

## 112 Nachweismethoden schadstoffmindernder Prozesse

Man unterscheidet im Wesentlichen qualitative und quantitative Nachweismethoden. In der Regel sind quantitative Methoden mit einem deutlich höheren Aufwand verbunden. In einem ersten Schritt wird die Abnahme der Schadstoffkonzentration entlang einer Migrationstrecke festgestellt. Sind die biogeochemischen Bedingungen im Grundwasserleiter geeignet, einen Abbau zuzulassen und die Analyse der Redoxindikatoren belegen einen Schadstoffabbau (Kapitel 112.2), wird in der Regel der Schadstofffingerprint untersucht. Das ist beim reduktiven Abbau der LCKW einfach: die gebildeten Metabolite gehören zum Standarduntersuchungsprogramm (Kapitel 112.2). Das Abflauen eines anaeroben Abbaus der BTEX und PAK kann nachgewiesen werden, wenn spezifische Metabolite, die nur in der anaeroben Abbaukette der BTEX oder PAK auftreten, in Grundwasser analytisch vorgefunden werden (Kapitel 112.2). Schwieriger ist der Nachweis des Ablaufens eines aeroben Abbaus. Hierbei akkumulieren in der Regel keine Metabolite im Grundwasser. Können jedoch die für einen aeroben Abbau spezifischen Gene nachgewiesen werden, so liegt im Grundwasserleiter zumindest das Potential für einen derartigen Abbau vor (Kapitel 112.4). Dies wird auch genutzt zur Überprüfung des Potentials für einen reduktiven Abbau der LCKW mit Hilfe des Bakteriums *Dehalococcoides* (Kapitel 112.4). In komplizierten Fällen wird der Nachweis des Schadstoffabbaus mit Hilfe von BacTraps geführt (Kapitel 112.3). Diese Methode liefert einen zwingenden Beweis, dass der untersuchte Schadstoff an Ort der Inkubation vollständig mineralisiert wird. Sie weist jedoch einige Einschränkungen auf: die BacTrap-Methode ist nicht geeignet für Schadstoffe, die anstatt als Elektronendonator nur als Elektronenakzeptor genutzt werden (z.B. höher chlorierte LCKW) und auch nicht für stark flüchtige Schadstoffe (z.B. VC). Bei sehr geringen Schadstoffkonzentrationen können viele Methoden nicht angewendet werden. In diesem Fall helfen mit Schadstoffen aufdotierte Abbauprobversuche (Batch-Versuche) unter Verwendung von Proben, die unter redoxkonservierenden Bedingungen am Standort entnommen wurden (Kapitel 112.5). Auch in diesem Fall wird lediglich ein Abbaupotential gemessen. Ob der Abbau auch tatsächlich im Grundwasserleiter so erfolgt, kann damit nicht zwingend nachgewiesen werden.

Quantitative Methoden liegen nur in geringer Anzahl vor. Allem voran kann die Analyse der Änderung der Isotopensignatur entlang einer Schadstoffmigrationsrichtung genutzt werden, um Abbauraten zu berechnen, vorausgesetzt der Isotopenfraktionierungsfaktor und die Abbaukinetik (oft Reaktion 1. Ordnung) ist bekannt (Kapitel 112.1). Auch aus der Abnahme der Fracht zwischen zwei Kontrollebenen, bestimmt mit Hilfe von Immissionspumpversuchen (Kapitel 112.6), können (vorausgesetzt, es liegen Frachtenberechnungen an drei oder mehr Kontrollebenen vor) Abbauraten berechnet werden. Sehr komplexe Fälle können die Erstellung eines reaktiven Schadstofftransportmodells (Kapitel 112.7) erforderlich machen. Ausschließlich mit diesem Modell sind quantitative Prognosen für die Zukunft möglich. Wegen des erheblichen Aufwandes für die Erstellung eines reaktiven Schadstofftransportmodells (einschließlich der Bestimmung der Input-Parameter) findet dieses nur in vergleichsweise wenigen Fällen Anwendung.

Wesentliche Grundlagen zu den Nachweismethoden für schadstoffmindernde Prozesse wurden im Rahmen des KORA-Forschungsverbundes (Kontrollierter Rückhalt und Abbau) erarbeitet. Dessen Ergebnisse sind in einer Handlungsempfehlung und mehreren Leitfäden dokumentiert. Die wichtigsten sind:

- Wabbels, D., Teutsch, G. (2008): Leitfaden. Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten. Methoden, Empfehlungen und Hinweise zur Untersuchung und Beurteilung. KORA-Themenverbund 1: Raffinerien, Tanklager, Kraftstoffe/Mineralöl, MTBE. Hrgb.: Universität Tübingen, Zentrum für angewandte Geowissenschaften, DECHEMA, Frankfurt.
- Börke, P., Hüßers, N. (2008): Leitfaden. Natürliche Schadstoffminderung bei Teerölaltlasten. KORA-Themenverbund 2: Gaswerke, Kokereien, Teerverarbeitung (Holz-)Imprägnierung. Hrgb.: Universität Tübingen, Zentrum für angewandte Geowissenschaften, DECHEMA, Frankfurt.
- Grandel, S., Dahmke, A. (2008): Leitfaden. Natürliche Schadstoffminderung bei LCKW-kontaminierten Standorten. Methoden, Empfehlungen und Hinweise zur Untersuchung und Beurteilung. KORA-

Themenverbund 3: Chemische Industrie, Metallverarbeitung. Hrgb.: Technische Universität Dresden, Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten.

Luckner, T., Helling, C, Raimann, S. (2008): Leitfaden. Umgang mit abfallablagerungsverursachten Gewässerschäden und Gefahrensituationen unter Berücksichtigung der Wirkung natürlicher Rückhalte- und Abbau-Prozesse. KORA-Themenverbund 4: Deponien, Altablagerungen. Hrgb.: Dresdner Grundwasserforschungszentrum e.V.

Luckner, T., Helling, C, Raimann, S. (2008): Synopse. Systemanalyse, Modellierung und Prognose der Wirkungen natürlicher Schadstoffminderungsprozesse – eine rezente Synopse. KORA-Themenverbund 7: Modellierung, Prognose. Hrgb.: Dresdner Grundwasserforschungszentrum e.V.

## 112.1 Isotopenuntersuchungen

### 112.1.1 Leistungsbeschreibung (rechtliche/technische Grundlagen)

Isotope sind Varianten eines chemischen Elements, die sich in ihrer Masse, d.h. in der Anzahl der Neutronen im Atomkern, unterscheiden. Die chemischen Eigenschaften von Isotopen eines Elements sind identisch, so dass alle Isotope eines Elements in den gleichen chemischen Verbindungen vorkommen. Damit können Isotope nur physikalisch, nicht jedoch über ihr chemisches Verhalten unterschieden werden. Den Isotopen wird in den Elementsymbolen die Summe der Neutronen und Protonen im Atomkern als Kennzeichnung hochgestellt vorangestellt.

Für forensische Untersuchungen in der Altlastenbearbeitung werden am häufigsten die Isotope von Kohlenstoff (C), Wasserstoff (H), Schwefel (S) und Chlor (Cl) eingesetzt.

Eine umfassende Darstellung der Grundlagen und Anwendungen von Isotopenmethoden findet man bei Hoefs, 1997. Die Anwendung von Isotopenmethoden bei forensischen Untersuchungen ist bei Ertel et.al., 2009, Dörr & Hiesl, 2012 und bei Dörr, 2013 beschrieben.

#### Probennahme

Die Probennahme für die  $^{13}\text{C}$ - Analytik erfolgt nach den in der Altlastenbearbeitung üblichen Standards.

Für die Analyse leichtflüchtiger Verbindungen sollte die Probennahme nach E DIN ISO 22155 erfolgen.

Auf Grund der hohen Dampfdrücke und der geringen Sorptionskoeffizienten besteht bei den LCKW eine große Gefahr der Verfälschung der Ergebnisse durch die Bodenprobennahme. Hier ist ganz besonders auf die Vermeidung der Ausgasung aus den Bohrkernen zu achten. Bodenproben zur  $^{13}\text{C}$ - Analyse sollten deshalb nur nach vorheriger Rücksprache mit dem Probennahmestitut genommen werden. Bei einer LCKW-Konzentration von 0,1 mg/kg werden 1 - 2 kg Boden<sup>1</sup> für die  $^{13}\text{C}$ - Analyse benötigt.

Für die  $^{13}\text{C}$  und Deuterium- Analytik an Wasserproben werden ab einer Konzentration von 5 µg/L etwa 0,2 L Wasser benötigt. Dies gilt für die  $^{13}\text{C}$ - und Deuterium Analyse an BTEX. Für die  $^{13}\text{C}$ - Analyse von MKW benötigt man ab einer Konzentration von 10 µg/L etwa 5 L Wasser.

Für die Chlor- Isotopenanalyse sind spezielle Probenaufbereitungsverfahren erforderlich. Für die  $^{37}\text{Cl}/^{35}\text{Cl}$  - Verhältnisse wird ab einer Konzentration von 5 µg/L eine Probe von 0,2 L benötigt.

Da sich die D/H- Analytik an LCKW gegenwärtig noch in der wissenschaftlichen Entwicklung befindet, wird für eine Analyse eine Probe mit einer LCKW- Konzentration von > 200 µg/L benötigt.

---

<sup>1</sup> Bei den Angaben zu den Probenmengen handelt es sich um allgemeine Angaben, die in jedem Einzelfall mit dem Analyselabor im Vorfeld abzustimmen sind.

Für die Schwefel- Isotopenanalyse sind spezielle Probenaufbereitungsverfahren erforderlich. Die Analysen können nur durch spezialisierte Labors durchgeführt werden. Die Analyselabors sind deshalb in die Aufstellung des Probennahmekonzeptes einzubeziehen.

Wasserproben sollten in Septumflaschen randvoll und luftdicht abgefüllt werden. Zur Vermeidung eines mikrobiologischen Abbaus in der Probenflasche sind die Proben z.B. mit NaOH- Pellets zu konservieren, sowie gekühlt gelagert und transportiert werden.

Bei der Beprobung von Phase sind generell geringere Probenmengen ausreichend.

Es sollten immer Rückstellproben genommen werden. Deren Lagerung ist bei durchgehender Kühlkette und Konservierung zur Vermeidung eines mikrobiologischen Abbaus über längere Zeiträume möglich.

Generell ist der Zeitbedarf für Isotopenuntersuchungen länger als bei konventionellen chemischen Analysen. Die jeweilige Analysendauer ist im Vorfeld mit dem Analyseinstitut abzustimmen. Für die Auswertung der Isotopendaten sind immer die Konzentrationen der untersuchten chemischen Elemente erforderlich. Dies ist bei der Aufstellung des Untersuchungsumfanges der Altlastenuntersuchungen zu berücksichtigen. Es ist nicht zwingend erforderlich, dass die Analyse der Konzentrationen vom selben Labor durchgeführt wird, wie die Isotopenanalysen. Jedoch kann es aus organisatorischen und logistischen Gründen ratsam sein.

Die Isotopenanalytik wird durch spezialisierte Labors durchgeführt. Die einzelnen Messverfahren sind z.B. bei Hoefs, 1997 und Hunkeler et.al, 2002 beschrieben.

#### Kohlenstoffisotopie

Eine umfassende Zusammenstellung der Wertebereiche verschiedener Isotope in unterschiedlichen chemischen Verbindungen ist bei Coplen et. al, 2002 enthalten.

Weitere grundlegende Informationen zu Methodik und Anwendung von Kohlenstoff-Isotopenuntersuchungen in der Altlastenbearbeitung sind z.B. bei Ertel et. al, 2009, Michels et. al, 2008 und Eisenmann und Fischer, 2010 zu finden.

#### Mineralölkohlenwasserstoffe

Die  $^{13}\text{C}$ - Gehalte von Rohöl spiegeln den Ort der Lagerstätte und die geologische Entstehungsgeschichte wieder. Die aliphatischen und aromatischen Kohlenwasserstofffraktionen zeigen ebenso wie die residuale Fraktion nahezu keine isotopischen Unterschiede zum Rohöl. Deshalb kann der  $^{13}\text{C}$ - Gehalt zur Unterscheidung von Mineralölprodukten unterschiedlicher Herkunft und damit z.B. auch unterschiedlicher Hersteller genutzt werden. Ebenso besteht die Möglichkeit, verschiedene Beiträge zu einem Gesamtschaden quantitativ zu rekonstruieren (falls sich die Schäden in Ihrer Herkunft der Kohlenwasserstoffe unterscheiden).

Sind jedoch in einem Schaden unterschiedliche Isotopensignaturen identifiziert und ist sichergestellt, dass diese nicht durch Abbau- oder andere Prozesse verändert wurden, kann man die Anteile dieser unterschiedlichen Komponenten zu einer Gesamtschadstofffahne ermitteln. Besonders hilfreich dabei ist es, wenn die Ausgangsprodukte z.B. in gelagerten Fässern noch vorhanden sind und die Ausgangsisotopensignatur möglicher Schadensquellen direkt analytisch bestimmt werden kann. Liegen Anzeichen für einen merklichen mikrobiellen Abbau vor, ist die Anwendbarkeit des Isotopenfingerprintings bei MKW Schäden stark eingeschränkt.

#### BTEX, MTBE

In vielen Fällen kann angenommen werden, dass bei geringem mikrobiologischen Abbau der ursprüngliche Isotopen- Fingerabdruck der BTEX in Mineralölprodukten nur sehr wenig überprägt ist. Ob die isotopischen Fingerabdrücke der BTEX dazu genutzt werden können, unterschiedliche Quellen einer Kontamination voneinander zu unterscheiden, hängt stark von den Unterschieden der  $^{13}\text{C}$ - Gehalte der Ausgangssubstanzen ab. Je größer der Unterschied der Ausgangssubstanzen, umso geringer ist der Einfluss der Isotopentrennung.

$^{13}\text{C}$  Untersuchungen an MTBE sind für forensische Untersuchungen nicht sinnvoll, da MTBE eindeutig Benzinschäden zugeordnet werden können, die nach etwa Ende der 1970-iger/Anfang der 1980-iger Jahre eingetreten sind (siehe 113.4)

#### Chlorierte Kohlenwasserstoffe

Entsprechend der unterschiedlichen Ausgangssubstanzen und Herstellungsverfahren der chlorierten Kohlenwasserstoffe können Lösungsmittel unterschiedliche Isotopensignaturen aufweisen, und sind so voneinander unterscheidbar.

Auch können unterschiedliche Anwendungen und Lagerungen zu einer Verschiebung der Isotopensignatur führen, die zur Unterscheidung der Anteile verschiedener Verursacher zu einem Gesamtschaden genutzt werden können.

#### Wasserstoffisotopie

Wasserstoff-Isotope werden hauptsächlich bei chlorierten Kohlenwasserstoffen und in Einzelfällen auch bei aromatischen Kohlenwasserstoffen untersucht. Die Grundlagen und die Auswerteprinzipien beruhen wie bei den Kohlenstoff-Isotopen auf Isotopentrenneffekten, die bei den Ausgangsprodukten herstellungsbedingt zu einem Unterscheidungsmerkmal führen, mit dem man die Herkunft einer Kontamination untersuchen kann. Außerdem resultiert ein mikrobiologischer Abbau in einer Isotopentrennung, an Hand derer man unabhängig von den Kohlenstoffisotopen den Abbaugrad bestimmen und ggfs. quantifizieren kann.

#### Chlorisotopie

Chlor-Isotope werden bei Grundwasserschäden mit chlorierten Kohlenwasserstoffen untersucht. Die Grundlagen und die Auswerteprinzipien beruhen wie bei den Kohlenstoff-Isotopen auf Isotopentrenneffekten, die bei den Ausgangsprodukten herstellungsbedingt zu einem Unterscheidungsmerkmal führen, mit dem man die Herkunft einer Kontamination untersuchen kann. Da das zur Herstellung von LCKW benötigte Chlor aus unterschiedlichen Quellen stammt (verschiedene Chlorid-haltige Mineralien, Salze), kann das  $^{37}\text{Cl}/^{35}\text{Cl}$ - Verhältnis der Ausgangskontamination unterschiedlich sein, und deshalb als unabhängiger Indikator zur Unterscheidung und ggf. quantitativen Zuordnung mehrerer verschiedener Schadensursachen herangezogen werden.

Insbesondere durch eine kombinierte Betrachtung der  $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ -, D/H und  $^{37}\text{Cl}/^{35}\text{Cl}$ - Verhältnisse kann die Aussagekraft einer forensischen Untersuchung hinsichtlich der Identifikation unterschiedlicher Verursacher erhöht werden.

### 112.1.2 Kostenermittlung

Bei den Isotopenuntersuchungen handelt es sich um eine Teilleistung der forensischen Untersuchungen. Der Aufwand für die Leistungserbringung ist vom jeweiligen Projektumfang und der Fragestellung abhängig. In die Kostenermittlung für die Isotopenuntersuchungen einzubeziehen ist der Aufwand für

- Abstimmung der Probennahme und Analysen mit dem Analyzelabor,
- Bereitstellung von speziellen Probennahmegefäßen, Werkzeugen und Konservierungsmittel,
- Probennahme
- Auswertung der Isotopenanalysen,
- Integration der Ergebnisse der Isotopenanalysen in die Ergebnisse der forensischen Untersuchung, Plausibilitätsprüfung
- Berichterstellung (gilt für alle forensischen Untersuchungsmethoden)

Das Leistungsregister mit Positionen und Kostenangaben ist Bestandteil der internetbasierten Datenbank (LB 112).

LB 110.2 Probenahme

LB 130 Analytik

### 112.1.3 Literatur

- Benson, S., Lennard, C., Maynard, P., Roux, C., (2006), Forensic applications of isotope ratio mass spectrometry - A review. - Forensic Science International 157, pp. 1 – 22
- Coplen, T. B., Hopple, J. A., Böhlke, J. K., Peiser, H. S., Rieder, S. E., Krouse, H. R., Rosman, K. J. R., Ding, T., Vocke, Jr., R. D., Révész, K. M., Lamberty A., Taylor, P., De Bièvre, P., (2002), Compilation of Minimum and Maximum Isotope Ratios of Selected Elements in Naturally Occurring Terrestrial Materials and Reagents, U.S. Department of the Interior U.S. Geological Survey, Water-Resources Investigations Report 01-4222
- Dörr, H. und Hiesl, E. S., (2012), Die Anwendung forensischer Methoden in der Altlastenbearbeitung - Methoden und Beispiele zur Ursachen- und Verursacheranalyse bei MKW-, BTEX- und PAK- Schäden in Boden und Grundwasser, Handbuch der Altlastensanierung und Flächenmanagement (Franzius,V., Altenbockum,M., Gerold, T. (Eds.)), 3. Auflage, 66. Aktualisierung, Verlagsgruppe Hüthig Jehle Rehm München
- Dörr, H., (2013), Die Anwendung forensischer Methoden in der Altlastenbearbeitung, Methoden und Beispiele zur Ursachen- und Verursacheranalyse bei CKW- Schäden, Handbuch der Altlastensanierung und Flächenmanagement (Franzius,V., Altenbockum,M., Gerold, T. (Eds.)), 3. Auflage, 68. Aktualisierung, Verlagsgruppe Hüthig Jehle Rehm München
- Eisenmann, H., und Fischer, A., (2010), Isotopenuntersuchungen in der Altlastenbewertung, Handbuch der Altlastensanierung und Flächenmanagement (Franzius,V., Altenbockum,M., Gerold, T. (Eds.)), 3. Auflage, Verlagsgruppe Hüthig Jehle Rehm München, ISBN 978-3-8114-9700-9
- Ertel, T., Dörr, H., Blessing, M., Hansel, H., Philipps, R., Rebel, M. Schöndorf, T., (2009), Forensische Verfahren in der Altlastenbearbeitung, Herausgegeben vom Arbeitskreis Innovative Erkundungs-, Sanierungs- und Überwachungsmethoden des Altlastenforums Baden-Württemberg e.V., E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, (Nägele u. Obermiller), ISBN 978-3-510-39014-4
- Michels, J., Stuhmann, M., Frey, C., Koschitzky, H.-P., (Hrsg.), (2008), Handlungsempfehlungen mit Methodensammlung, Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten. VEGAS, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, DECHEMA e.V. Frankfurt, ISBN 978-3-89746-092-0
- Slater, G.F., (2003), Stable isotope forensics - When isotopes work. Environmental Forensics, 4, pp. 13-23
- Michels, J., Sturmann, M., Frey, C., Koschitzky, H.-P. (2008): Handlungsempfehlung mit Methodensammlung. Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten. Bewertung und Anwendung, rechtliche Aspekte, Wirtschaftlichkeit, Akzeptanz. Hrgb.: DECHEMA, Frankfurt, VEGAS, Stuttgart.
- Wabbels, D., Teutsch, G. (2008): Leitfaden. Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten. Methoden, Empfehlungen und Hinweise zur Untersuchung und Beurteilung. KORA-Themenverbund 1: Raffinerien, Tanklager, Kraftstoffe/Mineralöl, MTBE. Hrgb.: Universität Tübingen, Zentrum für angewandte Geowissenschaften, DECHEMA, Frankfurt.
- Börke, P., Hüßers, N. (2008): Leitfaden. Natürliche Schadstoffminderung bei Teerölaltlasten. KORA-Themenverbund 2: Gaswerke, Kokereien, Teerverarbeitung (Holz-)Imprägnierung. Hrgb.: Universität Tübingen, Zentrum für angewandte Geowissenschaften, DECHEMA, Frankfurt.

Grandel, S., Dahmke, A. (2008): Leitfaden. Natürliche Schadstoffminderung bei LCKW-kontaminierten Standorten. Methoden, Empfehlungen und Hinweise zur Untersuchung und Beurteilung. KORA-Themenverbund 3: Chemische Industrie, Metallverarbeitung. Hrgb.: Technische Universität Dresden, Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten.

Luckner, T., Helling, C, Raimann, S. (2008): Leitfaden. Umgang mit abfallablagerungsverursachten Gewässerschäden und Gefahrensituationen unter Berücksichtigung der Wirkung natürlicher Rückhalte- und Abbau-Prozesse. KORA-Themenverbund 4: Deponien, Altablagerungen. Hrgb.: Dresdner Grundwasserforschungszentrum e.V.

#### 112.2.4 Information über Leistungsanbieter

Leistungsanbieter sind auf Isotopenanalysen spezialisierte Labors sowie Universitätsinstitute. Es gibt in Deutschland jedoch wenige kommerzielle Labors und Universitätsinstitute, die Isotopenuntersuchungen anbieten. Da es sich bei den Isotopenanalysen im Rahmen von forensischen Untersuchungen um sehr spezielle Technologien in der Probenaufbereitung und Analytik handelt, sind bei der Beauftragung Know-How, Erfahrung und Referenzen mit zu bewerten.

### 112.2 Nachweis des Schadstoffabbau über Probencharakterisierung

#### 112.2.1 Leistungsbeschreibung (rechtliche / technische Grundlagen)

Anhand der Charakterisierung und Untersuchung von Grundwasserproben können eine Reihe von Informationen gewonnen werden. Grundlegend ist die Unterscheidung, ob aerobe oder anaerobe Abbaubedingungen vorliegen. Da bei der konventionellen Probennahme mittels Unterwasserpumpen meist turbulente Strömungen innerhalb der Grundwassermessstelle mit einem verstärkten Lösen von Luftsauerstoff im Grundwasser verursacht werden, ist die Messung der Konzentration des gelösten Sauerstoffs in-situ notwendig. Dazu wird die Messsonde in die Grundwassermessstelle eingelassen. Optimaler Weise wird ein optisches Messverfahren verwendet. Bei der Verwendung einer Clark-Elektrode muss eine Anströmhilfe verwendet werden, da das Messverfahren selbst Sauerstoff verbraucht.

Anaerobe Abbauprozesse werden über die Zehrung der sogenannten Redoxindikatoren (Nitrat, gelöstes Mangan, gelöstes Eisen, Sulfat, Methan) ermittelt (da neben den üblicherweise gezehrten Elektronenakzeptoren wie z.B. Nitrat auch die verbrauchten (reduzierten) Elektronenakzeptoren (z.B. gelöstes Eisen = per Definition Fe-II) gemessen werden, spricht man von Redoxindikatoren). Gegebenenfalls geben Metabolite der Zehrung (Nitrit, Sulfid) weitere Auskunft über ablaufende Prozesse. Die Analyseparameter gehören zur Standardanalytik. Über die Zehrung der Elektronenakzeptoren entlang einer Fließstrecke kann (unter Vernachlässigung von nichtproduktiven Nebenreaktionen) quantitativ das Ausmaß des Abbaus organischer Verbindung berechnet werden.

Der Nachweis spezifischer Metabolite (sogenannter Signaturmetabolite) kann als Diagnoseinstrument zur Ermittlung der vorherrschenden Abbaubedingungen bzw. zum qualitativen Nachweis, dass überhaupt ein anaerober Abbau erfolgt, genutzt werden. Idealerweise treten diese Verbindungen ausschließlich bei der abzubauenen Substanz sowie dem eingeschlagenen Abbauweg auf. Sie müssen ausreichend biologisch stabil sein, so dass sie überhaupt nachgewiesen werden können, aber nicht so persistent, so dass sie das aktuelle und nicht das vergangene Abbaugeschehen anzeigen. Diese Anforderungen treffen vor allem auf die (Alkyl)benzylsuccinate bzw. (Alkyl)benzylfumarate als Indikatoren für den anaeroben BTEX-Abbau zu. Alkylbenzoate sind eher universelle Metabolite und treten beim Abbau vieler Aromaten, aber auch von aromatischen Aminosäuren auf und wurden zudem industriell eingesetzt. Bei den PAK können vor allem Metabolite des anaeroben Naphthalinabbaus (teildearomatisierte Verbindungen wie 1,2,3,4-Tetrahydronaphthosäure, 5,6,7,8-Tetrahydronaphthosäure oder Decahydronaphthosäure) analysiert werden.

Beim reduktiven LCKW-Abbau gehören die spezifischen Metabolite (z. B. cis-Dichlorethen) zum Standardanalyseprogramm. In diesem Fall ist es von Bedeutung, die spezifischen Abbauendprodukte zu analysieren. Zunächst wird VC zu Ethen abgebaut. Unter stark reduzierenden Bedingungen kann Ethen weiter zu Ethan reduziert werden. Der Nachweis von Ethen und Ethan gilt als Beweis dafür, dass eine LCKW-Mineralisierung am Untersuchungsstandort möglich ist.

Bei den meisten Schadstoffen sind die Zwischenprodukte nicht oder nur mit einem erheblichen analytischen Aufwand zu identifizieren, insbesondere dann, wenn schon der Ausgangsschadstoff zahlreiche Einzelverbindungen umfasst (Beispiel: Diesel). In der Praxis empfiehlt sich die Beschränkung auf die Analyse des DOC. Zur weiteren Charakterisierung des DOC kann dieser chromatographisch in einzelne Molekülgrößenfraktionen aufgetrennt und mit einem *Organic-Carbon*-Detektor (OCD) nachgewiesen werden (LC-OCD-Verfahren). Damit sind u.a. niedermolekulare organische Säuren, aber auch Huminstoffe und deren Vorstufen (*Building Blocks*) erkennbar. Die vorübergehende Akkumulierung von niedermolekularen Verbindungen (insbesondere Säuren) entlang einer Schadstoffmigrationsrichtung kann als relatives Maß für die Metabolitenbildung genommen werden.

### 112.2.2 Kostenermittlung

Das Leistungsregister mit Positionen und Kostenangaben ist Bestandteil der internetbasierten Datenbank (LB 112).

#### weiterführende Leistungen:

LB 112.4 Entnahme von Grundwasserproben für mikrobielle Untersuchungen

LB 130 Analytik

### 112.2.3 Literatur

- Beller, H.R., Ding, W., Reinhard, M. (1995), Byproducts of anaerobic alkylbenzene metabolism useful as indicators of in situ bioremediation. *Environ. Sci. Technol.* 29, 2864-2870
- Beller, H.R., Kane, S.R., Legler, T.C., McKelvie, J.R., Lollar, B.S., Pearson, F., Balsler, L., Mackay, D.M. (2008), Comparative assessments of benzene, toluene, and xylene natural attenuation by quantitative polymerase chain reaction analysis of a catabolic gene, signature metabolites, and compound-specific isotope analysis. *Environ Sci Technol.* 42 (16), 6065-72
- Foght, J., (2008), Anaerobic biodegradation of aromatic hydrocarbons: Pathways and prospects. *J. Mol. Microbiol. Biotechnol.* 15, 93-120
- Held, T. (Hrsg). (2007), Kontrollierter natürlicher Rückhalt und Abbau von Schadstoffen bei der Sanierung kontaminierter Grundwässer und Böden, Mikrobiologische NA-Untersuchungsmethoden: Fachliche Grundlagen für die Anwendung von Methoden zur Erfassung des natürlichen mikrobiellen Schadstoffabbaus im Aquifer. *ProcessNet/KORA*
- Huber, S.A., Frimmel, F.H., (1996), Gelchromatographie mit Kohlenstoffdetektion (LC-OCD): Ein rasches und aussagekräftiges Verfahren zur Charakterisierung hydrophiler organischer Wasserinhaltsstoffe. *Vom Wasser* 86, 277-290.
- Michels, J., Sturmman, M., Frey, C., Koschitzky, H.-P. (2008): Handlungsempfehlung mit Methodensammlung. Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten. Bewertung und Anwendung, rechtliche Aspekte, Wirtschaftlichkeit, Akzeptanz. Hrsg.: DECHEMA, Frankfurt, VEGAS, Stuttgart.
- Wabbels, D., Teutsch, G. (2008): Leitfaden. Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten. Methoden, Empfehlungen und Hinweise zur Untersuchung und Beurteilung. KORA-Themenverbund 1: Raffinerien, Tanklager, Kraftstoffe/Mineralöl, MTBE. Hrsg.: Universität Tübingen, Zentrum für angewandte Geowissenschaften, DECHEMA, Frankfurt.

- Börke, P., Hüfers, N. (2008): Leitfaden. Natürliche Schadstoffminderung bei Teerölastlasten. KORA-Themenverbund 2: Gaswerke, Kokereien, Teerverarbeitung (Holz-)Imprägnierung. Hrgb.: Universität Tübingen, Zentrum für angewandte Geowissenschaften, DECHEMA, Frankfurt.
- Grandel, S., Dahmke, A. (2008): Leitfaden. Natürliche Schadstoffminderung bei LCKW-kontaminierten Standorten. Methoden, Empfehlungen und Hinweise zur Untersuchung und Beurteilung. KORA-Themenverbund 3: Chemische Industrie, Metallverarbeitung. Hrgb.: Technische Universität Dresden, Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten.
- Luckner, T., Helling, C, Raimann, S. (2008): Leitfaden. Umgang mit abfallablagerungsverursachten Gewässerschäden und Gefahrensituationen unter Berücksichtigung der Wirkung natürlicher Rückhalte- und Abbau-Prozesse. KORA-Themenverbund 4: Deponien, Altablagerungen. Hrgb.: Dresdner Grundwasserforschungszentrum e.V.

#### 112.2.4 Information über Leistungsanbieter

Kompetente Fachunternehmen sind anhand einschlägiger Referenzen auszuwählen.

### 112.3 Nachweis des Schadstoffabbau mit Hilfe von BacTraps

#### 112.3.1 Leistungsbeschreibung (rechtliche/technische Grundlagen)

Mit Hilfe von *In-situ*-Mikrokosmen, sogenannten BacTraps<sup>®</sup> kann unter Verwendung stabiler Isotope sehr empfindlich nachgewiesen werden, dass am Ort der Inkubation unter den dort gegebenen Redoxbedingungen eine mikrobielle Mineralisierung des untersuchten Schadstoffs erfolgt. Dieser wird als vollständig <sup>13</sup>C-markiertes Substrat auf einem porösen Trägermaterial aufgebracht, welches sich in einem durchströmbaren Kunststoffbehälter befindet. Dieses BacTrap<sup>®</sup> wird in eine Grundwassermessstelle eingehängt. Nach einer ausreichenden Inkubationszeit zum Aufwuchs der Bakterien (ca. 2 – 3 Monate) werden die BacTraps<sup>®</sup> geborgen. Der sich auf den Aufwuchskörpern gebildete Biofilm wird abgelöst und die Fettsäuren aus den bakteriellen Membranen isoliert. Nach chemischer Modifizierung zu Fettsäuremethylestern (FSME) werden diese chromatographisch aufgetrennt, identifiziert und der Gehalt an <sup>13</sup>C bestimmt. Kann nachgewiesen werden, dass sich das <sup>13</sup>C in der Fettsäure angereichert hat, ist die Mineralisierung des untersuchten Schadstoffs bewiesen. Optional können zusätzliche molekularbiologische Analysen durchgeführt werden, um das mikrobielle Konsortium zu bestimmen, das dem BacTrap<sup>®</sup> aufgewachsen ist.

Das Verfahren ist nur auf Schadstoffe anwendbar, die von Mikroorganismen produktiv abgebaut werden können, d.h. die als alleinige Kohlenstoff- und Energiequelle dienen. So kann z.B. der reduktive Abbau der LCKW nicht damit detektiert werden. Erfahrungen liegen vor mit z.B. AKW, Chlorbenzole, MTBE und PAK. Die Anlieferung des BacTrap<sup>®</sup> erfolgt in anaerober, steriler Lösung.

#### 112.3.2 Kostenermittlung

Das Leistungsregister mit Positionen und Kostenangaben ist Bestandteil der internetbasierten Datenbank (LB 112).

weiterführende Leistungen:

LB 130 Analytik



### 112.3.3 Literatur

- ITRC, (2011), Technology Overview Environmental Molecular Diagnostics Fact Sheets. The Interstate Technology & Regulatory Council Environmental Molecular Diagnostics Team.  
www.itrcweb.org/GuidanceDocuments/EMD1.pdf (13.02.2013)
- Stelzer, N., Fischer, A., Richnow, H.-H., Kästner, M. (2006), Analyse des anaeroben Benzolabbaus: Vergleich von In-situ-Mikrokosmen, Elektronenakzeptorbilanzen und Isotopenfraktionierungsprozessen. Grundwasser 11 (4), 247-258
- Stelzer, N., Büning, C., Pfeifer, F., Dohrmann, A.B., Tebbe, C.C., Nijenhuis, I., Kästner, M., Richnow, H.-H., (2006), In situ microcosms to evaluate natural attenuation potentials in contaminated aquifers. Organic Geochemistry - Stable Isotopes in Biogeosciences 37 (10), 1394–1410.
- Michels, J., Sturm, M., Frey, C., Koschitzky, H.-P. (2008): Handlungsempfehlung mit Methodensammlung. Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten. Bewertung und Anwendung, rechtliche Aspekte, Wirtschaftlichkeit, Akzeptanz. Hrgb.: DECHEMA, Frankfurt, VEGAS, Stuttgart.
- Wabbels, D., Teutsch, G. (2008): Leitfaden. Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten. Methoden, Empfehlungen und Hinweise zur Untersuchung und Beurteilung. KORA-Themenverbund 1: Raffinerien, Tanklager, Kraftstoffe/Mineralöl, MTBE. Hrgb.: Universität Tübingen, Zentrum für angewandte Geowissenschaften, DECHEMA, Frankfurt.
- Börke, P., Hüßers, N. (2008): Leitfaden. Natürliche Schadstoffminderung bei Teerölaltlasten. KORA-Themenverbund 2: Gaswerke, Kokereien, Teerverarbeitung (Holz-)Imprägnierung. Hrgb.: Universität Tübingen, Zentrum für angewandte Geowissenschaften, DECHEMA, Frankfurt.
- Grandel, S., Dahmke, A. (2008): Leitfaden. Natürliche Schadstoffminderung bei LCKW-kontaminierten Standorten. Methoden, Empfehlungen und Hinweise zur Untersuchung und Beurteilung. KORA-Themenverbund 3: Chemische Industrie, Metallverarbeitung. Hrgb.: Technische Universität Dresden, Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten.
- Luckner, T., Helling, C., Raimann, S. (2008): Leitfaden. Umgang mit abfallablagerungsverursachten Gewässerschäden und Gefahrensituationen unter Berücksichtigung der Wirkung natürlicher Rückhalte- und Abbau-Prozesse. KORA-Themenverbund 4: Deponien, Altablagerungen. Hrgb.: Dresdner Grundwasserforschungszentrum e.V.

### 112.3.4 Information über Leistungsanbieter

Kompetente Fachunternehmen sind anhand einschlägiger Referenzen auszuwählen.

## 112.4 Nachweis des Schadstoffabbau-Potentials

### 112.4.1 Leistungsbeschreibung (rechtliche/technische Grundlagen)

Können an einem Standort Bakterien nachgewiesen werden, die zu einer bestimmten Abbauleistung in der Lage sind, so weist der Standort das Potential zu dieser Abbauleistung auf. Das gleiche gilt für den Nachweis von Genen, die für Enzyme (die die gesuchte Abbauleistung katalysieren) kodieren. Kann die Häufigkeit (Abundanz) eines Enzyms oder die Bakterienkonzentration noch mit der Schadstoffbelastung korreliert werden, ist die Wahrscheinlichkeit, dass das Potential auch zur Expression gelangt, sehr hoch.

Bakterien können mit Hilfe eines Kultivierungsverfahrens (MPN-Verfahren; most probable number; Kultivierung der Bakterien auf Agarplatten sollte nicht verwendet werden) oder molekularbiologisch quantifiziert werden. Gene der Abbauenzyme werden ausschließlich molekularbiologisch quantifiziert. Diese Untersuchungen

sind dann erforderlich, wenn das Abbaupotential nicht auf einfachere Weise bestimmt werden kann. Die wichtigsten quantitativen Bestimmungen sind:

- Nitrat-, Eisen-, oder Sulfat-Reduzierer
- *Dehalococcoides spp.* (anaerober LCKW-Abbau)
- Aerobe VC- oder cDCE-Verwerter

Mit Hilfe der Bestimmung der elektronenakzeptorzehrenden Bakterien lässt sich ebenfalls ermitteln, welcher Redoxprozess dominiert.

Derzeit ist nur ein Bakterium, *Dehalococcoides spp.*, (DHC) bekannt, dass in der Lage ist, PCE vollständig anaerob zu dechlorieren; dies gilt allerdings nicht für alle DHC-Stämme. Die ersten Transformationsschritte bis zum *cis*-1,2-Dichlorethen können auch von anderen Bakterien katalysiert werden. Die für die Transformation der LCKW verantwortlichen Enzyme und zugehörigen Gene sind in Tabelle 1 aufgelistet. Letztlich bedeutet dies, dass der Nachweis von DHC (beispielsweise mittels qPCR der speziesspezifischen 16S-rRNA-Gene) an einem Standort zur Ermittlung, ob ein Potential zur Mineralisierung der LCKW vorliegt, nicht ausreichend ist. Dazu ist es notwendig zu ermitteln, ob die Gene für die Enzyme, die VC transformieren, nachgewiesen werden können.

Tabelle 1 LCKW-transformierende Enzyme und zugehörige Gene

Katalysierte Reaktion	Enzym*	Gen
PCE → TCE	PCE-Reduktase	<i>pce A</i>
TCE → VC	TCE-Reduktase	<i>tce A</i>
cDCE → Ethen	VC-Reduktase	<i>bvc A</i> (Stamm BAV 1)
TCE → Ethen	VC-Reduktase	<i>vcr A</i>

\* auch als edukative Dehalogenase oder RDasen bezeichnet

Trotz der Tatsache, dass im Grundwasserleiter über lange Zeiträume keine erhöhten Sauerstoffgehalte messbar sind, können aerobe Abbauvorgänge ablaufen. Diese gehen einher mit einer Vermehrung der aeroben Mikroorganismen und damit mit einer Zunahme der Genkopien, die für Enzyme kodieren, die spezifisch den aeroben Abbau der vorhandenen Schadstoffe katalysieren. Diese Gene lassen sich mit Hilfe der quantitativen Polymerasekettenreaktion (qPCR) quantifizieren. Findet im zeitlichen Verlauf eine Zunahme der Anzahl dieser Genkopien statt, ist dies ein starkes Indiz für eine zunehmende aerobe Abbaupotential.

Da die Zehrung des eingetragenen Sauerstoffs so groß sein kann, dass im Grundwasser über eine lange Zeit keine erhöhten Sauerstoffkonzentrationen nachgewiesen werden können, stellt sich dann die Frage, ob dennoch aerobe Abbauvorgänge ablaufen, oder ob der Sauerstoffverbrauch lediglich durch die abiotische Oxidation reduzierter Verbindungen verursacht wird. Helfen können an dieser Stelle molekularbiologische Methoden. Der Nachweis der Gene, die für Enzyme kodieren, die einen ausschließlich aeroben Abbau der vorhandenen Schadstoffe katalysieren, kann hierfür herangezogen werden. Findet ein aerober Abbau statt, vermehren sich über die Zeit die aerob abbaupotentialen Mikroorganismen und damit auch die Anzahl der Genkopien aerober Abbaupotentialenzyme. Diese Genkopien können mit Hilfe der sogenannten quantitativen Polymerasekettenreaktion (qPCR) quantifiziert werden, vorausgesetzt, es sind die entsprechenden Primer vorhanden. Primer sind kurze DNA-Stücke, die zu einer Sequenz des gesuchten Genes komplementär sind. Alternativ zu den Enzymen wird das entsprechende Bakterium nachgewiesen. Primer liegen beispielsweise vor für:

- Epoxyalkan-Coenzyme-M-Transferase (Enzym im mikroaerophilen Abbaupotentialweg von VC, aber auch Ethen zu CO<sub>2</sub>)
- Alken-Monooxygenase (Enzym im mikroaerophilen Abbaupotentialweg von VC, aber auch Ethen zu CO<sub>2</sub>)
- Bakterium *Polaromonas JS666* (baut DCE unter mikroaerophilen Bedingungen zu CO<sub>2</sub> ab)

- Frühe Enzyme im BTEX-Abbau (Ringdihydroxylierung: Benzol/Toluol-Dioxygenase (tod), Ringmonohydroxylierung: Toluol-monooxygenasen (TOM, Tbu, T4MO) und Xylolmonooxygenase (TOL) (hierbei ist zu beachten, dass die Enzyme verschiedene BTEX-Verbindungen umsetzen können und daher meist nicht spezifisch für nur eine Verbindung sind).

Während der Nachweis von *Polaromonas JS666* ein starkes Indiz dafür ist, dass am untersuchten Standort ein aerober produktiver cDCE-Abbau möglich ist, lassen sich aerobe VC-Abbauer nicht sicher mit der PCR-Methode und Primern für die Abbaugene bestimmen. Der Nachweis von Epoxyalkan-Coenzyme-M-Transferase und der Alken-Monooxygenase gilt als erstes Indiz (da diese Enzyme auch im aeroben Ethen-Abbau vorkommen), das mit weiteren Untersuchungen erhärtet werden muss. Metabolite des aeroben LCKW-Abbaus akkumulieren nicht und sind daher analytisch nicht nachweisbar.

#### 112.4.2 Kostenermittlung

Das Leistungsregister mit Positionen und Kostenangaben ist Bestandteil der internetbasierten Datenbank (LB 112).

weiterführende Leistungen:

LB 130                      Analytik

#### 112.4.3 Literatur

ITRC (2011) Technology Overview Environmental Molecular Diagnostics Fact Sheets. The Interstate Technology & Regulatory Council Environmental Molecular Diagnostics Team.  
www.itrcweb.org/GuidanceDocuments/EMD1.pdf (13.02.2013).

Cao, B., Nagarajan, K., Loh, K.-C. (2009): Biodegradation of aromatic compounds: current status and opportunities for biomolecular approaches. Appl Microbiol Biotechnol 85, 207–228.

#### 112.4.4 Information über Leistungsanbieter

Kompetente Fachunternehmen sind anhand einschlägiger Referenzen auszuwählen.

### 112.5 Mikrobiologische Abbauprobversuche (Batch-Versuche)

#### 112.5.1 Leistungsbeschreibung (rechtliche / technische Grundlagen)

Unter Umständen können die an einem definierten Standort ablaufenden mikrobiellen Abbauprozesse nicht mit den verfügbaren Methoden (z.B. Isotopenanalytik, molekularbiologischen Untersuchungen) geklärt werden, z.B. dann wenn die Schadstoffe nur in geringer Konzentration vorliegen. Da an kontaminierten Standorten in der Regel anaerobe oder allenfalls mikroaerobe Bedingungen vorliegen, darf bei der Probenahme und beim Probenhandling im Labor kein Sauerstoff eingemischt werden. Im Labor werden in der sogenannten (sauerstofffreien) Anaerobox Batch-Ansätze unter Verwendung von Boden (als Hauptquelle der standorteigenen Mikroorganismen) und Grundwasser vom Standort erstellt. Dieser werden in der Regel mit dem Schadstoff aufdotiert. Sollen bestimmte Abbaureaktionen untersucht werden (z.B. aerober Abbau), kann dem Batch-Ansatz Sauerstoff zugegeben werden. Von Zeit zu Zeit werden dem Ansatz ohne Zutritt von Sauerstoff Grundwasserproben entnommen und vermessen (z.B. Sauerstoffkonzentration, pH-Wert, Redoxpotential) und je nach Fragestellung analysiert. Am Versuchsende kann die Feststoffphase separat analysiert werden.

## 112.5.2 Kostenermittlung

Das Leistungsregister mit Positionen und Kostenangaben ist Bestandteil der internetbasierten Datenbank (LB 112).

weiterführende Leistungen:

LB 130                      Analytik

## 112.5.3 Literatur

Materialienband des LfUG zur Altlastenbehandlung: "Laborative Vorversuche im Rahmen der Sanierungsuntersuchung und Sanierung (Batch- und Säulentests)", 1999

## 112.5.4 Information über Leistungsanbieter

Kompetente Fachunternehmen sind anhand einschlägiger Referenzen auszuwählen.

## 112.6 Frachtenbetrachtung (Immissionspumpversuch)

### 112.6.1 Leistungsbeschreibung (rechtliche / technische Grundlagen)

Mit dem Immissionspumpversuch (IPV) wird räumlich integral der gesamte Abstrom eines Schadensherdes durch eine Pumpmaßnahme an einer Ebene senkrecht zur Schadstoffausbreitungsrichtung (der sogenannten Kontrollebene) erfasst. Über die Verarbeitung der gemessenen Konzentrationsganglinien mit Hilfe eines Computermodells werden die räumliche Schadstoffverteilung sowie der Massenfluss berechnet. In der Regel werden für einen IPV mehrere Grundwasserbrunnen benötigt. Die Pumpzeit muss so lange sein, dass sich die einstellenden Grundwasserentnahmebreiten den Gesamtschadstoffabstrom weitgehend vollständig erfassen. Dies bedeutet, dass ein IPV oft mehrere Tage bis Wochen benötigt und große Volumina an kontaminiertem Wasser generiert. Es muss im Einzelfall geprüft werden, ob das Grundwasser unbehandelt in die Kanalisation eingeleitet werden kann oder ob es zuvor einer Reinigung bedarf.

Die Durchführung eines Pumpversuches bedarf einer umfangreichen Planung sowie einer angemessenen Auswertung mit Hilfe von Computerprogrammen.

Der IPV ist ein Benutzungstatbestand, der nach § 2 Wasserhaushaltsgesetz (WHG) eine Erlaubnis oder Bewilligung erfordert. Die Entnahme von Grundwasser sowie hydraulische Sicherungsmaßnahmen, die zu einem Aufstauen oder einer Veränderung der Strömungsrichtung des Grundwassers führen, stellen gemäß § 3 Abs. 1 Nr. 6 bzw. Abs. 2 Nr. 1 WHG eine erlaubnispflichtige Gewässerbenutzung dar.

### 112.6.2 Kostenermittlung

Bei der Kostenermittlung wird vorausgesetzt, dass die erforderlichen Grundwassermessstellen vorhanden sind. Die wesentlichen Kosten sind Aufbau der Infrastruktur für den Pumpversuch, Stromkosten, gegebenenfalls Vorhalten und Betrieb einer Wasserreinigungsanlage, Analytik einschl. Probennahme sowie Kosten für die Einleitung des geförderten (gegebenenfalls gereinigten) Grundwassers in die Kanalisation.

Das Leistungsregister mit Positionen und Kostenangaben ist Bestandteil der internetbasierten Datenbank (LB 112).

weiterführende Leistungen:

LB 240                      Brunnen- / Grundwassermessstellenbau, Pumpversuche

LB 270                      Indirekteinleitung von Grund- und Oberflächenwasser, Prozess- und Sickerwasser

LB 130                      Analytik

### 112.6.3 Literatur

Ptak, T., Kirchholtes, H., Hiesl, E., Holde, T., Rothschink, P., Hekel, U., Beer, H.-P., Ertel, T., Herold, M., Koschitzky, H.-P. (Hrsg.), (2013), Grundwasserabstromerkundung mittels Immissionspumpversuchen. Aktualisierung, Stand der Technik, Planung, Implementierung, Anwendungsstrategien. altlastenforum Baden-Württemberg e.V., Schriftenreihe, Heft 16.

### 112.6.4 Information über Leistungsanbieter

Kompetente Leistungsanbieter sollten anhand vergleichbarer Referenzen ausgewählt werden.

## 112.7 Reaktives Schadstofftransportmodell

### 112.7.1 Leistungsbeschreibung (rechtliche / technische Grundlagen)

Die Berechnung von Grundwasserströmungen mit Hilfe von Computermodellen zur Wasserbilanzierung (hydrogeologisches Modell) wird seit langem genutzt. Wird zudem die Schadstoffausbreitung im Grundwasser, im Wesentlichen durch Advektion, Dispersion, Retardation und den Eintrag von Schadstoffen in Schadstoffquellen berücksichtigt, werden Grundwassermodelle zu Schadstofftransportmodellen erweitert. Werden zusätzlich mikrobielle und chemische (Abbau-)Prozesse integriert, gelangt man zu den numerischen reaktiven Schadstofftransportmodellen. Vereinfacht ausgedrückt wird der Grundwasserleiter in eine Vielzahl von Zellen unterteilt (Diskretisierung). Innerhalb der Zellen liegen homogene Bedingungen vor, so dass die vorgegebenen biogeochemischen Reaktionen ablaufen und berechnet werden können. Das Ausmaß der Reaktion wird allein von der Aufenthaltszeit eines Moleküls in der jeweiligen Zelle, der Reaktionsgeschwindigkeit und der Verfügbarkeit von Reaktionspartnern bestimmt. Die Schadstoffmoleküle werden von Zelle zu Zelle weitergegeben und im optimalen Fall innerhalb des Modellgebietes (Bilanzraumes) vollständig abgebaut. Verlässt ein Schadstoffmolekül das Modellgebiet, so kann über dessen weiteren Verbleib keine Aussage getroffen werden. Daher ist es wichtig, das Modellgebiet ausreichend groß zu wählen. Daraus wird deutlich, dass für ein reaktives Schadstofftransportmodell neben den bereits im Rahmen der Erstellung des hydrogeologischen Modells erarbeiteten geologischen und hydrogeologischen Randbedingungen zahlreiche Eingangsparameter bestimmt werden müssen. Wesentliche Parameter sind die Standort- und Redoxmilieu-spezifische Abbaurate (Kapitel 112.1) und der Zustrom von Reaktionspartnern (Elektronenakzeptoren) in das Modellgebiet. Mit reaktiven Schadstofftransportmodellen kann eine zeitliche und räumliche Prognose des Grundwasserschadens erstellt werden. Sie dienen vor allem zur Abschätzung von Natural Attenuation-Prozessen im Grundwasserabstrom eines Schadensfalles. Im Einzelnen können folgende Fragen beantwortet werden:

- Ist die Fahne in ihrer räumlichen Ausdehnung stabil (quasi stationär)?
- Wenn nein, mit welcher Geschwindigkeit schrumpft sie bzw. dehnt sich aus?
- Was wird künftig die maximale Ausdehnung der Schadstofffahne sein?
- Wann wird an einem definierten Punkt eine vorgegebene Konzentration erreicht werden?
- Wie lange wird die Fahne existieren? (dies erfordert detaillierte Kenntnisse der Schadstoffquellen und Schadstoffinventare)

Der Aufwand für die Erstellung eines reaktiven Schadstofftransportmodells kann sehr stark variieren und ist im Wesentlichen abhängig von den vor Beginn der Modellierung bereits zur Verfügung stehenden erforderlichen Daten sowie der Komplexität des Standortes und der Abbauprozesse.

### 112.7.2 Kostenermittlung

Da jedes Untersuchungsgebiet und jede Fragestellung an die jeweiligen Modelltypen unterschiedlich sind, ist eine grundsätzliche Kostenermittlung schwierig. Die Spannbreite des Zeitaufwandes reicht von ca. 1 Woche bis mehrere Jahren. Im Folgenden wurde daher zwischen den drei ineinander aufbauenden Modelltypen:

- Hydrogeologisches Strukturmodell
- Grundwasserströmungsmodell
- Schadstofftransportmodell

sowie anhand von Erfahrungswerten eine grobe Einteilung in

- einfache,
- normale (sprich standardmäßige) und
- komplexe Modelle

unterschieden. Mit dieser Einteilung lässt sich ein Großteil der Modelle klassifizieren, Ausnahmen aus dieser Einteilung sind selbstverständlich möglich.

Das Leistungsregister mit Positionen und Kostenangaben ist Bestandteil der internetbasierten Datenbank (LB 112).

#### weiterführende Leistungen

keine

### 112.7.3 Literatur

Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz LANUV NRW (2010): Hinweise zur Erstellung und Beurteilung von Grundwassermodellen im Altlastenbereich (Arbeitsblatt 12).

Fachsektion Hydrogeologie in der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften (Hrsg.) (2010): Hydrogeologische Modelle - Bedeutung des Hydrogeologischen a priori-Wissens. Schriftenreihe der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften e.V., Heft 70, 58 S.; Hannover.

Fachsektion Hydrogeologie in der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften (Hrsg.) (2002): Hydrogeologische Modelle - Ein Leitfaden mit Fallbeispielen. Schriftenreihe der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften e.V., Heft 24, 120 S, Hannover.

van Breukelen, B.M., Griffioen, J., Röling, W.F.M, van Verseveld, H.W. (2004), Reactive transport modelling of biogeochemical processes and carbon isotope geochemistry inside a landfill leachate plume. Journal of Contaminant Hydrology 70 (3–4), 249–269.

Zhang, F., Parker, J.C. (2012), Groundwater Reactive Transport Models, Bentham Science Publishers, Bussum, The Netherlands.

### 112.7.4 Information über Leistungsanbieter

Kompetente Leistungsanbieter für die methodischen Untersuchungen zur Quantifizierung von NA, für die Anwendung von Modellsystemen zur Prognose der räumlichen und zeitlichen Veränderungen sowie für Monitoringmaßnahmen sollten anhand vergleichbarer Referenzen ausgewählt werden.