluorid in Wassergefährdungsklasse 2 (wassergefährdend) eingeordnet.

Benzotrifluorid und 4-Chlorbenzotrifluorid waren seinerzeit vom Beratergremium für umweltrelevante Altstoffe in die Gruppe IV eingestuft worden, zu der Stoffe mit möglichem Gefährdungspotential gehören, das jedoch aufgrund der gegebenen Expositionssituation nur am Arbeitsplatz Bedeutung hat (BUA 1992).

## *3. Bewertungsgrundlagen – Zielwerte*

Es liegen keine Zielwerte vor.

## **IV. Hessische Werte: Einzeldaten und Trends**

### **1. Benzotrifluoride im Wasser aus hessischen Oberflächengewässern 1994-1996**

#### *1.1 Die Ergebnisse 1994-1996*

In den hessischen Fließgewässern lagen die Konzentrationen aller gemessenen

Benzotrifluoride 1994-96 fast ausnahmslos unterhalb der BG von 0,05 µg/L. Lediglich 1994 traten ein paar Befunde auf: Im Rhein (nördliche Landesgrenze) konnten alle chlorierten Benzotrifluoride mit Werten von 0,05-0,17 µg/L gefunden werden, das Vorprodukt Benzotrifluorid jedoch nicht. In Rodau, Lahn und Fulda trat 2,4/2,5-Dibenzotrifluorid im Bereich von 0,1-0,2 µg/L auf, in der Fulda außerdem noch 3,4-Dichlorbenzotrifluorid (0,3 µg/l).

### 1.2 Vergleichswerte

Ältere Vergleichsdaten aus dem Jahr 1983 (vgl. HLfU 1997) beziehen sich auf die Mainfahne im Rhein: Für Benzotrifluorid, Chlor- und Dichlorbenzotrifluorid lagen die Konzentrations-Mittelwerte bei 0,15-0,38 µg/L und die Maximalwerte bei 1,1-3,7 µg/L. Zwischen 1983 und 1994-1996 ist also ein deutlicher Rückgang der Werte im Rhein (und Main) zu verzeichnen.

## 2. Benzotrifluoride im Ablauf (Wasser) kommunaler und industrieller Kläranlagen in Hessen 1994-1996

In den *kommunalen Kläranlagenabläufen* (n = 6-9) waren die Benzotrifluoride 1994-1996 fast nie nachweisbar (BG 0,05 µg/L, 1995 für 2,4/2,5-Dichlorbenzotrifluorid 0,1 µg/L). Lediglich 1994 konnte an drei Orten 3-Chlor- und 2,4/2,5-Dichlorbenzotrifluorid nachgewiesen werden (0,1-0,2 µg/L).

In den beprobten *industriellen Kläranlagenabläufen* (n = 3-6) ließen sich die Benzotrifluoride bei gleicher BG teilweise nachweisen. 1994 konnte die Mehrzahl der Benzotrifluoride im Ablauf der IKA I11 gemessen werden (0,05-1,4 µg/L). Daneben kamen 1994/95 noch einzelne Befunde im Ablauf von I12 und I13 vor (0,1-0,3 µg/L). 1996 wurden für alle gemessenen Substanzen in allen sechs untersuchten Abläufen Werte unterhalb von 0,05 µg/l erhalten.

## V. Bewertung

### 1. Zielwerte und Zielwertüberschreitungen

Zielwerte liegen für Benzotrifluorid und die Chlorbenzotrifluoride nicht vor.

### 2. Belastungstrend und Vergleichsdaten

Der Vergleich mit den Befunden aus dem Rhein/Main für 1983 ergibt eine deutliche Reduktion der Gewässerkonzentration bis 1996. Aus späterer Zeit liegen keine Messdaten vor.

### 3. Zusammenfassende Bewertung

Eine Bewertung anhand verfügbarer aquatischer Toxizitätsdaten ist nur für 4-Chlorbenzotrifluorid (bzw. Benzotrifluorid) möglich. Für diese Stoffe betrug die höchste Gewässerkonzentration 0,05 µg/L (bzw. <0,05 µg/L). Die o.g. niedrigste aquatische Wirkkonzentration liegt bei 1 mg/L; aufgrund des großen Abstands (Faktor 20.000) sind keine Schäden im aquatischen Bereich zu erwarten. Für die übrigen Benzotrifluoride (maximal gemessene Gewässerkonzentration von 0,2 µg/L) kann keine Bewertung erfolgen, da zu ihnen keine entsprechenden Toxizitätsdaten vorlagen.

**VI. Lit.**

- BG Chemie, Benzotrifluorid, Toxikologische Bewertung Nr. 75, Heidelberg 1993
- BG Chemie, m-Chlorbenzotrifluorid, Toxikologische Bewertung Nr. 89, Heidelberg 1997
- BG Chemie, o-Chlorbenzotrifluorid, Toxikologische Bewertung Nr. 88, Heidelberg 1990
- BG Chemie, p-Chlorbenzotrifluorid, Toxikologische Bewertung Nr. 272, Heidelberg 1995
- B. Broecker, Der Bereich Umweltgefährlichkeit – Eine kontroverse Betrachtung, in: UWSF – Z. Umweltchem. Ökotox. 3, 1991, S. 3-4
- BUA (Beratergremium für umweltrelevante Altstoffe der Gesellschaft Deutscher Chemiker), Umweltrelevante Alte Stoffe III. Prioritätensetzung und eingestufte Stoffe der dritten Stoffliste, Weinheim [VCH] 1992
- Clariant 2004: Clariant GmbH, Frankfurt/M.-Griesheim, pers. Mittl. 2004
- HLfU [Hessische Landesanstalt für Umwelt] 1997: C. Fooken, R. Gühr, M. Häckl, P. Seel, Orientierende Messungen gefährlicher Stoffe. Landesweite Untersuchungen auf organische Spurenverunreinigungen in hessischen Fließgewässern, Abwässern und Klärschlämmen 1991-1996. HLfU, Umweltplanung, Arbeits- und Umweltschutz H. 233, Wiesbaden 1997
- HLUG (Hessisches Landesamt für Umwelt und Geologie) 2003b: S. Fengler, C. Fooken, R. Gühr, P. Seel, Orientierende Messungen gefährlicher Stoffe. Landesweite Untersuchungen auf organische Spurenverunreinigungen in hessischen Fließgewässern, Abwässern und Klärschlämmen 1991-2001, Analysenergebnisse, HLUG (Wiesbaden 2003)
- Rhodia 2004: Rhodia Organique, Lyon, Sicherheitsdatenblatt Trifluormethylbenzol, CAS-Nr. 98-08-8, Stand: 27.1.2004