

Umweltforschungsplan des
Bundesministeriums für Umwelt,
Naturschutz und Reaktorsicherheit

Forschungskennzahl 3718 59 303 0

Unterstützung der Erarbeitung einer Verwaltungsvorschrift zum angemessenen Sicherheitsabstand - Anlagenband 2

von

Dr. Christoph Ewen
team ewen GbR, Darmstadt

Dr. Hans-Joachim Uth
Sachverständiger für chemische Anlagensicherheit, Berlin

team ewen GbR
Hügelstraße 19
64283 Darmstadt

Im Auftrag des Umweltbundesamtes

Abschlussdatum Oktober 2020

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	5
Tabellenverzeichnis	5
1. Anlass	6
2. Sachstand	6
3. Qualität und Quantität der entstehenden Stoffe	6
4. Bewertung und Pauschalisierungsansatz	11
5. Zusammenfassung	13
6. Hydrolyse und Stöchiometriefaktoren von 29 Stoffen mit dem Gefahrenmerkmal EUH029*	16

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Entwicklung des GP_{HCl} in Abhängigkeit von der Masse. Ausgleichsgrade: $GP_{HCl} = 0,01113 \times m + 13,1$	10
Abbildung 2:	Zusammenhang zwischen dem Gefahrenpotential GP_{Tox} und dem angemessenen Sicherheitsabstand nach "Handlungsempfehlung..." Ausgleichsgrade: $A = 8,1 \times GP_{Tox} + 198,56$	10
Abbildung 3:	Entwicklung des GP für Phosphin und Chlorwasserstoff.....	11

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Bestimmung von angemessenen Sicherheitsabständen bei Hydrolyse ausgewählter Referenzstoffe aus der Kohorte mit Merkmal EUH029	7
Tabelle 2:	Stoffspezifischer Faktor der wichtigsten Hydrolyseprodukte.....	9
Tabelle 3:	Vergleich der Berechnung GP_{HCl} aus der Formel 2 und Tabelle 1 in "Handlungsempfehlung..."	9
Tabelle 4:	Mengen, die zur Auslösung des Maximalabstandes ($GP_{Tox} = 215$) nach den Handlungsempfehlungen... führen.	12
Tabelle 5:	Angemessene Sicherheitsabstände für flüssige Stoffe, die hydrolisiert werden. Ausfluss des Lagerbehälters mit Lachenbildung auf Leichtbetonboden (288K) und Verdampfung 65% Umwandlung in gasförmigen Chlorwasserstoff.....	13
Tabelle 6:	Stoffe mit Gefahrenmerkmal EUH029 aus GESTIS Datenbank.....	14

Sondergutachten „Hydrolysierbare Stoffe“ – Ermittlung angemessener Sicherheitsabstände bei Stoffen, die im Störfall entstehen können

1. Anlass

Nach der Bestimmung des § 3 Abs. 5c der Störfall-Verordnung (StöV2017) sind für Betriebsbereiche gemäß § 3 Abs. 5a BImSchG angemessene Sicherheitsabstände zu ermitteln. Zur Konkretisierung der Vorschrift ist der Erlass einer AVV(TAAB) geplant. Nach Konsultierung der Bundesländer hat BMU die "Handlungsempfehlungen für die Ermittlung angemessener Sicherheitsabstände"¹ veröffentlicht, deren Vorschriften Grundlage dieses Berichts sind. Kernbestimmungen der Vorschrift sind pauschalisierte Berechnungsmethoden zur Ermittlung toxischer und explosiver Gefahrenpotentiale (Kap.1.3 und Kap.1.4), denen bestimmte Abstandskategorien zugeordnet werden. Die Entstehung von Betriebsbereichen (Anwendung der Störfall-Verordnung) richtet sich an das Vorhandensein oder "Entstehen können" von Stoffen nach Anhang 1 der Störfall-Verordnung in bestimmten Mengen. Neben sonstigen Stoffen, die im Störfall z.B. durch Brände entstehen können, sind Stoffe, die durch Kontakt mit Wasser gefährliche brennbare oder giftige Gase entwickeln können, explizit in Anhang 1 aufgeführt. Es sind dies Stoffe mit dem Gefahrenmerkmal EUH014 ("Reagiert heftig mit Wasser") Nr. 1.4.1 Anhang 1 Störfall-Verordnung und EUH029 ("Entwickelt bei Berührung mit Wasser giftige Gase") Nr. 1.4.3 Anhang 1 Störfall-Verordnung. Da die Stoffe mit EUH014 in der "Handlungsempfehlung..." pauschal mit einem Abstand von 100 m versehen sind (s. Kap. 1.5) bezieht sich die vorliegende Studie ausschließlich auf Stoffe mit dem Gefahrenmerkmal EUH029.² Zur Bestimmung des Sicherheitsabstandes für die Bauleitplanung müssen die Hydrolyseprodukte der Stoffe hinsichtlich ihrer Menge und Qualität analysiert und der Abstandsvorschrift (TAAB) zugeordnet werden.

2. Sachstand

Stoffe mit dem Gefahrenmerkmal EUH029 entwickeln bei Kontakt mit Wasser giftige Gase unterschiedlicher Qualität. Sie unterliegen nach Nr. 1.4.3 des Anhang 1 der Störfall-Verordnung mit 50t/200t in der unteren und oberen Klasse. Viele dieser Stoffe weisen neben dem Gefahrenmerkmal EUH029 weitere, insbesondere gesundheitsgefährdende Einstufungen (H1; P5a; H2) vor. Dadurch können sich niedrigere Mengenschwellen bis zu 5t/20t für die untere und obere Klasse ergeben.

3. Qualität und Quantität der entstehenden Stoffe

Die Datenbank GESTIS³ der Deutschen gesetzlichen Unfallversicherung führt derzeit eine Kohorte von 29 Stoffe u.a. mit dem Gefahrenmerkmal EUH029 auf (s. Tabelle 6). Die Analyse⁴ zeigt, dass das bei diesen Stoffen das mit Abstand häufigste Hydrolyseprodukt **Chlorwasserstoff** (62%) ist, gefolgt von **Phosphin** (14%), **Fluorwasserstoff**, **Schwefelwasserstoff**, **Schwefeldioxid**, **Ammoniak** (jeweils

1 "Handlungsempfehlungen für die Ermittlung angemessener Sicherheitsabstände" mit "Erläuterungen..." und "Definitionen für Schutzobjekte gemäß § 3 Abs.5d BImSchG"; BMU 6.09.2019

2 Es sei aber darauf hingewiesen, dass viele Stoffe mit der Gefahrenkennzeichnung EUH014 ebenfalls sich unter Bildung giftiger Gase im Kontakt mit Wasser zersetzen. Die Datenbank GESTIS (Abfrage 21.10.19) listet rund 150 Stoffe mit dem Gefahrenmerkmal EUH014 auf, von denen bei der Hydrolyse Chlorwasserstoff (ca. 50%), Bromwasserstoff und Cyanwasserstoff (jeweils ca. 5%), Fluorwasserstoff (ca. 3%) und Jodwasserstoff (ca. 1,5%) freigesetzt werden.

3 <https://www.dguv.de/ifa/gestis/gestis-stoffdatenbank/index.jsp> (Abruf 27.09.2019)

4 Die grundlegenden chemischen Hydrolysereaktionen und die stöchiometrischen Faktoren (Ausbeute bei 100% Umsetzung) zur Bestimmung der quantitativen Verhältnisse sind für die einzelnen Stoffe der Kohorte Anhang 2 zu entnehmen.

7%), **Stickoxide** und **Cyanwasserstoff** (jeweils 3,5%). Viele Stoffe der betrachteten Kohorte weisen neben dem Gefahrenmerkmal EUH029 weitere, insbesondere gesundheitsgefährdende Einstufungen vor. Dies ist bei der Bestimmung der anzunehmenden Mengen in den beispielhaften Berechnungen zu berücksichtigen. Diese sind:

- ▶ die jeweils kleinsten, die Anwendung der Störfall-Verordnung auslösenden Mengen für die untere Klasse
- ▶ die jeweils kleinsten, die Anwendung der Störfall-Verordnung auslösenden Mengen für die obere Klasse
- ▶ die Bagatellmengen⁵ (0,5 % der Mengenschwelle der unteren Klasse)

Die ausgewählten Beispiele sind hinsichtlich ihrer höchsten Bildungsrate (Stöchiometriefaktor Kapitel 6) ausgewählt, die übrigen Stoffe der hydrolysestoffbezogenen Kohorte liefern kleinere Werte. Es wurden keine auswirkungsmindernden Maßnahmen berücksichtigt. Es wird konservativ angenommen, dass Wasser ausreichend zur Verfügung steht, die Hydrolyse der Stoffe vollständig erfolgt und in einem Zeitraum von 10 Minuten abgeschlossen ist. Die Ergebnisse zu allen Hydrolyseprodukten enthält Tabelle 1.

Tabelle 1: Bestimmung von angemessenen Sicherheitsabständen bei Hydrolyse ausgewählter Referenzstoffe aus der Kohorte mit Merkmal EUH029

Hydrolyseprodukt	Stoffspez. Faktor**	Referenzstoff*	MS StÖV UK/OK [t]	Stöco Faktor*	Menge [t]	GP _{Tox}	SA [m]	Bemerkung
Chlorwasserstoff	1,257	PCl ₅ (max)	50/-	0,8755	28,45	212,01	2000	Masse zu 65%, max
			-/200		113,81	424,05	2000	
		C ₃ H ₃ Br ₂ OCl (min)	50/-	0,145	4,71	86,26	1000	
			-/200		18,85	172,58	1500	
Phosphin	12,11	PCl ₅	0,5%=0,25	0,8755	0,142	14,99	400	SRA Menge
		AIP (max)	5/-	0,581	2,905	652,7	2000	Max
			-/20		11,62	1305	2000	Max
		Zn ₃ P ₂ (min)	50/-	0,2634	13,17	1389	2000	Max
			-/200		52,68	2779	2000	Max
AIP	0,5%=0,25	0,581	0,014	46,15	750	SRA Menge		
Fluorwasserstoff	0,049	CrF ₃ (max)	50/-	0,557	27,13	8,07	300	Masse zu 62% min
			-/200		69,06	12,87	400	
			0,5%=0,25		0,0863	0,455	100	
Schwefelwasserstoff	0,535	P ₂ S ₅ (max)	50/-	0,76	38	104,29	1000	
			-/200		152	208,58	1500	
			0,5%=0,25		0,19	7,37	300	SRA Menge
Schwefeldioxid	1,623	SOCl ₂ (max)	50/-	0,5385	26,92	266,29	2000	Maximal
			-/200		107,7	532,63	2000	Maximal
			0,5%=0,25		0,134	18,86	400	SRA Menge

⁵ Nach KAS-1 "Sicherheitsrelevante Teile eines Betriebsbereiches und Richtwerte für sicherheitsrelevante Anlagenteile (SRA)" KAS 2017

Hydrolyseprodukt	Stoffspez. Faktor**	Referenzstoff*	MS StöV UK/OK [t]	Stöco Faktor*	Menge [t]	GP _{Tox}	SA [m]	Bemerkung	
Ammoniak	0,0766	MgN (max)	50/-	0,3375	16,87	9,949	300		
			-/200		67,5	19,9	400		
			0,5%=0,25		0,084	0,70	100	minimal	
Stickstoffdioxid	0,043	NOHSO ₄ (max)	NOHSO ₄ (max)	50/-	0,362	18,1	5,78	300	
					-/200		72,4	11,75	400
					0,5%=0,25		0,09	0,40	100
Cyanwasserstoff	0,101	SiC ₃ H ₉ CN (max)	5/-	0,2724	1,362	3,72	200		
			-/20		5,448	7,45	300		
			0,5%=0,25		0,0068	0,263	100	minimal	

* Referenzstoff mit maximalem und minimalem stöchiometrischem Umsetzungsfaktor, s. Anhang 2

** Stoffspezifischer Faktor, s. Text

Das Gefahrenpotential der Hydrolysestoffe kann durch einen stoffspezifischen Faktor dargestellt werden. Dazu wird die Rechenvorschrift zum GP_{tox} nach Nr.1.3.1. der "Handlungsempfehlung..."⁶ zu

$$[1] \quad F_{\text{Stoff}} = p_d/p_n \times 1/B_w \text{ [m}^3/\text{mg]}$$

mit p_d (Dampfdruck bei 293K in hPa); p_n (Normaldruck; 1013 hPa) und B_w (AEGL-2 Beurteilungswert für 60 min in mg/m³) aufgelöst. Tabelle 2 zeigt den stoffspezifischen Faktor der wichtigsten Hydrolyseprodukte, die aus den Stoffen mit EUH029 entstehen können.

⁶ a.a.O.

Tabelle 2: Stoffspezifischer Faktor der wichtigsten Hydrolyseprodukte

Stoff	CAS-Nr.	AEGL - 2 (60 min) in [mg/m ³]	Dampfdruck bei 293K [hPa]	Stoffspez. Faktor
Phosphin	7803-51-2	2,82	34600	12,11
Schwefeldioxid	7446-09-5	1,995	3300	1,632
Chlorwasserstoff	7647-01-0	33,44	42600	1,257
Schwefelwasserstoff	7783-06-4	38,34	20797	0,535
Bromwasserstoff	10035-10-6	134,4	21000	0,154
Cyanwasserstoff	74-90-8	7,95	817	0,101
Fluorwasserstoff	7664-39-3	19,94	1000	0,049
Stickstoffdioxid	10102-44-0	22,92	1000	0,043
Ammoniak	7664-41-7	113,28	8800	0,0766

Chlorwasserstoff

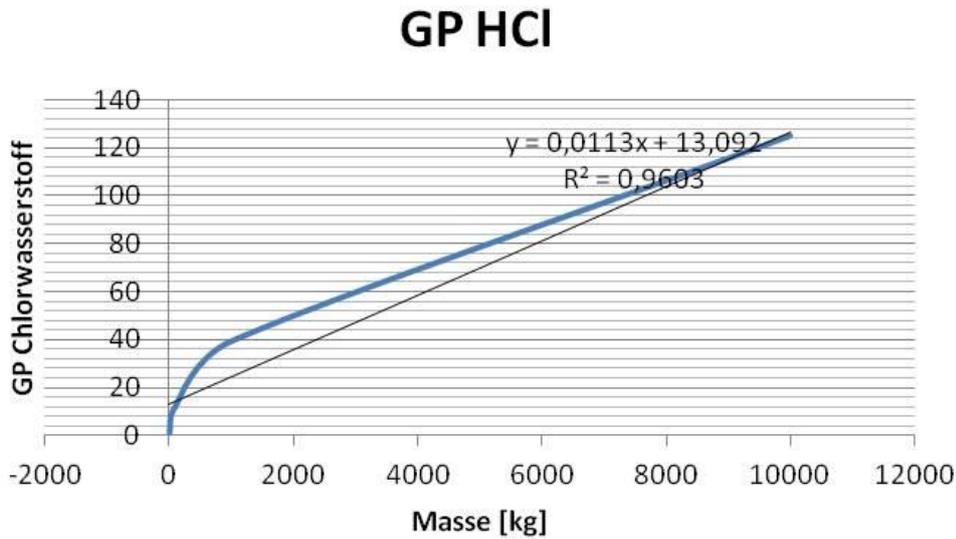
Das häufigste Hydrolyseprodukt ist Chlorwasserstoff. Er wird bei Kontakt mit Wasser als Gas freigesetzt, bindet sich jedoch in nicht unerheblichem Ausmaß mit dem verfügbaren Wasser zur Salzsäure. Die Wasserlöslichkeit von Chlorwasserstoff ist sehr hoch (720g/l bei 293K), ca. 35% werden zur Salzsäure gebunden, mithin stehen lediglich ca. 65% für die gasförmige Ausbreitung zur Verfügung. Die Entwicklung des Gefahrenpotentials GP_{HCl} mit der freigesetzten Menge zeigt Bild 1. Das daraus ermittelte GP kann direkt einem angemessenen Sicherheitsabstand nach Bild 2 zugeordnet werden. Zur überschlägigen Abschätzung kann der angemessene Abstand anhand folgender empirischer Formel bestimmt werden:

$$[2] A_{HCl} = 8,1 \times (0,0113 \times m + 13,1) + 198,56 \text{ [m]}$$

Tabelle 3: Vergleich der Berechnung GP_{HCl} aus der Formel 2 und Tabelle 1 in "Handlungsempfehlung..."

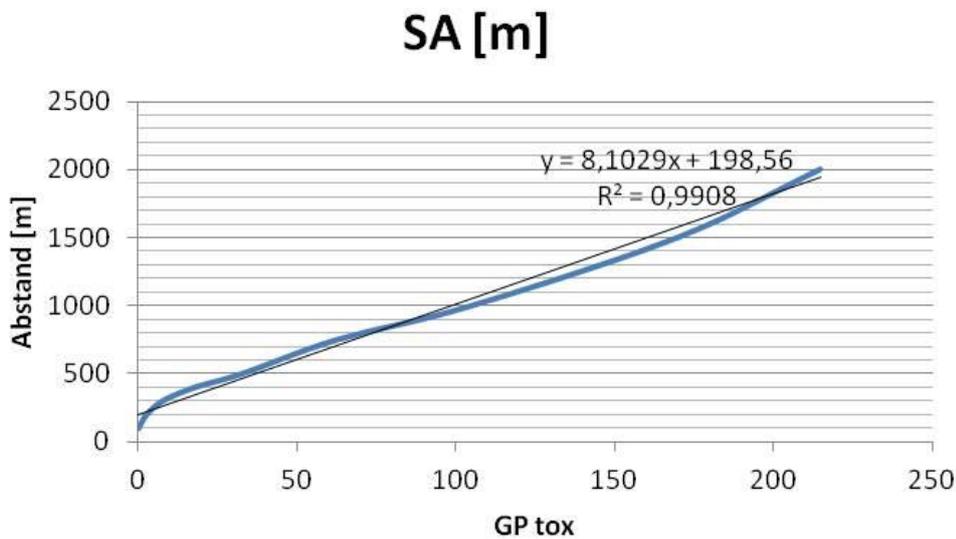
Masse HCl (Gas) [kg]	Abstand nach [2] in [m]	GP_{HCl}	Abstand nach Tabelle 1
0	198	0	100 (Mindestabstand)
1	304	1,257	200
100	313	12,57	400
1.000	395	39,74	500
10.000	1219	125,7	1500

Abbildung 1: Entwicklung des GP_{HCl} in Abhängigkeit von der Masse. Ausgleichsgrade: $GP_{HCl} = 0,01113 \times m + 13,1$



Quelle: Dr. Hans-Joachim Uth

Abbildung 2: Zusammenhang zwischen dem Gefahrenpotential GP_{Tox} und dem angemessenen Sicherheitsabstand nach "Handlungsempfehlung⁷..." Ausgleichsgrade: $A = 8,1 \times GP_{Tox} + 198,56$



Quelle: Dr. Hans-Joachim Uth

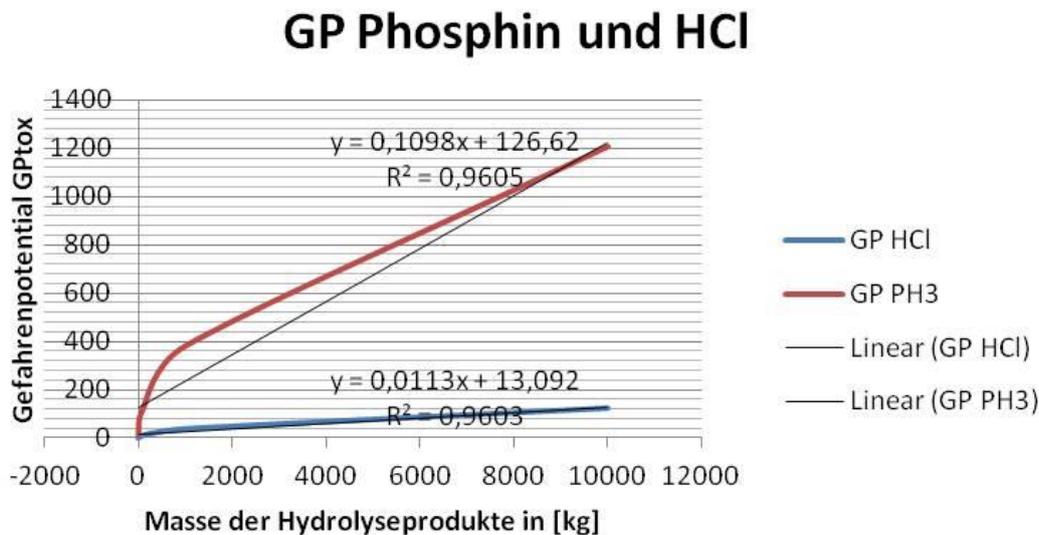
Die Abweichungen der Abstände in Tabelle 3 sind der Festlegung von Mindestabständen und den Mittelwerten der Abstandskategorien zuzurechnen.

⁷ a.a.O.

Phosphin

Phosphin hat unter den ermittelten Hydrolyseprodukten das größte Gefahrenpotential (vergl. Tabelle 2) und wird in der betrachteten Kohorte ausschließlich aus Metallphosphiden generiert. Dies sind i.d.R. bei 293 K Feststoffe, denen nach 1.3.1. der "Handlungsempfehlung..."⁸ kein GP_{Tox} zugeordnet werden kann. Sie sind nach CLP i.d.R. mit H1 eingestuft, mithin unterliegen sie nach Nr. 1.1.1 des Anhang 1 Störfall-Verordnung mit Mengenschwellen 5t/20t für die untere bzw. obere Klasse. Phosphin erreicht die Maximalabstände (2000 m) bereits mit einer Gasmasse von rund 315 kg.

Abbildung 3: Entwicklung des GP für Phosphin und Chlorwasserstoff



Quelle: Dr. Hans-Joachim Uth

4. Bewertung und Pauschalisierungsansatz

Die Ergebnisse zeigen die höchsten Gefahrenpotentialwerte für das Hydrolyseprodukt Phosphin gefolgt von Schwefeldioxid und Chlorwasserstoff. Bei Zugrundelegung der die Störfall-Verordnung auslösenden Mengen werden hier nur die maximalen Abstandswerte erreicht. Tabelle 4 zeigt zum Vergleich die Mengen, die bereits zur Anwendung der Maximalregelung führen.

⁸ a.a.O.

Tabelle 4: Mengen, die zur Auslösung des Maximalabstandes ($GP_{Tox} = 215$) nach den Handlungsempfehlungen...“ führen.

Hydrolyseprodukt	CAS-Nr.	Max. Gasmengen in [t]
Phosphin	7803-51-2	0,3
Schwefeldioxid	7446-09-5	17
Chlorwasserstoff	7647-01-0	29
Schwefelwasserstoff	7783-06-4	161
Bromwasserstoff	10035-10-6	1.949
Cyanwasserstoff	74-90-8	4.531
Ammoniak	7664-41-7	7.878
Fluorwasserstoff	7664-39-3	19.252
Stickstoffdioxid	10102-44-0	25.000

Mithin sind die für die Ermittlung realistischer Abstandswerte sicherzustellen, dass nur geringere Mengen für die Ausbreitung zur Verfügung stehen. Geht man von den im Leitfaden KAS 18⁹ der Kommission für Anlagensicherheit angenommenen Szenarien aus, sind als relevante Mengen die anzusehen, die aus einem standardisierten Leck (DN25) innerhalb von 10 Minuten austreten. Dies gilt für Flüssigkeiten, die rund 2/3 der Kohorte ausmachen. 1/3 der Stoffe sind Feststoffe bei denen in erster Näherung der Inhalt eines handelsüblichen Behältnisses als die zu betrachtende Menge angesehen werden kann. Übliche Gebinde sind ca. 100 kg Fässer. Daraus ergibt sich für phosphinentwickelnde Substanzen die Abstandskategorie VII-VIII (1000m - 1500m), für chlorwasserstoffentwickelnde Substanzen die Abstandskategorien III-IV (300m - 400m).

Für Flüssigkeiten kann in erster Näherung das Auslaufen eines Tanks mit anschließender Lachenbildung und Verdampfung (bei Windgeschwindigkeit 3 m/sec) über 10 Minuten angenommen werden. Je nach Stoff kann in der vorgegebenen Zeit die Verdampfung aus einer Lache als relevante Menge für die Abstandsbestimmung herangezogen werden. Dabei wird angenommen, dass die Hydrolyse erst in der Gasphase stattfindet. Tabelle 5 zeigt einige Beispiele. Die verdampfende Menge ist hauptsächlich vom Dampfdruck der Flüssigkeit und der Lachenfläche abhängig, Trichlorsilan besitzt in der Kohorte den höchsten Dampfdruck mit 660 hPa bei 293K.

⁹ KAS 18 Empfehlungen für Abstände zwischen Betriebsbereichen nach der Störfall-Verordnung und schutzbedürftigen Gebieten im Rahmen der Bauleitplanung – Umsetzung § 50 BImSchG, KAS 2010

Tabelle 5: Angemessene Sicherheitsabstände für flüssige Stoffe, die hydrolisiert werden. Ausfluss des Lagerbehälters mit Lachenbildung auf Leichtbetonboden (288K) und Verdampfung¹⁰ 65% Umwandlung in gasförmigen Chlorwasserstoff

Stoff	Behältergröße [m ³]	Menge [t]	Lache [m ²]	Massenstrom [kg/sec]	Verdampfte Menge in 10min [t]	Abstand [m]	Bemerkung
Phosphor-trichlorid	2	3,35	400	2,646	1,588	500	
Phosphoryl-trichlorid	2	3,148	400	0,841	0,505	400	
Trichlorsilan	2	2,68	400	13,63	2,680	750	Gesamter Inhalt verdampft
	10	13,4	2000	62,39	13,4	1000	

$GP_{tox} = F_{HCL} \times (m_v \times f_{stoch} \times 0,65)^{1/2}$ mit m_v = verdampfte Menge in 10 Minuten, f_{stoch} = Stöchiometriefaktor der HCl Bildung; F_{HCL} = stoffspezifischer Faktor, s. Text

Für flüssige Stoffe mit den Gefahrenmerkmal EUH29 erscheint die Einhaltung eines Sicherheitsabstandes von 500 m - 750 m abdeckend.

5. Zusammenfassung

Gefahrstoffe mit dem Gefahrenmerkmal EUH029 ("Bilden im Kontakt mit Wasser giftige Gase") unterliegen der Störfall-Verordnung. Es wurde eine Kohorte von 30 Stoffen mit diesem Gefahrenmerkmal, die in der Praxis eine gewisse Bedeutung erlangt haben, analysiert. Das mit Abstand häufigste Hydrolyseprodukt (62%) ist Chlorwasserstoff, gefolgt von Phosphin mit 14%, und vereinzelt Fluorwasserstoff, Schwefelwasserstoff, Schwefeldioxid, Ammoniak, Stickoxide und Cyanwasserstoff. Die höchsten Gefahrenpotentialwerte werden für das Hydrolyseprodukt Phosphin gefolgt von Schwefeldioxid und Chlorwasserstoff ermittelt. Phosphin wird in der Kohorte ausschließlich aus Feststoffen generiert, Chlorwasserstoff und Schwefeldioxid hauptsächlich aus Flüssigkeiten. Zur standardisierten Berücksichtigung des Gefahrenpotentials dieser Stoffkategorie erscheint es notwendig hinsichtlich der Hydrolyseprodukte zu unterscheiden. Für die Abschätzung angemessener Sicherheitsabstände ist konservativ von einer 100% igen Umsetzung des Ausgangsstoffs in das Hydrolyseprodukt auszugehen und unter Berücksichtigung der stöchiometrischen Zusammenhänge die relevanten Mengen zu ermitteln und die Abstandsberechnung nach den "Handlungsempfehlungen..." vorzunehmen.

Für phosphinentwickelnde (feste) Substanzen wird pauschal die Abstandskategorie VII-VIII (1000m - 1500m), für chlorwasserstoffentwickelnde (feste) Substanzen die Abstandskategorien III-IV (300m - 400m) als abdeckend vorgeschlagen. Für flüssige Stoffe aus denen Chlorwasserstoff generiert werden kann erscheint die Einhaltung eines Sicherheitsabstandes von 500m - 750 m in erster Näherung abdeckend.

¹⁰ Berechnung mit Programmsystem DISMA Ver. 4, TÜV Rheinland e.V.

Tabelle 6: Stoffe mit Gefahrenmerkmal EUH029 aus GESTIS Datenbank

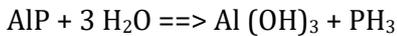
Lfd. Nr	Bezeichnung	CAS-Nr	AEGL-2 (60 min) [ppm]	Gefahrenmerkmal	Hydrolyseprodukte
1	Aluminiumphosphid	20859-73-8	kein	H1+EUH029	Phosphin
2	Butyltrichlorsilan	7521-80-4	7,3	EUH029+EUH014	Chlorwasserstoff
3	Calciumphosphid	1305-99-3	1,00	H1+EUH029	Phosphin, Diphosphin
4	Chloracetylchlorid	79-04-9	1,60	EUH029+EUH014	Chlorwasserstoff
5	2-Chlorpropionylchlorid	7623-09-8	kein	EUH029+EUH014	Chlorwasserstoff
6	Chrom(III)-fluorid	16671-27-5	kein	EUH029	Fluorwasserstoff
7	2,3-Dibrompropionylchlorid	18791-02-1	kein	EUH029+EUH014	Chlorwasserstoff
8	3,5-Dichlor-2,4-difluorbenzoylfluorid	101513-70-6	kein	H2+EUH029	Fluorwasserstoff
9	Diphosphorpentasulfid	1314-80-3	kein	EUH029	Schwefelwasserstoff
10	Dischwefeldichlorid	10025-67-9	4,60	H2+EUH014+EUH029	Schwefeldioxid, Chlorwasserstoff
11	3-(4-Fluorphenyl)-2-methylpropionylchlorid	1017183-70-8	kein	EUH029+EUH014	Chlorwasserstoff
12	Magnesiumnitrid	12057-71-5	kein	H2+EUH029	Ammoniak
13	Magnesiumphosphid	12057-74-8	1,00	H1+EUH029	Phosphin
14	2-Methylpropenoylchlorid	920-46-7	kein	H1+EUH029	Chlorwasserstoff
15	Natriumamid	7782-92-5	kein	EUH029	Ammoniak
16	4-Nitrobenzoylchlorid	122-04-3	kein	EUH029	Chlorwasserstoff
17	Nitrosylschwefelsäure	7782-78-7	kein	EUH029+EUH014	NO ₂ , NO _x
18	Oxalyldichlorid	79-37-8	kein	H2+EUH014+EUH029	Chlorwasserstoff
19	Phenyldichlorphosphat	770-12-7	kein	EUH029+EUH014	Chlorwasserstoff
20	Phosphorpentachlorid	10026-13-8	Kein	H2+EUH014+EUH029	Chlorwasserstoff
21	Phosphortrichlorid	7719-12-2	2,00	H2+EUH014+EUH029	Chlorwasserstoff
22	Phosphoryltrichlorid	10025-87-3	N.R.	H1+EUH014+EUH029	Chlorwasserstoff
23	Thionylchlorid	7719-09-7	2,40	H2+EUH014+EUH029	Chlorwasserstoff, Schwefeldioxid
24	Thiophosphoryltrichlorid	3982-91-0	kein	H1+EUH029	Chlorwasserstoff, Schwefelwasserstoff
25	Trichlorsilan	10025-78-2	kein	P5a+EUH014+EUH029	Chlorwasserstoff, Wasserstoff
26	Trimethylsilylcyanid	7677-24-9	kein	H1+EUH029	Cyanwasserstoff

Lfd. Nr	Bezeichnung	CAS-Nr	AEGL-2 (60 min) [ppm]	Gefahrenmerkmal	Hydrolyseprodukte
27	Wolfram(VI)-chlorid	13283-01-7	kein	EUH029	Chlorwasserstoff
28	Zinkphosphid	1314-84-7	kein	H2+EUH029	Phosphin
29	Glutaryldichlorid	2873-74-7	kein	H2+EUH029	Chlorwasserstoff
30	Titantetrachlorid	7550-45-0	1,00	H2+EUH014	Chlorwasserstoff
31	Siliziumtetrachlorid	10026-04-7	5,50	H2+EUH014	Chlorwasserstoff

6. Hydrolyse und Stöchiometriefaktoren von 29 Stoffen mit dem Gefahrenmerkmal EUH029*¹¹

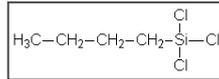
1. Aluminiumphosphid

1.1. Hydrolyse



1.2. Stöchiometriefaktor

$M_E = 58$; $M_{\text{Phosphin}}/M_E = 34/58 = 0,581$; 1 kg AlP \Rightarrow 0,581 kg Phosphin



2. Butyltrichlorosilan

2.1. Hydrolyse

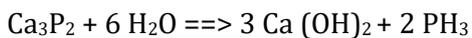


2.2. Stöchiometriefaktor

$M_E = 191,56$; $3 M_{\text{HCl}}/M_E = 3 \times 36,46/191,56 \Rightarrow 0,571$;

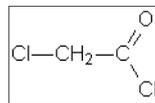
3. Calciumphosphid

3.1. Hydrolyse



3.2. Stöchiometriefaktor

$M_E = 182,18$; $2 M_{\text{Phosphin}}/M_E = 2 \times 34/182,18 \Rightarrow 0,3732$



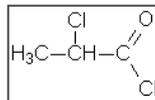
4. Chloroacetylchlorid

4.1. Hydrolyse



4.2. Stöchiometriefaktor

$M_E = 112,94 \text{ g/mol}$; $M_{\text{HCl}}/M_E = 36,46/112,94 \Rightarrow 0,322$



5. 2-Chlorpropionylchlorid

5.1. Hydrolyse

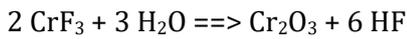


5.2. Stöchiometriefaktor

$M_E = 126,97 \text{ g/mol}$; $M_{\text{HCl}}/M_E = 36,46/126,97 \Rightarrow 0,287$

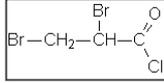
¹¹ Quelle: <https://www.dguv.de/ifa/gestis/gestis-stoffdatenbank/index.jsp>

6. Chrom(III)-fluorid



6.1. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 108,99 \text{ g/mol}; 6 M_{\text{HF}}/M_E = 6 \times 20,0/2 \times 108,99 \Rightarrow 0,557$$



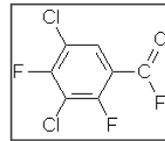
7. 2,3-Dibrompropionylchlorid

7.1. Hydrolyse



7.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 250,32 \text{ g/mol}; M_{\text{HCl}}/M_E = 36,46/250,32 \Rightarrow 0,1457$$



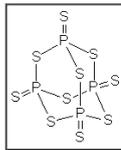
8. 3,5-Dichlor-2,4-difluorbenzoylfluorid

8.1. Hydrolyse



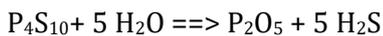
8.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 228,99 \text{ g/mol}; M_{\text{HF}}/M_E = 20,0/228,99 \Rightarrow 0,0874$$



9. Diphosphorpentasulfid

9.1. Hydrolyse

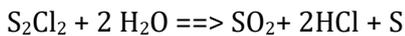


9.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 222,28 \text{ g/mol}; 5 M_{\text{H}_2\text{S}}/M_E = 5 \times 34,08/222,28 \Rightarrow 0,7666$$

10. Dischwefeldichlorid

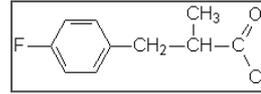
10.1. Hydrolyse



10.2. Stöchiometriefaktor

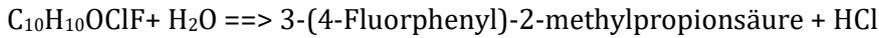
$$M_E = 135,04 \text{ g/mol}; 2 M_{\text{HCl}}/M_E = 2 \times 36,46/135,04 \Rightarrow 0,54$$

$$M_{\text{SO}_2}/M_E = 2 \times 64,06/135,04 \Rightarrow 0,9488$$



11. 3-(4-Fluorphenyl)-2-methylpropionylchlorid

11.1. Hydrolyse

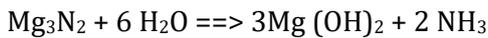


11.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 200,64 \text{ g/mol}; M_{\text{HCl}} / M_E = 36,46/200,64 \Rightarrow 0,1817$$

12. Magnesiumnitrid

12.1. Hydrolyse

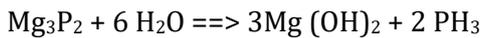


12.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 100,93 \text{ g/mol}; 2 M_{\text{NH}_3} / M_E = 2 \times 17,03/100,93 \Rightarrow 0,3375$$

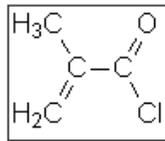
13. Magnesiumphosphid

13.1. Hydrolyse



13.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 134,86 \text{ g/mol}; 2 M_{\text{Phosphin}} / M_E = 2 \times 34/134,86 \Rightarrow 0,5042$$



14. 2-Methylpropenoylchlorid

14.1. Hydrolyse

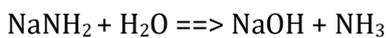


14.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 104,54 \text{ g/mol}; M_{\text{HCl}} / M_E = 36,46/104,54 \Rightarrow 0,3488$$

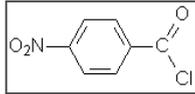
15. Natriumamid

15.1. Hydrolyse



15.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 39,01 \text{ g/mol}; M_{\text{NH}_3} / M_E = 17,03/39,01 \Rightarrow 0,291$$



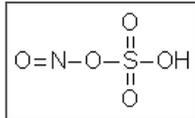
16. 4-Nitrobenzoylchlorid

16.1. Hydrolyse



16.2. Stöchiometriefaktor

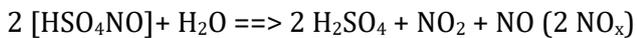
$$M_E = 185,57 \text{ g/mol}; M_{\text{HCl}} / M_E = 36,46/185,57 \Rightarrow 0,1965$$



17. Nitrosylschwefelsäure

17.1. Hydrolyse

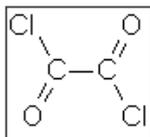
Feststoff, Liegt technisch als 40% ige Lösung in Schwefelsäure vor.



17.2. Stöchiometriefaktor

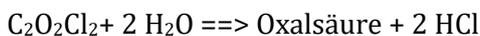
$$M_E = 127,08 \text{ g/mol}; M_{\text{NO}_2} / M_E = 46,00/127,08 \Rightarrow 0,362$$

$$M_{\text{NO}} / M_E = 30,00/127,08 \Rightarrow 0,236$$



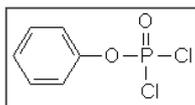
18. Oxalyldichlorid

18.1. Hydrolyse



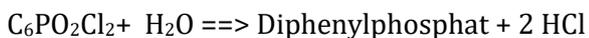
18.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 126,93 \text{ g/mol}; 2 M_{\text{HCl}} / M_E = 2 \times 36,46/126,93 \Rightarrow 0,5745$$



19. Phenyl dichlorophosphat

19.1. Hydrolyse



19.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 210,98 \text{ g/mol}; 2 M_{\text{HCl}} / M_E = 2 \times 36,46/210,98 \Rightarrow 0,3456$$

20. Phosphorpentachlorid

20.1. Hydrolyse, zwei Stufen

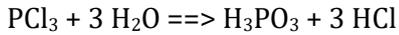


20.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 208,24 \text{ g/mol}; 5 M_{\text{HCl}} / M_E = 5 \times 36,46 / 208,24 \implies 0,8755$$

21. Phosphortrichlorid

21.1. Hydrolyse

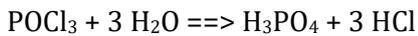


21.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 137,33 \text{ g/mol}; 3 M_{\text{HCl}} / M_E = 3 \times 36,46 / 137,33 \implies 0,7965$$

22. Phosphorylchlorid

22.1. Hydrolyse

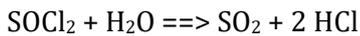


22.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 153,33 \text{ g/mol}; 3 M_{\text{HCl}} / M_E = 3 \times 36,46 / 153,33 \implies 0,7134$$

23. Thionylchlorid

23.1. Hydrolyse



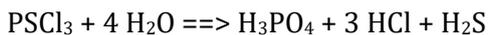
23.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 118,97 \text{ g/mol}; 2 M_{\text{HCl}} / M_E = 2 \times 36,46 / 118,97 \implies 0,6129$$

$$M_{\text{SO}_2} / M_E = 2 \times 64,06 / 118,97 \implies 0,5385$$

24. Thiophosphorylchlorid

24.1. Hydrolyse



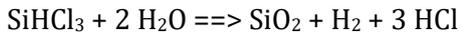
24.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 169,40 \text{ g/mol}; 3 M_{\text{HCl}} / M_E = 3 \times 36,46 / 169,40 \implies 0,6457$$

$$M_{\text{H}_2\text{S}} / M_E = 5 \times 34,08 / 169,40 \implies 0,2012$$

25. Trichlorsilan

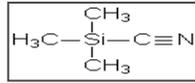
25.1. Hydrolyse



25.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 135,45 \text{ g/mol}; 3 M_{\text{HCl}} / M_E = 3 \times 36,46 / 135,45 \Rightarrow 0,8075$$

$$M_{\text{H}_2} / M_E = 2 / 135,45 \Rightarrow 0,014$$



26. Trimethylsilylcyanid

26.1. Hydrolyse

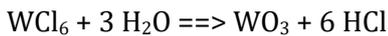


26.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 99,21 \text{ g/mol}; M_{\text{HCN}} / M_E = 27,02 / 99,21 \Rightarrow 0,2724$$

27. Wolfram (VI)-chlorid

27.1. Hydrolyse

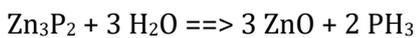


27.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 396,56 \text{ g/mol}; 6 M_{\text{HCl}} / M_E = 6 \times 36,46 / 396,56 \Rightarrow 0,5517$$

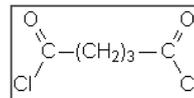
28. Zinkphosphid

28.1. Hydrolyse



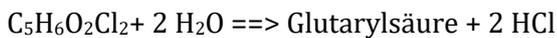
28.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 258,12 \text{ g/mol}; 2 M_{\text{Phosphin}} / M_E = 2 \times 34 / 258,12 \Rightarrow 0,2634$$



29. Glutaryldichlorid

29.1. Hydrolyse



29.2. Stöchiometriefaktor

$$M_E = 169,01 \text{ g/mol}; 2 M_{\text{HCl}} / M_E = 2 \times 36,46 / 169,01 \Rightarrow 0,4315$$

Dr. Hans-Joachim Uth

Sachverständiger für Chemische Anlagensicherheit

Berlin (Germany)

www.expert.abendgalerie.de