

Anhang C

Physikalisch-chemische Stoffparameter

Verbindung	Abkürzung	CAS-Nr.	Formel	Molmasse [g/mol]	Wasserlöslichkeit (20 - 25 °C) [g/L]	Aggregat-zustand (0 °C)	Schmelzpunkt [°C]	Siedepunkt [°C]	Dampfdruck [Pa]	Henry-Koeffizient [Pa·m ³ ·mol ⁻¹]	log K _{ow} (berechnet) [-]	log K _{oc} [L/kg]	Dissoziations-konstante (pKa)	Literatur
Perfluorierte Alkylcarboxylate (Carbonsäuren)														
Perfluorbutansäure	PFBA	375-22-4	F(CF ₂) ₃ COOH	214,04	563				38,57		-0,52	1,88	0,39	[2] [3]
Perfluorpentansäure	PFPeA	2706-90-3	F(CF ₂) ₄ COOH	264,05	113				1348,96		0,09	1,37	0,57	[2] [3]
Perfluorhexansäure	PFHxA	68259-11-0	F(CF ₂) ₅ COOH	314,05	21,7				457,09		0,70	1,91	0,84	[2] [3]
Perfluorheptansäure	PFHpA	375-85-9	F(CF ₂) ₆ COOH	364,06	4,18				158,49		1,31	2,19		[2] [3]
Perfluorooctansäure (Säureform)	PFOA	335-67-1	F(CF ₂) ₇ COOH	414,07	3,40	Fest	59 - 60	192	2,30	0,044	1,92	2,48	0,5	[1] [2] [3]
Perfluorononansäure	PFNA	375-95-1	F(CF ₂) ₈ COOH	464,08	0,131				4,20		2,57	2,39	2,58	[2] [4] [3]
Perfluordecansäure	PFDA	335-76-2	F(CF ₂) ₉ COOH	514,09	0,025				6,61		2,90	2,76	2,61	[2] [3]
Perfluorundecansäure	PFUDA	2058-94-8	F(CF ₂) ₁₀ COOH	564,09	0,0042				2,19		7,15	3,30	3,13	[2] [3]
Perfluordodecansäure	PFDOA	307-55-1	F(CF ₂) ₁₁ COOH	614,10	0,0007				0,74		7,77			[2]
Perfluortridecansäure	PFTDA	72629-94-8	F(CF ₂) ₁₂ COOH	664,11	0,0002				0,27		8,25			[2]
Perfluortetradecansäure	PFTeDA	376-06-7	F(CF ₂) ₁₃ COOH	714,12	0,0000				0,10		8,90			[2]
Perfluorpentadecansäure	PFPeDA	141074-63-7	F(CF ₂) ₁₄ COOH	764,12	-				-		-			
Perfluorierte Alkylcarboxylate (Salze)														
Ammonium-Pentadecafluorooctanoat	APFO	3825-26-1	C ₈ H ₄ NF ₁₅ NO ₂	445,11	> 500		130		0,0081				0,5	[1] [4]
Perfluorierte Alkylsulfonsäuren														
Perfluorbutansulfonsäure	PFBS	375-73-5	F(CF ₂) ₄ SO ₃ H	300,10	30,0095			76 - 84	630,96		3,90	1,00		[2]
Perfluorhexansulfonsäure	PFHxS	432-50-8	F(CF ₂) ₆ SO ₃ H	400,11	2,3024				58,88		5,17	1,78		[2]
Perfluorheptansulfonsäure	PFHpS	357-92-8	F(CF ₂) ₇ SO ₃ H	450,12	-				-		-			
Perfluorooctansulfonsäure	PFOS	1763-23-1	F(CF ₂) ₈ SO ₃ H	500,13	0,570	Fest	54	> 400	6,76	0,000319	2,45	2,68	< 0,3	[1][3] [5]
Perfluordecansulfonsäure	PFDS	333-77-3	F(CF ₂) ₁₀ SO ₃ H	600,14	0,0024				0,71		7,66	3,66		[2] [5]
Perfluorierte Alkylphosphorsäuren														
Perfluorbutylphosphorsäure	PFBPA	52299-24-8	F(CF ₂) ₄ P(O)(OH) ₂	350,02	14259,1245				0,18		2,19			[2]
Perfluorhexylphosphorsäure	PFHxPA	40143-76-8	F(CF ₂) ₆ P(O)(OH) ₂	400,03	515,3385				0,04		3,48			[2]
Perfluorooctylphosphorsäure	PFOPA	40143-78-0	F(CF ₂) ₈ P(O)(OH) ₂	500,05	24,4914				0,01		4,73			[2]
Perfluordodecylphosphorsäure	PFDPA	52299-26-0	F(CF ₂) ₁₀ P(O)(OH) ₂	600,06	0,4877				0,00		5,98			[2]
Perfluorooctansulfonamide und Derivate														
Perfluorooctansulfonamid	PFOSA	754-91-6	F(CF ₂) ₈ SO ₂ NH ₂	499,14	-	fest	154 - 155		-		-			
Perfluorooctansulfonamidethanol	FOSE	10116-92-4	F(CF ₂) ₈ SO ₂ NH(CH ₂) ₂ OH	543,19	0,0009				0,00		5,78			[2]
N-Methyl-Perfluorooctansulfonamid	N-MeFOSA	31506-32-8	F(CF ₂) ₈ SO ₂ NHCH ₃	513,17	0,0002				0,30		6,07	3,14		[2]
N-Ethyl-Perfluorooctansulfonamid	N-EtFOSA	4151-50-2	F(CF ₂) ₈ SO ₂ NHCH ₂ CH ₃	527,20	0,0001				0,12		6,71	3,23		[2]
N-Methyl-Perfluorooctansulfonamidethanol	N-MeFOSE	24448-09-7	F(CF ₂) ₈ SO ₂ N(CH ₃)(CH ₂) ₂ OH	557,22	0,0003				0,01		6,00			[2]
N-Ethyl-Perfluorooctansulfonamidoethanol	N-EtFOSE	1691-99-2	F(CF ₂) ₈ SO ₂ N(CH ₂ CH ₃)(CH ₂) ₂ OH	571,25	0,0001		55 - 60		0,00		6,52			[2]
Fluortelomersäuren														
FTS														
1H,1H,2H,2H-Perfluor-n-Butansulfonsäure	H4-PFBS (2:2 FTS)	149246-63-9	F(CF ₂) ₂ CH ₂ CH ₂ SO ₃ H	228,13	-				-		-			
1H,1H,2H,2H-Perfluor-n-Hexansulfonsäure	H4-PFHxS (4:2 FTS)	757124-72-4	F(CF ₂) ₄ CH ₂ CH ₂ SO ₃ H	328,15	27,9301				0,33		3,21			[2]
1H,1H,2H,2H-Perfluor-n-Octansulfonsäure	H4-PFOS (6:2 FTS)	27619-97-2	F(CF ₂) ₆ CH ₂ CH ₂ SO ₃ H	428,17	1,3232				0,11		4,44		1,31	[2]
1H,1H,2H,2H-Perfluor-n-Decansulfonsäure	H4-PFDeS (8:2 FTS)	39108-34-4	F(CF ₂) ₈ CH ₂ CH ₂ SO ₃ H	528,18	0,0579				0,01		5,66	0,01	1,32	[2]
1H,1H,2H,2H-Perfluor-n-Dodecansulfonsäure	H4-PFUDS (10:2 FTS)	120226-60-0	F(CF ₂) ₁₀ CH ₂ CH ₂ SO ₃ H	628,20	0,0021				0,00		6,91			[2]
1H,1H,2H,2H-Perfluor-n-Tetradecansulfonsäure	H4-PFTeS (12:2 FTS)	149246-64-0	F(CF ₂) ₁₂ CH ₂ CH ₂ SO ₃ H	728,21	0,0002				0,00		7,94			[2]
Fluortelomeralkohole (FTOH)														
FTOHs														
Perfluoräthylethanol 2:2	2:2 FTOH	54949-74-5	F(CF ₂) ₂ CH ₂ CH ₂ OH	164,08	-				-		-			
Perfluorbutylethanol 4:2	4:2 FTOH	2043-47-2	F(CF ₂) ₄ CH ₂ CH ₂ OH	264,09	0,0740	Flüssig			213,80		3,30	0,93		[2] [3] [6]
Perfluorhexylethanol 6:2	6:2 FTOH	647-42-7	F(CF ₂) ₆ CH ₂ CH ₂ OH	364,11	0,0188	Flüssig	-33	172	18,20	5726	4,54	2,43		[2] [3] [6]
Perfluorooctylethanol 8:2	8:2 FTOH	865-86-1	F(CF ₂) ₈ CH ₂ CH ₂ OH	464,12	0,0013 - 0,0032	Fest	45	114	1,38	5039	5,60	3,84		[2] [3]
Perfluordecylethanol 10:2	10:2 FTOH	678-39-8	F(CF ₂) ₁₀ CH ₂ CH ₂ OH	564,14	0,0000	Fest			0,20	7776	6,20	6,20		[2] [3] [6]
Perfluordodecylethanol 12:2	12:2 FTOH	39239-77-5	F(CF ₂) ₁₂ CH ₂ CH ₂ OH	664,15	-				-		-			
Polyfluorierte Alkylphosphate (alg.)														
PAP														
Monoester														
4:2 Fluortelomerphosphatmonoester	4:2 monoPAP	150065-76-2	F(CF ₂) ₄ CH ₂ CH ₂ OP(O)(OH) ₂	344,07	11,9302				0,000		1,99			[2]
6:2 Fluortelomerphosphatmonoester	6:2 monoPAP	57678-01-0	F(CF ₂) ₆ CH ₂ CH ₂ OP(O)(OH) ₂	444,09	2,5555				0,000		3,39			[2]
8:2 Fluortelomerphosphatmonoester	8:2 monoPAP	57678-03-2	F(CF ₂) ₈ CH ₂ CH ₂ OP(O)(OH) ₂	544,10	0,1643				0,000		4,67			[2]
10:2 Fluortelomerphosphatmonoester	10:2 monoPAP	57678-05-4	F(CF ₂) ₁₀ CH ₂ CH ₂ OP(O)(OH) ₂	644,12	0,0102				0,000		5,92			[2]
12:2 Fluortelomerphosphatmonoester	12:2 monoPAP	57678-07-6	F(CF ₂) ₁₂ CH ₂ CH ₂ OP(O)(OH) ₂	744,13	0,0003				0,000		7,21			[2]
Diester														
4:2 Fluortelomerphosphatdiester	4:2 diPAP	135098-69-0	(F(CF ₂) ₄ CH ₂ CH ₂ O) ₂ P(O)(OH)	590,15	0,0004				0,000		6,16			[2]
6:2 Fluortelomerphosphatdiester	6:2 diPAP	57677-95-9	(F(CF ₂) ₆ CH ₂ CH ₂ O) ₂ P(O)(OH)	790,18	0,0000				0,000		8,41			[2]
8:2 Fluortelomerphosphatdiester	8:2 diPAP	678-41-1	(F(CF ₂) ₈ CH ₂ CH ₂ O) ₂ P(O)(OH)	990,21	0,0000				0,000		10,93			[2]
10:2 Fluortelomerphosphatdiester	10:2 diPAP	1895-26-7	(F(CF ₂) ₁₀ CH ₂ CH ₂ O) ₂ P(O)(OH)	1190,24	0,0000				0,000		12,88			[2]
12:2 Fluortelomerphosphatdiester	12:2 diPAP	57677-99-3	(F(CF ₂) ₁₂ CH ₂ CH ₂ O) ₂ P(O)(OH)	1390,27	0,0000				0,000		15,15			[2]
Polytetrafluoroethylen (Teflon)														
	PTFE	9002-84-0	-(CF ₂) _n -				327°C (Zersetzung bei 260°C)							

1 hPa = 100 Pa = 1 mbar, ! log K_{ow} ist aufgrund oberflächenaktiver Eigenschaften (Emulsionsbildung) experimentell nicht bestimmbar

Literatur

- [1] Vierke, L., Berger, U., Cousins, I.T. (2013): Estimation of the acid dissociation constant of perfluoroalkyl carboxylic acids through an experimental investigation of their water-to-air transport. *Environ. Sci. Technol.* 47, 11032 – 11039
 - [2] Wang, Z., MacLeod, M., Cousins, I.T., Scheringer, M., Hungerbühler, K. (2011): Using COSMOtherm to predict physicochemical properties of poly- and perfluorinated alkyl substances (PFASs). *Environmental Chemistry* 8(4) 389-398.
 - [3] Ding, G., Peijnenburg, W.J.G.M. (2013): Physicochemical properties and aquatic toxicity of poly-and perfluorinated compounds. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology* 43, 598 – 678.
 - [4] RPS Advies B.V. (2010): Analysis of the risks arising from the industrial use of Perfluorooctanoic acid (PFOA) and Ammonium Perfluorooctanoate (APFO) and from their use in consumer articles. Evaluation of the risk reduction measures for potential restrictions on the manufacture, placing on the market and use of PFOA and APFO. Final Report (20.12.2008 – 20.10.2009).
 - [5] Higgins, C.P., Luthy, R.G. (2006): Sorption of perfluorinated surfactants on sediments. *Environ. Sci. Technol.* 2006, 40, 7251-7256.
 - [6] Liu, J., Lee, L.S. (2007): Effect of fluorotelomer alcohol chain length on aqueous solubility and sorption by soils. *Environ. Sci. Technol.* 41, 5357-5362.
-