Experimentelle Untersuchungen zur Verteilung endokriner Stoffe auf Boden/Wasser – Systeme

vom Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik
der Technischen Universität Kaiserslautern
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Frau

Dipl.-Ing. Danuta Kohne

aus Danzig, Polen

D 386

Kaiserslautern 2011

Experimentelle Untersuchungen zur Verteilung endokriner Stoffe auf Boden/Wasser – Systeme

vom Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik
der Technischen Universität Kaiserslautern
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

genehmigte Dissertation

Eingereicht am:	01.09.2010
Mündliche Prüfung am:	25.11.2010

Promotionskommission:

Vorsitzender:	Prof. Dr.-Ing. Hans Hasse
Referenten:	Prof. Dr.-Ing. Gerd Maurer
	Prof. Dipl.-Ing. Dr. Techn. H.-J. Bart
Dekan:	Prof. Dr.-Ing. Siegfried Ripperger

D 386

Kaiserslautern 2011

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand in der Zeit von 2003 bis 2008 während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin von Herrn Prof. Dr.-Ing. G. Maurer am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik der Technischen Universität Kaiserslautern. Ich bedanke mich bei Herrn Prof. Maurer für die Betreuung, sein Engagement und seine Unterstützung in jeder Hinsicht bei der Entstehung dieser Arbeit. Besonders bedanke ich mich für die zahlreichen Diskussionen und Anregungen die zum Fortgang der Arbeit beigetragen haben.

Herr Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. H.-J. Bart danke ich für die Übernahme des Korreferates und Herrn Prof. Dr.-Ing. H. Hasse danke ich für die Übernahme des Vorsitzes der Prüfungskommission.

Frau Prof. Dr.-Ing. habil. Dipl.-LMChem. A. Welker danke ich für das Interesse, das sie dieser Arbeit entgegengebracht hat und für das Zurverfügungstellen der HPLC-Anlage.

Bei allen Mitarbeitern des Lehrstuhls möchte ich mich für ein angenehmes Arbeitsklima und eine sehr freundschaftliche Zusammenarbeit bedanken. Ein besonderes Dankeschön widme ich Herrn Mrawek für die zahlreichen fachlichen und persönlichen Diskussionen und für die technische Unterstützung im Laboralltag.
Frau Reim und Frau Hofmann danke ich für die Unterstützung im Lehrstuhlalltag und danach.

Von ganzem Herzen danke ich meinem Mann, der durch seine Unterstützung und sein Verständnis zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat.

Bayreuth, im November 2010
Danuta Kohne

Abstract

Endocrine disruptors are synthetic chemicals that disturb the control functions of hormones in human beings and animals. They might cause a variety of malfunctions and diseases which are summarized as “endocrine effects”. There are many sources for the presence of endocrine disruptors in the environment for example from using such substances as pesticides in agriculture or by its release via traffic accidents and chemical plants leakages. The propagation of endocrine disruptors in the environment is essentially influenced by their partitioning to soil-water two-phase systems. Developing a profound data base for the partition coefficients of endocrine disruptors between an aqueous phase and a soil is a prerequisite for the development of tools to correlate and (finally even) predict the partitioning. Experimental work in that area faces two problems: The characterization of the “soil” that coexists with an aqueous phase and the selection of an appropriate method for the experimental investigation of the phase equilibrium. In recent years, the European Commission tried to overcome the “soil-problem” by selected the Eurosoils series, i.e., a number of soils that are considered to represent the most important soils structure in the member states of the European Union. Experimental work on the partitioning of endocrine disruptors should be performed primarily using such Eurosoils. The most common method to study the partitioning of endocrine disruptors to soil/water phases is the so-called ”Shake-Flask” method. To enable reproducible results from different laboratories a standard method was developed and recommended by the *Organization of Economic Co-operation and Development* (OECD). That method was published as OECD-guideline 106 “Adsorption/Desorption Using a Batch Equilibrium Method”. The “Shake-Flask” method is tedious and time-consuming and its results are often of low quality. The aim of the present work was to test an alternative method based on a procedure common in liquid chromatography (HPLC). The method uses a soil as retention medium in a chromatographic column and applies thermodynamic relations to determine the partitioning of a solute from its retention time in the column. The method is particularly simple, but it was not known if the experimental results form that HPLC- method agree with the results from the “shake – flask” method as the

phenomena that govern the retention might differ from the phenomena that determine the partitioning in a “shake-flask” experiment. As there were questions on the quality of published data on the partition coefficient of endocrine disruptors to Eurosoil/water-systems, besides the HPLC-experiments although “shake-flask”-experiments were performed. The partitioning of about 25 endocrine disruptors to 3 Eurosoil/water-systems was studied at ambient temperature. The results reveal, at first, that for many endocrine disruptors the accuracy of published partition coefficients determined by “shake-flask”-experiments applying the OCED guideline 106 is considerably lower that expected and, at second, that partition coefficients determined by the HPLC-method often reveal large deviations from experimental data by the “shake-flask” method. Obviously, the governing phenomena can be different in both types of experiments. The sorption of endocrine disruptors in a “shake-flask” experiment seems to be a combination of surface effects (adsorption) and bulk effects (absorption) whereas, the retention time in a HPLC experiment is primarily governed by adsorption (or an absorption only in a small liquid layer near the surface of the soil).

1 Einleitung - 1 -

2 Grundlagen - 3 -

2.1 Der Boden und seine Bestandteile - 3 -

2.1.1 Modellböden – Eurosoils - 4 -

2.1.1.1 Eurosoil 1 - 7 -

2.1.1.2 Eurosoil 2 - 7 -

2.1.1.3 Eurosoil 3 - 8 -

2.1.1.4 Eurosoil 4 - 8 -

2.1.1.5 Eurosoil 5 - 9 -

2.1.1.6 Eurosoil 6 - 9 -

2.1.1.7 Eurosoil 7 - 10 -

2.2 Endokrin wirksame Stoffe - 10 -

2.2.1 Datenquellen über klärschlammrelevante organische Stoffe - 11 -

2.2.1.1 Physikalisch - chemische Daten - 11 -

2.2.1.2 Toxikologische Daten - 12 -

2.2.1.3 Daten aus der Technosphäre - 13 -

2.2.1.4 Analytische Daten - 14 -

2.3 Thermodynamische Grundlagen der Sorption - 14 -

2.3.1 Isothermengleichungen - 18 -

2.3.1.1 Isothermengleichung nach Henry - 19 -

2.3.1.2 Isothermengleichung nach Freundlich - 20 -

2.3.1.3 Isothermengleichung nach Langmuir - 22 -

2.3.2 Einfluss der Eigenschaften des Adsorptivs auf die Sorption - 23 -

2.3.3 Einfluss der Parameter eines Bodens auf die Sorption - 26 -

2.4 Experimentelle Methoden zur Bestimmung von Verteilungskoeffizienten - 31 -

2.4.1 Direkte Methoden - 31 -

2.4.2 Indirekte Methoden - 34 -

3 Experimentelle Untersuchungen - 35 -

3.1 Einführung - 35 -

3.2 Ausgewählte Stoffe - 36 -

3.3 Schüttelkolbenmethode - 41 -
3.3.1 Ergebnisse der Sorptionsversuche mit der Schüttelkolbenmethode - 43 -
3.3.2 Sorption an Eurosoil 3 - 68 -
3.3.3 Sorption an Eurosoil 4 - 69 -
3.3.4 Sorption an Eurosoil 5 - 70 -
3.4 HPLC- Methode - 71 -
3.4.1 Untersuchte Substanzen - 71 -
3.4.2 Aufbau der HPLC- Anlage - 72 -
3.4.3 Allgemeine Beschreibung des Verfahrens - 72 -
3.4.4 Auswertung - 74 -
3.4.5 Sorption an Eurosoil 3 - 79 -
3.4.6 Sorption an Eurosoil 4 - 79 -
3.4.7 Sorption an Eurosoil 5 - 80 -

4 Vergleich der Boden/Wasser-Verteilungskoeffizienten aus den experimentellen Untersuchungen - 81 -

5 Zusammenfassung und Ausblick - 90 -

6 Literatur - 92 -

Anhang. Experimentelle Ergebnisse. - 98 -

Anhang A. Ergänzungen zur Eichkurven - 98 -

Anhang B. Ergänzungen zu den Beispielrechnungen - 113 -

Anhang C. Ergänzungen zu Retentionszeiten - 127 -

Anhang D. Ergänzungen zu Paaren (V_{ES}·K_D) - 129 -

Anhang E. Freundlich Isothermen - 131 -

Anhang F. Auswertung mit statistischer Betrachtung - 223 -

Formelzeichen, Abkürzungen und Indices

Lateinische Formelzeichen

a	Aktivität
a	Korrelationsparameter
a	Neigung der Ausgleichgerade
A	Quotient
a*	Korrelationsparameter
b	Korrelationsparameter
b*	Korrelationsparameter
C	Beladung der Komponente in der Adsorbatphase
C	Konzentration
c*	Korrelationsparameter
$C^{(0)}$	Einheitskonzentration
C_{aufES}	Konzentration des Stoffes auf Eurosoil
$C_{aufES}^{(0)}$	Einheitskonzentration
C_e	Konzentration der Substanz in der Lösung
$C_e^{(0)}$	Einheitskonzentration
C_i	Beladung des Sorbenten
$C_{i,m}$	Maximale Beladung des Sorbenten
$C_{inLös}$	Konzentration des Stoffes in der Lösung
$C_{inLös.}^{(0)}$	Einheitskonzentration
$C_{oktanol}$	Konzentration der Substanz in der oktanolreiche Phase
$C_{org.}$	Gehalt an organischem Kohlenstoff
C_{SL}	Konzentration in der Stammlösung
d*	Korrelationsparameter
D^*_S	Wasserdifussion Koeffizient
G	Extrapolationswert
h	partielle Molare Enthalpie
i	Sorptiv
K	Verteilungskoeffizient
k´	Kapazitätsfaktor
K*	Verteilungskoeffizient
K_a	Dissoziationskonstante einer Säure

K_b	Protonierungskonstante einer Base
K_D	Eurosoil/Wasser Verteilungskoeffizient
K_D	Henry Verteilungskoeffizient nach Gawlik
K_{Di}	Verteilungskoeffizient
K_{Dmax}	minimalen Verteilungskoeffizient K_D
K_{Dmin}	maximalen Verteilungskoeffizient K_D
K_f	Freundlich Verteilungskoeffizient nach Gawlik
K_F	Freundlich Verteilungskoeffizient
K_H	Henry Verteilungskoeffizient
K_i	Verteilungskoeffizient aus statistischer Betrachtung
$K_{i,B/W}$	Boden/Wasser Verteilungskoeffizient
$K^*_{i,B/W}$	Boden/Wasser Verteilungskoeffizient
K_L	Langmuir Verteilungskoeffizient
K_{OC}	Verteilungskoeffizient bezogen auf Gehalt des Bodens an organischer Substanz
$K_{O/W}$	Oktanol/Wasser Verteilungskoeffizient
m	Bodenmasse
m	Molalität
m	Sorbentkonzentration
m	Volumenstrom
M	Mittelwert
$m^{(0)}$	Einheitsmolalität
$\dot{m}$	Massenstrom des Eluenten
n	Konstante
N	Menge der natürlichen Zahlen
R	Referenzsubstanz
R	universelle Gaskonstante
s	partielle molare Entropie
S	Steigung
T	Temperatur
t_0	Totzeit
t_R	Retentionszeit
V_{ES}	Eurosoilvolumen
V_g	Flüssigkeits-/Gasvolumen

V_R	Retentionsvolumen
V_1	Flüssigkeitsvolumen
x	die Menge sorbierter Substanz auf Boden
$x^{(0)}$	Einheitskonzentration

Griechische Formelzeichen

γ	Aktivitätskoeffizient einer Komponente
Δ	Abweichung/Differenz
δ	Standarbabweichung
λ	Wellenlänge
μ	chemisches Potential
Φ	Porosität

Abkürzungen (Teilweise auch als Indices verwendet)

Abb.	Abbildung
Absorb.	Absorbierte
AE	Absorptionseinheit
EC	Mittlere effektive Konzentration
ES	Eurosoil
ESS	Equilibrium Soil Solution
exp.	Expotential
FAO	Food and Agriculture Organization
HPLC	High Performance/High Pressure Liquid Chromatography
Konz.	Konzentration
$K_{Lit.}$	Verteilungskoeffizient aus Literaturangaben
liq.	Flüssige Phase
LC	Letale Konzentration
LD	Letale Dosis
ln	natürlichen Logarithmus
log	Logarithmus
Lös.	Lösung
nm	Nanometer
OC	organic content – organische Substanzgehalt
OECD	Organisation for Economic Co-operation and Development

OW	Oktanol/Wasser
RP	Reversed Phase
SL	Stammlösung
sorb.	Adsorbatphase
Tab.	Tabelle
U	Umdrehung
UV	Ultraviolettstrahlung

Tiefgestellte Indices

50	50%
1,2,i, j, n,m, p,R	Laufvariable
aufES	auf dem Eurosoil
Batch	Batchversuch
B/W	Boden/Wasser
E	Extrapoliert
ES	Eurosoil
HPLC	High Preformance Liquid Chromatography
inLös.	in der Lösung
Lös.	Lösung
M	Mittel
max.	maximal
min.	minimal
org.	organisch
R	Referenzsubstanz
SL	Stammlösung

Hochgestellte Indices

(o)	Einheitsdimension
B/W	Boden/Wasser
E	Exzess
liq.	flüssige Phase
n	Konstante
ref.	Referenzzustand
sorb.	Adsorbatphase

1 Einleitung

Daten und Informationen zur Charakterisierung physikalisch-chemischer Eigenschaften und der Reaktivität eines Stoffes sind von besonderer Bedeutung für dessen ökochemische und toxikologische Bewertung. Die wichtigsten Angaben sind: Löslichkeit, Flüchtigkeit (Dampfdruck) und die verschiedenen Verteilungskoeffizienten des Stoffes zwischen flüssigen Phasen, flüssigen und gasförmigen sowie flüssigen und festen Phasen. Daraus leiten sich Aussagen zur Stoffmobilität in der Hydro-, Pedo-, und Atmosphäre sowie zur Verteilungstendenz zwischen den differenzierten biologischen und nichtbiologischen Umweltstrukturen ab. Die durch das Nernstsche - Verteilungsgesetz bzw. das Henrysche - Gesetz bestimmten stoffspezifischen Gleichgewichtskonstanten z.B. die n - Oktanol/Wasser Verteilungskoeffizienten und die Henry-Koeffizienten, ermöglichen beispielsweise Aussagen zum Verteilungsverhalten eines Stoffes zwischen einer wässrigen und einer organischen (biologischen) Phase (Biosystem- Wasser oder organischen Strukturen von Boden/Sediment) bzw. zwischen einer wässrigen und einer gasförmigen Phase (Wasser – Atmosphäre). Mit dem Begriff Reaktivität werden vor allem chemische Eigenschaften wie das Oxidations-, Reduktions-, und Hydrolyseverhalten, photolytische Umsetzungen und damit die Transformationstendenz eines Stoffes charakterisiert.

Aus diesen Informationen können in Verbindung mit Verteilungsparametern häufig Parallelen gezogen werden zum Verteilungs- und Transformationsverhalten und damit zu Mobilität und Persistenz in biotischen und abiotischen Umweltstrukturen, zu den Abbau- und Metabolisierungsreaktionen, aber auch zu Stoffwandlungen im Rahmen technologischer Prozesse wie der Wasseraufbereitung, der Abwasserreinigung, der Abfallverbrennung und der Deponie. Die Fragen des Abbaus und der chemischen Umwandlung durch biologische und physikalische Vorgänge in der Umwelt sind für die Umweltbewertung von ausschlaggebender Bedeutung (Koch, et al., 1991).

Die Herstellung und Verwendung von Chemikalien erfolgt nahezu immer in offenen Systemen. Damit ist es unvermeidbar, dass eine Chemikalie in die Umwelt gerät. Der Transport eines Stoffes, der aus Unterschieden im chemischen Potential und Abweichungen vom Gleichgewicht resultiert, steht in enger Beziehung zur Verteilung, wobei entsprechende Verteilungsparameter ihrerseits durch physikalisch - chemische Stoffeigenschaften und molekulare Strukturen bestimmt werden.

Unter „endokrinen Stoffen“ (Endocrin Disruptors) versteht man synthetisch erzeugte und in die Umwelt gelangte Chemikalien, die in die hormonellen Regelkreise von Mensch und Tier eingreifen. Sie entfalten ihre Wirkung i. d. R. bereits bei geringer Konzentration. Die aus der Einwirkung solcher Stoffe resultierenden negativen Folgen (z. B. Wachstumsstörungen, sinkende Fruchtbarkeit) werden unter dem Begriff „endokrine Effekte“ zusammengefasst. Die Untersuchung endokriner Effekte von Chemikalien ist ein hochaktuelles Forschungsgebiet in verschiedenen Fachgebieten z. B. in der Toxikologie und der Medizin. Unter den endokrinen Chemikalien finden wir zahlreiche Pestizide, die man in der Landwirtschaft benutzt. Bedenklich ist, dass die Belastung von Nahrungsmitteln mit Pestizidrückständen zunimmt. Über ein Drittel der in den EU-Mitgliedstaaten untersuchten pflanzlichen Produkte sind mit Rückständen belastet, 4,3% davon überschreiten die festgelegten Höchstmengen (Smolka und Cameron; 2002). Das wichtigste aller Lebensmittel ist das Trinkwasser. Sauberes Grundwasser ist die wichtige Grundlage für die Trinkwasserversorgung.

Die Aufgabe der vorliegenden Arbeit besteht darin, einen wichtigen Teilaspekt bei der Ausbreitung endokriner Stoffe, nämlich das Phasengleichgewicht bei deren Verteilung auf eine feste Phase (einen Boden) und eine damit koexistierende wässrige Phase in experimentellen Arbeiten zu untersuchen, mit dem Ziel, die Entwicklung von zuverlässigen Methoden zur Vorhersage solcher Phasengleichgewichte zu ermöglichen.

In der Literatur sind zahlreiche Ansätze zur Berechnung/Vorhersage von Verteilungskoeffizienten auf flüssige Zweiphasensysteme bekannt. In der Regel handelt es sich dabei um sogenannte „Quantitative Structure Activity Relationship“ (QSAR)-Methoden. Solche Methoden werden z. B. auch von der US-EPA zum Screening auf endokrine Wirkungen empfohlen.

Im Mittelpunkt der experimentellen Untersuchungen der vorliegenden Arbeit stand die Erprobung einer „direkten HPLC – Methode“ zur Bestimmung der Verteilungskoeffizienten endokriner Stoffe auf Eurosoil/Wasser – Systeme.

2 Grundlagen

2.1 Der Boden und seine Bestandteile

Als Boden bezeichnet man die oberste, belebte Verwitterungsschicht der Erde auf der Pflanzen wachsen können (Brockhaus, 1967). Die Verwitterungsschichten bestehen aus einer großen Anzahl von Stoffen; primär aus Mineralien. Die mineralischen Komponenten sind von entscheidender Bedeutung für die Eigenschaften eines Bodens und somit für seine etwaige Nutzung durch den Menschen. Die mineralischen Komponenten werden in folgende Gruppen unterteilt (Gawlik, 1997):

- Quarz und Feldspate,
- Glimmer und akzessorische Minerale,
- Carbonate, schwefelhaltige Minerale und Halide,
- Schichtsilikate,
- Kristalline Oxide, Hydroxide und nicht - kristalline mineralische Verbindungen.

Ein Boden enthält auch organische Substanzen. Die organische Substanz des Bodens umfasst alle in und auf dem Boden befindlichen, abgestorbenen pflanzlichen und tierischen Stoffe und deren organische Umwandlungsprodukte (Mückenhausen, 1985). Die pflanzliche Masse enthält:

- Zucker, Proteine, Stärke, Proteide, Pektine, Hemizellulose, Zellulose, Lignin, Wachse, Harze, Gerbstoffe.

Den im Gleichgewicht vorhandenen Gehalt an organischer Substanz bezeichnet man als Humusspiegel. Der Gehalt an organischen Bestandteilen nimmt im Bodenprofil mit zunehmender Tiefe ab. Dabei zeigt sich eine breite Verteilung. Der Gehalt an organischer Substanz des Bodens wird häufig in Gewichtsprozent Trockenmasse (bezogen auf die Gesamtbodenmasse) angegeben und über den organischen Kohlenstoffgehalt ermittelt (Mückenhausen, 1985). Der Gehalt an organischer Substanz liegt im oberen Bodenbereich bei bis zu 10 Massenprozent (Schachtschabel et al., 1992). Für reproduzierbare thermophysikalische und thermochemische Untersuchungen an Böden, muss der betrachtete Boden ausreichend charakterisiert werden. Dies ist eine bislang nicht zufriedenstellend gelöste Aufgabe. Deshalb führt man solche Untersuchungen in jüngste Zeit vermehrt

an standardisierten Böden bzw. Modellböden, z.B. den sogenannten Eurosoils durch.

2.1.1 Modellböden – Eurosoils

Insbesondere vor dem Hintergrund, dass einheitliche Testmethoden zur Bewertung des Sorptionsverhaltens von Umweltchemikalien im/an Böden benötigt werden, hat die Europäische Union Standardverfahren zur Chemikalienbewertung entwickelt. In der EU-Direktive 79/831/EEC (1979) gilt der Grundsatz, dass Daten, die in einem Mitgliedsland bestimmt und bei einer zuständigen nationalen Behörde eingereicht und akzeptiert wurden, für den ganzen EU-Raum gültig sind und in Einklang mit den Anforderungen der anderen Mitgliedsländer sein sollen. Die im Anhang V dieser Direktive (Annexe V to Directive 79/831/EEC, 1984) beschriebenen Testmethoden sind heute als Standardverfahren zur Chemikalienbewertung anerkannt. Im Jahr 1986 wurde von der EU - Kommission festgestellt, dass eine Standardprozedur zur Bewertung der Sorption von Umweltchemikalien im/an Böden fehlt. Deshalb wurde entschieden, die allgemein anerkannte OECD-Prüfvorschrift 106 “Adsorption/Desorption Using a Batch Equilibrium Method” (OECD, 2000) auf den EU-Raum zu übertragen. Jedoch musste hierzu zunächst das Problem der Auswahl und Beschreibung von für die Europäische Union repräsentativen Böden gelöst werden. Die EU-Kommission (DG XI) rief in Zusammenarbeit mit dem Joint Research Centre Ispra und mehreren nationalen Institutionen ein Projekt zur Auswahl und Beschreibung von europäischen Referenzböden für Bodenuntersuchungen - den sogenannten Eurosoils - ins Leben (Kuhnt et al., 1994). Ziel des Projektes war, eine Anzahl repräsentativer und reproduzierbar herstellbarer Böden für Sorptionsuntersuchungen auszuwählen.

Bei der Auswahl der Referenzböden wurden drei Kriterien zugrunde gelegt (Kuhnt und Muntau, 1992):

- Repräsentanz der Bodeneigenschaften
  unterschiedliche pH-Werte, variierende Anteile an organischem Kohlenstoff, charakteristische Körngroßenverteilungen, usw.
- Repräsentanz in Bezug auf Häufigkeitsverteilung
  Die Böden sollten möglichst große Fläche der EU beschreiben.
- Repräsentanz in Bezug der Assoziationsmuster
  Die Referenzböden sollte an Orten entnommen werden, an denen die Assoziation mit anderen Bodentypen, den klimatischen und

geomorphologischen Bedingungen sowie der vorherrschenden Vegetation repräsentativ für die unterschiedlichen Regionen der EU ist.

Horizont definiert man als Bereich innerhalb des Bodens der einheitlich ähnliche Merkmale und Eigenschaften besitzt und sich von darüber- oder darunterliegenden Bereichen unterscheidet (Scheffer und Schachtschabel, 2002).

Die Eigenschaften von Bodenhorizonten (Abb.2.1) werden durch Buchstaben – und/oder Zahlensymbole gekennzeichnet. Dabei werden mit Großbuchstaben die Lage im Profil sowie die Zugehörigkeit zum Humus-, Mineral- und/oder Grundwasserkörper signiert. Spezifische Wirkungen bodenbildender Prozesse werden durch nachgestellte Kleinbuchstaben gekennzeichnet. Es bestehen verschiedene nationale Systeme (Scheffer und Schachtschabel, 2002).

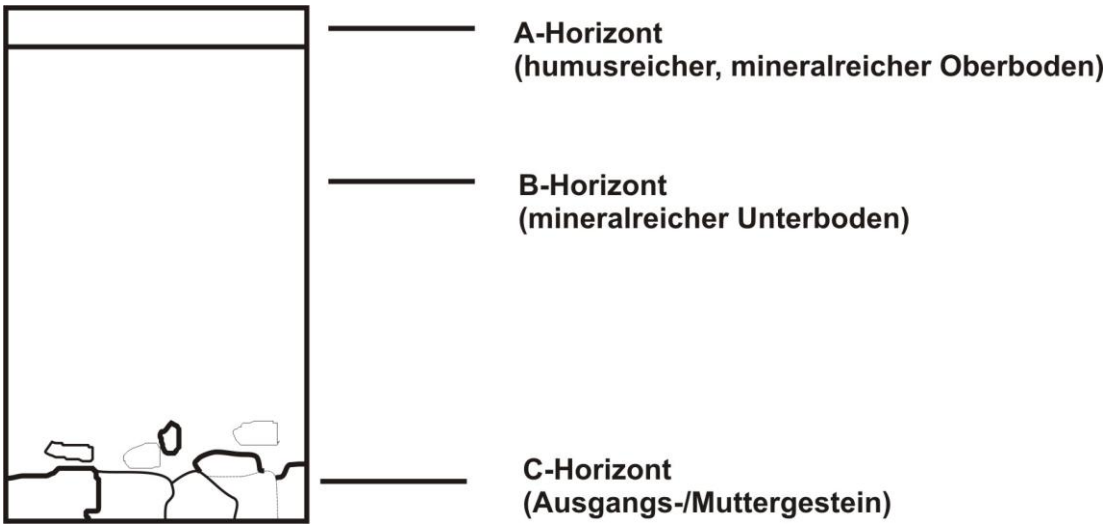

Abb. 2.1 Bodenprofil mit Horizonten (Verändert nach Bruckmann/Lethmate/Wendeler, 2002).

Im Eurosoil - Projekt wurden sieben für verschiedene EU-Regionen typischen Böden (Eurosoil 1 bis Eurosoil 7) ausgewählt. In der Tabelle 2-1 sind zu diesen Böden einige wichtige Angaben zu FAO - Bodeneinheit, Horizont, Entnahmeort und EU – Mitgliedsland zusammengestellt. Die **FAO - Systematik**, zuletzt dargestellt im World Soil Resources Report Nr. 60 FAO, Rom, 1990, stellt eine einfache weltumspannende Bodenlegende dar. Sie besteht aus 28 Hauptbodengruppen (Major Soil Groups), die alle durch die Nachsilbe 'sol' gekennzeichnet sind. Diese werden in 153 Soil Units (Bodeneinheiten) untergliedert, die in etwa den Bodentypen der deutschen Bodensystematik entsprechen. Als dritte systematische Einheit sind

die 'soil phases' eingeführt. Diese 'soil phases' dienen in erster Linie zur Kennzeichnung von Nutzungsbegrenzungen.

Tab. 2-1 Entnahmeorte der Eurosoils

Boden	FAO Bodeneinheit	Horizont	Entnahmeort	EU-Mitgliedsland
Eurosoil 1	Vertic Cambisol	Ah-Bw-C	Sizilien	Italien
Eurosoil 2	Rendzina	Ahk-ACk-Ck	Peloponnes	Griechenland
Eurosoil 3	Dystric Cambisol	Ap-Bw1-Bw2-Bw3/C	Wales	UK
Eurosoil 4	Orthic Luvisol	Ap-E-Bt-Ck	Normandie	Frankreich
Eurosoil 5	Orthic Podzol	O-Ah-E-Bhs-Bs-BC-C	Schleswig-Holstein	Deutschland
Eurosoil 6	Subsoil	_____	Normandie	Frankreich
Eurosoil 7	Dystric Cambisol	Ahg-Bw-BwCw-Cw	Lungau	Österreich

Die ursprüngliche Idee des Eurosoil- Projektes bestand darin, nur eine begrenzte Menge an Bodenmaterial an den jeweiligen Standorten zu entnehmen, aufzuarbeiten und zu charakterisieren. Um die auf der Basis der pedologischen Charakterisierung erwarteten unterschiedlichen Sorptioneigenschaften der Bodenproben experimentell zu belegen, wurden Experimente zur Adsorption/Desorption mit umweltrelevanten Testchemikalien durchgeführt. Zum Abschluss des Projektes wurde ein internationaler Ringtest durchgeführt, um bei Einsatz verschiedener Testsubstanzen die Eignung der ausgewählten Bodentypen für die Chemikalienprüfung im EU-Bereich in der erweiteter Form nochmals zu überprüfen (Kuhnt et al., 1991). Auf Grund des großen Interesses an dem Projekt wurde entschieden, eine zentrale Verteilung von Eurosoils an Laboratorien, die begründetes Interesse nachweisen konnten, vorzunehmen. Die Verteilung begann im Jahr 1990. Die Nachfrage war so groß, dass man eine zweite Auflage von Eurosoils herstellen musste.

In der vorliegenden Arbeit werden 3 dieser Böden (Eurosoil 3, Eurosoil 4 und Eurosoil 5) verwendet. In den nächsten Abschnitten sind weitere Informationen zu den Eurosoils zusammengestellt.

2.1.1.1 Eurosoil 1

Eurosoil 1 (Vertic Cambisol) wurde in der Nähe des kleinen Ortes Aliminusa auf Sizilien, 45 km südlich von Palermo entnommen. Er repräsentiert typische, in mediterranen Regionen weit verbreitete Braunerde. Aufgrund des Klimas und der recht extremen Bodeneigenschaften ist die natürliche Vegetationsbedeckung karg. Dominierende Pflanzenarten sind Gräser, vereinzelt durchsetzt mit Disteln und wilden Artischocken (Kuhnt et al., 1991).

Eigenschaften:

- Horizont Ah-Bw-C (Ah – Anreicherung von Humus, Bw – extrem Tonreich, C – mineralischer Untergrund).
- Leicht sauer.
- Tonreich und relativ arm an organischer Substanz (1,6%).
- Fast keine größeren Sandfraktionen.
- Relativ hohe Kationaustauschkapazität (zum Großteil auf das Sorptionsvermögen der Tonminerale zurückzuführen).

2.1.1.2 Eurosoil 2

Eurosoil 2 (Rendzina) wurde in ca. 600 m Höhe über NN auf dem Peloponnes/Griechenland, 12 km südlich der kleinen Hafenstadt Kiato entnommen. Das Probenahmegebiet ist intensiv landwirtschaftlich genutzt. Unter Wein und Oliven ist der humose Oberboden teilweise sehr abgetragen. Eine typische Rendzina findet sich daher unter natürlicher Vegetationsbedeckung wie Sträucher, Büsche und Hartlaubgehölzen (Kuhnt et al., 1991).

Eigenschaften:

- Horizont Ahk-ACk-Ck (Ahk – Humus Horizont mit Kohle, ACk – Humus Horizont, Ck – Horizont mit karbonhaltigem Ausganggestein).
- Charakteristische rote Farbe.
- Der A-Horizont zeigt ein gut entwickeltes Krümelgefüge, geringer Sandanteil, beträchtliche Anteile an freiem $CaCO_3$.
- Hoher Anteil an organischer Substanz.
- Hoher pH-Wert (>7) bei gleichzeitig erheblichem Anteil an gut humifizierter organischer Substanz.

2.1.1.3 Eurosoil 3

Eurosoil 3 (Dystric Cambisol) wurde auf einem niedrigen Plateau (90-120 m. ü. M.) in der walisischen Landschaft Glamorgan Gwent aus einem Weidegebiet entnommen. Die Landschaft in dieser Gegend wird landwirtschaftlich genutzt.

- Horizont Ap-Bw1-Bw2-Bw3/C (Ap – meist als Ackerkrume bezeichnet, Bw1- durch Bröckel bis subpoiliederartige („vieleckige Körper ineinander verschachtelt“) Struktur des Materials gekennzeichnet, Bw2 und Bw3/C-Polyedergefüge (häufigste Gefügeform im Unterboden mit wenig organischer Substanz).
- Das Ausgangsubstrat der Bodenbildung ist steinig und zeigt eine braune bis rötlich-braune Farbe.
- Lehmig und gut durchlüftet.
- Enthält vor allem Sandstein und Schieferton des Karbons.
- Die Primärmineralien enthalten freigesetztes Eisen in Oxid- oder Hydroxidform sowohl als Umhüllung von Quarzkörnern als auch in Koagulaten.
- Hohe Jahresniederschlagsmengen.
- Das Sorptionsvermögen nimmt unter allen Eurosoils eine mittlere Stellung ein.

2.1.1.4 Eurosoil 4

Eurosoil 4 (Orthic Luvisol) wurde in der Normandie in Frankreich, in der Nähe der Ortschaft Rots (nördlich von Caen) entnommen. Das Probenentnahmegebiet liegt auf einem sanft nach Westen abfallenden Plateau ca. 25 m über Meeresniveau.

Eigenschaften:

- Horizont Ap-E-Bt-Ck (Ap – meist als Ackerkrume bezeichnet, E – Mineralbodenhorizont, Bt – Unterbodenhorizont mit Ton eingereicht, Ck – Horizont mit karbonhaltigem Ausganggestein).
- Löss (ein carbonatreiches äolisches Sediment, in dem Feinsande und Schluffanteile oft dominant sind).
- Eine für Löss charakteristische Braunfärbung.
- Das Gebiet ist sehr niederschlagsreich.

- Die Temperaturen sind während des ganzen Jahres recht ausgeglichen (stark ozeanisches Klima mit hohem Jahresniederschlag).
- Sehr fruchtbar.
- Der Oberboden besitzt aufgrund der intensiven landwirtschaftlichen Nutzung (Ackerbau) nur einen geringen Gehalt an organischer Substanz.

2.1.1.5 Eurosoil 5

Eurosoil 5 (Orthic Podzol) wurde in Deutschland in der Nähe der Ortschaft Gudow ca. 23 km nordöstlich von Lauenburg in einem Waldgebiet entnommen. Das Klima in dieser Region ist kühl und humid. Die Landschaft ist wesentlich durch glaziale Einflüsse bestimmt.

Eigenschaften:

- Horizont O-Ah-E-Bhs-Bs-BC-C (O - Organischer Horizont aus Humusansammlung, Ah - Anreicherung von Humus, E – Mineralbodenhorizont, Bhs – Übergangs-Horizont, Bs – durch Einwaschung mit Sesquioxiden (v.a. Fe, Al) angereichert, BC – Unterboden, C – Muttergestein).
- Der Boden besteht aus Sandablagerungen.
- Der Tonanteil ist vernachlässigbar gering im Vergleich zu den anderen Böden.
- Der Boden enthält einen sehr hohen Anteil an organischer Substanz.
- Saurer Charakter, nährstoffarm und gut wasserdurchlässig.
- Geringe mikrobielle Aktivität.
- Huminstoffe sind in diesem Boden überwiegend in Form von Fulvosäuren (wasserlöslichen Huminsäuren) enthalten.

2.1.1.6 Eurosoil 6

Eurosoil 6 (Subsoil) repräsentiert keinen Euro-Boden im Sinne der ursprünglichen Definition. Die Probe wurde auf Wunsch der EG-Boden-Expertengruppe aus dem BC-Horizont des Eurosoil 4 (Orthic Luvisol) entnommen und repräsentiert einen Unterboden, der nahezu frei von organischer Substanz ist.

Aus technischen und datenspezifischen Gründen ist eine Identifizierung von repräsentativem Unterboden grundsätzlich nicht möglich. Daher wurde aus Kostengrunden ein Unterboden aus den bereits ermittelten Referenzböden

entnommen. Das Material zeigt eine relativ gleichförmige Korngrößenverteilung und einen Gehalt an organischem Kohlenstoff von weniger als 0,5% (Kuhnt et al., 1991).

2.1.1.7 Eurosoil 7

Eurosoil 7 (Dystric Cambisol) ist ein für die Alpenregion repräsentativer Boden. Die Probe wurde in der Region Lungau, im südlichwestlichen Teil der Region Salzburg entnommen. Nach der Erweiterung der EU im Jahre 1995 wurde festgestellt, dass die Eurosoils 1-6 für die ganze Europäische Union nicht ausreichend sind. Deshalb wurde zusätzlich dieser Boden ausgewählt.

Eigenschaften:

- Horizont Ahg-Bw-BwCw-Cw (Ahg – Humushorizont, Bw - Horizont durch subpoiliederartige („vieleckige Körper ineinander verschachtelt“) Struktur des Materials gekennzeichnet), Cw – Horizont enthält eisenfleckige Verwitterungsflecken).
- Region: relativ niedrige Niederschläge, große Temperaturschwankungen zwischen Tag und Nacht (bis zu 30 K) und zwischen Sommer und Winter (bis zu 20 K).
- Typische braune bis gelbe Farbe.
- Im A-Horizont hoher Anteil an organischer Substanz.
- Niedriger pH – Wert.
- Niedrige Kationaustauschkapazität .

2.2 Endokrin wirksame Stoffe

Unter diesem Begriff werden Stoffe zusammengefasst, die als körperfremde Substanzen in das Hormonsystem und somit in die zentralen Körperfunktionen von Mensch und Tier eingreifen (Smolka und Cameron; 2002). Hormone besitzen eine zentrale und essentielle Bedeutung für die Steuerung und die Aufrechthaltung der lebensnotwendigen Funktionen im Körper. Die Bildung, der Abbau, der Transport und das Zusammenwirken der Hormone wird durch das Hormonsystem reguliert. Manche künstlich hergestellte, körperfremde Substanzen ähneln in ihrem chemischen Aufbau den Hormonen: Sie können deshalb in das Hormonsystem und somit in die zentralen Körperfunktionen von Mensch und Tier eingreifen. Hormone wirken i.d.R. in einer komplexen und vielfältigen Weise auf die Entwicklungsvorgänge und die Körperfunktionen im Organismus ein. Entsprechend vielfältig und komplex können die Störungen durch hormonell wirksame Chemikalien

sein (Kloas; 2002). Sie können z.B. wie körpereigene Hormone fungieren. Folgende typische Störungen können durch hormonell wirksame Umweltchemikalien verursacht werden:

- Missbildungen der Fortpflanzungsorgane (Folgen z.B.: verminderte Fruchtbarkeit)
- Veränderungen im Immunsystem (Folgen z.B.: Krankheitsanfälligkeit)
- Veränderungen im Hormonspiegel (Folgen z.B.: Krebs)
- Veränderungen im Gehirn (Folgen z.B.: Verhaltensänderungen).

Die Störungen können grundsätzlich schon durch hormonell wirkende Substanzen in sehr niedriger Konzentration ausgelöst werden. Viele hormonell wirkende Substanzen gelangen über die Ausbringung von Klärschlamm auf Felder und die Abschwemmung von landwirtschaftlichen Flächen mit Abwässern in die Umwelt. Ein häufig gefundener, endokriner Stoff ist z. B. Diuron, das häufig von privaten Anwendern zur Unkrautvernichtung eingesetzt wird.

2.2.1 Datenquellen über klärschlammrelevante organische Stoffe

Für die Bewertung der Klärschlammrelevanz einer organischen Verbindung können Informationen aus vier Bereichen herangezogen werden (nach Rippen, 2004):

- Physikalisch-chemische Daten
- Angaben zur Toxizität
- Informationen aus der Technosphäre
- Analytische Daten.

2.2.1.1 Physikalisch - chemische Daten

Physikalisch-chemische Stoffdaten können erste Hinweise darauf geben, wie sich ein Stoff in der Umwelt verhält. Solche Angaben dienen zu einer ersten Beurteilung zu welchem Umweltkompartiment eine Substanz tendiert. Zusammen mit Angaben zur Persistenz und Toxizität erhält man so Hinweise, welche Bereiche primär in eine Überwachung der Substanz einzubeziehen sind.

Abwasser transportiert organische Schadstoffe entweder in gelöstem Zustand oder adsorbiert an Schwebstoffe. Im ausgedehnten Kanalnetz können Schadstoffe z. B. ausgasen, abgebaut werden oder sich an Wänden absetzen. Physikalische - chemische Stoffdaten erlauben einen orientierenden Überblick, welche Stoffe in der Kläranlage zu erwarten sind und sich tendenziell im Klärschlamm anreichern.

Daraus kann man Folgerungen für die potentielle Belastung der Nahrungskette bei landwirtschaftlicher Verwertung von Abwässern und Klärschlämmen ziehen. Das Molekulargewicht, der Dampfdruck, sowie Schmelz- und Siedepunkt sind wichtige thermophysikalische Daten eines endokrinen Stoffes. Die Molekülstruktur und Angaben zu chemischen Reaktionen – z. B. zur Dissoziation, zur Photolyse und zur Hydrolyse sind weitere wichtige thermochemische Daten.

Zu den in diesem Zusammenhang interessierenden physikalisch-chemischen Daten zählen:

- **Die Henrysche – Konstante für die Löslichkeit des Stoffes in Wasser**.
  Sie ist ein Maß dafür, wie sich ein in der Luft vorhandener Stoff in Wasser löst. Dies ist z. B. wichtig bei der Bewertung, wie ein Stoff im Kanalnetz oder während des Klärprozesses in die Umgebungsluft entweicht.
- **Die Wasserlöslichkeit**.
  Sie ist ein Maß dafür, in welchem Umfang ein Stoff mit einer wässrigen Phase transportiert wird.
- **Die Lipophilität.**
  Sie liefert eine Aussage darüber, in welchem Umfang ein Stoff mit organischen Schwebstoffen transportiert wird und deshalb zu einer Anreicherung im Klärschlamm tendiert. Zur Bewertung der Lipophilität wird häufig der Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient herangezogen (wobei Oktanol als Modellsubstanz für einen organischen Schwebstoff dient).
- **Die Adsorptionstendenz.**
  Sie liefert eine Information darüber, in welchem Umfang sich ein Stoff an Boden- und Klärschlammpartikel anlagert. Zur quantitativen Erfassung wird häufig der Verteilungskoeffizient K_{oc} verwendet.

2.2.1.2 Toxikologische Daten

Unter toxikologischen Daten versteht man Angaben zur Menge und Konzentration eines Stoffes, die erforderlich sind, um ausgewählte Testorganismen in einem

bestimmten Umfang innerhalb einer definierten Zeitspanne zu schädigen. Zu den wichtigsten toxikologischen Daten zählen **LD (letale Dosis), LC (letale Konzentration) und EC (mittlere effektive Konzentration).** LD ist die für ein bestimmtes Lebewesen tödliche Dosis eines bestimmten Stoffes oder einer bestimmten Strahlung. Gegenüber LD bezeichnet man als letale Konzentration LC eine aus der Umgebung des Lebewesens wirkende Stoffkonzentration mit gleichem Effekt. Als EC wird in der Pharmakologie und Toxikologie die effektive Dosis bzw. Konzentration bezeichnet, die zu einem interessierenden Effekt bei der Population führt. Für die Angabe der letalen Dosis bzw. der letalen Konzentration gibt es verschiedne Messgrößen, am häufigsten wird LD_{50}, LC_{50} bzw. EC_{50} verwendet. Der Index gibt die Dosis bzw. die Konzentration an, bei der 50 % einer Versuchspopulation innerhalb der Versuchszeit stirbt (Lewin, 1992). Die toxikologischen Daten sind erforderlich, um das Potenzial eines Stoffes zur Gefährdung von Mensch und Tier zu bewerten.

2.2.1.3 Daten aus der Technosphäre

Unter Technosphäre wird der Bereich Produktion, Anwendung und Transport von Chemikalien bis zum Eintritt in das Abwasser bzw. in den Oberflächenabfluss verstanden. Aus Emissionsquellen der Technosphäre können Stoffe in die Ökosphäre gelangen. Unter der Ökosphäre versteht man den Bereich der Erdoberfläche, der von Lebewesen besiedelt ist und durch vielfältige miteinander verknüpfte Stoffkreise von Luft und Wasser sowie anorganischen und organischen Stoffen gekennzeichnet ist (Scheffer und Schachtschabel; 2002). Innerhalb der Ökosphäre stellen Böden die Basis dar, auf der menschliches und tierisches Leben möglich ist. Solange ein Stoff in der Technosphäre bleibt, ist sein Massenfluss in gewissem Sinne kontrollierbar, mit dem Eintritt in Umwelt ist er Abfall.

Emissionsquellen kann man in verschiedener Hinsicht aufschlüsseln:

1. Räumliches - geographisches - anwendungsbedingtes Quellmuster:
    a. Diffuse Quellen, z.B. Haushaltschemikalien, Lösungsmittel
    b. Flächenquellen, z.B. Agrarchemikalien
    c. Linienquellen (Verkehrswege), z.B. Kohlenwasserstoffe, Abrieb von Reifen
    d. Multipunktquellen (Kläranlageneinleitungen), z.B. Harnstoff

   e. Regionale Unterscheidung zwischen Siedlungsgebiet, land- und forstwirtschaftlichem Gebiet, Erholungsgebiet, Industriegebiet
2. Zeitliches Quellmuster:
   a. Gleichmäßig
   b. Periodisch (jahreszeitlich, monatlich), z.B. Agrarchemikalien
   c. Intermittierend, z.B. Chemikalien die unregelmäßig produziert und eingesetzt werden

2.2.1.4 Analytische Daten

Gelangt Klärschlamm in die Landwirtschaft, so müssen entsprechende Untersuchungen der Matrizes Boden, Flora, Fauna und Grundwasser durchgeführt werden, um das Potenzial von Verunreinigungen der Ökosphäre durch Schadstoffe beurteilen zu können. Solche Untersuchungen bestehen überwiegend aus der experimentellen Bestimmung der Konzentration von Schadstoffen aber auch aus der Untersuchung von Abbauwegen und Abbauprodukten.

2.3 Thermodynamische Grundlagen der Sorption

Unter dem Begriff Sorption versteht man den Prozess bei dem eine Verbindung (Sorptiv, z.B. eine endokrine Substanz) aus einer mobilen Phase (z.B. einer Fluidphase) aufgrund chemischer und/oder physikalischer Wechselwirkungen an einer immobilen Phase (Sorbent, z.B. einem Boden) abgelagert wird. Der aufzunehmende Stoff (Sorptiv) kann dabei auch in das Innere der Phase (Sorbent) eindringen. Dringt das Sorptiv in die Volumenphase des Sorbenten ein und verteilt es sich dort homogen, dann spricht man von Absorption. Die Sorption beinhaltet sowohl die Adsorption an Ober- und Grenzflächen als auch die Absorption in einer festen oder flüssigen dreidimensionalen (bulk) Phase (Rügner, 1998). Nach Falbe und Regitz (1992) lässt sich der Sorptionsbegriff erweitern: Sorption ist ein Sammelbegriff für alle Vorgänge (z.B. Adsorption, Absorption, Ionenaustausch und Fällung), bei denen ein Stoff durch einen anderen mit ihm in Berührung stehenden Stoff selektiv aufgenommen (immobilisiert) wird.

Die Wechselwirkungen zwischen einer in einer flüssigen Phase gelösten Substanz und einem Boden können entweder physikalischer, chemischer oder biologischer Art sein. Zu den Ursachen für physikalische Wechselwirkungen zählen z.B. van-der-

Waals Kräfte. Dissoziation, Hydrolyse, REDOX - Reaktion, Komplexation sind typische Beispiele für chemische Wechselwirkungen. Bei Wechselwirkungen mit Pflanzen, Mikroorganismen und Tiere spricht man i.d.R. von biologischen Wechselwirkungen.

Die Adsorption ist das wichtigste Phasengleichgewichts-Phänomen wenn eine in einer wässrigen Lösung vorhandene Substanz mit einem Boden in Berührung kommt. Adsorptionsprozesse führen zu einer Anreicherung einer Chemikalie in den festen Bodenteilchen und in einer Verarmung der Chemikalie in der koexistierenden Lösung. Neben den Stoffeigenschaften der adsorbierenden Substanz bestimmt die Art und Zusammensetzung des Bodens das Sorptionsvermögen. Die ökologische Bedeutung der Adsorption liegt in ihrem Einfluss auf die Migrationsgeschwindigkeit einer Substanz durch eine Bodenschicht.

Unter dem Begriff Adsorptiv versteht man die freien, noch nicht adsorbierten Anteile eines Stoffes (Abb.2.2). Den adsorptionsaktiven Feststoff, an dem die Adsorption stattfindet, nennt man Adsorbens (Plural = Adsorbentien) z. B., Eurosoil. Die adsorbierten Teile des Adsorptivs heißen Adsorpt. Sie bilden zusammen mit der Oberfläche des Adsorbens das Adsorbat (Kümmel und Worch, 1990).

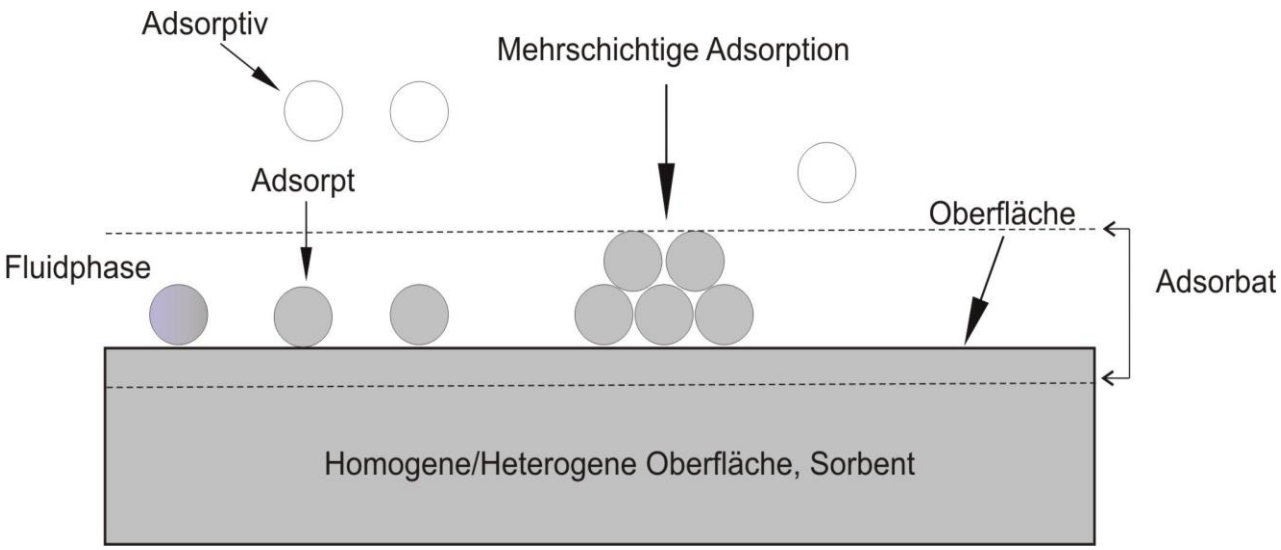

Abb. 2.2 Grundbegriffe der Adsorption an einem Festkörper nach Kümmel und Worch (1990).

Thermodynamische Gleichgewichtsbedingungen

Bei der Betrachtung des thermodynamischen Gleichgewichts zwischen einer flüssigen Phase (liq.) und einer sorbierten Phase (sorb.) muß man Annahmen über

die Dimension der sorbierten Phase treffen und dabei zwischen einer zwei-dimensionalen Phase (d.h einer Flächenphase) und einer drei-dimensionalen Phase (d.h. einer Volumenphase oder Bulk-Phase) unterscheiden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit interessiert insbesondere der Fall, bei dem das Adsorbat als Flächenphase angenähert wird (die thermodynamische Beschreibung unter der Annahme, dass das Adsorbat eine Volumenphase ist, entspricht einem flüssig-flüssig Gleichgewicht). Da flüssig-flüssig Gleichgewichte in Lehrbüchern ausführlich diskutiert werden, wird auf eine Behandlung an dieser Stelle verzichtet.

Im Fall des thermodynamischen Gleichgewichts zwischen Komponenten in einer flüssigen Phase und einer damit koexistierenden Adsorbatphase gilt das thermische Gleichgewicht (d.h die Temperatur T ist in beiden Phasen gleich):

$$T^{(liq)} = T^{(sorb)} \tag{1}$$

und das stoffliche Gleichgewicht für jede Komponente i, die in beiden Phasen auftritt:

$$\mu_i^{(liq)} = \mu_i^{(sorb)} \tag{2}$$

d.h. das chemische Potential μ_i einer Komponente i ist in der Flüssigkeit *(liq)* so groß wie im Adsorbat *(sorb)*. Das chemische Potential $\mu_i^{(liq)}$ einer Komponente i in einer flüssigen Phase hängt von der Temperatur, dem Druck und der Zusammensetzung der Phase ab. Bei nicht allzu hohem Drücken, darf der Einfluss des Drucks auf das chemische Potential in einem kondensierten Zustand vernachlässigt werden. Das chemische Potential $\mu_i^{(sorb)}$ einer Komponente i in einer zweidimensionalen Adsorbatphase hängt von der Temperatur, dem Spreizungsdruck (d.h. dem zweidimensionalen Druck- dem Drück in einer Flächenphase), dem Kraftfeld für die Bildung des Sorbenten (hier Boden) und der Zusammensetzung des Sorptivs ab. Vernachlässigt man in analoger Weise wie bei einer Volumenphase den Einfluss des Spreizungsdrucks auf das chemische Potential $\mu_i^{(sorb)}$ und führt man zur Beschreibung der chemischen Potentiale in beiden Phasen (unterschiedliche) Referenzzustände ein, so erhält man:

$$\begin{aligned} \mu_i^{(liq)} &= \mu_i(T)^{(ref,liq)} + RT \cdot \ln \cdot a_i^{(liq)} = \mu_i^{(sorb)} \\ &= \mu_i(T)^{(ref,sorb)} + RT \cdot \ln a_i^{(sorb)} \end{aligned} \tag{3}$$

Darin bedeuten: $\mu_i\ (T)^{(ref,\ liq)}$ und $\mu_i\ (T)^{(ref,\ sorb)}$ die chemischen Potentiale des Sorptivs i im jeweiligen Referenzzustand für die flüssige Phase bzw. das Adsorbat; *R* die universelle Gaskonstante und $a_i^{(liq)}$ bzw. $a_i^{(sorb)}$ die (thermodynamischen) Aktivitäten der Komponente i in den betrachteten Phasen. Verschiedene Referenzzustände –

also verschiedenen Terme für sowohl $\mu_i\ (T)^{(ref,\ liq)}$ als auch für $\mu_i\ (T)^{(ref,\ sorb)}$ - sind bei der Behandlung von Phasengleichgewichten bei der Adsorption üblich. Hier wird zunächst für jeden der beiden Referenzzustände ein Beispiel angegeben: Für die flüssige Phase wird dabei als Referenzzustand, die „pseudoreine“ flüssige Komponente i und als Konzentrationsmaß die Menge (Molzahl) des Sorptivs pro Kilogramm Lösungsmittel (Molalität m_i) gewählt. In diesem Referenzzustand erfährt das Sorptiv i die gleichen Wechselwirkungen wie bei einer Lösung in unendlicher Verdünnung im Lösungsmittel (hier Wasser). Der Referenzzustand für die Komponente i in der Adsorbatphase ist ebenfalls eine so genannte„ pseudoreine Komponente mit der Beladung (Menge (hier Molzahl) Sorptiv pro Mengeneinheit (z.B. Kilogramm) des Sorbenten) C_i. Als „pseudoreine Komponente“ der Adsorbatphase liegt die Komponente i in der Einheitskonzentration (d.h. z.B. ein Mol pro Kilogramm Boden) vor und erfährt dabei nur Wechselwirkungen vom Boden wie in unendlicher Verdünnung auf dem Boden und vom Lösungsmittel (d.h. hier von Wasser). Die thermodynamische Aktivität eines sich verteilenden Stoffes i wird als Produkt aus der Konzentration und dem Aktivitätskoeffizienten geschrieben:

$$a_i^{(liq)} = m_i \cdot \gamma_i^{(liq)} \tag{4}$$

$$a_i^{(sorb)} = C_i \cdot \gamma_i^{(sorb)} \tag{5}$$

Damit erhält man den so genannten Verteilungskoeffizienten $K_{i,\ B/W}$

$$K_{i,B/W}(T) = \frac{a_i^{(sorb)}}{a_i^{(liq)}} = \frac{C_i \cdot \gamma_i^{(sorb)}}{m_i \cdot \gamma_i^{(liq)}} = \exp \cdot \left(\frac{\mu_i(T)^{(ref,liq)} - \mu_i(T)^{(ref,sorb)}}{RT}\right) \tag{6}$$

Der Verteilungskoeffizient $K_{i,B/W}$ einer Komponente i ist für ein gegebenes Boden/Lösungsmittel (z.B. Boden/Wasser) System nur von der Temperatur abhängig. Nimmt man an, dass eine Komponente im realen Boden/Wasser System in beiden Phasen nur in geringer Konzentration vorliegt, dann sind die Wechselwirkungsunterschiede im Vergleich zum jeweiligen Referenzzustand gering (d.h $\gamma_i^{(liq)}$ = $\gamma_i^{(sorb)}$ = 1) und Gl. (6) vereinfacht sich zum so genannten Henryschen Gesetz der Adsorption (manchmal auch Henrysche Isotherme genannt):

$$K_{i,B/W}(T) = \frac{C_i}{m_i} \tag{7}$$

bzw.

$$\left(\frac{C_i}{C^{(0)}}\right) = K_{i,B/W}(T) \cdot \left(\frac{m_i}{m^{(0)}}\right) \tag{8}$$

$m^{(0)}$ – *Einheitsdimension von* m_i $\left(\frac{1molSorptiv}{1kgWasser}\right)$

$C^{(0)}$ – *Einheitsdimension von* C_i $\left(\frac{1mol.absorb}{1kgBoden}\right)$

2.3.1 Isothermengleichungen

Bei der experimentellen Untersuchung des Phasengleichgewichts bei der Adsorption bestimmt man die bei einer konstanten Temperatur pro Menge Sorbenten aus einer Flüssigkeit adsorbierte Menge einer Substanz. Dabei wird i.d.R. die Konzentration der zu adsorbierenden Substanz in der Flüssigkeit variiert (und die Zusammensetzung der Flüssigkeit ansonsten konstant gehalten). Man erhält dabei sogenannte „Isothermenverläufe“ (Abb.2.3). Zur Beschreibung der Adsorption aus einer wässrigen Lösung sind sowohl theoretisch fundierte als auch empirische Ansätze bekannt. Eine Übersicht darüber wurde z.B. von Kümmel und Worch (1990) gegeben. Einige dieser Ansätze werden auch bei der Sorption an/in einem Boden verwendet.

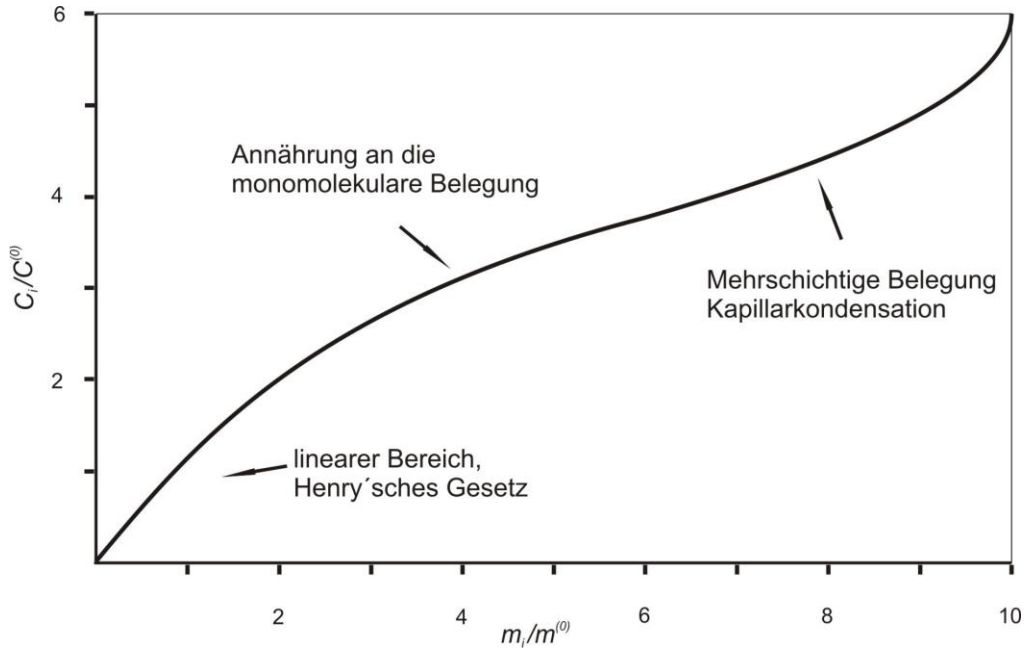

Abb. 2.3 Allgemeiner Verlauf eine Adsorptions-Isotherme (nach Rügner, 1998)

Am häufigsten werden die Isothermengleichungen nach Henry, Freundlich bzw. Langmuir verwendet. In der vorliegenden Arbeit werden zur Darstellung der

experimentellen Ergebnisse die Gleichungen von Henry bzw. von Freundlich herangezogen.

2.3.1.1 Isothermengleichung nach Henry

Bei der Gleichung nach Henry wird ein linearer Zusammenhang zwischen der Beladung und der Konzentration in der Lösung angenommen. Das gilt solange eine Komponente im realen Boden/Wasser System in beiden Phasen nur in geringer Konzentration vorliegt. Die sorbierte Menge eines Stoffes pro Mengeneinheit des Sorbenten (C_i) verhält sich demnach direkt proportional zur Molalität (m_i) des Sorptivs und ist nur vom so genannten Henry-Koeffizienten (K_H) abhängig:

$$K_H = \frac{C_i}{m_i} \tag{9}$$

bzw.

$$\left(\frac{C_i}{C^{(0)}}\right) = K_H \cdot \left(\frac{m_i}{m^{(0)}}\right) \tag{10}$$

Gawlik und Muntau (1999) geben folgende Definition von Henry-Verteilungskoeffizienten:

$$K_D = \left(\frac{x}{C_e}\right) \tag{11}$$

bzw.

$$K_D = \frac{\left(\frac{x}{x^{(0)}}\right)}{\left(\frac{C_e}{C_e^{(0)}}\right)} \tag{12}$$

mit *x- die Menge der sorbierter Substanz auf Boden (g/g)*

C_e- die Konzentration der Substanz in der Lösung (g/mL)

$x^{(0)}$- Einheitsdimension vom x $\left(\frac{1gSubst.}{1gBoden}\right)$

$C_e^{(0)}$- Einheitsdimension vom C_e $\left(\frac{1gSubst.}{1mLLös.}\right)$

In Gawlik und Muntau (1999) wurden einige Henry-Koeffizienten (K_D) für endokrine Stoffe/ Eurosoils aufgelistet (z.B. Anilin auf Eurosoil 3: K_D=2,6227; 4-Chloroanilin auf Eurosoil 4: K_D=1,901; N-Methylanilin auf Eurosoil 5: K_D=5,902).

2.3.1.2 Isothermengleichung nach Freundlich

Die so genannte Freundlich- Isotherme (Freundlich, 1906) ist das am häufigsten verwendete Modell zur Beschreibung der Sorption an einem Boden. Die Freundlich - Isotherme ist ein empirisch gefundener, zweiparametriger, exponentieller Zusammenhang zwischen der Beladung des Sorbenten (C_i) mit dem Sorptiv und der Molalität (m_i) des Sorptivs.

$$C_i = K_F \cdot m_i^{\frac{1}{n}} \tag{13}$$

bzw.

$$\left(\frac{C_i}{C^{(0)}}\right) = K_F \cdot \left(\frac{m_i}{m^{(0)}}\right)^{\left(\frac{1}{n}\right)} \tag{14}$$

oder nach Logarithmierung (Abb.2.4):

$$\log\left(\frac{C_i}{C^{(0)}}\right) = \log K_F + \left(\frac{1}{n}\right)\log\left(\frac{m_i}{m^{(0)}}\right) \tag{15}$$

K_F und n sind die für die Sorption charakteristischen Freundlich-Parameter des Sorptiv/Sorbent - Systems. Im Falle sehr niedrigen Konzentrationen (z.B. bei der Sorption organischer Substanzen aus wässrigen Lösungen an einem Sediment, nach dem Ablauf aus einer Kläranlage (z.B. bei der Bisphenol A liegt die Konzentration in der Lösung mit ca. 700 ng/l und im Sediment mit 190 µg/kg TS)) (Jurkutat und Kratz; 2000) vereinfacht sich diese Gleichung zur Henryschen Isothermen. Zur Bestimmung der Konstanten 1/n und K_F trägt man den Logarithmus der adsorbierten Menge eines gelösten Stoffes $\left(\frac{C_i}{C^{(0)}}\right)$ gegen den Logarithmus der Molalität des gelösten Stoffes $\left(\frac{m_i}{m^{(0)}}\right)$ auf (Abb.2.4).

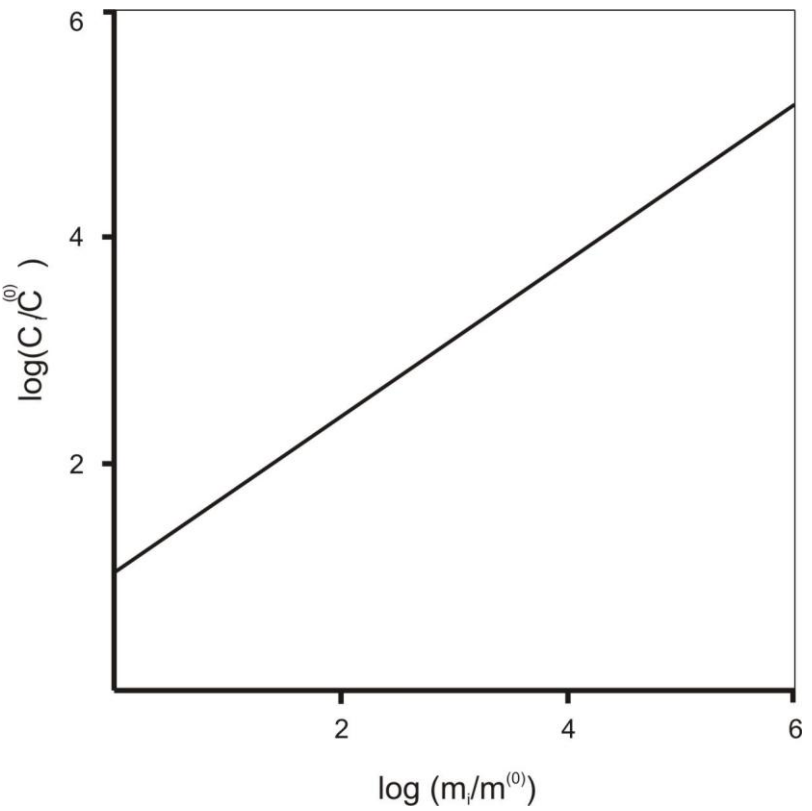

Abb. 2.4 Doppel-logarithmische Auftragung nach Freundlich

Der Vorteil einer solchen Auftragung ist, dass man aus einer Ausgleichgeraden durch die Messpunkten, die Konstanten 1/n und K_F in eine einfache Weise (Ordinatenabschnitt und der Steigung) erhält.

Bei Gawlik und Muntau (1999) wurde die Freundlich-Isotherme folgendermaßen definiert:

$$x = K_f \cdot C_e^{\frac{1}{n}} \tag{16}$$

bzw.

$$\left(\frac{x}{x^{(0)}}\right) = K_f \cdot \left(\frac{C_e}{C_e^{(0)}}\right)^{\left(\frac{1}{n}\right)} \tag{17}$$

mit *x- die Menge der adsorbierter Substanz auf dem Boden (g/g)*

C_e- die Konzentration der Substanz in der Lösung (g/mL)

n- Konstante

Eine Zusammenstellung von Freundlich-Verteilungskoeffizienten K_f für endokrine Stoffe auf Eurosoils, findet man bei Gawlik und Muntau (1999) (z.B. 2,4-D auf Eurosoil 3: K_f=1,04, 1/n=0,78; Methiocarb auf Eurosoil 4: K_f=4,24, 1/n=0,88; Atrazin auf Eurosoil 5 K_f=13,57, 1/n=0,97).

2.3.1.3 Isothermengleichung nach Langmuir

Langmuir (1918) hat eine physikalisch begründete Beziehung für die Adsorptionsisotherme abgeleitet. Er hat angenommen, dass alle Sorptionsplätze gleichwertig sind, nur eine monomolekulare Schicht entstehen kann und zwischen den adsorbierten Teilchen keine Kräfte auftreten.

$$\frac{\left(\frac{C_i}{C^{(0)}}\right)}{\left(\frac{C_{i,m}}{C^{(0)}}\right)} = \frac{\left(K_L \cdot \frac{m_i}{m^{(0)}}\right)}{\left(1 + K_L \cdot \frac{m_i}{m^{(0)}}\right)} \tag{18}$$

darin bedeuten C_i $\left(\frac{1mol}{kgBoden}\right)$ die Beladung des Sorbenten mit dem Sorptiv im Gleichgewicht; $C_{i,m}$ $\left(\frac{1mol}{kgBoden}\right)$ die maximale Beladung des Sorbenten mit dem Sorptiv und m_i die Molalität des Sorptivs in der umgebenden Phase (vgl. Kap.2.3). Der Verteilungskoeffizient K_L ist ein Maß für die Stärke der Bindung des Sorptivs an das Sorbent. Bei niedrigen Konzentrationen liefert die Gleichung (18) eine lineare Abhängigkeit der Beladung C_i von der Molalität m_i des Sorptivs. Deshalb entspricht K_L der Henryschen Konstanten. Bei hoher Molalität m_i des Sorptivs nähert sich die Beladung asymptotisch dem maximalen Beladung (dem Sorptionsmaximum $C_{i,m}$) – vgl. Abb.2.5.

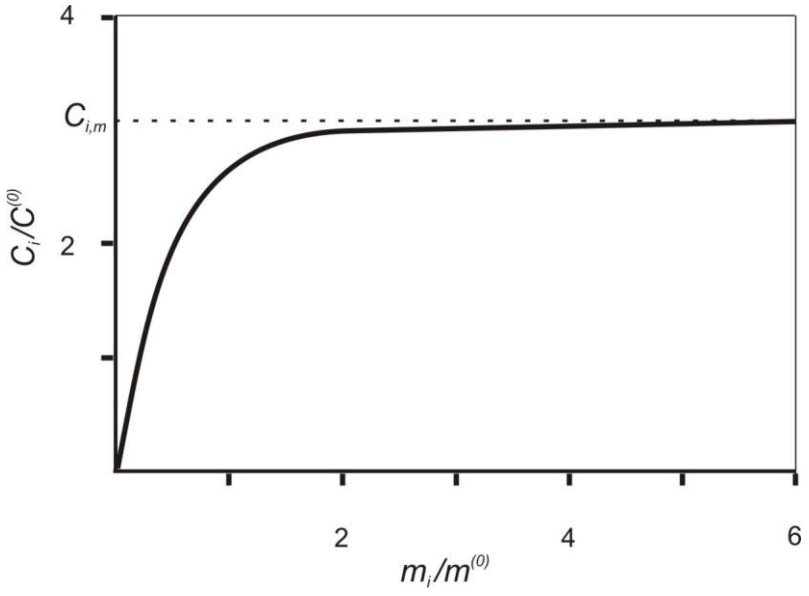

Abb. 2.5 Adsorptions- Isotherme nach Langmuir

2.3.2 Einfluss der Eigenschaften des Adsorptivs auf die Sorption

Je höher die thermodynamische Aktivität eines Sorptivs in der Flüssigkeit bzw. je geringer die thermodynamische Aktivität des Sorptivs im Sorbent ist, desto besser wird das Adsorptiv am Sorbent sorbiert. Einige wichtige Parameter, die diese beiden Aktivitäten beeinflussen, werden im folgenden Abschnitt diskutiert.

Dampfdruck und Henrysche Konstante (für die Löslichkeit eines Stoffes in Wasser)

Der Dampfdruck ist eine Maß für die Tendenz einer reinen Komponente aus dem flüssigen in den gasförmigen Zustand überzugehen. Er kann in erste Näherung auch verwendet werden, um die Neigung des Stoffes zum Entweichen aus einer flüssigen Phase zu beschreiben. Ein besseres Maß ist jedoch die Henrysche Konstante für die Löslichkeit eines Stoffes in einem Lösungsmittel, z.B. in Wasser. Die Henrysche Konstante kann als Produkt aus dem Dampfdruck und einem Aktivitätskoeffizienten geschrieben werden. Der Aktivitätskoeffizient beschreibt dabei die Unterschiede in den Wechselwirkungen zwischen Molekülen des gelösten Stoffes und Lösungsmittelmolekülen zu den Wechselwirkungen zwischen Molekülen des gelösten Stoffes im reinen, flüssigen Zustand.

Struktur, molekularer Aufbau, funktionelle Gruppen, Polarität

Der Dampfdruck wird wesentlich vom molekularen Aufbau einer Verbindung bestimmt. Zum Beispiel nimmt in einer homologen Reihe i.d.R. der Dampfdruck mit

zunehmender Molmasse ab. Analog dazu wird die Henrysche Konstante für die Löslichkeit eines Stoffes in einem Lösungsmittel vom molekularen Aufbau der beiden Stoffe bestimmt. Dabei gilt die Faustregel „Gleiches löst sich in Gleichem“. Funktionelle Gruppen (z.B. aliphatische, aromatische, saure, basische, amphotere Gruppen) haben einen großen Einfluss auf das Sorptionsverhalten. Auch die Kombination mehrerer funktioneller Gruppen in einem Stoff kann einen wichtigen Einfluss besitzen. Gawilk (1997) erwähnt, dass ein Stoff, der sowohl eine n- Aryl- als auch eine n- Alkylgruppe enthält, i.d.R. weniger von einem Boden sorbiert wird, als ein Stoff, der nur eine der beiden funktionellen Gruppen enthält. Weiterhin schreibt Gawlik (1997), dass mit zunehmender Länge einer Alkylkette sowie durch den Einbau chlorhaltiger Gruppen als Bestandteil eines Arylsubstituenten (z.B. durch Bildung der Chlor- oder Chlorphenoxygruppe) die Sorption an einem Boden zunimmt. Zur Kennzeichnung der molekularen Struktur wird häufig die Ladungsverteilung im Molekül – üblicherweise mit Hilfe der Polarität angenähert – benutzt. Unter Polarität bezeichnet man in der Chemie (www.chemie.de/lexikon) eine durch Ladungsverschiebung in Atomgruppen entstandene Bildung von getrennten Ladungsschwerpunkten in einem nach außen neutralem Molekül. Dadurch kommt es zur Bildung von elektrischen Dipolen und Multipolen. Wechselwirkungen zwischen solchen permanenten Di- und Multipolen sind i.d.R. stärker als Dispersionswechselwirkungen (d.h. Wechselwirkungen zwischen induzierten Dipolen, die auch als van-der Waals-Wechselwirkungen bezeichnet werden). Treten solche Wechselwirkungen zwischen einem gelösten Stoff und einem Lösungsmittel auf, dann reduziert sich die thermodynamische Aktivität des gelösten Stoffes im Lösungsmittel und damit seine Neigung zur Sorption an einem Boden.

Säure- /Base-Eigenschaften; pH-Wert

In hoher Verdünnung in Wasser entspricht die Dissoziationskonstante einer Säure K_a bzw. die Protonierungskonstante einer Base K_b dem pH-Wert bei dem die Hälfte der Säuremoleküle dissoziiert ist bzw. die Hälfte der Moleküle der Base protoniert ist Anstelle der Dissoziationskonstanten bzw. der Protonierungskonstanten verwendet man üblicherweise den pK_a- bzw. pK_b-Wert, wobei $pK_a = -\log K_a$ bzw. $pK_b = -\log K_b$ ist. Je stärker die Säure, umso größer ist K_a (umso kleiner ist der pK_a –Wert). Der analoge Zusammenhang gilt für die Base. Da i.d.R. die neutrale Form einer

Verbindung an einem Boden sorbiert wird, werden organische Verbindungen, die eine Säuregruppe enthalten, bei niedrigem pH-Wert, organische Verbindungen, die eine basische Gruppe enthalten bei hohen pH-Werten aus einer wässrigen Lösung von einem Boden gut sorbiert. Verschiedene Autoren (z. B. Bailey at al. (1968), Hayes and Himes, in Gawlik, 1986) zeigten, dass die entsprechenden chemischen Gleichgewichtskonstanten in erster Näherung zur Abschätzung des Sorptionsverhalten verwendet werden können.

Wasserlöslichkeit und Lipophilie

Die Sorptionsfähigkeit einer organischen Substanz ist eng verknüpft mit der Wasserlöslichkeit und der Lipophilie. Je größer die Wasserlöslichkeit einer Verbindung desto größer ist i.d.R. die Beladung eines Bodens – dies zeigen schon die Gleichungen für die Sorptionsisotherme. Zur Beurteilung der Lipophilie verwendet man üblicherweise den Verteilungskoeffizienten eines Stoffes zwischen n-Oktanol und Wasser, den so genannten Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizienten. Der *Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizient* $K_{o/w}$ ist definiert als ein dimensionsloser Wert der angibt, ob ein Stoff eher fett- oder wasserlöslich ist. Je höher der Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizient ist, umso größer ist die Tendenz eines Stoffes, sich in Fett anzureichen (Goss, 2003).

Der $K_{O/W}$ – *Verteilungskoeffizient* ist das Verhältnis der Konzentration des Stoffes in den beiden (nicht mischbaren) Phasen bei einer vorgegebenen Temperatur im Gleichgewicht.

$$K_{O/W} = \frac{C_{\text{oktanol}}}{C_{Wasser}} \tag{19}$$

C_{oktanol} – Konzentration der Substanz in n-Oktanol (g/g)

C_{wasser} – Konzentration der Substanz in Wasser (g/g)

Dieser Verteilungskoeffizient ist für eine große Anzahl von Stoffen aus experimentellen Untersuchungen bekannt. Darüber hinaus existieren mehrere Methoden zur Abschätzung aus charakteristischen (entweder experimentell oder mit quantenchemischen Rechnungen bestimmten) molekularen Daten (z. B. Leo und Hansch, 1979; Eisfeld und Maurer, 1999). Für Abschätzungen geht man davon aus, dass die von einer bestimmten Bodenmenge sorbierte Menge eines Stoffes

proportional zu seinem Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizienten und zu Konzentration des Stoffes in der wässrigen Lösung ist.

Die Sorption von Chemikalien an/in Böden wird natürlich entscheidend durch Wechselwirkungen zwischen der Chemikalie und dem Boden bestimmt. Deshalb wird im nächsten Abschnitt auf wichtige charakteristische Eigenschaften eines Bodens eingegangen.

2.3.3 Einfluss der Parameter eines Bodens auf die Sorption

Ein Boden ist ein poröser Körper. Die Matrix besteht aus Mineralien, organischer Substanz, Wurzeln und Bodenorganismen. Der Porenraum ist teilweise mit einer gasförmigen Phase (der Bodenluft), teilweise auch mit einer wässrigen Phase (der Bodenlösung) gefüllt. An den Grenzflächen zwischen Fest-, Gas-, und Lösungsphase finden physikalisch-chemische Vorgänge statt, die das Verhalten vieler Stoffe im Boden und ihre Bewegung in Ökosystemen bestimmen (Scheffer und Schachtschabel; 2002). Für diese Vorgänge spielen einige, für einen Boden charakteristische Größen eine bedeutende Rolle.

Gehalt an organischer Substanz

Zur organischen Substanz (auch Humusgehalt genannt) eines Bodens zählen alle abgestorbenen pflanzlichen und tierischen Stoffen sowie deren Umwandlungsprodukte. Man unterteilt nach dem Grad ihrer Umwandlung die organischen Substanzen in schwach umgewandelte Stoffe (Streustoffe) und stark umgewandelte Stoffe (Huminstoffe). Der Gehalt an organischer Substanz eines Bodens hängt vom Horizont ab (Scheffer und Schachtschabel, 2002). Er unterliegt außerdem einem jahreszeitlichen Rhythmus. Der Humusgehalt verschiedener Böden unterscheidet sich oftmals stark. Die Adsorption organischer Chemikalien an einem Boden erfolgt vor allem durch die organische Substanz des Bodens, sodass bei den meisten Chemikalien eine Korrelation zwischen der adsorbierten Menge (bzw. der Freundlich-Konstanten K_F (vgl. Kap. 2.3.1.2) oder der Henryschen Konstanten K_H (vgl. Kap.2.3.1.1)) einerseits und dem Gehalt an organischem Kohlenstoff C_{org} andererseits besteht (Gawilk und Muntau, 1999). Deshalb wird zur besseren Vergleichbarkeit häufig der K_F – Werte bzw. K_H – Werte eines Sorptivs auf den jeweiligen Gehalt des Bodens an organischem Kohlenstoff bezogen und als K_{OC} - Wert angegeben.

$$K_{OC} = \frac{K_F bzw. K_H}{C_{org.}(\%)} \cdot 100 \qquad (20)$$

Bodenart und Tonminerale

Tonminerale sind Verwitterungsprodukte und daraus folgende Umwandlungsprodukte primärer Silicate, insbesondere von Schichtsilikaten. Unter den Schichtsilicaten sind die beiden Glimmer Muskovit und Biotit sowie die Chlorite (grüngefärbte Phyllosilicate) für die Bildung der Tonminerale am wichtigsten. Die bei der Verwitterung vom Gestein zum Boden entstandenen oder aus ihm stammenden Tonminerale können sich umwandeln, weil sich bei fortschreitender Verwitterung die Bedingungen ändern. So nimmt z.B. in Böden humider Gebiete der Versauerungsgrad mit der Zeit zu (Scheffer und Schachtschabel, 2002). Dabei ändert sich auch der pH-Wert des Bodens. Die Bodeneigenschaften variieren von extrem kalkhaltigen und kohlenstoffarmen Böden (pH>9) über tonreiche Ackerböden bis zu Wald- oder Moorböden (pH<3) (Gawlik, 1997).

pH-Wert

Die Bodenacidität beruht auf dem Gehalt der Böden an gelösten und in fester Form vorhandener Säuren, von denen Hydrogenionen dissoziieren und in der Bodenlösung auftreten. Die wichtigsten Säuren in der Bodenlösung sind neben der Kohlensäure, die starke Säuren Schwefelsäure und Salpetersäure sowie organische Säuren. Aus der Bodenlösung können neutrale sowie ionische Teilchen sorbiert werden. Die Sorption von Kationen nimmt mit steigendem pH-Wert (Umwandlung von Kationen in neutrale Spezies) zu, umgekehrt nimmt die Sorption der Anionen mit sinkendem pH-Wert ab. Außerdem hat die Salzkonzentration der Bodenlösung einen Einfluß auf das Sorptionsverhalten. In der Regel nimmt mit steigender Salzkonzentration die Sorption zu - man beobachtet den aus anderen Phasengleichgewichtsphänomenen bekannten „Aussalzeffekt“. Die maximale Sorption einer dissozziier- bzw. protonierbaren Substanz soll nach Gawlik (1997) bei pH-Werten in der in der Nähe des pK_a- bzw. pK_b- Wertes (vgl. Kap.2.3.2) stattfinden.

Die spezifische Oberfläche eines Bodens

Wenn bei der Sorption die Adsorption dominiert, ist die spezifische Oberfläche eines Bodens eine entscheidende Größe. Als Oberfläche eines Bodens bezeichnet man die Summe aller Grenzflächen fest-flüssig und fest-gasförmig. Die auf die Masseneinheit eines Bodens bezogene Oberfläche nennt man die spezifische

Oberfläche. In Abhängigkeit von Korngröße, Mineralzusammensetzung und Gehalt an organischer Substanz liegt die spezifische Oberfläche von Böden im Bereich von wenigen m^2/g und etwa 500 m^2/g. Sie nimmt mit dem Gehalt an Ton, aufweitbaren Mineralen und organischer Substanz im Boden zu (Scheffer und Schachtschabel, 2002). Die Größe der spezifischen Oberfläche hängt auch von der Größe und der Form (und deren Verteilungen) der Partikel ab, aus denen ein Boden besteht. Die spezifische Oberfläche nimmt dabei mit zunehmender Teilchengröße ab. Sie beträgt bei einer grobkörnigen Sandfraktion weniger als 0,1 m^2/g, bei Schlufffraktion zwischen etwa (0,1 und 1) m^2/g und bei (den feinkörnigen) Tonfraktionen etwa (5 bis 500) m^2/g. Weiterhin muss beachtet werden, dass die Partikel eines Bodens häufig auch eine „innere“ Oberfläche besitzen. Bailey und White (1970) schreiben, dass die Wirkung solcher innerer Oberflächen bei Tonmineralien überwiegt. Dann kann die Zugänglichkeit solcher innerer Oberflächen (z.B. durch Porengröße und Porenlänge bestimmt) eine große Rolle bei der Adsorption spielen. Tonmineralien enthalten innere Oberflächen in lamellaren Strukturen. Wenn die Adsorption durch die Bildung von Oberflächenkomplexen (d.h. durch chemische Reaktionen) wesentlich beeinflusst wird, dann spielt die Thermodynamik der Bildung der Komplexe eine Rolle. Diese wird wiederum durch lokale elektrische Ladungen an den inneren Oberflächen beeinflusst. Der Ladungsausgleich wird durch den Wassergehalt im Raum zwischen den inneren Oberflächen bestimmt. Experimentelle Untersuchungen zur Adsorption von Parathion belegen, dass die Sorption (die durch Kation- und Dipolbindung wesentlich bestimmt wird) an trockenen Böden stärker ist als an feuchten Böden – dort dominiert bei der Adsorption die Bindung infolge von Wasserstoffbrücken (Yaron und Saltzman, 1979).

Temperatureinfluss

Die Temperatur hat auf die Sorptionseigenschaften eines Bodens einen Einfluss, da einerseits mit steigender Temperatur der mikrobielle Abbau der organischen Substanz sich beschleunigt und andererseits, die Wechselwirkungen zwischen Boden und Sorptiv sich verändern. Der Einfluss auf den mikrobiellen Abbau wird hier nicht weiter diskutiert, da davon ausgegangen wird, dass die in der vorliegenden Arbeit untersuchten Böden im thermodynamischen Gleichgewicht vorliegen, d.h. der mikrobielle Abbau zum Stillstand gekommen ist. Bei der Sorption wird, wie bei jedem Phasengleichgewicht, der Einfluss der Temperatur auf die Wechselwirkungen in einer

Mischphase über den Einfluss der Temperatur auf das chemischen Potentials μ_i des Sorptivs i in der Adsorbatphase und in der damit koexistierenden Flüssigkeit ausgedrückt (vgl. Gl.6):

Ausgehend von Gleichung (6),

$$K_{i,B/W} = \frac{a_i^{(sorb)}}{a_i^{(liq)}} = \frac{\left(\frac{C_i}{C^{(0)}}\right) \cdot \gamma_i^{(sorb)}}{\left(\frac{m_i}{m^{(0)}}\right) \cdot \gamma_i^{(liq)}} = \exp\left[\frac{(\mu_i(T)^{(ref,liq)} - \mu_i(T)^{(ref,sorb)})}{RT}\right]$$

erhält man:

$$K_{i,B/W} = K^*_{i,B/W} \cdot \frac{\gamma_i^{(sorb)}}{\gamma_i^{(liq)}} = \exp\left[\frac{(\mu_i(T)^{(ref,liq)} - \mu_i(T)^{(ref,sorb)})}{RT}\right] \tag{21}$$

mit

$$K^*_{i,B/W} = \left[\frac{\left(\frac{C_i}{C^{(0)}}\right)}{\left(\frac{m_i}{m^{(0)}}\right)}\right] \tag{22}$$

Daraus folgt,

$$K^*_{i,B/W} = \exp\left[\frac{(\mu_i(T)^{(ref,liq)} - \mu_i(T)^{(ref,sorb)})}{RT}\right] \cdot \frac{\gamma_i^{(liq)}}{\gamma_i^{(sorb)}} \tag{23}$$

bzw.

$$\ln K^*_{i,B/W} = \left[\frac{(\mu_i(T)^{(ref,liq)} - \mu_i(T)^{(ref,sorb)})}{RT}\right] \cdot \ln\left(\frac{\gamma_i^{(liq)}}{\gamma_i^{(sorb)}}\right) \tag{24}$$

Entsprechend der allgemeingültigen thermodynamischen Beziehung

$$\left(\frac{\partial \frac{\mu_i}{RT}}{\partial T}\right)_{p,n_j} = -\frac{h_i}{RT^2} \tag{25}$$

die den Einfluss der Temperatur auf das chemische Potential mit Hilfe der partiellen molaren Enthalpie der Komponenten i, h_i, beschreibt, erhält man für den Einfluss der Temperatur auf den Verteilungskoeffizienten $K_{i,B/W}$:

$$\left(\frac{\partial \ln K_{i,B/W}}{\partial T}\right)_j = - \frac{(h_i^{(ref,liq)} - h_i^{(ref,sorb)})}{RT^2} \qquad (26)$$

Darin bedeuten $h_i^{(ref,liq)}$ (gleich $h_i^{(liq)}$) bzw. $h_i^{(ref,sorb)}$ (gleich $h_i^{(sorb)}$) bei der Vernachlässigung des Exzessbeitrages die partiellen molaren Enthalpien der Komponente i in der flüssigen Phase bzw. in der Adsorbatphase.

Da die Enthalpieänderung direkt mit der Wärmetönung bei der Sorption verknüpft ist, folgt daraus, dass die Wärmetönung bei der Sorption den Einfluss der Temperatur auf den Verteilungskoeffizienten $K_{i,B/W}$ bestimmt. Erfolgt die Sorption exotherm (d.h. $h_i^{(liq)} > h_i^{(sorb)}$), dann nimmt dieser Verteilungskoeffizient mit steigender Temperatur ab; ist diese Wärmetönung endotherm (d.h. $h_i^{(liq)} < h_i^{(sorb)}$), dann nimmt der Verteilungskoeffizient mit steigender Temperatur zu.
Eine andere (ähnliche) Interpretation erhält man ausgehend von:

$$\begin{aligned} RT \cdot \ln \cdot K_{i,B/W}(T) &= \mu_i(T)^{(ref,liq)} - \mu_i(T)^{(ref,sorb)} \\ &= \Delta\mu_i^{ref,(sorb)\to(liq)} \end{aligned} \qquad (27)$$

Da das chemische Potential einer Komponente μ_i mit seiner partiellen molaren Enthalpie h_i und seiner partiellen molaren Entropie s_i über

$$\mu_i = h_i - T \cdot s_i \qquad (28)$$

verknüpft ist, erhält man:

$$RT \cdot \ln \cdot K_{i,B/W}(T) = \Delta h_i^{ref,(sorb)\to(liq)} - T \cdot \Delta s_i^{ref,(sorb)\to(liq)} \quad . \qquad (29)$$

Ist die Enthalpieänderung beim Übergang aus der flüssigen Phase in das Sorbent gering und dominiert die Entropieänderung, so spricht man von einem entropie-getriebenen Prozess. Ein solches Verhalten wird bei der Sorption hydrophober Verbindungen an Böden beobachtet. Dabei ist der Einfluss der Temperatur auf den Verteilungskoeffizienten gering. Überwiegen dagegen enthalpische Effekte die

entropischen Effekte, (z.B. bei der Sorption polarer Substanzen an Böden) so spricht man von einer enthalpiegetriebenen Sorption. In der Literatur wird in solchen Fällen überwiegend von einer Abnahme des Verteilungskoeffizienten mit steigender Temperatur berichtet (d.h. die Sorption erfolgt exotherm).

Sorptionskinetik

Die Kinetik hat auf das Gleichgewicht keinen Einfluss. Deshalb wird sie auch in der vorliegenden Arbeit nicht weiter betrachtet. Jedoch ist die Sorptionskinetik für die Ausbreitung eines Schadstoffes in der Umgebung und für die zur Einstellung des Gleichgewichts bei der Sorption an Böden erforderliche Zeit, wichtig.

Zahlreiche Autoren (siehe z.B., OECD, 2000) geben an, dass in Batchexperimenten mit Böden etwa 16 bis 24 Stunden ausreichend sind, um den Gleichgewichtszustand bei der Sorption organischer Substanzen zu erreichen.

2.4 Experimentelle Methoden zur Bestimmung von Verteilungskoeffizienten

Zur experimentellen Bestimmung von Verteilungskoeffizienten in Boden/Wasser Systemen werden entweder „direkte“ oder „indirekte“ Verfahren verwendet. Bei den „direkten“ Methoden wird unmittelbar die Verteilung eines Stoffes auf ein Boden/Wasser System bestimmt. Bei den „indirekten“ Methoden, werden mit den zu untersuchenden Stoffen Experimente durchgeführt, aus deren Ergebnissen mit Hilfe von (mehr oder weniger empirischen) Korrelationsgleichungen der gesuchte Verteilungskoeffizient bestimmt wird. Die wichtigsten „direkten“ und „indirekten“ Methoden werden in den nächsten Kapiteln vorgestellt.

2.4.1 Direkte Methoden

Ein Überblick über experimentelle Methoden zur Bestimmung des Verteilungskoeffizienten auf ein Boden/Wasser System wurde von Delle Site (2001) gegeben. Die folgenden Ausführungen beziehen sich im Wesentlichen auf diese Zusammenstellung.

- *Schüttelkolbenmethode (Batch equilibration, Shake- flask)*
  Die Schüttelkolbenmethode ist die klassische Methode zur Bestimmung von Verteilungskoeffizienten. Ein standardisiertes Verfahren ist in der OECD-

Prüfrichtlinie 106 (OECD, 2000) beschrieben. Bei diesem Verfahren wird zu einer wässrigen Lösung, welche die zu untersuchende Substanz in einer bekannten Konzentration enthält, eine ebenfalls genau bekannte Menge des interessierenden Bodens gegeben und bei konstanter Temperatur durch Schütteln ins Gleichgewicht gebracht. Danach wird der Boden von der koexistierenden wässrigen Lösung getrennt. Die wässrige Lösung wird analysiert und aus einer Mengenbilanz die vom Boden sorbierte Menge des Sorptivs bestimmt (Fischer, 1999). Wesentlich für den Erfolg dieser Methode ist eine auf den Verteilungskoeffizienten des Sorptivs abgestimmte Konzentration des Sorptivs in der Ausgangslösung und/bzw. ein abgestimmtes Verhältnis der Menge an Boden zur Menge an wässriger Lösung (DeBruijn et al., 1989; Grover und Hance, 1970, O'Connor and Connolly, 1980). Messfehler können u. a. durch Adsorption des Sorptivs an den Gefäßwänden, und insbesondere bei flüchtigeren Verbindungen durch Verdunstung entstehen.

- *ESS- Methode (Equilibrium Soil Solution)*

  Die ESS Methode ist in der Literatur nur grob beschrieben.

  Die Konzentration des gelösten Stoffes im Wasserextrakt hängt von dem Boden/Lösung Verhältnis ab. Die Extraktion - ist ein physikalisches Stofftrennverfahren, bei dem mit Hilfe eines *Extraktionsmittels* (ein *Lösemittel*, gegebenenfalls erwärmt) eine Komponente aus einem festen oder flüssigen Stoffgemisch gelöst wird. Im ersten Schritt wird eine einfache Wasserextraktion durchgeführt. Danach wird eine Lösung (z.B. $CaCl_2$-Lösung) zusammen mit dem Boden geschüttelt um die natürlichen Boden - Verhältnisse zu imitieren. Dieser Schritt wird solange wiederholt bis kein signifikanter Austausch mehr zwischen dem Boden und der Lösung nachweisbar ist. Das heißt, das Gleichgewicht wurde erreicht. Nach der Erfahrung von Matschonat und Vogt (1996) sollen vier Schritte ausreichen, um der Gleichgewichtszustand zu erreichen. Die ESS- Methode kann für landwirtschaftlich genutzte Böden mit befriedigen Resultaten eingesetzt werden (Strandberg und Fortkamp, 2005).

- *Column leaching/equilibrium*

  Bei dieser Methode wird ein dünnes Rohr (*Kolonne bzw. Säule*) mit dem zu untersuchenden Boden befüllt und eine wässrige Lösung des Sorptivs auf ein

Ende der Säule aufgegeben bis es zum Durchbruch (*breakthrough*) des Sorptivs am anderen Säulenende kommt. Die eluierte Lösung wird aufgefangen. Aus dem Eluat werden Proben entnommen, analysiert und so der Durchbruch festgestellt. Aus der Anfangskonzentration des Sorptivs in der wässrigen Lösung, der Bodenmenge in der Säule und der bis zum Durchbruch eluierten Wassermenge wird die Beladung des Bodens im thermodynamischen Gleichgewicht bestimmt.

Aus der Analyse der eluierten Flüssigkeit kann man auch feststellen, ob durch das Sorptiv andere sorbierte Stoffe verdrängt werden d. h., ob vom Boden Stoffe desorbiert werden. Nachteilig ist der vergleichsweise hohe zeitliche Aufwand solcher Messungen. In der Literatur wird der typische Zeitbedarf mit mehreren Wochen angegeben (Strandberg und Fortkamp, 2005).

- *Zentrifugale Extraktion*

  Eine Anlage für eine zentrifugale Extraktion besteht aus einem senkrecht stehenden Behälter der in zwei Kammern geteilt ist. Der nasse Boden wird im oberen Teil des Behälters aufbewahrt und mit der unteren Kammer über ein ca. 0,5 mm großes Loch verbunden. Dann wird zentrifugiert wobei sich das Wasser in der unteren Kammer ansammelt und der Boden in der oberen Kammer verbleibt (Strandberg und Fortkamp, 2005).

  Entscheidend für diese Methode sind die Zentrifugationszeit und die Zentrifugationsgeschwindigkeit. Grieve (1996) beschreibt ein Experiment bei dem mit 1000 Umdrehungen pro Minute zentrifugiert wurde. Dabei wurde 80% Bodenwasser nach 30 Minuten und 90% nach 1 Stunde extrahiert. Zentrifugationsgeschwindigkeiten über 3000 g (ca. 4000 U/min) führten zu einer künstlichen Zunahme des gelösten organischen Kohlenstoffs die durch den Bruch von Biota- Masse verursacht wurde (Ross und Barlett, 1990, Zabrowski, 1989).

- *In situ batch method*

  Bei diese Methode wird eine feuchte Bodenprobe aus ihrer natürlichen Umgebung entnommen, durch Zentrifugieren das Bodenwasser entfernt und anschließend die vom Boden sorbierten bzw. im Bodenwasser enthaltenen Sorptive analysiert. Daraus wird die Verteilung der Sorptive auf das Boden/Bodenwasser-System bestimmt.

Neben den zuvor erwähnten Methoden, die darauf zielen, das thermodynamische Gleichgewicht zu bestimmen, sind auch andere Methoden üblich, die primär Informationen zur Kinetik der Sorption liefern. Die beiden wichtigsten Methoden beinhalten Untersuchungen zur Diffusion eines Sorptivs in einem Boden und zur Entfernung von Stoffen aus einem Boden durch Dialyse (vgl. Delle Site, 2001).

2.4.2 Indirekte Methoden

Bei den indirekten Methoden wird die Verteilung eines Stoffes auf eine wässrige Phase und eine stationäre, chromatographische Phase bestimmt. Aus den Ergebnissen wird unter Verwendung (aus anderen Untersuchungen bekannter) Verteilungskoeffizienten zwischen Sorptiv/Boden eine Korrelation für den Verteilungskoeffizient erstellt. Dabei geht man davon aus, dass mit geeigneten stationären Phasen das chromatographische Experiment schneller und genauer durchgeführt werden kann, als mit dem Boden selbst. Die daraus basierenden Korrelationsmethoden setzen voraus, dass die Sorption auf dem chromatographischen Material durch dieselben physikalisch/chemischen Effekte wie die Sorption auf dem Boden bestimmt wird. Häufig werden chromatographische Materialien, die für die Reverse - Phase (RP) HPLC entwickelt worden sind (z. B. Octadecylsilikat-Säulen), als stationäre Phasen eingesetzt.

Bei solchen HPLC- Experimenten wird die Retentionszeit t_{Ri} des interessierenden Sorptivs in einer chromatographischen Säule gemessen und mit Hilfe der Retentionszeit t_0 eines schlecht sorbierenden Stoffes der so genannte Kapazitätsfaktor des Stoffes i, $k_i^{'}$ berechnet:

$$k_i^{'} = (\frac{t_{Ri} - t_0}{t_0}) \qquad (30)$$

Es wird angenommen, dass der Verteilungskoeffizient $K_{i,B/W}$ (vgl. Kap. 2.3) des Sorptivs i im Boden/Wasser System mit dem Kapazitätsfaktor $k_i^{'}$, durch folgende empirische Gleichung korreliert ist:

$$\log K_{i,B/W} = a + b \cdot \log k_i^{'} \qquad (31)$$

Erfahrungsgemäß hängen die beiden Korrelationsparameter a und b vom chromatographischen Säulenmaterial und dem interessierenden Boden ab. Sie können aber auch von der chemischen Natur der Stoffgruppe des Sorptivs i abhängen. Deswegen verwendet man solche *indirekten* Methoden i.d.R. nur für

Abschätzungen (man bezeichnet sie auch als „screening methods“). Einen Überblick über indirekte Methoden haben z.B. Gawlik et al. (1999) gegeben.

Die Sorption eines Stoffes an einem Boden wurde in der vorliegenden Arbeit mit zwei Methoden bestimmt. Im Mittelpunkt der Untersuchungen stand dabei die Bestimmung der Verteilung mit Hilfe der HPLC Methode, wobei das Säulenmaterial aus dem jeweils zu untersuchenden Boden bestand. Darüber hinaus und zu Kontrollzwecken wurde die Verteilung auch mit der Schüttelkolbenmethode bestimmt.

Die Grundlagen die Schüttelkolbenmethode sind in der OECD Prüfrichtlinie 106 (OECD, 2000) beschrieben. Gawlik (1997) hat nach dieser Richtlinie zahlreiche Verteilungskoeffizienten endokriner Stoffe in Eurosoil/Wasser Systemen ermittelt. Der Aufwand zur Durchführung solcher Untersuchungen ist vergleichsweise hoch. Deshalb sollte in der vorliegenden Arbeit der Einsatz der „direkten“ HPLC- Methode (die einen wesentlich geringeren Aufwand erfordert, da sie auf Analysen verzichtet) auf ihre Eignung zur Bestimmung von Verteilungskoeffizienten in Boden/Wasser Systemen untersucht werden. Bei dieser Methode wird eine chromatographische Säule mit dem zu untersuchenden Boden (Eurosoil) befüllt und die Retentionszeit eines zu verteilenden Stoffes gemessen und daraus der Verteilungskoeffizient bestimmt. In der Literatur gibt es wenige Hinweise auf ähnliche Arbeiten (z.B. Bi; 2006; Rongbo et al., 2003).
Beide Methoden werden in den folgenden Abschnitten vorgestellt.

3 Experimentelle Untersuchungen

3.1 Einführung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit bestand darin, in experimentellen Untersuchungen zu überprüfen, ob mit der HPLC unter Verwendung des jeweils interessierenden Bodens als Trennsäule, ein zuverlässiges Messverfahren zur Bestimmung des Boden/Wasser- Verteilungskoeffizienten geschaffen werden kann. Wegen des strengen Zusammenhangs zwischen Verteilungskoeffizient und chromatographischer Retentionszeit, kann diese Technik als „direkte“ Meßmethode bezeichnet werden. Im Vergleich zur Schüttelkolbenmethode ist eine „direkte“ HPLC-Methode schneller und weniger aufwändig. Sie kommt mit deutlich geringeren

Mengen des zu verteilenden Stoffes aus. Sie erfordert nur die Bestimmung der Retentionszeit, verzichtet auf aufwändige Analysen zur Bestimmung der Konzentrationen des sich verteilenden Stoffes auf den Boden und die mit dem Boden koexistierende wässrige Phase. Sie wird jedoch dann versagen, wenn die Sorption so langsam verläuft, dass während des HPLC Experiments kein Gleichgewicht zwischen den koexistierenden Phasen erreicht wird. Dies könnte z.B. dann der Fall sein, wenn nicht nur die Oberflächen und oberflächennahe Schichten des Bodens (in einer Trennsäule), sondern auch die Volumenphase des Bodens am Sorptionsprozess wesentlich beteiligt ist. In diesem Zusammenhang weist z.B. Delle Site (2001) darauf hin, dass, die Kinetiken beim Schüttelkolbenversuch schneller ablaufen als beim HPLC- Versuch. Er begründet dies damit, dass bei den Schüttelkolbenversuchen ein besserer Stofftransport (durch die stärkere Relativbewegung zwischen wässriger Lösung und Boden) vorhanden ist und auch das Mengenverhältnis Boden/Lösung bei der Schüttelkolbenmethode größer ist. Andere Autoren (Garcia- Valcárcel et al. 2000) zweifeln die Vergleichbarkeit der Ergebnisse aus beiden Methoden u.a. auch deshalb an, weil es sich bei der Schüttelkolbenmethode um ein „geschlossenes, statisches System“ und bei der HPLC- Methode um ein „dynamisches und offenes System“ handelt.

3.2 Ausgewählte Stoffe

In der vorliegenden Arbeit werden zwei Gruppen von Chemikalien betrachtet: *Pflanzenschutzmitteln* und *Industriechemikalien*.

Pflanzenschutzmittel (Pestizide) sind biologisch aktive Verbindungen. Je nach Verwendung unterscheidet man zwischen Herbiziden (gegen Unkraut, z.B. Amitrol), Insektiziden (gegen Insekten, z.B. Diazinon), Nematiziden (gegen Fadenwürmer z.B. Metam-Natrium), Fungiziden (gegen Pilze, z.B. Vinclozolin) und Molluskiziden (gegen Schnecken z.B. Methiocarb).

Der Beginn der Ära der synthetisch-organischen Pestizide datiert ins Jahr 1939, als die insektiziden Eigenschaften des Dichlordiphenyltrichlorethans (DDT) entdeckt wurden. In Verbindung mit der Entwicklung einer intensiven Landwirtschaft wurden zahlreiche organische Pestizide entwickelt. Etwa 600 aktive Verbindungen führten zu Entstehung von Tausenden von Einzelprodukten. In den Jahren 2000/2001 wurde die Einsatzmenge von Pestiziden weltweit auf 11 Millionen Tonnen geschätzt (www.epa.gov). Pestizide können produktions- bzw. anwendungsbedingt in die

Gewässer eingetragen werden. Anwendungsbedingte Einträge stammen z.B. aus landwirtschaftlicher und nichtlandwirtschaftlicher Anwendung (z.B. Anwendung auf Industrie- und Verkehrsflächen, im privaten Haus- und Gartenbereich). Des weiteren kann eine Gewässerbelastung durch Altlasten und durch unsachgemäße Anwendung und Entsorgung auftreten (UBA, 2007). Aus dem landwirtschaftlichen Bereich können Pestizide durch Verwehung (Abdrift), Abschwemmung, Auswaschung in Dränagen und Grundwasser, Verdunstung mit nachfolgender nasser und trockener Deposition und Abläufe von landwirtschaftlichen Höfen (z.B. nach der Spritzen- oder Fahrzeugreinigung) erfolgen (UBA, 2007). Die Einträge aus Dränage, Run- off und Abdriften betragen in Deutschland zusammen circa 15 t/a (UBA Texte, 1999). Das entspricht etwa der Hälfte des gesamten Eintrages in Oberflächenwässer in Deutschland (UBA Texte, 1999).

Organische Fremdchemikalien, welche durch herkömmliche Verfahren der Rückstandsanalyse im Boden nicht nachweisbar sind, werden als gebundene Rückstände bezeichnet (Schinner und Sonnleitner, 1997). Da gebundene Stoffe und Stoffmetabolite in Routineanalysen nicht erfasst werden, wird die entsprechende Belastung des Bodens mit diesen Stoffen häufig unterschätzt. Zahlreiche Agrarchemikalien weisen Strukturähnlichkeiten mit natürlich auftretenden organischen Verbindungen auf und können im Zuge der Humifizierung in die organische Bodensubstanz eingebaut werden. Es handelt sich häufig um aromatische Verbindungen welche chemisch oder biologisch zu phenolischen Zwischenprodukten oder zu aromatischen Aminen transformiert werden (Schinner und Sonnleitner, 1997). Hauptmetabolite von Phenoxyalkanoatherbiziden und anderen Pestiziden sind Chlorphenole. Anilinverbindungen sind häufige Abbauprodukte von Pestiziden. Viele landwirtschaftlich wichtige Herbizide, wie z.B. Phenylcarbamate, Phenylharnstoffe und Acylanilide, setzen bei Transformation substituierte Aniline frei (Schinner und Sonnleitner, 1997). Die Konsequenzen einer Bindung von Pestiziden oder deren Abbau- bzw. Transformationsprodukte im Boden für die Bodenqualität ist nicht einfach abzuschätzen. Es stellt sich die Frage nach der Toxizität und Wiederfreisetzung von gebundenen Rückständen. Eine Studie mit radioaktiv (C^{14}) markiertem Atrazin (Capriel et al., 1985) ergab, dass unter Feldbedingungen ein Boden neun Jahren nach einer Herbizidapplikation noch etwa 83% der ursprünglich applizierten Radioaktivität enthielt. Gebundene Pflanzenschutzmitteln oder deren Metabolite können als Quelle der Verunreinigung

von Nahrungsmitteln auftreten (Schinner und Sonnleitner, 1997). Es besteht auch die Möglichkeit, dass die gealterten, gebundenen Rückstände als potentielle Kontaminanten des Grundwassers auftreten. Bruhler, et al. (1993) berichten, dass vier Jahre nach der ursprünglichen Applikation von Atrazin in einem tonigen Lehmboden noch signifikante Atrazinmengen nachgewiesen werden konnten.

Stoffe aus der Gruppe der Industriechemikalien werden in unterschiedlichsten Anwendungsbereichen eingesetzt oder stammen aus Produktions- und Abbauprozessen (Smolka und Cameron, 2002). Dazu zählen z. B:

- Abbauprodukte von Tensiden aus Reinigungsmitteln
- Nebenprodukte der industriellen Produktion oder von Verbrennungsprozessen
- Zusatzstoffe in Kunststoffen, z.B. Weichmacher
- Flammschutzmittel.

Organische Chemikalien können zunehmend in terrestrischen und aquatischen Ökosystemen nachgewiesen werden. Sie können bei der Herstellung, Verwendung oder Beseitigung in die Umwelt gelangen. Sie gelangen z.B. über industrielle, gewerbliche, häusliche und verkehrsbedingte Emissionen über die Atmosphäre in den Boden (Schinner und Sonnleitner, 1997). Ein wichtiger Weg des Eintrags der Chemikalien ist die Behandlung der Böden mit verschiedenen Siedlungs-, Gewerbe- und Industrieabfällen (z.B. Klärschlamm, Abfallkomposte, etc.). Ein bedeutender Aspekt ist die Entsorgung bzw. Beseitigung von Abfällen. Prozesse wie z.B. Verbrennung oder Chlorierung von Abwässern stellen eine wichtige Quelle für organische Umweltchemikalien dar. Aus Deponien können sowohl über die Atmosphäre als auch über Sickerwasser Belastungen von Böden entstehen (Schinner und Sonnleitner, 1997).

Für die Verteilungsexperimente der vorliegenden Arbeit wurden 26 Substanzen (Pflanzenschutzmittel bzw. Industriechemikalien) ausgewählt (vgl. Tab. 3-1). Zu den Auswahlkriterien zählte auch die potenzielle *endokrine* Wirkung der Substanzen.
Unter den endokrinen Chemikalien findet man zahlreiche Pestizide, die in der Landwirtschaft eingesetzt werden.

Tab. 3-1 Ausgewählte Substanzen

Substanz	Substanz Klasse	Gruppe	CAS	Chemische Formel	Wasserlöslichkeit g/100mL (Farlbe und Regitz, 1992)
2,4-Dichlorphenoxyessigsäure	**Chlorophenoxyessigsäure-Derivate**	Herbizid	94-75-7	$C_8H_6Cl_2O_3$	0,089
Amitrol	**Triazole**	Herbizid	61-82-5	$C_2H_4N_4$	28,0
Bromoxynil	**Nitrile**	Herbizid	1689-84-5	$C_7H_3Br_2NO$	0,013
Carbofuran	**Carbamate**	Insektizid	1563-66-2	$C_{12}H_{15}NO_3$	0,032
Diazinon	**Heterocyclische Enolester**	Insektizid	333-41-5	$C_{12}H_{21}N_2O_3PS$	0,004
Diuron	**Harnstoffe**	Herbizid	330-54-1	$C_9H_{10}Cl_2N_2O$	0,004
Imazalil	**Imidazole**	Fungizid	35554-44-0	$C_{14}H_{14}Cl_2N_2O$	0,018
Prochloraz	**Imidazole**	Fungizid	67747-09-5	$C_{15}H_{16}Cl_3N_3O_2$	0,003 (25°C)
Vinclozolin	**Dicarboximide**	Fungizid	50471-44-8	$C_{12}H_9Cl_2NO_3$	0,0003
Bisphenol A	**Phenole**	Industriechemikalie/ Fungizid	80-05-7	$C_{15}H_{16}O_2$	<0,10 (21,5°C)
4-tert-Butylphenol	**Phenole**	Industriechemikalie	98-54-4	$C_{10}H_{14}O$	0,058
Atrazin	**s-Triazine**	Herbizid	1912-24-9	$C_8H_{14}ClN_5$	0,007
Benzamid	**Benzamide**	Industriechemikalie	55-21-0	C_7H_7NO	<0,1 (22,5°C)

Tab. 3-1 Ausgewählte Substanzen (Fortsetzung)

Substanz	Substanz Klasse	Gruppe	CAS	Chemische Formel	Wasserlöslichkeit g/100mL (Farlbe und Regitz, 1992)
9,10-Anthrachinon	**Antrachinone**	Industriechemikalie	84-65-1	$C_{14}H_8O_2$	<0,10 (23°C)
Methiocarb	**Carbamate**	Insektizid/Akarizid	2032-65-7	$C_{11}H_{15}NO_2S$	0,003
Anilin	**Aniline**	Industriechemikalie	62-53-3	C_6H_7N	3,5 (20°C)
4-Chloroanilin	**Aniline**	Industriechemikalie	106-47-8	C_6H_6ClN	0,0004
Propanil	**Amide**	Herbizid	709-98-8	$C_9H_9Cl_2NO$	0,015
2-Nitrophenol	**Phenole**	Industriechemikalie/ Fungizid	88-75-5	$C_6H_5NO_3$	0,210
n-Methylanilin	**Aniline**	Industriechemikalie	100-61-8	C_7H_9N	0,1-0,5 (21,5°C)
4-Chlorophenol	**Phenole**	Industriechemikalie	106-48-9	C_6H_5ClO	1,0-5,0 (15°C)
Metribuzin	**Triazine**	Herbizid	21087-64-9	$C_8H_{14}N_4OS$	0,105
o-Kresol	**Phenole**	Industriechemikalie	95-48-7	C_7H_8O	<0,1 (19°C)
Terbutryn	**s-Triazine**	Herbizid	886-50-0	$C_{10}H_{19}N_5S$	0,002
Phenol	**Phenole**	Industriechemikalie	108-95-2	C_6H_6O	8,28
Triadimefon	**Triazole**	Fungizid	43121-43-3	$C_{14}H_{16}ClN_3O_2$	0,026

3.3 Schüttelkolbenmethode

Die Schüttelkolbenmethode (Batch Method, Shake-Flask Method) ist eine klassische Methode zur Bestimmung des Verteilungskoeffizienten. Das in der OECD-Prüfrichtlinie 106 (OECD, 2000) beschriebene Standardverfahren wurde für die Untersuchungen der vorliegenden Arbeit mit geringen Modifikationen übernommen.

Experimentelle Durchführung

Vorbereitung des Bodens

Der zu untersuchende Boden wurde zunächst sorgfältig gewaschen. Dies ist erforderlich, um zu vermeiden, dass durch Desorption organischer Stoffe die quantitative Analyse des interessierenden Stoffes (die durch UV-Analyse erfolgt) in der mit dem Boden koexistierenden wässrigen Phase verfälscht wird. Bei der Vorbereitung eines Bodens wurde ca. ein Gramm des Bodens mit ca. 100 g Wasser gewaschen. Nach jeweils etwa 19 Stunden wurde die wässrige Phase ausgetauscht. Der gesamte Waschprozess dauerte – je nach Bodenart – zwischen 10 und 20 Tagen, Bei an organischen Bestandteilen reichen Böden (z.B. bei „Eurosoil 5“) betrug die Waschdauer ca. 20 Tage, bei weniger „organische Komponenten“ enthaltenden Böden (z.B. bei „Eurosoil 4“) reichten dagegen 10 Tage aus. Vor jedem Wechsel des Waschwassers wurde die wässrige Waschlösung aus dem letzten Waschvorgang mit Hilfe eines UV-Spektrophotometers (Zweistrahl- UV- Spektrometer Typ CARY 1E der Fa. Varian) in dem Wellenlängenbereich analysiert, in dem die quantitative Analyse des sich verteilenden Stoffes durchgeführt wurde. Sobald das Signal bei der UV-Analyse einen vorgegebenen Zahlenwert (hier 0,05 AE) nicht mehr überstieg, wurde der Waschvorgang beendet.

Beladung des Bodens und Analyse

Danach erfolgte die schrittweise Beladung des Bodens bei Raumtemperatur. Dabei wurde der gewaschene Boden mit einer Mischung aus 20 Gramm Wasser und 10 g einer wässrigen Lösung (*Stammlösung*) des interessierenden Stoffes (*Wertstoffes*) ins Gleichgewicht gebracht. Um Gleichgewicht zu erreichen, wurden die Proben nach der Beladung 19 Stunden geschüttelt. Danach wurden die Proben 30 Minuten bis 1 Stunde sedimentiert. Etwa 10 Gramm überstehendes Wasser wurden in ein Zentrifugenglas abgefüllt und 15 Minuten bei 3500 U/min zentrifugiert. Nach dem Zentrifugieren wurden die Lösungen per UV-Photometrie analysiert. Aus dem Analyseergebnis wurde – mit Hilfe einer

Massenbilanz – die vom Boden sorbierte Menge des Wertstoffes berechnet. Danach wurde die Restlösung Boden/Wasser wieder mit der Stammlösung auf etwa 30 Gramm wässrige Phase aufgefüllt und die zuvor beschriebenen Schritte (Gleichgewichtseinstellung, Trennung, Analyse) bis zu fünfmal wiederholt. Jeder dieser stufenweise erfolgten Sorptionsversuche wurde mindestens einmal wiederholt. Parallel dazu wurden die Experimente mit *Blindproben* – d.h. Proben aus reinem Wasser (anstelle der Stammlösung) – durchgeführt, um „Ausblutungen“ des Bodens (d.h. die Überlagerung der Analyseergebnisse durch weiter vom Boden desorbiertes Material) erkennen zu können. Zu Beginn wurden Kalibrierungskurven für die UV-photometrischen Analysen erstellt. Die Kalibrierungen wurden für jede Substanz mehrmals wiederholt um den Fehler der UV-Analyse ($\Delta S/S$) (d.h. des Quotienten aus *Absorptionseinheiten AE und der Konzentration*) zu ermitteln. Diese Fehler sind für 17 (von 26) untersuchte Sorptive in der Tabelle 3-2 zusammengestellt.

Tab. 3-2 Details der UV Analyse

Substanz	λ_1 (nm)	Steigung S (AE/(g/g))	Abweichung $\Delta S/S$ (%)	λ_2 (nm)	Steigung S (AE/(g/g))	Abweichung $\Delta S/S$ (%)
Propanil	209	133000	4,20	249	72000	0,01
Bromoxynil	223	91000	0,11	282	63000	1,82
Diuron	211	130000	0,35	248	82000	0,07
Metribuzin	212	47000	0,83	294	39000	0,30
Carbofuran	278	11000	2,56	-	-	-
Diazinon	248	14000	0,38	-	-	-
4-Chloroanilin	238	86000	0,62	290	11000	0,02
n-Methylanilin	235	81000	5,08	284	14000	0,78
Anilin	230	81000	0,02	280	14000	0,29
4-Chlorophenol	225	67000	0,70	279	12000	0,11
4-tert-Buthylphenol	220	46000	0,48	274	10000	0,28
o-Kresol	214	64000	0,35	270	15000	0,25
Bisphenol A	225	61000	0,90	276	14000	0,10
Phenol	210	64000	1,96	269	16000	0,28
2-Nitrophenol	210	78000	0,83	279	34000	5,73
Benzamid	226	67000	1,61	268	4700	0,77
2,4-Dichlorphenoxy-essigsäure	228	34000	2,30	282	7500	3,08

Die Wellenlänge, die bei einer UV-Analyse eingestellt wurde, hängt vom Sorptiv ab. In der Regel wurde die Analyse mit zwei unterschiedlichen Wellenlängen durchgeführt. Für die restlichen 9 Sorptive (vgl. Tab. 3-1) wurden wegen zu geringer Löslichkeit in Wasser keine Schüttelkolbenexperimente durchgeführt. Zur Auswertung der Ergebnisse der UV-photometrischen Analysen wurde stets nur die Differenz zwischen dem Signal einer wertstoffhaltigen Probe und dem Signal der entsprechenden Blindprobe benutzt.

3.3.1 Ergebnisse der Sorptionsversuche mit der Schüttelkolben-methode

Die Schüttelkolbenversuche sollten einerseits die Vergleichsdatenbasis für die Erprobung der HPLC-Methode liefern und andererseits auch dazu verwendet werden, die Qualität von Literaturangaben zu den Verteilungskoeffizienten zu überprüfen. Dies erschien erforderlich, da in der Literatur Verteilungskoeffizienten mit bis zu 4 relevanten Stellen angegeben werden, jedoch i.d.R. Angaben zur Genauigkeit dieser Zahlenwerte fehlen. Die Tabelle 3-3 gibt einen Überblick über die in den Schüttelkolbenversuchen eingesetzten Substanzen (*Wertstoffe*) mit ihren Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizienten und der min. bzw. max. Konzentration in der Stammlösung.

Bei der Auswertung wurden die Unsicherheiten der UV-spektroskopischen Analyse und die daraus resultierenden Unsicherheiten im Verteilungskoeffizienten K_D berücksichtigt. *Der Verteilungskoeffizient K_D* ist definiert als der Quotient aus der Beladung des Eurosoils mit dem Wertstoff (Gramm Substanz pro Gramm Eurosoil) und der Konzentration des gelösten Wertstoffes in der Lösung (Gramm Substanz pro Gramm Lösung),

$$K_D = \frac{C_{aufES}}{C_{inLös.}} \tag{32}$$

mit

C_{aufES}- Konzentration des Stoffes auf dem Boden (g/g)

$C_{inLös.}$- Konzentration des Stoffes in der Lösung (g/g)

$C_{aufES}^{(0)}$- Einheitsdimension vom C_{aufES} $\left(\frac{1gSubst.}{1gBoden}\right)$

$C_{inLös.}^{(0)}$- Einheitsdimension vom $C_{inLös.}$ $\left(\frac{1gSubst.}{1gLös.}\right)$

Tab. 3-3 Testsubstanzen für die Schüttelkolbenmethode

Substanz	CAS Nummer	Log K_{OW}* (Hansch und Leo, 1995)	Konz. in der Stammlösung C_{SL} (g/g) $\cdot 10^5$	
			min.	max.
Propanil	94-75-7	3,07	2,3	3,2
Bromoxynil	1689-84-5	3,39	2,0	2,5
Diuron	30-54-1	2,68	0,9	1,6
Metribuzin	21087-64-9	1,70	2,0	3,7
Carbofuran	1563-66-2	2,32	9,0	11,0
Diazinon	333-41-5	3,81	2,9	5,0
4-Chloroanilin	106-47-8	1,83	2,0	3,0
n- Methylanilin	100-61-8	1,66	2,1	25,0
Anilin	62-53-3	0,84	3,6	11,0
4-Chlorophenol	106-48-9	2,39	1,7	11,0
4-tert-Butylphenol	98-54-4	3,31	3,1	7,5
o-Kresol	95-48-7	1,95	4,6	7,8
Bisphenol A	80-05-7	3,32	3,3	30,0
Phenol	108-95-2	0,62	0,6	6,3
2-Nitrophenol	88-75-5	1,68	2,4	4,2
Benzamid	55-21-0	0,74	3,8	5,6
2,4-Dichlorphenoxy-essigsäure	94-75-7	2,62	10,0	13,0

* Konzentrationsangaben in mol/dm^3

Die Abb.3.1 zeigt das Schema des Mess- bzw. Auswerteverfahrens. Die Qualität der im Experiment bestimmten Zahlenwerte für die Gleichgewichtskonstante hängt von der Konzentration des Wertstoffes in der Stammlösung, vom Zahlenwert des Verteilungskoeffizienten, von der Höhe der bei der UV-Analyse detektierten Signale und der Zunahme der Extinktion mit der Konzentration des Wertstoffes ab. Diese Konzentration muss ausreichend weit von der Sättigungskonzentration entfernt sein.

Bei den Untersuchungen der vorliegenden Arbeit betrug die Konzentration eines Wertstoffes in der Stammlösung (sieheTab.3.3) minimal etwa $6{,}1 \cdot 10^{-6}$ g/g (für Phenol) und maximal etwa $3{,}0 \cdot 10^{-4}$ g/g (für Bisphenol A). Bei den meisten Sorptiven lag sie bei etwa $1{,}2 \cdot 10^{-4}$ g/g. Die Auswirkungen der experimentellen Unsicherheiten werden für diese drei typischen Konzentrationen in den Stammlösungen in

Verbindung mit drei typischen Zahlenwerten für den Verteilungskoeffizienten in der Tab. 3-4 bis 3-6 diskutiert: für einen kleinen Verteilungskoeffizienten K_D=1 (z.B. 4-Chloroanilin auf Eurosoil 4); für einen mittleren Verteilungskoeffizienten K_D=28 (z.B. Anilin auf Eurosoil 5) und für einen großen Verteilungskoeffizienten K_D=450 (z.B. Bisphenol A auf Eurosoil 3).

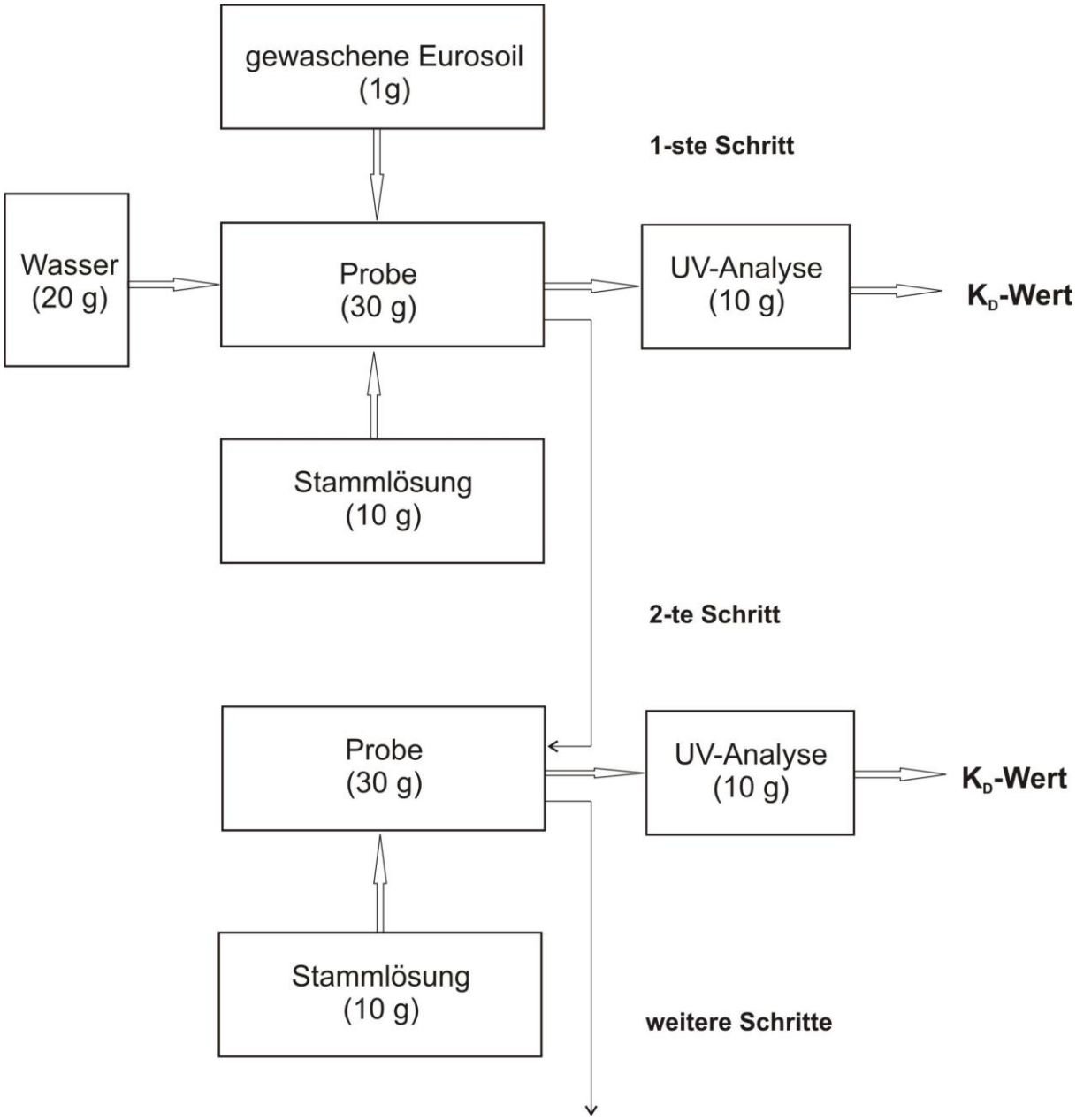

Abb. 3.1 Schema der Auswertung der Beladung eines Bodens mit einem Wertstoff

Die UV-spektroskopische Analyse erfolgte (nach Möglichkeit bei zwei Wellenlängen) im Bereich von 190 bis 900 nm: Die maximale Signalhöhe liegt bei 3,5 Absorptionseinheiten (AE). Die Unsicherheit des experimentell bestimmten UV-Signals wird zu ± 0,05 AE abgeschätzt. Die Änderung des Signals der UV-Analyse mit der Zunahme der Konzentration des Wertstoffes (Steigung S in Tab. 3-2) beträgt bei den hier interessierenden Wertstoffen (in Verbindung mit dem verwendeten UV-Spektrophotometer) zwischen 4700 AE/g/g (bei 278 nm) und 133000 AE/g/g (bei 209 nm). In Verbindung mit der Differenz der UV- Signale (der UV- Signale aus der Analyse der wässrigen, wertstoffhaltigen Lösung und der Blindprobe) erhält man z.B. bei der Verteilung von Methylanilin auf (Wasser + Eurosoil 3) bei 284 nm ein Signal in Höhe von etwa 1 AE und damit aus der Eichkurve für die UV-Analyse (bei 284 nm) (vgl. Abb. 3.2) eine Unsicherheit in der Konzentration von Methylanilin in der wässrigen Lösung von etwa ± $4{,}3 \cdot 10^{-6}$ g/g.

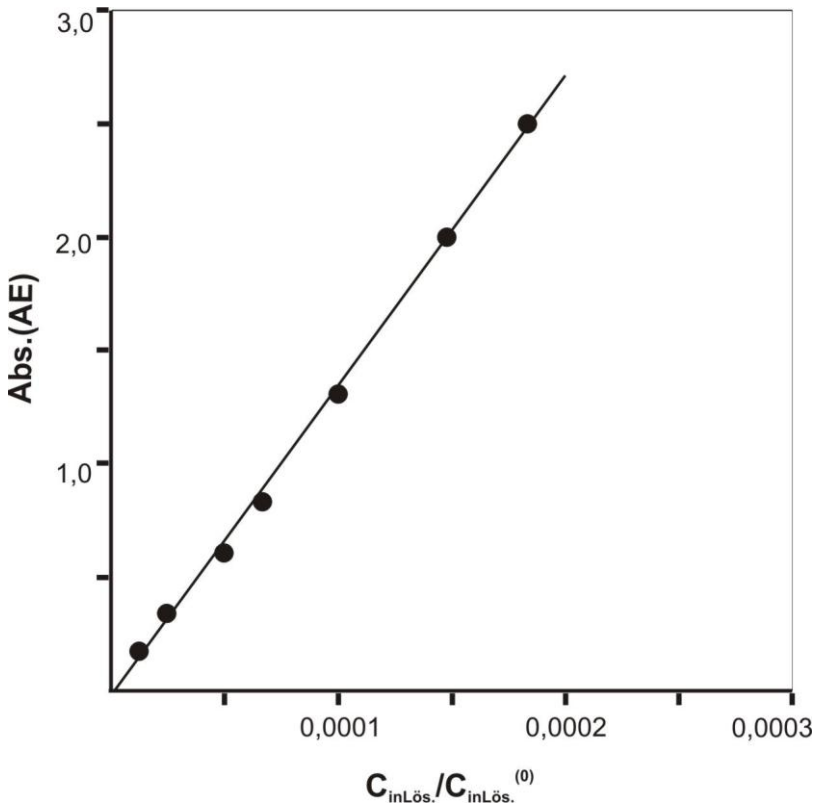

Abb. 3.2 UV- Analyse von n-Methylanilin: Eichkurve bei 284 nm

Analog ergibt sich bei der Sorption von Butylphenol auf Eurosoil 5 (bei einer UV-Analyse bei 220 nm) ein typisches UV-Signal von 1,57 AE und ein Fehler von ± $1{,}2 \cdot 10^{-6}$g/g in der Bestimmung der Konzentration von Butylphenol in der wässrigen Phase. Daraus erkennt man, dass bei sehr geringer Konzentration des Wertstoffes

in der Stammlösung und bei sehr geringer Sorption eine zuverlässige Bestimmung des Verteilungskoeffizienten mit der nach OECD-Prüfrichtlinie 106 durchgeführten Schüttelkolbenmethode nicht möglich ist.

Zur weiteren Detaillierung enthalten die Tabellen 3-4 bis 3-6 die Ergebnisse einiger typischer Beispielrechnungen (für 3 Verteilungskoeffizienten K_D, 3 Wertstoff-Konzentrationen C_{SL} in den Stammlösungen und 3 Empfindlichkeiten S des UV-Photometers) für jeweils 5 aufeinander folgende Sorptionsschritte mit der gleichen Bodenprobe (Ergänzungen dazu im Anhang B). Aus diesen Rechnungen erhält man für jeden Verteilungskoeffizienten einen minimalen (K_{Dmin}) und einen maximalen (K_{Dmax}) Zahlenwert für K_D. Anhand dieser Werte kann man abschätzen, wie groß der Messfehler bei der Bestimmung von K_D ist.

Bei den Beispielrechnungen wurde von folgenden Unsicherheiten ausgegangen:

- Unsicherheiten der Masse des Bodens (ca. 1g): ± 0,02 g
- Unsicherheit der Masse von Wasser vor der ersten Zugabe der Stammlösung: ± 0,1 g
- Unsicherheit der Masse der Stammlösung:± 0,02 g
- Unsicherheit der Masse in der Probe (Wasser plus Stammlösung):± 0,02 g
- Unsicherheit der Masse (ca. 10 g) der für die UV-Analyse entnommenen Probe : ± 0,02 g
- Unsicherheit des Differenzsignals der UV-photometrischen Analyse: ± 0,05 AE.

Tab. 3-4 Beispielrechnung für 3 Wertstoffe, K_D =1 und 3 C_{SL} - Werte

Verteilungs-Koeffizient	n	C_{SL} (g/g)	Steigung S (AE/Konz.)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=1	Schritt 1	$6{,}1 \cdot 10^{-6}$	4700	∞	0,2
	Schritt 2			∞	0,2
	Schritt 3			∞	0,3
	Schritt 4			∞	0,3
	Schritt 5			∞	0,3
	Schritt 1		81000	1,5	0,8
	Schritt 2			1,2	0,8
	Schritt 3			1,2	0,9
	Schritt 4			1,1	0,9
	Schritt 5			1,1	0,9
K_D=1	Schritt 1		132000	1,2	0,8
	Schritt 2			1,1	0,9
	Schritt 3			1,1	0,9
	Schritt 4			1,1	0,9
	Schritt 5			1,1	0,9
K_D=1	Schritt 1	$1{,}20 \cdot 10^{-4}$	4700	1,4	0,8
	Schritt 2			1,6	0,7
	Schritt 3			∞	0,6
	Schritt 4			∞	0,6
	Schritt 5			∞	0,5
K_D=1	Schritt 1	$3{,}00 \cdot 10^{-4}$	4700	1,1	0,9
	Schritt 2			1,2	0,9
	Schritt 3			1,3	0,8
	Schritt 4			1,5	0,7
	Schritt 5			1,8	0,7

Tab. 3-5 Beispielrechnung für 3 Wertstoffe, K_D =28 und 3 C_{SL} – Werte

Verteilungs-Koeffizient	n	C_{SL} (g/g)	Steigung S (AE/Konz.)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=28	Schritt 1	$6{,}1 \cdot 10^{-6}$	4700	∞	2,5
	Schritt 2			∞	5,7
	Schritt 3			∞	7,4
	Schritt 4			∞	8,4
	Schritt 5			∞	9,0
	Schritt 1		81000	∞	17,8
	Schritt 2			36,2	22,8
	Schritt 3			33,4	24,1
	Schritt 4			32,4	24,6
	Schritt 5			31,9	24,9
	Schritt 1		132000	∞	20,7
	Schritt 2			32,6	24,5
	Schritt 3			31,1	25,4
	Schritt 4			30,6	25,8
	Schritt 5			30,3	25,9
K_D=28	Schritt 1	$1{,}20 \cdot 10^{-4}$	4700	∞	18,7
	Schritt 2			35,1	23,3
	Schritt 3			32,8	24,4
	Schritt 4			32,0	25,0
	Schritt 5			31,5	25,2
	Schritt 1		81000	28,4	27,6
	Schritt 2			28,4	27,6
	Schritt 3			29,7	27,6
	Schritt 4			30,0	27,6
	Schritt 5			30,3	27,6
	Schritt 1		132000	28,1	27,9
	Schritt 2			28,9	27,7
	Schritt 3			29,1	27,7
	Schritt 4			29,3	27,7
	Schritt 5			29,4	27,7
K_D=28	Schritt 1	$3{,}00 \cdot 10^{-4}$	4700	34,6	23,6
	Schritt 2			30,5	25,8
	Schritt 3			29,8	26,4
	Schritt 4			29,6	26,6
	Schritt 5			29,4	26,7

Tab. 3-6 Beispielrechnung für 3 Wertstoffe, K_D =450 und 3 C_{SL} - Werte

Verteilungs-Koeffizient	n	C_{SL} (g/g)	Steigung S (AE/Konz.)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=450	Schritt 1	$6{,}1 \cdot 10^{-6}$	4700	∞	5,4
	Schritt 2			∞	74,6
	Schritt 3			∞	109,7
	Schritt 4			∞	129,7
	Schritt 5			∞	141,7
	Schritt 1		81000	∞	78,4
	Schritt 2			637,3	347,5
	Schritt 3			338,6	379,8
	Schritt 4			420,1	391,7
	Schritt 5			455,8	397,5
K_D=450	Schritt 1		132000	-	-
	Schritt 2			549,8	380,7
	Schritt 3			508,3	403,5
	Schritt 4			496,2	411,5
	Schritt 5			490,7	415,3
K_D=450	Schritt 1	$1{,}20 \cdot 10^{-4}$	4700	∞	87,4
	Schritt 2			606,3	375,5
	Schritt 3			536,8	387,1
	Schritt 4			517,4	397,8
	Schritt 5			508,9	403,1
	Schritt 1		81000	574,6	371,9
	Schritt 1		132000	511,3	403,2
K_D=450	Schritt 1	$3{,}00 \cdot 10^{-4}$	4700	∞	170,4
	Schritt 2			501,9	408,9
	Schritt 3			481,4	424,5
	Schritt 4			475,1	429,8
	Schritt 5			472,2	432,4
K_D=450	Schritt 1		81000	481,9	422,9
K_D=450	Schritt 1		132000	462,7	438,4

Aus den Tabellen 3-4 bis 3-6 kann man folgende Aussagen treffen:

- Wenn der Verteilungskoeffizient K_D nahe bei eins liegt und die Konzentration in der Lösung C_{SL}= $6{,}1 \cdot 10^{-6}$ g/g beträgt, kann der Verteilungskoeffizient erst

bestimmt werden, wenn die Steigung größer bzw. gleich 81000 AE/(g/g) ist. Das Messergebnis ist dann mit einem Fehler von bis zu 50% belastet.

Bei mittleren Konzentrationen C_{SL}=1,20·10^{-4} g/g ist eine Ermittlung des Verteilungskoeffizienten nur bei eine Steigung größer 4700 AE/(g/g) nach den ersten beiden Schritten möglich – mit einer Unsicherheit von bis zu 60%. Bei den größten Steigungen 132000 AE/(g/g) liegen die berechnete UV- Signale außerhalb der Messgrenzen des Messgerätes. Für die höchste Konzentration C_{SL}= 3,0·10^{-4} g/g ist die Messung des Verteilungskoeffizienten nur bei Steigungen in Bereich von 4700 AE/(g/g) möglich, mit Unsicherheiten von 20% im ersten Schritt und 80 % im letzten Schritt.

- Für K_D = 28 und der niedrigsten Konzentration (C_{SL}= 6,1·10^{-6} g/g) lässt sich der Verteilungskoeffizient erst ab einer Steigung von 81000 AE/(g/g) ermitteln. Die Unsicherheiten betragen dann zwischen 8 und 30%. Bei der mittlere Konzentration (C_{SL}=1,20·10^{-4} g/g) ist es möglich, alle Verteilungskoeffizienten zu bestimmen. Der kleinste Fehler beträgt etwa 1% für eine Steigung von 81000 AE/(g/g). Bei einer Steigung von 132000 AE/(g/g) beträgt der Fehler zwischen 0,3 und 0,5%. Der Verteilungskoeffizient für die höchste Stammlösungskonzentration (C_{SL}= 3,0·10^{-4} g/g) kann nur für die erste angenommene Steigung (4700 AE/(g/g)) bestimmt werden. Der Fehler beträgt dort zwischen 16 und 23%. Die für weitere Steigungen berechneten UV – Signale befinden sich außerhalb des Messbereiches.
- Wenn der Verteilungskoeffizient K_D = 450 beträgt, ist es möglich den Verteilungskoeffizienten bei der niedrigsten Konzentration erst bei S≥81000 AE/(g/g) zu bestimmen. Der Fehler im zweiten Schritt liegt zwischen 16% (bei S=81000 AE/(g/g)) und 22% (bei S=132000 AE/(g/g)). Für die mittleren und höchsten Konzentrationen ist es nur möglich den Verteilungskoeffizienten bei der kleinsten Steigung zu bestimmen, bei den größten Steigungen liegen die UV – Signale außerhalb des Messbereiches.
- Der allgemeine Vergleich über alle Konzentrationen und alle Steigungswerte ergibt folgende Beschränkungen für die Verteilungskoeffizienten:

  Für K_D=1 der Messwert beträgt minimal 0,2; maximal 1,8.

  Für K_D=28 der Messwert beträgt minimal 2,5; maximal 36,2.

  Für K_D=450 der Messwert beträgt minimal 5,4; maximal 637,3.

Aus der in der Tabelle 3-4 bis 3-6 angegebenen Ergebnissen wurden die Bereiche ermittelt, in denen die Verteilungskoeffizienten mit einer maximalen Unsicherheit von ±10% bestimmt werden können. Das heißt, alle Verteilungskoeffizienten, die mit einem Fehler größer als 10% belastet sind, wurden nicht mehr berücksichtigt.
Dadurch sind zuverlässige Messwerte nur für bestimmte Kombinationen an Konzentration C_{SL}, Steigung S und Schritte n zu erzielen. Diese Kombinationen sind in der Tabelle 3-7 zusammengestellt.

Tab. 3-7 Randbedingungen für den Fall, dass ein Fehler von 10% bei der Ermittlung von Verteilungskoeffizienten nicht überschreiten werden soll.

K_D	C_{SL} (g/g)	S(AE/Konz.)	Schrittnummer n von - bis
1	$6{,}1\cdot10^{-6}$	81000	4-5
		132000	2-5
	$3{,}0\cdot10^{-4}$	4700	=1
28	$6{,}1\cdot10^{-6}$	132000	3-5
	$1{,}2\cdot10^{-4}$	4700	=5
		81000	1-5
		132000	1-5
	$3{,}0\cdot10^{-4}$	4700	2-5
450	$3{,}0\cdot10^{-4}$	4700	3-5
		81000	=1
		132000	=1

Für Verteilungskoeffizienten K_D in der Nähe von Eins, bei einer Konzentration in der Lösung von C_{SL}= $6{,}1\cdot10^{-6}$ g/g und einer Steigung S=4700 AE/(g/g) ist es nicht möglich, den Verteilungskoeffizienten auf 10% genau zu bestimmen. Bei der größeren Steigung 81000 AE/(g/g) bei der gleiche Konzentration werden mindestens vier Schritte benötigt, um den Verteilungskoeffizient mit einem Fehler von ±10% bestimmen zu können. Bei der höchsten Konzentration in der Lösung (C_{SL}= $3{,}0\cdot10^{-4}$ g/g) und einer Steigung S=4700 AE/(g/g) wird schon im zweiten Schritt der Fehler von ±10% überschritten.
Bei einem Verteilungskoeffizienten K_D = 28 ist es für die niedrigste Konzentration C_{SL}= $6{,}1\cdot10^{-6}$ g/g und die Steigungen 4700 AE/(g/g) und 81000 AE/(g/g) nicht möglich, den Verteilungskoeffizienten auf ±10% genau zu bestimmen. Bei der größte Steigung S=132000 AE/(g/g) sind mindestens drei Schritte erforderlich, um diese Fehlergrenze zu erreichen. Bei der mittleren Konzentration (C_{SL}= $1{,}2\cdot10^{-4}$ g/g) und

der niedrigsten Steigung (4700 AE/(g/g)) sind fünf Schritte erforderlich, um die Fehlergrenze von ±10% zu unterschreiten. Für die Steigungen S= 81000 AE/(g/g) und S=132000 AE/(g/g) ist schon im ersten Schritt diese Fehlergrenze unterschritten. Bei der höchsten Konzentration (C_{SL}= $3{,}0 \cdot 10^{-4}$ g/g) und einer Steigung S=4700 AE/(g/g) wird die Fehlergrenze von ±10% ab dem zweiten Schritt erreicht.
Für K_D = 450, ist es bei C_{SL}= $6{,}1 \cdot 10^{-6}$ g/g und bei C_{SL}= $1{,}2 \cdot 10^{-4}$ g/g nicht möglich, den Verteilungskoeffizient auf ±10% zu bestimmen. Bei der höchste Konzentration (C_{SL}= $3{,}0 \cdot 10^{-4}$ g/g) werden bei der niedrigste Steigung 4700 AE/(g/g) mindestens drei Schritte benötigt. Für die größten Steigungen, (S=81000 AE/(g/g) und S=132000 AE/(g/g)) wird diese Fehlergrenze schon in zweitem Schritt überschritten.

Diese Zusammenstellung zeigt, dass es schwierig ist, den Verteilungskoeffizienten mit einem Fehler von weniger als 10% zu bestimmen. Besonders wenn die Konzentration der Lösung klein (z.B. C_{SL}= $6{,}1 \cdot 10^{-6}$ g/g) und die Steigung die Eichkurve niedrig (z.B. S= 4700 AE/(g/g)) ist. Deswegen war es für die kleinste Konzentration in der Stammlösung (C_{SL}=$6{,}1 \cdot 10^{-6}$ g/g) nicht möglich, den Verteilungskoeffizient auf ±10% zu bestimmen. Für höhere Steigungen und Konzentrationen, ist es wesentlich einfacher diese Fehlergrenze zu unterschreiten.

Massenbilanz:
Nach der Beladung eines Bodens mit der Stammlösung C_{SL} und Wasser, erhält man eine Konzentration in der Lösung ($C_{inLös}$), die mit einem Fehler ($\Delta C_{inLös}$) belastet ist. Anhand der Änderung des UV-Signals mit der Zunahme der Konzentration des Wertstoffes berechnet man („indirekt“) die Beladung eines Bodens (C_{aufES}). Das ist der erste Schritt um den K_D-Wert zu bestimmen. Bei der Diskussion zur Tab. 3-7 hat sich gezeigt, dass man mehrere Schritte (abhängig von der Größe des Verteilungskoeffizienten, Steigung und Stammlösungskonzentration) benötig, um den Verteilungskoeffizient zuverlässig zu bestimmen. Aufgrund dieser Aussage und um die Massenbilanz möglichst genau zu erstellen, erfolgte die Beladung eines Bodens mit den untersuchten Wertstoffen jeweils in 4 bzw. 5 Schritten. Beispiele dafür (für die Eurosoils 3, 4 und 5) sind in den Tabellen 3-8 bis 3-10 dargestellt. In diesen Tabellen sind die Konzentrationen des jeweiligen Sorptivs in der wässrigen Lösung ($C_{inLös}$) und auf dem Boden (C_{aufES}) zusammen mit den Unsicherheiten

(Δ $C_{inLös}$ bzw. ΔC_{aufES}) angegeben. Alle K_D – Werte eines Experiments und der aus diesen Zahlenwerten bestimmte Mittelwert sind zusammen mit einem Angabe zur Unsicherheit $\pm\Delta$ dieses Mittelwerts dargestellt. Diese Unsicherheit ist folgendermaßen definiert:

$$\pm\Delta = \frac{(höchsterK_DWert - niedriegsterK_DWert)}{2} \qquad (33)$$

Die auf diese Weise erhaltenen K_D-Messwerte dienen als Ausgangswerte für weitere Auswertungen der Messergebnissen mit Hilfe der Freundlich – Isotherme (im folgenden Abschnitt).

Tab. 3-8 Massenbilanz-Beispiel für Eurosoil 3

Eurosoil 3								
Substanz	**$C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**$\Delta C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**UV-Signal (AE)**	**$C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**$\Delta C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**K_D**	**K_D Mittelwert**	**±Δ**
Propanil	$4{,}78 \cdot 10^{-6}$ $8{,}79 \cdot 10^{-6}$ $1{,}17 \cdot 10^{-5}$ $1{,}40 \cdot 10^{-5}$	$1{,}64 \cdot 10^{-6}$ $4{,}87 \cdot 10^{-6}$ $8{,}46 \cdot 10^{-6}$ $1{,}20 \cdot 10^{-5}$	0,634 1,164 1,555 1,855	$5{,}11 \cdot 10^{-5}$ $7{,}84 \cdot 10^{-5}$ $1{,}12 \cdot 10^{-4}$ $1{,}41 \cdot 10^{-4}$	$3{,}56 \cdot 10^{-5}$ $9{,}02 \cdot 10^{-5}$ $1{,}47 \cdot 10^{-5}$ $2{,}06 \cdot 10^{-5}$	10,7 8,9 9,6 10,1	9,8	0,9
Bromoxynil	$6{,}17 \cdot 10^{-6}$ $1{,}02 \cdot 10^{-5}$ $1{,}31 \cdot 10^{-5}$ $1{,}62 \cdot 10^{-5}$	$1{,}22 \cdot 10^{-6}$ $4{,}66 \cdot 10^{-6}$ $8{,}05 \cdot 10^{-6}$ $1{,}15 \cdot 10^{-5}$	0,561 0,932 1,196 1,478	$1{,}49 \cdot 10^{-5}$ $3{,}38 \cdot 10^{-5}$ $5{,}40 \cdot 10^{-5}$ $4{,}27 \cdot 10^{-5}$	$2{,}52 \cdot 10^{-5}$ $7{,}52 \cdot 10^{-5}$ $1{,}21 \cdot 10^{-4}$ $1{,}68 \cdot 10^{-4}$	2,4 3,3 4,1 2,6	3,1	1,0
Diuron	$4{,}01 \cdot 10^{-6}$ $7{,}34 \cdot 10^{-6}$ $9{,}77 \cdot 10^{-6}$ $1{,}16 \cdot 10^{-5}$	$1{,}84 \cdot 10^{-6}$ $5{,}11 \cdot 10^{-6}$ $8{,}32 \cdot 10^{-6}$ $1{,}16 \cdot 10^{-5}$	0,522 0,955 1,271 1,510	$1{,}36 \cdot 10^{-5}$ $1{,}99 \cdot 10^{-5}$ $2{,}34 \cdot 10^{-5}$ $1{,}82 \cdot 10^{-5}$	$3{,}56 \cdot 10^{-5}$ $8{,}82 \cdot 10^{-5}$ $1{,}42 \cdot 10^{-4}$ $1{,}91 \cdot 10^{-4}$	3,4 2,7 2,4 1,6	2,5	0,9
Carbofuran	$1{,}90 \cdot 10^{-5}$ $3{,}64 \cdot 10^{-5}$ $4{,}95 \cdot 10^{-5}$ $5{,}99 \cdot 10^{-5}$	$6{,}30 \cdot 10^{-6}$ $1{,}27 \cdot 10^{-5}$ $1{,}87 \cdot 10^{-5}$ $2{,}43 \cdot 10^{-5}$	0,200 0,383 0,520 0,629	$1{,}22 \cdot 10^{-4}$ $2{,}17 \cdot 10^{-4}$ $2{,}78 \cdot 10^{-4}$ $3{,}32 \cdot 10^{-4}$	$1{,}94 \cdot 10^{-4}$ $3{,}08 \cdot 10^{-4}$ $4{,}19 \cdot 10^{-4}$ $5{,}41 \cdot 10^{-4}$	6,4 6,0 5,6 5,5	5,9	0,4
4-Chloroanilin	$7{,}06 \cdot 10^{-6}$ $1{,}17 \cdot 10^{-5}$ $1{,}50 \cdot 10^{-5}$ $1{,}71 \cdot 10^{-5}$	$1{,}47 \cdot 10^{-6}$ $7{,}99 \cdot 10^{-6}$ $1{,}45 \cdot 10^{-5}$ $2{,}13 \cdot 10^{-5}$	0,607 1,006 1,292 1,466	$3{,}41 \cdot 10^{-5}$ $6{,}57 \cdot 10^{-5}$ $9{,}42 \cdot 10^{-5}$ $1{,}30 \cdot 10^{-4}$	$3{,}12 \cdot 10^{-5}$ $1{,}28 \cdot 10^{-4}$ $2{,}25 \cdot 10^{-4}$ $3{,}19 \cdot 10^{-4}$	4,8 5,6 6,3 7,6	6,1	1,4

Tab. 3-8 Massenbilanz-Beispiel für Eurosoil 3 (Fortsetzung)

Eurosoil 3								
Substanz	**$C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**$\Delta C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**UV-Signal (AE)**	**$C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**$\Delta C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**K_D**	**K_D Mittelwert**	**$\pm\Delta$**
n-Methylanilin	$6{,}93\cdot10^{-5}$	$7{,}96\cdot10^{-6}$	0,927	$2{,}22\cdot10^{-4}$	$1{,}92\cdot10^{-4}$	3,2	3,4	0,5
	$1{,}18\cdot10^{-4}$	$1{,}75\cdot10^{-5}$	1,587	$3{,}41\cdot10^{-4}$	$3{,}46\cdot10^{-4}$	2,9		
	$1{,}53\cdot10^{-4}$	$2{,}82\cdot10^{-5}$	2,050	$5{,}47\cdot10^{-4}$	$5{,}08\cdot10^{-4}$	3,6		
	$1{,}77\cdot10^{-4}$	$3{,}79\cdot10^{-5}$	2,373	$6{,}95\cdot10^{-4}$	$6{,}65\cdot10^{-4}$	3,9		
Anilin	$1{,}03\cdot10^{-5}$	$4{,}39\cdot10^{-6}$	0,141	$7{,}71\cdot10^{-5}$	$1{,}14\cdot10^{-4}$	7,5	3,9	2,7
	$1{,}93\cdot10^{-5}$	$1{,}02\cdot10^{-5}$	0,264	$8{,}88\cdot10^{-5}$	$1{,}92\cdot10^{-4}$	4,6		
	$2{,}63\cdot10^{-5}$	$1{,}58\cdot10^{-5}$	0,360	$7{,}94\cdot10^{-5}$	$2{,}73\cdot10^{-4}$	3,2		
	$3{,}08\cdot10^{-5}$	$2{,}16\cdot10^{-5}$	0,423	$7{,}74\cdot10^{-5}$	$3{,}54\cdot10^{-4}$	2,5		
	$3{,}40\cdot10^{-5}$	$2{,}42\cdot10^{-5}$	0,466	$6{,}92\cdot10^{-5}$	$3{,}90\cdot10^{-4}$	2,0		
4-Chlorphenol	$1{,}11\cdot10^{-5}$	$2{,}14\cdot10^{-6}$	0,742	$7{,}40\cdot10^{-5}$	$4{,}28\cdot10^{-5}$	6,7	8,9	3,8
	$1{,}95\cdot10^{-5}$	$8{,}95\cdot10^{-6}$	1,303	$1{,}26\cdot10^{-4}$	$1{,}44\cdot10^{-4}$	6,5		
	$2{,}51\cdot10^{-5}$	$1{,}58\cdot10^{-5}$	1,677	$1{,}78\cdot10^{-4}$	$2{,}44\cdot10^{-4}$	7,1		
	$2{,}52\cdot10^{-5}$	$2{,}23\cdot10^{-5}$	1,674	$3{,}53\cdot10^{-4}$	$3{,}48\cdot10^{-4}$	14,0		
	$3{,}15\cdot10^{-5}$	$2{,}33\cdot10^{-5}$	2,101	$3{,}23\cdot10^{-4}$	$3{,}59\cdot10^{-4}$	10,2		
4-tert-Butylphenol	$9{,}17\cdot10^{-6}$	$2{,}54\cdot10^{-6}$	0,423	$2{,}78\cdot10^{-5}$	$5{,}63\cdot10^{-5}$	3,0	2,9	0,3
	$1{,}66\cdot10^{-5}$	$6{,}40\cdot10^{-6}$	0,768	$4{,}19\cdot10^{-5}$	$1{,}18\cdot10^{-4}$	2,5		
	$2{,}11\cdot10^{-5}$	$1{,}01\cdot10^{-5}$	0,937	$6{,}73\cdot10^{-5}$	$1{,}78\cdot10^{-4}$	3,2		
	$2{,}51\cdot10^{-5}$	$1{,}36\cdot10^{-5}$	1,158	$6{,}78\cdot10^{-5}$	$2{,}42\cdot10^{-4}$	2,7		
o-Kresol	$1{,}32\cdot10^{-5}$	$1{,}80\cdot10^{-6}$	0,843	$6{,}13\cdot10^{-5}$	$3{,}78\cdot10^{-5}$	4,6	9,8	9,8
	$1{,}90\cdot10^{-5}$	$5{,}64\cdot10^{-6}$	1,211	$2{,}02\cdot10^{-4}$	$9{,}34\cdot10^{-5}$	10,6		
	$2{,}49\cdot10^{-5}$	$9{,}54\cdot10^{-6}$	1,583	$2{,}92\cdot10^{-4}$	$1{,}50\cdot10^{-4}$	11,7		
	$2{,}92\cdot10^{-5}$	$1{,}34\cdot10^{-5}$	1,856	$3{,}59\cdot10^{-4}$	$2{,}04\cdot10^{-4}$	12,3		

Tab. 3-8 Massenbilanz-Beispiel für Eurosoil 3 (Fortsetzung)

Eurosoil 3								
Substanz	**$C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**$\Delta C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**UV-Signal (AE)**	**$C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**$\Delta C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**K_D**	**K_D Mittelwert**	**$\pm\Delta$**
Bisphenol A	$7{,}09 \cdot 10^{-6}$ $1{,}22 \cdot 10^{-5}$ $1{,}61 \cdot 10^{-5}$ $1{,}95 \cdot 10^{-5}$	$3{,}18 \cdot 10^{-6}$ $7{,}23 \cdot 10^{-6}$ $1{,}13 \cdot 10^{-5}$ $1{,}53 \cdot 10^{-5}$	0,433 0,748 0,985 1,195	$2{,}67 \cdot 10^{-3}$ $5{,}27 \cdot 10^{-3}$ $7{,}93 \cdot 10^{-3}$ $1{,}07 \cdot 10^{-2}$	$6{,}38 \cdot 10^{-5}$ $1{,}28 \cdot 10^{-4}$ $1{,}93 \cdot 10^{-4}$ $2{,}62 \cdot 10^{-4}$	376,6 432,0 492,5 548,7	462,4	86,1
Phenol	$1{,}59 \cdot 10^{-5}$ $2{,}64 \cdot 10^{-5}$ $3{,}51 \cdot 10^{-5}$ $4{,}24 \cdot 10^{-5}$	$4{,}05 \cdot 10^{-6}$ $9{,}11 \cdot 10^{-6}$ $1{,}41 \cdot 10^{-5}$ $1{,}91 \cdot 10^{-5}$	0,248 0,413 0,549 0,663	$1{,}02 \cdot 10^{-4}$ $1{,}90 \cdot 10^{-4}$ $2{,}48 \cdot 10^{-4}$ $2{,}53 \cdot 10^{-4}$	$1{,}10 \cdot 10^{-4}$ $1{,}87 \cdot 10^{-4}$ $2{,}68 \cdot 10^{-4}$ $3{,}45 \cdot 10^{-4}$	6,3 7,2 7,6 8,1	6,7	0,6

Tab. 3-9 Massenbilanz-Beispiel für Eurosoil 4

Eurosoil 4								
Substanz	**$C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**$\Delta C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**UV-Signal (AE)**	**$C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**$\Delta C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**K_D**	**K_D Mittelwert**	**±Δ**
Propanil	$6{,}71 \cdot 10^{-6}$ $1{,}18 \cdot 10^{-5}$ 1,51·10-5 $1{,}72 \cdot 10^{-5}$	$2{,}05 \cdot 10^{-6}$ $5{,}92 \cdot 10^{-6}$ $9{,}91 \cdot 10^{-6}$ $1{,}38 \cdot 10^{-5}$	0,889 1,565 1,995 2,287	$1{,}69 \cdot 10^{-5}$ $2{,}36 \cdot 10^{-5}$ $3{,}74 \cdot 10^{-5}$ $4{,}97 \cdot 10^{-5}$	$4{,}09 \cdot 10^{-5}$ $1{,}03 \cdot 10^{-4}$ $1{,}64 \cdot 10^{-4}$ $2{,}24 \cdot 10^{-4}$	2,5 2,0 2,5 2,9	2,5	0,4
Diuron	$2{,}84 \cdot 10^{-6}$ $4{,}81 \cdot 10^{-6}$ $6{,}26 \cdot 10^{-6}$ $7{,}18 \cdot 10^{-6}$	$1{,}89 \cdot 10^{-6}$ $5{,}36 \cdot 10^{-6}$ $8{,}84 \cdot 10^{-6}$ $1{,}24 \cdot 10^{-5}$	0,370 0,626 0,815 0,935	$9{,}39 \cdot 10^{-6}$ $1{,}68 \cdot 10^{-5}$ $2{,}03 \cdot 10^{-5}$ $2{,}62 \cdot 10^{-5}$	$3{,}46 \cdot 10^{-5}$ $8{,}75 \cdot 10^{-5}$ $1{,}40 \cdot 10^{-4}$ $1{,}92 \cdot 10^{-4}$	3,3 3,5 3,2 3,6	3,4	0,2
Carbofuran	$3{,}00 \cdot 10^{-5}$ $4{,}76 \cdot 10^{-5}$ $5{,}99 \cdot 10^{-5}$ $6{,}87 \cdot 10^{-5}$	$7{,}08 \cdot 10^{-6}$ $1{,}45 \cdot 10^{-5}$ $2{,}23 \cdot 10^{-5}$ $3{,}02 \cdot 10^{-5}$	0,315 0,500 0,629 0,721	$6{,}55 \cdot 10^{-5}$ $1{,}95 \cdot 10^{-4}$ $3{,}18 \cdot 10^{-4}$ $4{,}34 \cdot 10^{-4}$	$1{,}85 \cdot 10^{-4}$ $2{,}99 \cdot 10^{-4}$ $4{,}13 \cdot 10^{-4}$ $5{,}29 \cdot 10^{-4}$	2,2 4,1 5,3 6,3	4,5	2,1
4-Chloroanilin	$6{,}93 \cdot 10^{-6}$ $1{,}17 \cdot 10^{-5}$ $1{,}43 \cdot 10^{-5}$ $1{,}67 \cdot 10^{-5}$	$1{,}33 \cdot 10^{-6}$ $8{,}38 \cdot 10^{-6}$ $1{,}55 \cdot 10^{-5}$ $2{,}25 \cdot 10^{-5}$	0,596 1,010 1,227 1,435	$9{,}49 \cdot 10^{-6}$ $1{,}98 \cdot 10^{-5}$ $4{,}95 \cdot 10^{-5}$ $6{,}03 \cdot 10^{-5}$	$2{,}78 \cdot 10^{-5}$ $1{,}29 \cdot 10^{-4}$ $2{,}28 \cdot 10^{-4}$ $3{,}30 \cdot 10^{-4}$	1,4 1,7 3,5 3,6	2,5	1,1
4-Chlorphenol	$2{,}02 \cdot 10^{-5}$ $3{,}32 \cdot 10^{-5}$ $4{,}05 \cdot 10^{-5}$ $4{,}38 \cdot 10^{-5}$	$2{,}38 \cdot 10^{-6}$ $9{,}52 \cdot 10^{-6}$ $1{,}69 \cdot 10^{-5}$ $2{,}40 \cdot 10^{-5}$	1,345 2,209 2,701 2,918	$7{,}17 \cdot 10^{-5}$ $1{,}72 \cdot 10^{-4}$ $3{,}24 \cdot 10^{-4}$ $5{,}19 \cdot 10^{-4}$	$4{,}80 \cdot 10^{-5}$ $1{,}53 \cdot 10^{-4}$ $2{,}61 \cdot 10^{-4}$ $3{,}65 \cdot 10^{-4}$	3,5 5,2 8,0 11,8	7,1	4,1

Tab. 3-9 Massenbilanz-Beispiel für Eurosoil 4 (Fortsetzung)

Eurosoil 4								
Substanz	**$C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**$\Delta C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**UV-Signal (AE)**	**$C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**$\Delta C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**K_D**	**K_D Mittelwert**	**±Δ**
4-tert-Butylphenol	$1{,}05 \cdot 10^{-5}$ $1{,}75 \cdot 10^{-5}$ $2{,}19 \cdot 10^{-5}$ $2{,}54 \cdot 10^{-5}$	$1{,}94 \cdot 10^{-6}$ $9{,}09 \cdot 10^{-6}$ $1{,}63 \cdot 10^{-5}$ $2{,}37 \cdot 10^{-5}$	0,484 0,806 1,010 1,170	$1{,}40 \cdot 10^{-5}$ $3{,}22 \cdot 10^{-5}$ $6{,}26 \cdot 10^{-5}$ $7{,}95 \cdot 10^{-5}$	$4{,}57 \cdot 10^{-5}$ $1{,}52 \cdot 10^{-4}$ $2{,}60 \cdot 10^{-4}$ $3{,}69 \cdot 10^{-4}$	1,4 1,8 2,8 3,1	2,3	0,9
o-Kresol	$2{,}04 \cdot 10^{-5}$ $3{,}31 \cdot 10^{-5}$ $3{,}94 \cdot 10^{-5}$ $4{,}16 \cdot 10^{-5}$	$5{,}39 \cdot 10^{-6}$ $9{,}25 \cdot 10^{-6}$ $1{,}30 \cdot 10^{-5}$ $1{,}70 \cdot 10^{-5}$	1,294 2,106 2,505 2,643	$4{,}91 \cdot 10^{-5}$ $1{,}12 \cdot 10^{-4}$ $2{,}44 \cdot 10^{-4}$ $4{,}22 \cdot 10^{-4}$	$9{,}15 \cdot 10^{-5}$ $1{,}49 \cdot 10^{-4}$ $2{,}05 \cdot 10^{-4}$ $2{,}58 \cdot 10^{-4}$	2,4 3,1 6,2 10,1	5,5	3,9
Bisphenol A	$9{,}41 \cdot 10^{-6}$ $1{,}63 \cdot 10^{-5}$ $2{,}10\text{-}10^{-5}$ $2{,}43 \cdot 10^{-5}$	$2{,}59 \cdot 10^{-6}$ $6{,}51 \cdot 10^{-6}$ $1{,}04 \cdot 10^{-5}$ $1{,}44 \cdot 10^{-5}$	0,575 0,999 1,283 1,482	$3{,}71 \cdot 10^{-5}$ $5{,}84 \cdot 10^{-5}$ $8{,}13 \cdot 10^{-5}$ $1{,}02 \cdot 10^{-4}$	$5{,}00 \cdot 10^{-5}$ $1{,}07 \cdot 10^{-4}$ $1{,}64 \cdot 10^{-4}$ $2{,}21 \cdot 10^{-4}$	3,9 3,6 3,8 4,2	3,9	0,3
Phenol	$1{,}85 \cdot 10^{-5}$ $3{,}10 \cdot 10^{-5}$ $3{,}73 \cdot 10^{-5}$ $4{,}06 \cdot 10^{-5}$	$5{,}31 \cdot 10^{-6}$ $9{,}62 \cdot 10^{-6}$ $1{,}38 \cdot 10^{-5}$ $1{,}79 \cdot 10^{-5}$	1,187 1,986 2,386 2,601	$4{,}22 \cdot 10^{-5}$ $9{,}65 \cdot 10^{-5}$ $2{,}36 \cdot 10^{-4}$ $3{,}73 \cdot 10^{-4}$	$9{,}70 \cdot 10^{-5}$ $1{,}66 \cdot 10^{-4}$ $2{,}39 \cdot 10^{-4}$ $3{,}05 \cdot 10^{-4}$	2,3 3,1 6,3 9,2	5,2	3,4

Tab. 3-9 Massenbilanz-Beispiel für Eurosoil 4 (Fortsetzung)

Eurosoil 4								
Substanz	**$C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**$\Delta C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**UV-Signal (AE)**	**$C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**$\Delta C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**K_D**	**K_D Mittelwert**	**$\pm\Delta$**
2-Nitrophenol	$9{,}82 \cdot 10^{-6}$ $1{,}77 \cdot 10^{-5}$ $2{,}15 \cdot 10^{-5}$ $2{,}49 \cdot 10^{-5}$	$1{,}71 \cdot 10^{-6}$ $8{,}80 \cdot 10^{-6}$ $1{,}60 \cdot 10^{-5}$ $2{,}33 \cdot 10^{-5}$	0,762 1,375 1,665 1,935	$1{,}07 \cdot 10^{-4}$ $1{,}77 \cdot 10^{-4}$ $2{,}92 \cdot 10^{-4}$ $3{,}84 \cdot 10^{-4}$	$3{,}54 \cdot 10^{-5}$ $1{,}39 \cdot 10^{-4}$ $2{,}42 \cdot 10^{-4}$ $3{,}46 \cdot 10^{-4}$	10,8 10,0 13,6 15,4	12,5	2,7
n-Methylanilin	$6{,}61 \cdot 10^{-6}$ $1{,}25 \cdot 10^{-5}$ $1{,}71 \cdot 10^{-5}$ $2{,}04 \cdot 10^{-5}$	$2{,}70 \cdot 10^{-6}$ $9{,}93 \cdot 10^{-6}$ $1{,}78 \cdot 10^{-5}$ $2{,}57 \cdot 10^{-5}$	0,547 1,019 1,385 1,647	$5{,}61 \cdot 10^{-5}$ $5{,}54 \cdot 10^{-5}$ $5{,}54 \cdot 10^{-5}$ $5{,}22 \cdot 10^{-5}$	$5{,}47 \cdot 10^{-5}$ $1{,}64 \cdot 10^{-4}$ $2{,}82 \cdot 10^{-4}$ $4{,}07 \cdot 10^{-4}$	8,5 4,4 3,2 2,6	4,7	3,0

Tab. 3-10 Massenbilanz-Beispiel für Eurosoil 5

Eurosoil 5								
Substanz	**$C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**$\Delta C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**UV-Signal (AE)**	**$C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**$\Delta C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**K_D**	**K_D Mittelwert**	**$\pm\Delta$**
Propanil	$4{,}73 \cdot 10^{-6}$	$1{,}75 \cdot 10^{-6}$	0,627	$9{,}43 \cdot 10^{-5}$	$3{,}40 \cdot 10^{-5}$	20,0	16,0	3,0
	$9{,}45 \cdot 10^{-6}$	$4{,}89 \cdot 10^{-6}$	1,251	$1{,}54 \cdot 10^{-4}$	$8{,}37 \cdot 10^{-5}$	16,2		
	$1{,}29 \cdot 10^{-5}$	$8{,}19 \cdot 10^{-6}$	1,713	$2{,}06 \cdot 10^{-4}$	$1{,}34 \cdot 10^{-4}$	16,0		
	$1{,}64 \cdot 10^{-5}$	$1{,}15 \cdot 10^{-5}$	2,17	$2{,}28 \cdot 10^{-4}$	$1{,}85 \cdot 10^{-4}$	13,9		
	$1{,}85 \cdot 10^{-5}$	$1{,}49 \cdot 10^{-5}$	2,449	$2{,}59 \cdot 10^{-4}$	$2{,}35 \cdot 10^{-4}$	14,0		
Bromoxynil	$6{,}00 \cdot 10^{-6}$	$1{,}43 \cdot 10^{-6}$	0,546	$4{,}37 \cdot 10^{-5}$	$2{,}89 \cdot 10^{-5}$	7,3	6,2	1,3
	$1{,}07 \cdot 10^{-5}$	$5{,}01 \cdot 10^{-6}$	0,997	$6{,}72 \cdot 10^{-5}$	$8{,}14 \cdot 10^{-5}$	6,3		
	$1{,}41 \cdot 10^{-5}$	$8{,}61 \cdot 10^{-6}$	1,287	$9{,}68 \cdot 10^{-5}$	$1{,}34 \cdot 10^{-4}$	6,9		
	$1{,}78 \cdot 10^{-5}$	$1{,}22 \cdot 10^{-5}$	1,619	$8{,}15 \cdot 10^{-5}$	$1{,}87 \cdot 10^{-4}$	4,6		
Metribuzin	$7{,}81 \cdot 10^{-6}$	$2{,}79 \cdot 10^{-6}$	0,365	$1{,}71 \cdot 10^{-5}$	$5{,}77 \cdot 10^{-5}$	2,2	1,5	0,8
	$1{,}35 \cdot 10^{-5}$	$6{,}79 \cdot 10^{-6}$	0,629	$2{,}76 \cdot 10^{-5}$	$1{,}17 \cdot 10^{-4}$	2,0		
	$1{,}79 \cdot 10^{-5}$	$1{,}08 \cdot 10^{-5}$	0,839	$1{,}89 \cdot 10^{-5}$	$1{,}76 \cdot 10^{-4}$	1,0		
	$2{,}09 \cdot 10^{-5}$	$1{,}48 \cdot 10^{-5}$	0,979	$1{,}19 \cdot 10^{-5}$	$2{,}35 \cdot 10^{-4}$	0,6		
Carbofuran	$2{,}47 \cdot 10^{-5}$	$6{,}92 \cdot 10^{-6}$	0,260	$1{,}88 \cdot 10^{-4}$	$1{,}79 \cdot 10^{-4}$	7,6	6,7	1,0
	$4{,}37 \cdot 10^{-5}$	$1{,}41 \cdot 10^{-5}$	0,459	$3{,}09 \cdot 10^{-4}$	$2{,}91 \cdot 10^{-4}$	7,1		
	$5{,}87 \cdot 10^{-5}$	$2{,}14 \cdot 10^{-5}$	0,616	$3{,}73 \cdot 10^{-4}$	$4{,}04 \cdot 10^{-4}$	6,3		
	$7{,}01 \cdot 10^{-5}$	$2{,}85 \cdot 10^{-5}$	0,736	$3{,}97 \cdot 10^{-4}$	$5{,}18 \cdot 10^{-4}$	5,7		
Diazinon	$7{,}84 \cdot 10^{-6}$	$6{,}79 \cdot 10^{-6}$	0,105	$1{,}34 \cdot 10^{-4}$	$1{,}56 \cdot 10^{-4}$	17,1	26,2	8,7
	$1{,}16 \cdot 10^{-5}$	$1{,}23 \cdot 10^{-5}$	0,156	$3{,}13 \cdot 10^{-4}$	$2{,}37 \cdot 10^{-4}$	27,0		
	$1{,}42 \cdot 10^{-5}$	$1{,}75 \cdot 10^{-5}$	0,191	$4{,}91 \cdot 10^{-4}$	$3{,}19 \cdot 10^{-4}$	34,5		

Tab. 3-10 Massenbilanz-Beispiel für Eurosoil 5 (Fortsetzung)

Eurosoil 5								
Substanz	**$C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**$\Delta C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**UV-Signal (AE)**	**$C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**$\Delta C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**K_D**	**K_D Mittelwert**	**$\pm\Delta$**
4-Chloroanilin	$2{,}19\cdot10^{-6}$	$1{,}30\cdot10^{-6}$	0,188	$1{,}41\cdot10^{-4}$	$2{,}73\cdot10^{-5}$	64,3	47,2	12,1
	$5{,}20\cdot10^{-6}$	$8{,}17\cdot10^{-6}$	0,447	$2{,}35\cdot10^{-4}$	$1{,}27\cdot10^{-4}$	45,2		
	$7{,}36\cdot10^{-6}$	$1{,}49\cdot10^{-5}$	0,633	$3{,}26\cdot10^{-4}$	$2{,}27\cdot10^{-4}$	44,2		
	$9{,}47\cdot10^{-6}$	$2{,}18\cdot10^{-5}$	0,814	$4{,}00\cdot10^{-4}$	$3{,}28\cdot10^{-4}$	42,2		
	$1{,}14\cdot10^{-5}$	$2{,}87\cdot10^{-5}$	0,979	$4{,}57\cdot10^{-4}$	$4{,}26\cdot10^{-4}$	40,1		
n-Methylanilin	$3{,}95\cdot10^{-5}$	$7{,}52\cdot10^{-6}$	0,528	$9{,}29\cdot10^{-4}$	$1{,}74\cdot10^{-4}$	23,5	17,7	5,0
	$8{,}16\cdot10^{-5}$	$1{,}68\cdot10^{-5}$	1,091	$1{,}42\cdot10^{-3}$	$3{,}23\cdot10^{-4}$	17,4		
	$1{,}12\cdot10^{-4}$	$2{,}59\cdot10^{-5}$	1,500	$1{,}85\cdot10^{-3}$	$4{,}71\cdot10^{-4}$	16,5		
	$1{,}44\cdot10^{-4}$	$3{,}54\cdot10^{-5}$	1,927	$1{,}94\cdot10^{-3}$	$6{,}23\cdot10^{-4}$	13,5		
Anilin	$0{,}97\cdot10^{-5}$	$4{,}55\cdot10^{-6}$	0,156	$2{,}79\cdot10^{-4}$	$1{,}20\cdot10^{-4}$	28,7	51,4	33,8
	$2{,}15\cdot10^{-5}$	$1{,}03\cdot10^{-5}$	0,344	$4{,}16\cdot10^{-4}$	$2{,}03\cdot10^{-4}$	19,3		
	$3{,}29\cdot10^{-5}$	$1{,}04\cdot10^{-5}$	0,528	$2{,}86\cdot10^{-3}$	$2{,}08\cdot10^{-4}$	86,9		
	$4{,}11\cdot10^{-5}$	$1{,}59\cdot10^{-5}$	0,657	$2{,}90\cdot10^{-3}$	$2{,}90\cdot10^{-4}$	70,5		
4-Chlorophenol	$7{,}81\cdot10^{-5}$	$6{,}96\cdot10^{-6}$	0,895	$2{,}37\cdot10^{-4}$	$1{,}73\cdot10^{-4}$	3,0	2,4	0,6
	$1{,}36\cdot10^{-4}$	$1{,}65\cdot10^{-5}$	1,563	$2{,}60\cdot10^{-4}$	$3{,}16\cdot10^{-4}$	1,9		
	$1{,}72\cdot10^{-4}$	$2{,}63\cdot10^{-5}$	1,975	$4{,}58\cdot10^{-4}$	$4{,}67\cdot10^{-4}$	2,7		
	$2{,}04\cdot10^{-4}$	$3{,}59\cdot10^{-5}$	2,337	$4{,}26\cdot10^{-4}$	$6{,}16\cdot10^{-4}$	2,1		
4-tert-Butylphenol	$1{,}88\cdot10^{-5}$	$2{,}56\cdot10^{-6}$	0,869	$1{,}28\cdot10^{-4}$	$5{,}46\cdot10^{-5}$	6,8	5,5	0,8
	$3{,}41\cdot10^{-5}$	$9{,}73\cdot10^{-6}$	1,573	$1{,}75\cdot10^{-4}$	$1{,}62\cdot10^{-4}$	5,1		
	$4{,}48\cdot10^{-5}$	$1{,}68\cdot10^{-5}$	2,069	$2{,}11\cdot10^{-4}$	$2{,}70\cdot10^{-4}$	4,7		
	$5{,}11\cdot10^{-5}$	$2{,}39\cdot10^{-5}$	2,359	$2{,}74\cdot10^{-4}$	$3{,}76\cdot10^{-4}$	5,4		

Tab. 3-10 Massenbilanz-Beispiel für Eurosoil 5 (Fortsetzung)

Eurosoil 5								
Substanz	**$C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**$\Delta C_{in\ Lös.}$ (g/g)**	**UV-Signal (AE)**	**$C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**$\Delta C_{auf\ ES}$ (g/g)**	**K_D**	**K_D Mittelwert**	**$\pm\Delta$**
o-Kresol	$2{,}12 \cdot 10^{-5}$	$6{,}04 \cdot 10^{-6}$	1,350	$9{,}20 \cdot 10^{-5}$	$1{,}02 \cdot 10^{-4}$	4,3	7,2	3,1
	$3{,}40 \cdot 10^{-5}$	$1{,}29 \cdot 10^{-5}$	2,160	$2{,}23 \cdot 10^{-4}$	$2{,}05 \cdot 10^{-4}$	6,5		
	$4{,}03 \cdot 10^{-5}$	$1{,}99 \cdot 10^{-5}$	2,560	$4{,}29 \cdot 10^{-4}$	$3{,}08 \cdot 10^{-4}$	10,6		
Bisphenol A	$7{,}78 \cdot 10^{-6}$	$2{,}56 \cdot 10^{-6}$	0,475	$1{,}10 \cdot 10^{-4}$	$5{,}28 \cdot 10^{-5}$	14,1	10,8	3,0
	$1{,}45 \cdot 10^{-5}$	$6{,}37 \cdot 10^{-6}$	0,889	$1{,}77 \cdot 10^{-4}$	$1{,}12 \cdot 10^{-4}$	12,2		
	$2{,}03 \cdot 10^{-5}$	$1{,}00 \cdot 10^{-5}$	1,243	$2{,}03 \cdot 10^{-4}$	$1{,}73 \cdot 10^{-4}$	10,0		
	$2{,}43 \cdot 10^{-5}$	$1{,}37 \cdot 10^{-5}$	1,486	$2{,}30 \cdot 10^{-4}$	$2{,}32 \cdot 10^{-4}$	9,5		
	$2{,}80 \cdot 10^{-5}$	$1{,}75 \cdot 10^{-5}$	1,710	$2{,}26 \cdot 10^{-4}$	$2{,}92 \cdot 10^{-4}$	8,1		
Phenol	$1{,}81 \cdot 10^{-5}$	$5{,}33 \cdot 10^{-6}$	1,157	$5{,}81 \cdot 10^{-5}$	$9{,}59 \cdot 10^{-5}$	3,2	7,1	4,4
	$2{,}95 \cdot 10^{-5}$	$9{,}61 \cdot 10^{-6}$	1,894	$1{,}46 \cdot 10^{-4}$	$1{,}64 \cdot 10^{-4}$	4,9		
	$3{,}52 \cdot 10^{-5}$	$1{,}35 \cdot 10^{-5}$	2,251	$2{,}88 \cdot 10^{-4}$	$2{,}29 \cdot 10^{-4}$	8,2		
	$3{,}80 \cdot 10^{-5}$	$1{,}77 \cdot 10^{-5}$	2,434	$4{,}59 \cdot 10^{-4}$	$2{,}94 \cdot 10^{-4}$	12,1		
2-Nitrophenol	$1{,}10 \cdot 10^{-5}$	$1{,}64 \cdot 10^{-6}$	0,857	$4{,}94 \cdot 10^{-5}$	$3{,}66 \cdot 10^{-5}$	4,5	3,7	0,7
	$1{,}94 \cdot 10^{-5}$	$8{,}62 \cdot 10^{-6}$	1,503	$7{,}58 \cdot 10^{-5}$	$1{,}46 \cdot 10^{-4}$	3,9		
	$2{,}56 \cdot 10^{-5}$	$1{,}55 \cdot 10^{-5}$	1,990	$7{,}89 \cdot 10^{-5}$	$2{,}53 \cdot 10^{-4}$	3,1		
	$2{,}95 \cdot 10^{-5}$	$2{,}25 \cdot 10^{-5}$	2,288	$9{,}96 \cdot 10^{-5}$	$3{,}64 \cdot 10^{-4}$	3,4		
	$3{,}22 \cdot 10^{-5}$	$2{,}97 \cdot 10^{-5}$	2,500	$1{,}14 \cdot 10^{-4}$	$4{,}73 \cdot 10^{-4}$	3,5		

Bei Eurosoil 3 liegen die Verteilungskoeffizienten zwischen K_D= 1,6 (für Diuron, bei der letzten Zugabe) und K_D= 548 (für Bisphenol A, bei der vierten Zugabe). Bei Eurosoil 4 beträgt der kleinste Verteilungskoeffizient 1,4 (für 4-Chloroanilin und 4-tert-Butylphenol) und der größte 15,4 (für 2-Nitrophenol). Bei Eurosoil 5 liegen die K_D-Werte zwischen 0,6 (für Metribuzin, im vierten Schritt) und 87,0 (für Anilin, bei der dritten Zugabe).

Das UV-Signal befand sich im Bereich von 0,105 AE bis 2,91 AE. Der Fehler in der Konzentration des Sorptivs in der Lösung lag zwischen $1{,}2 \cdot 10^{-6}$ g/g (für Bromoxynil mit Eurosoil 3) und $3{,}8 \cdot 10^{-5}$ g/g (für n-Methylanilin mit Eurosoil 3). Die höchste Beladung betrug $2{,}9 \cdot 10^{-3}$ g/g für Anilin auf Eurosoil 5. Der Fehler bei der Beladung auf Eurosoil 3 betrug zwischen $2{,}73 \cdot 10^{-5}$ g/g (für 4-Chloroanilin) und $6{,}65 \cdot 10^{-4}$ g/g (für n-Methylanilin).

Als Beispiel wird die Sorption von Propanil auf Eurosoil 3 behandelt. Die Messwerte für den Verteilungskoeffizienten K_D betragen zwischen 8,9 und 10,7, die Konzentration in der Lösung $C_{inLös}$ liegt zwischen $4{,}8 \cdot 10^{-6}$ und $1{,}40 \cdot 10^{-5}$ g/g und die Steigung beträgt S=133000 AE/(g/g). Nach den Angaben in der Tab. 3-7, soll in diesem Beispiel der Verteilungskoeffizient zwischen 8,9 und 10,1 liegen, der Mittelwert beträgt 9,8.
Ein anderes Beispiel: 4-Chloranilin auf Eurosoil 3: die Messwerte für den Verteilungskoeffizienten betragen zwischen 4,8 und 7,6 und die Konzentration in der Lösung beträgt $7 \cdot 10^{-6}$ bis $1{,}7 \cdot 10^{-5}$ g/g und die Steigung S=86000 AE/(g/g). Daraus folgt, dass mindestens vier Schritte nötig sind um den Verteilungskoeffizient mit einem Fehler $\leq$10% zu bestimmen. Der Verteilungskoeffizient von 4-Chloranilin beträgt 7,6.

Mittelung der Messwerte

Um die Reproduzierbarkeit der Messwerte zu überprüfen, wurden für jedes Sorptiv mehrere Beladungsversuche durchgeführt. Die dadurch experimentell bestimmten Verteilungskoeffizienten K_D und deren Unsicherheiten (ΔK_D) wurden graphisch dargestellt. Für jeden Wertstoff wurde durch alle Messpunkte eine mittelwertbildende Gerade bestimmt (vgl. Tabelle 3-11). Die Abbildung 3.3 zeigt als typisches Beispiel die Ergebnisse für die Sorption von Propanil auf Eurosoil 3.

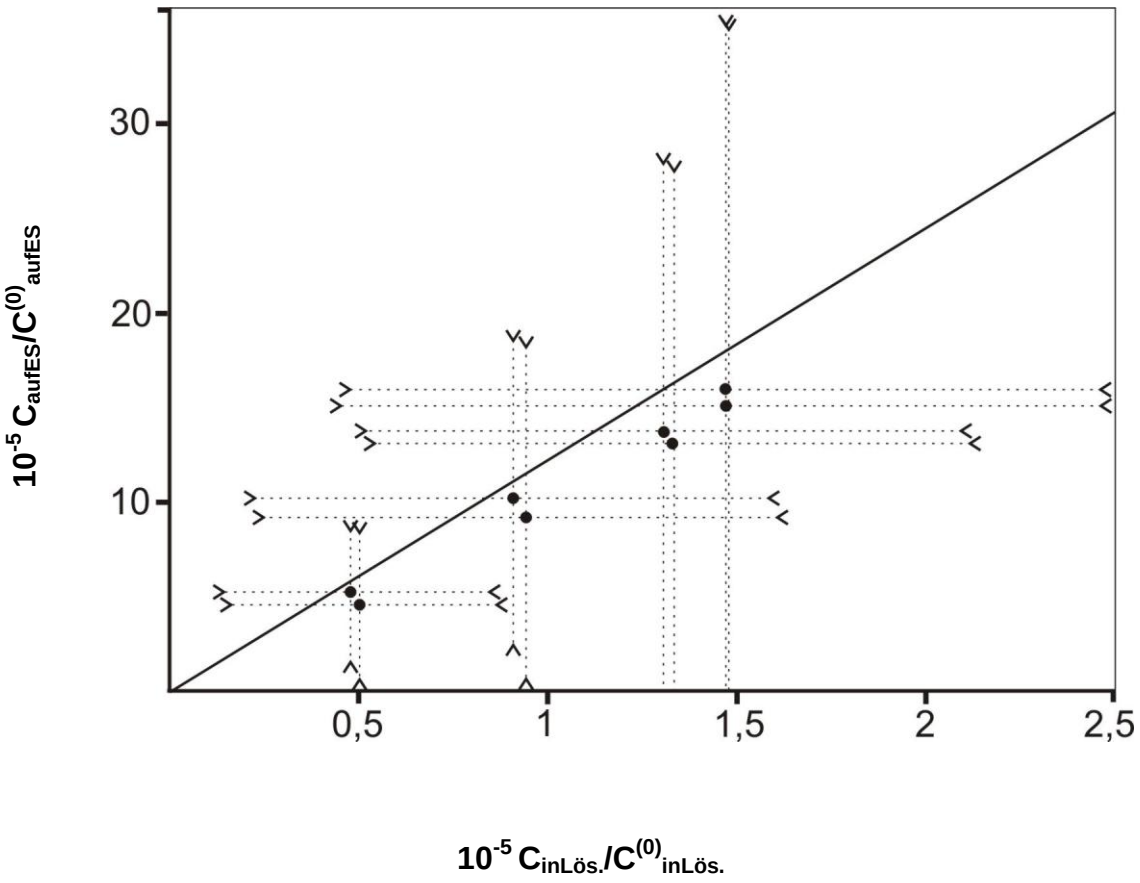

Abb. 3.3 Mittelwertbildung mit Fehlerberücksichtigung für Propanil auf Eurosoil 3 (• Messpunkte, >····< - Fehler in $C_{inLös.}$ und Fehler in C_{aufES}).

Um zu ermitteln, wie stark der Messfehler die Bestimmung des Verteilungskoeffizienten beeinflusst, wurde eine zweite Mittelwertbildung vorgenommen (Abb.3.4). Dabei wurden alle experimentell bestimmten Messpunkte (ohne die dazu gehörigen Messfehler) berücksichtigt. Das Ergebnis wird als K_{D1} – Wert in der Tabelle 3-11 angegeben.

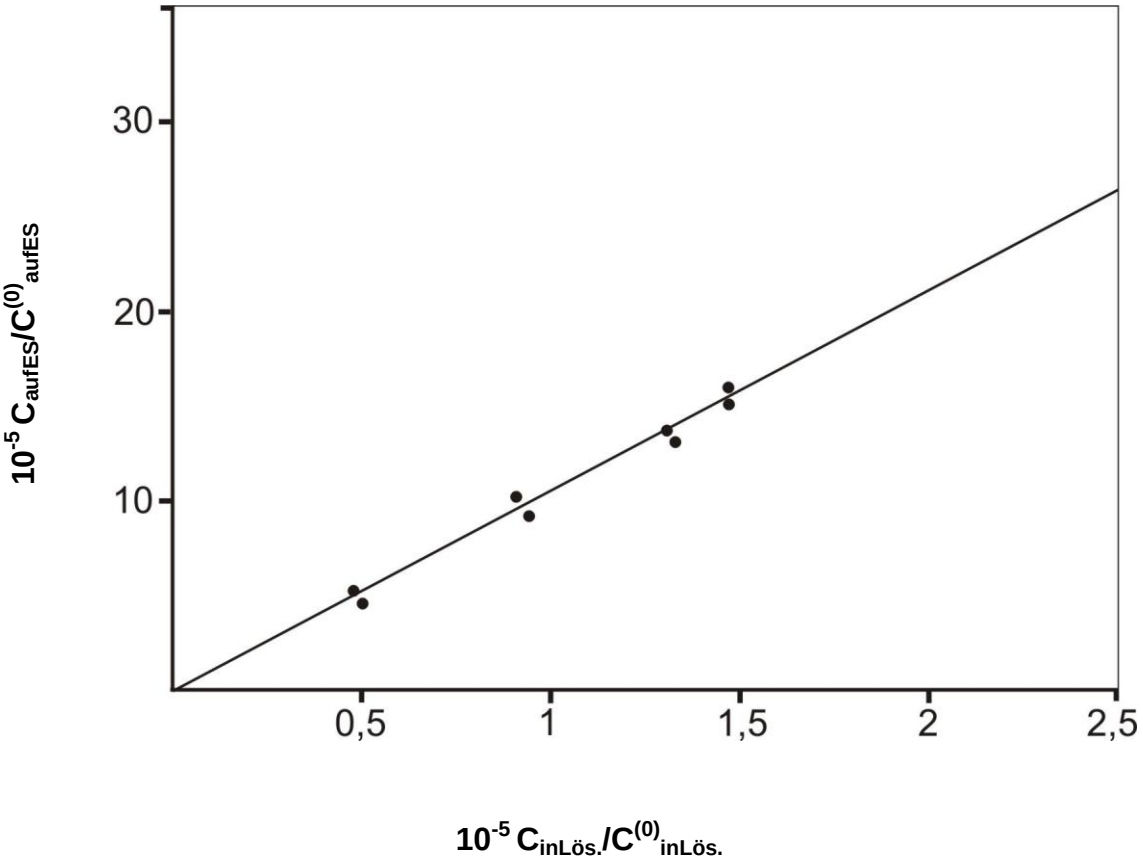

Abb. 3.4 Mittelwertbildung ohne Fehlerberücksichtigung für Propanil auf Eurosoil 3, (• Messpunkte).

Die Tabelle 3-11 fasst für alle untersuchten Sorptiv/Eurosoil Kombinationen die K_D und die K_{D1} Werte mit dazu gehörigen ΔK_{D1}-Unsicherheiten zusammen und vergleicht sie mit den Literaturangaben K_{Lit}. Die ΔK_{D1} Unsicherheit ist entsprechend Gl. (33) definiert:

$$\pm\Delta = \frac{(höchsterK_D Wert - niedriegsterK_D Wert)}{2}$$

Die Konzentration einer Komponente in der wässrigen Lösung wurde von Gawlik (1997) in g/mL angegeben. Da es sich stets um hochverdünnte wässrige Lösungen bei der Raumtemperatur handelt, wird angenommen, dass 1 mL der Lösung 1 Gramm wiegt. Damit ergeben sich die gleichen Zahlenwerte für Verteilungskoeffizienten wie in der vorliegenden Arbeit.

Die Ergebnisse (nicht der Vergleich mit den Literaturangaben) werden im nächsten Kapitel diskutiert. Aufgrund fehlender weiterer Untersuchungen mit den Eurosoils als Sorbent bei der Bestimmung von endokrinen Stoff/Boden – Verteilungskoeffizienten, wurden in die Tabelle 3-11 nur die Angaben von Gawlik (1997) übernommen. Gawlik

gibt die Verteilungskoeffizienten mit bis zu 5 Stellen an. Eine solche Angabe erscheint wegen der vergleichsweise geringen Messgenauigkeit nicht sinnvoll.

Tab. 3-11 K_D-Werte

	Eurosoil 3			**Eurosoil 4**			**Eurosoil 5**		
Substanz	**$K_{D1}\pm\Delta K_{D1}$ (g/g)**	**K_D (g/g)**	**$K_{Lit.}$[1] (g/g)**	**$K_{D1}\pm\Delta K_{D1}$ (g/g)**	**K_D (g/g)**	**$K_{Lit.}$[1] (g/g)**	**$K_{D1}\pm\Delta K_{D1}$ (g/g)**	**K_D (g/g)**	**$K_{Lit.}$[1] (g/g)**
Propanil	9,73±3,93	11,83		4,24±2,91	7,37		24,51±12,86	21,36	
Bromoxynil	2,91±3,10	6,04		naw.	naw.		9,27±7,63	11,36	
Diuron	1,96±1,08	6,68		2,22±1,33	8,49		naw.	naw.	
Metribuzin	naw.[2]	naw.		naw.	naw.		1,66±1,77	2,95	
Carbofuran	5,76±0,69	7,27		3,76±3,69	4,92		6,24±0,96	3,57	
Diazinon	naw.	naw.		naw.			25,36±8,68	22,80	
4-Chloroanilin	5,17±2,69	8,47	7,0389	2,68±1,42	1,00	1,8996	31,55±54,92	19,18	54,3299
n-Methylanilin	3,55±0,55	3,88	2,2279	0,42±5,22	0,76	0,2707	14,72±17,68	14,68	5,9036
Anilin	2,58±3,21	4,15	2,6227	naw.	naw.	0,3715	27,53±38,69	34,80	6,0534
4-Chlorophen-ol	3,92±3,58	6,24	3,0718	4,27±2,15	6,86	2,6482	3,12±4,01	5,93	9,3650
4-tert-Butylphenol	3,06±1,82	7,27		1,55±1,24	7,42		4,18±10,80	4,12	
o-Kresol	11,11±7,66	9,73		7,24±6,01	7,81		6,12±4,41	8,27	
Bisphenol A	446,27±169,23	306,26		5,02±2,58	7,05		10,72±8,75	9,02	
Phenol	8,24±4,11	9,10	0,6325 (n=1,162)	2,29±1,02	5,13	0,5421 (n=1,176)	5,51±2,62	7,61	1,5509 (n=1,087)
2-Nitrophenol	naw.	naw.	2,3735 (n=1,063)	8,63±1,99	6,30	0,6932 (n=1,333)	3,17±2,53	7,54	8,4925 (n=0,909)

(1) K_D aus der Literatur (Gawilk, 1997)
(2) nichtauswertbar

3.3.2 Sorption an Eurosoil 3

Für 12 (von 26) Substanzen konnten die Verteilungskoeffizienten gemessen werden. Die Ergebnisse sind in der Tabelle 3-11 zusammengestellt. Für die restlichen 14 Substanzen war eine zuverlässige experimentelle Bestimmung des Verteilungskoeffizienten wegen einer zu geringen Löslichkeit der Substanz in Wasser (vgl. Tab. 3-1) nicht möglich.

Zu diesen „nichtauswertbaren“ Substanzen zählen z.B. Diazinon, Metribuzin und 2-Nitrophenol. Bei Diazinon betrug die Konzentration auf dem Boden im ersten Schritt $4{,}3 \cdot 10^{-5}$ g/g (bei der Stammlösungskonzentration $2{,}9 \cdot 10^{-5}$ g/g) und die experimentelle Unsicherheit dieses Wertes ($1{,}62 \cdot 10^{-4}$ g/g) beträgt etwa das Vierfache des Messwertes selbst. Die Konzentration von Metribuzin auf Eurosoil im ersten Schritt betrug $2{,}4 \cdot 10^{-5}$ g/g und der Fehler dieses Messwertes $6{,}1 \cdot 10^{-5}$ g/g. Die Stammlösungskonzentration war $3{,}2 \cdot 10^{-5}$ g/g. Bei 2-Nitrophenol betrug die Konzentration auf diesem Boden im ersten Schritt $1{,}2 \cdot 10^{-5}$ g/g und der Messfehler $4{,}0 \cdot 10^{-5}$ g/g (bei der Stammlösungskonzentration von $3{,}5 \cdot 10^{-5}$ g/g).
Für Eurosoil 3 liegen die experimentell bestimmten Zahlenwerte für die Koeffizienten K_D und K_{D1} zwischen den entsprechenden Zahlenwerten für Eurosoil 4 und Eurosoil 5 (vgl. Tab. 3-11). Die K_D- und K_{D1}-Werte dieser Stoffe liegen im Bereich von 2,0 bis 446. Aus den Messwerten ergibt sich folgende Reihenfolge (von der am Besten zu der am Schwächsten sorbierten Substanz): Bisphenol A > o-Kresol > Propanil > Phenol > Carbofuran > 4-Chloroanilin > 4-Chlorophenol > n-Methylanilin > Butylphenol > Bromoxynil > Anilin > Diuron. Bei 9 Substanzen beträgt der Verteilungskoeffizient zwischen 3 und 8. Zwei Stoffe (Propanil und o- Kresol) haben einen K_D-Wert im Bereich von 9 bis 12 und Bisphenol A, das am stärksten sorbiert wird, hat einen K_D-Wert deutlich über allen anderen Stoffen.

Gawlik (1997) gibt für 4-Chloroanilin K_D= 7,0389 an, während aus den Untersuchungen der vorliegenden Arbeit $5{,}2 < K_D < 8{,}5$ resultiert. Für n-Methylanilin gibt Gawlik (1997) K_D=2,2279 an, die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit liefern $3{,}5 < K_D < 3{,}9$. Für Anilin beträgt laut Gawlik (1997) K_D=2,6227, die

vorliegende Arbeit liefert 2,6 < K_D < 4,1. Diese Vergleiche zeigen, dass in vielen (aber nicht allen) Fällen die von Gawlik angegebenen Zahlenwerte innerhalb der Bandbreite der Ergebnisse der vorliegenden Arbeit liegen. Sie zeigen jedoch auch, dass die von Gawlik angegebene Anzahl von Stellen eine nicht begründete Genauigkeit seiner Zahlenwerte vortäuscht.

3.3.3 Sorption an Eurosoil 4

Mit Eurosoil 4 konnte nur für 11 (von insgesamt 26) untersuchte Substanzen der Verteilungskoeffizient zuverlässig bestimmt werden. Die Ergebnisse sind in der Tabelle 3-11 zusammengestellt. Bei den anderen 15 untersuchten Substanzen ist die Wasserlöslichkeit zu gering (vgl. Tab. 3-1) oder der K_D-Wert ist kleiner als eins.

Zu den Stoffen, deren Verteilungskoeffizient nicht bestimmt werden konnte zählen: Bromoxynil, Metribuzin, Diazinon und Anilin. Wie bei Eurosoil 3, waren die Messfehler größer als die sorbierte Masse des Stoffes auf dem Boden. Zum Beispiel betrug für Bromoxynil die Konzentration auf dem Boden (bei der Stammlösungskonzentration
$2{,}3 \cdot 10^{-5}$ g/g) im ersten Schritt $9{,}5 \cdot 10^{-6}$ g/g und die experimentelle Unsicherheit ($4{,}5 \cdot 10^{-5}$ g/g) etwa das Fünffache dieses Wertes.

Die experimentell bestimmten Verteilungskoeffizienten der untersuchten Sorptive auf Eurosoil 4 liegen im Bereich von 0,4 bis 9,0.
Aus den gemessenen K_D-Werten erkennt man folgende Reihenfolge der Sorptionsaffinität: o-Kresol > 2-Nitrophenol > Bisphenol_A > Propanil > 4-Chlorophenol > Carbofuran > 4-Chloroanilin > Phenol > Diuron > Butylphenol > n-Methylanilin.
O-Kresol und 2-Nitrophenol besitzen die größten Verteilungskoeffizienten K_D (O-Kresol: 7 < K_D < 8; 2-Nitrophenol: 6 < K_D < 8). Am Ende der Sorptionsreihe steht n-Methylanilin mit 0,42 < K_D < 0,76 (vgl. Tab. 3-11).
Wenn man die neuen Messwerte mit den Literaturangaben vergleicht, findet man qualitativ den zuvor schon für Eurosoil 3 erwähnten Befund. Ein Teil der Angaben von Gawlik liegt in der Bandbreite der Ergebnisse der vorliegenden Arbeit, z.B., für 4-Chloroanilin gibt Gawlik (1997) K_D=1,8996 an, aus der vorliegenden Arbeit folgt 1 < K_D < 2,7 (vgl. Tab. 3-11). Ein Teil der Ergebnisse von Gawlik liegt außerhalb der

Bandbreite der Ergebnisse der vorliegenden Arbeit, z.B. für 4-Chlorophenol gibt Gawlik (1997) K_D=2,6482 an, die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit liefern $4 < K_D < 7$. Für Anilin gibt Gawlik (1997) K_D=0,3715 an; eine zuverlässige Auswertung der Ergebnisse der Messungen der vorliegenden Arbeit war für Anilin hingegen wegen zu großer experimenteller Unsicherheiten nicht möglich (die Konzentration von Anilin auf dem Boden betrug bei der ersten Zugabe $8{,}3 \cdot 10^{-5}$ g/g und die experimentelle Unsicherheit dieser Angabe beträgt $1{,}3 \cdot 10^{-4}$ g/g). Auch hier zeigt sich, dass die Anzahl der von Gawlik für die Verteilungskoeffizienten angegebenen Stellen, eine zu hohe Messgenauigkeit vortäuscht.

3.3.4 Sorption an Eurosoil 5

Unter den sieben Referenzböden zeigt Eurosoil 5 das größte Sorptionspotential und damit die größten Zahlenwerte für die Verteilungskoeffizienten.

Für 14 (von 26 untersuchte) Substanzen konnten die Verteilungskoeffizienten zuverlässig bestimmt werden. Die experimentell bestimmten Verteilungskoeffizienten K_D liegen im Bereich von 1,7 bis 34,8 (vgl. Tab. 3.11). Zu den Stoffen, deren Verteilungskoeffizient nicht bestimmt werden konnte, zählt Diuron.

Es zeigt sich folgende Reihenfolge der Sorptionsaffinität für diesen Boden:
4-Chloroanilin > Anilin > Diazinon > Propanil > n-Methylanilin > Bisphenol A > Bromoxynil > o- Kresol > Carbofuran > Phenol > Buthylphenol > 4-Chlorophenol > 2-Nitrophenol > Metribuzin. Bei 4 Substanzen (Propanil, Diazinon, 4-Chloroanilin, Anilin) ist der Verteilungskoeffizient K_D größer als 20. Bei 3 Substanzen (Bromoxynil, n-Methylanilin, Bisphenol A) liegt der Verteilungskoeffizient im Bereich von 9 bis 14. Bei allen anderen 7 Sorptiven liegt der K_D zwischen 1,7 und 8,0.
4-Chloroanilin besitzt den größten Verteilungskoeffizienten ($20 < K_D < 32$), gefolgt von Anilin ($27 < K_D < 35$; vgl. (Tab. 3-11)). Am unteren Ende des Spektrums liegt Metribuzin ($1{,}7 < K_D < 3{,}0$).
Beim Vergleich mit den Angaben von Gawlik (1997) bestätigen sich die schon für die anderen Eurosoils getroffenen Aussagen. Zum Beispiel, gibt Gawlik für 4-Chloroanilin K_D= 54,3299 an, aus den Untersuchungen der vorliegenden Arbeit folgt ein Zahlenwert im Bereich von 20 bis 32. Für 4-Chlorophenol gibt Gawlik K_D=9,3650 an, während die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit einen Zahlenwert $3 < K_D < 6$ liefern.

3.4 HPLC- Methode

Die *High-Performance-Liquid-Chromatography* – oder *High-Pressure-Liquid-Chromatography* (HPLC) ist ein Standardverfahren der chromatographischen Analyse. Dabei wird eine in einen Eluenten (mobile Phase) eingespritzte Probe unter hohem Druck durch eine stationäre Phase (Trennsäule) transportiert. Je nach Art der Wechselwirkung, welche die Komponenten der Probe mit der stationären Phase erfahren, werden die Komponenten unterschiedlich schnell durch die Trennsäule transportiert. Dadurch wird die Probe in ihre Bestandteile zerlegt. Die Bestandteile werden im Detektor erfasst. Je nach Art der Wechselwirkung der Bestandteile der Probe mit dem Säulenmaterial, unterscheidet man z.B. zwischen Adsorptions-, Verteilungs-, Ionenaustausch-, Ausschluss- und Affinitätschromatographie. Bei der HPLC Methode überwiegen Verfahren der Adsorptions- und Verteilungschromatographie. Bei der Betriebsweise unterscheidet man zwei Arbeitsweisen: Bei der *isokratischen Methode* ist die Zusammensetzung des Eluenten und dessen Flussrate während des Trennvorganges konstant. Bei der *Gradientenelution* ändert sich während des Trennvorgangs die Zusammensetzung und/oder die Flussrate des Eluenten.

In der vorliegenden Arbeit wurde die isokratische Methode bei Raumtemperatur mit einer 0,01 Molaren wässrigen $CaCl_2$ – Lösung als Eluent verwendet. Mit diesem Eluenten soll eine realistische Annäherung an die in typischen Nutzböden herrschenden Verhältnisse (z.B. pH = 5 bis pH = 7,5) (Kördel et al., 1993) erreicht werden. Als Säulenmaterial wurde der zu untersuchende Boden eingesetzt. Die Probe bestand aus einer wässrigen Lösung der interessierenden Substanz. Aus der zeitlichen Verzögerung (Retentionszeit) wird - im Vergleich zur Retentionszeit eines nicht (bzw. schlecht) sorbierenden Stoffes - der Verteilungskoeffizient der interessierenden Substanz zwischen Eluent und Boden bestimmt.

3.4.1 Untersuchte Substanzen

Mit der HPLC- Methode wurde die Verteilung von 27 Substanzen auf drei Eurosoils untersucht. Dabei handelt es sich neben den 26 schon in der Tabelle 3-3 angegebenen Substanzen zusätzlich noch um 9,10-Antrachinon (CAS-Nummer 84-65-1).

3.4.2 Aufbau der HPLC- Anlage

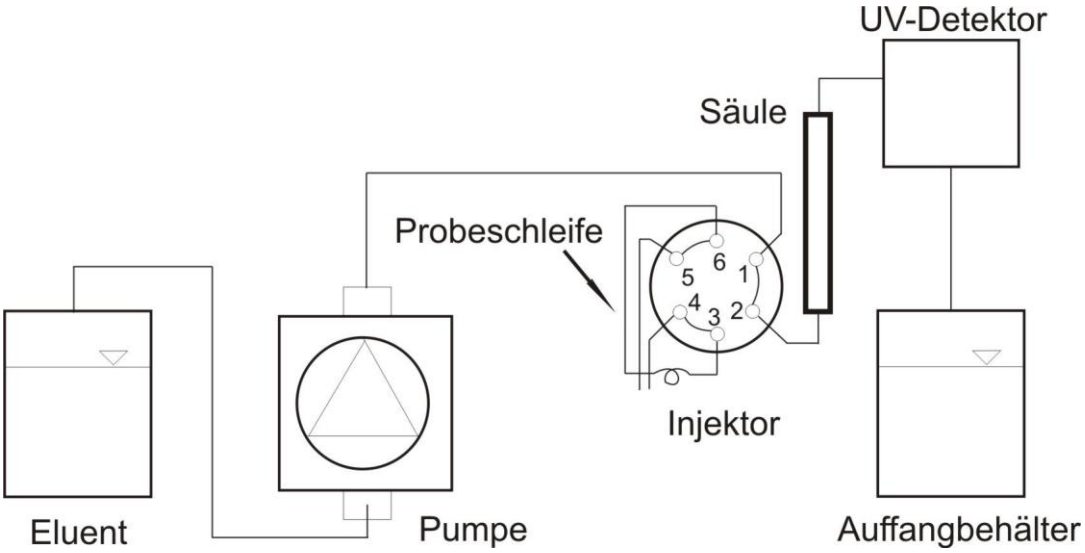

Abb. 3.5 Aufbau einer HPLC-Anlage

Die Abbildung 3.5 zeigt ein Schema der eingesetzten HPLC-Anlage. Mit Hilfe einer Pumpe (Merck, Hitachi, LiChroGraph, Model L-6200A) wurde der Eluent zunächst durch einen Injektor (in dem die Beladung mit der Probe erfolgte), dann durch die Säule (Eurosoil- Kolonne, Kap. 3.4.3) (in der die Retention der Probe erfolgte) und dann durch einen UV-Detektor (Merk, Hitachi, LiCHroGraph Model L-4000) gepumpt. Die Säule befand sich in einem unbeheizten Ofen (Merck, Hitachi, L-5025). An den Detektor war ein Integrator (Shimadzu Chromatopac C-R6A) angeschlossen. Der Eluent wurde in einem Auffangbehälter gesammelt.

3.4.3 Allgemeine Beschreibung des Verfahrens

Die Methode beruht auf einer Beziehung zwischen dem Sorptionskoeffizienten eines Stoffes im Säulenmaterial und seinem HPLC-Retentionsverhalten (vgl. Kap.2.4.2). Zu diesem Zweck wurde eine stationäre Phase (Eurosoil), und eine mobile Phase, (ein Laufmittel) verwendet.

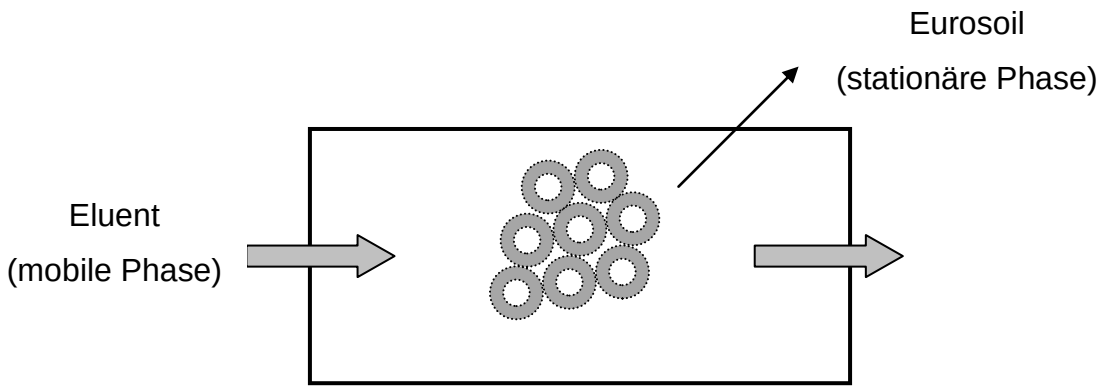

Abb. 3.6 Darstellung einer Eurosoil- Kolonne

Die im Injektor mit der Probe aufgegebene Substanz bewegt sich durch die stationäre Phase und die Wechselwirkungen mit der stationären Phase führen zu einem charakteristischen Retentionsverhalten.

Die Retentionszeiten der Testsubstanzen wurden bei fünf verschiedenen Volumenströmen des Eluenten (0,6 ml/min; 0,8 ml/min; 1,0 ml/min; 1,2 ml/min; 1,5 ml/min) gemessen. Die Proben wurden in der Regel durch Auflösen in Wasser hergestellt. In Fällen geringer Löslichkeit wurde eine zweiphasige Lösung hergestellt und die untere, wasserreiche Phase als Probe benutzt. Die Proben hatten ein Volumen von ca. 100 µl. Sie wurden per Hand durch einen Einspritzblock injiziert. Die Detektion erfolgte durch Aufnahme des Peaks unter Verwendung eines UV-Detektors. Die Berechnung des Verteilungskoeffizienten aus der Retentionszeit erfordert die Kenntnis der sogenannten Totzeit t_0. Als Totzeit t_0 wird die Retentionszeit bezeichnet, die die mobile Phase benötigt, um das chromatographische System von der Injektion bis zur Detektion zu durchlaufen, wenn keine Zurückhaltung durch die stationäre Phase erfolgt. Die Totzeit ist experimentell schwer zugänglich. Sie wurde deshalb durch die Retentionszeit der an den Eurosoils sehr schlecht sorbierenden Substanz Formamid (Gawlik, 1997) approximiert. Die Totzeiten (Retentionszeiten für Formamid) beim Einsatz von Eurosoil 3 sind in der Tabelle 3-12 (für die weiteren Eurosoils in den Tabellen C1 und C2 im Anhang C) angegeben.

HPLC–Säulen mit dem hier interessierenden Boden sind kommerziell nicht erhältlich. Sie wurden deshalb selbst hergestellt. Dazu wurde ein leere Säule (Edelstahlrohr, 50 cm lang, bestehend aus zwei Stahl-Säulen (Fa. Grace) je 25 cm lang und einem Innendurchmesser von 4 mm) mit Hilfe der in der Abb. 3.5 dargestellten HPLC–Anlage mit dem Eurosoil befüllt. Dazu wurden etwa 20 g Boden

zunächst 3 bis 4-mal mit Wasser im Verhältnis 1:3 (20g Boden zu 60g Wasser) gewaschen. Danach wurde das Wasser entfernt und der feuchte Boden mit Hilfe der HPLC-Pumpe in die Kolonne gepresst. Der Volumenstrom betrug 3,0 ml/min und der Druck 30 bar. Um die Gesamtmasse des Bodens zu bestimmen wurde die Kolonne vor und nach dem Befüllungsverfahren gewogen. Die Säule wurde zum Konditionieren an die Anlage (ohne UV-Detektor) angeschlossen und mit dem Eluenten durchströmt bis sich bei einem festgehaltenen Volumenstrom des Eluenten ein konstanter Druck in der Säule einstellte. Dazu war ein Zeitraum von 1-2 Wochen erforderlich. Danach wurde mit der Verteilungsmessungen begonnen.

3.4.4 Auswertung

Für jede Substanz wurde für jede Säule für verschiedene Volumenströme des Eluenten die Retentionszeit (t_R) gemessen. Jede Messung wurde mindestens zweimal wiederholt. Daraus wurde eine gemittelte Retentionszeit gebildet. Dabei gilt: je größer der Volumenstrom desto kürzer ist die Retentionszeit.

Tab. 3-12 Retentionszeiten t_R (mit Unsicherheiten Δt_R) bei der HPLC- Messung mit Eurosoil 3.

Retentionszeit t_R (min) $\pm \Delta t_R$					
Volumenstrom (ml/min)	0,6	0,8	1,0	1,2	1,5
Formamid	4,86 ±0,05	3,63 ±0,04	2,87 ±0,02	2,72 ±0,01	2,17 ±0,01
Atrazin	10,95 ±0,11	8,30 ±0,66	5,99 ±0,01	4,86 ±0,06	3,80 ±0,07
Amitrol	5,77 ±0,05	4,48 ±0,05	3,39 ±0,04	2,86 ±0,03	2,25 ±0,01
Vinclozolin	9,78 ±0,05	7,17 ±0,47	4,98 ±0,06	3,91 ±0,01	3,26 ±0,09
Nitrophenol	8,94 ±0,02	6,09 ±0,08	5,22 ±0,05	4,40 ±0,04	3,53 ±0,01
Chloranilin	11,69 ±0,01	8,47 ±0,16	6,68 ±0,01	5,62 ±0,02	4,33 ±0,01
o – Kresol	8,32 ±0,18	5,80 ±0,01	4,68 ±0,02	3,89 ±0,05	3,11 ±0,01
4-Chlorophenol	16,83 ±0,21	12,41 ±0,08	9,75 ±0,06	7,67 ±0,14	5,73 ±0,08
Metribuzin	6,44 ±0,11	4,91 ±0,01	3,95 ±0,08	2,84 ±0,09	2,52 ±0,01
Benzamid	6,39 ±0,08	4,85 ±0,01	3,85 ±0,04	3,47 ±0,03	2,47 ±0,01
Carbofuran	8,01 ±0,02	5,95 ±0,03	4,60 ±0,02	3,77 ±0,03	2,92 ±0,01
2,4-Dichlorphenoxy -essigsäure	6,65 ±0,02	4,84 ±0,02	3,81 ±0,02	3,13 ±0,01	2,41 ±0,01
Bromoxynil	8,82 ±0,09	6,41 ±0,13	5,04 ±0,06	4,01 ±0,04	3,10 ±0,01
n-Methylanilin	7,29 ±0,04	5,47 ±0,01	4,28 ±0,04	3,51 ±0,03	2,77 ±0,01
Anilin	6,28 ±0,03	4,62 ±0,01	3,67 ±0,01	3,03 ±0,01	2,35 ±0,01
Phenol	6,72 ±0,07	5,03 ±0,05	4,05 ±0,02	3,30 ±0,02	2,55 ±0,01

Die kürzesten Retentionszeiten ergaben sich, wie erwartet, für Formamid, von dem man annimmt, dass es keine Rückhaltung durch die Säulenfüllung erfährt (Gawlik, 1997). Die längste Retentionszeit für Eurosoil 3 betrug 16,83 Minuten (für 4-Chlorophenol bei einer Durchflussrate von 0,6 ml/min).

Die Gleichungen zur Auswertung der HPLC–Analyse werden aus der Gaschromatographie übernommen. Die Theorie der gaschromatographischen Trennung (Leibnitz und Struppe, 1970) liefert folgenden Zusammenhang zwischen dem Retentionsvolumen V_R (d.h. dem Volumen des Trägergases, das zwischen Eingabe und Austritt der Komponente die Trennsäule durchströmt), dem Verteilungskoeffizient K (d.h. dem Quotienten aus der Molarität in der Flüssigkeit zur Molarität in der Gasphase), dem Gasvolumen V_g und dem Flüssigkeitsvolumen V_1 in der Trennsäule:

$$V_R = V_g + K \cdot V_1 \tag{34}$$

Wenn man diese Gleichung auf die Flüssig–Fest–Chromatographie überträgt, dann erhält man:

$$V_R = V_g + K_D \cdot V_{ES} \tag{35}$$

mit

$V_R = t_R \cdot \dot{m}$ - Retentionsvolumen (36)

$\dot{m}$ - Massenstrom des Eluenten

V_g -Volumen der Flüssigkeit in der Säule

V_{ES} -Volumen des Bodens in der Säule

Das Retentionsvolumen ist das Volumen des Eluenten, das zwischen Eingabe und Austritt der Komponente die Trennsäule durchströmt.

Im Falle des Formamids, das als nicht sorbierender Stoff auf Eurosoils gilt, kann K_D =0 gesetzt werden. Daraus folgt:

$$(V_R) = V_g = V_{g\,Formamid} = (t_R \cdot \dot{m})_{Formamid} \tag{37}$$

Daraus erhält man das Flüssigkeitsvolumen V_g, und mit Hilfe von Gl. (35) kann das Produkt ($V_{ES} \cdot K_D$) in Abhängigkeit vom Volumenstrom ermittelt werden. Die Ergebnisse sind für Eurosoil 3 in der Tabelle 3-13 zusammengestellt. Für Eurosoil 4 und Eurosoil 5 sind die entsprechenden Ergebnisse in den Tabellen D1 und D2 im Anhang D angegeben.

Tab. 3-13 Experimentelle Ergebnisse für das Produkt ($V_{ES} \cdot K_D$) aus den HPLC-Versuchen mit Eurosoil 3.

$V_{ES} \cdot K_D$					
Volumenstrom (ml/min)	0,6	0,8	1,0	1,2	1,5
Atrazin	3,65 ±0,30	3,74 ±0,23	3,13 ±0,16	3,44 ±0,17	3,80 ±0,13
Amitrol	0,55 ±0,04	0,70 ±0,04	0,53 ±0,03	1,00 ±0,01	1,50 ±0,01
Vinclozolin	2,95 ±0,24	2,84 ±0,18	2,11 ±0,10	2,30 ±0,09	3,00 ±0,08
Nitrophenol	2,45 ±0,20	2,00 ±0,12	2,35 ±0,12	2,90 ±0,12	3,40 ±0,10
Chloranilin	4,10 ±0,34	3,90 ±0,24	3,82 ±0,19	4,40 ±0,23	4,60 ±0,17
o -Kresol	2,10 ±0,17	1,73 ±0,10	1,81 ±0,09	2,30 ±0,09	2,75 ±0,08
4 - Chlorophenol	7,20 ±0,59	7,02 ±0,43	6,90 ±0,34	6,83 ±0,39	6,70 ±0,28
Metribuzin	0,95 ±0,08	1,00 ±0,06	1,10 ±0,05	1,02 ±0,01	1,90 ±0,02
Benzamid	0,92 ±0,08	1,00 ±0,06	1,00 ±0,05	1,80 ±0,06	1,81 ±0,02
Carbofuran	1,90 ±0,15	1,90 ±0,12	1,73 ±0,09	2,15 ±0,08	2,50 ±0,06
2,4-Dichlorphenoxy -essigsäure	1,10 ±0,09	1,00 ±0,06	1,00 ±0,05	1,40 ±0,03	1,70 ±0,02
Bromoxynil	2,40 ±0,20	2,23 ±0,14	2,20 ±0,11	2,43 ±0,10	2,75 ±0,07
n-Methylanilin	1,50 ±0,12	1,50 ±0,09	1,42 ±0,07	1,82 ±0,06	2,24 ±0,05
Anilin	0,90 ±0,07	0,80 ±0,05	0,80 ±0,05	1,25 ±0,02	1,63 ±0,01
Phenol	1,11 ±0,09	1,12 ±0,07	1,20 ±0,06	1,60 ±0,05	1,91 ±0,03

Um die Kinetik des Stofftransports und die Sorption zu eliminieren, werden diese Ergebnisse auf den Volumenstrom $\dot{m} \Rightarrow 0$ extrapoliert,

$$G = (V_{ES} \cdot K_D) = \lim_{\dot{m} \Rightarrow 0} (V_{ES} \cdot K_D) \tag{38}$$

Dazu wurde (mit Hilfe der Software *Excel*) eine Ausgleichsgerade durch die Messpunkte gelegt.

$$y = a \cdot x + G \tag{39}$$

mit

a-Neigung der Ausgleichsgeraden

G-Wert, der dem Volumenstrom $\dot{m} \Rightarrow 0$ entspricht

Die Abbildung 3.7 (links) zeigt als typisches Beispiel einer solchen Auswertung die Ergebnisse für 4-Chlorophenol auf Eurosoil 3.

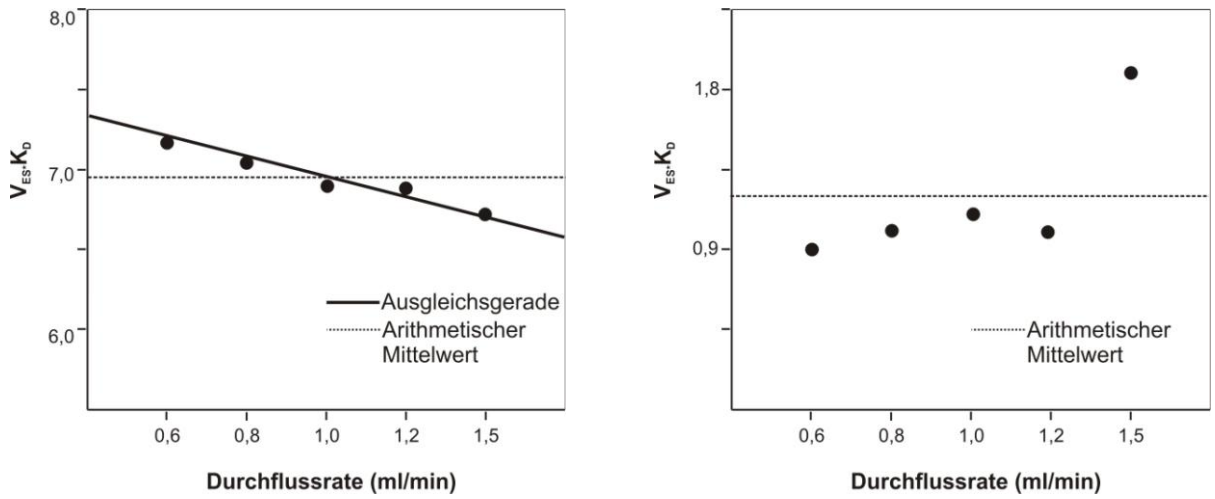

Abb. 3.7 Einfluss des Volumenstroms auf das Produkt (V_{ES}·K_D) für 4-Chlorophenol (links) und Metribuzin (rechts) auf Eurosoil 3.

Ist die Kinetik sehr schnell, dann hängt das Produkt (V_{ES}·K_D) nicht vom Volumenstrom ab. Manchmal streuen die Ergebnisse vergleichsweise stark: Ein Beispiel dazu zeigt das rechte Diagramm in der Abb. 3.7 (für Mertibuzin). Dann ist eine zuverlässige Extrapolation nicht möglich. Deswegen wird auch der arithmetische Mittelwert betrachtet:

$$M = \overline{(V_{ES} \cdot K_D)} = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1} (V_{ES} \cdot K_D)_i \qquad (40)$$

Die Ergebnisse für alle untersuchten Stoffe sind in der Tabelle 3-14 zusammengestellt.

Nicht für jeden der drei untersuchten Böden war es möglich jede der 27 Substanzen zu vermessen. Bei manchen Substanzen waren die Peaks sehr breit (z.B. bei 4-tert-Butylphenol auf Eurosoil 3), so dass man die Retentionszeit nicht zuverlässig auswerten konnte. Bei anderen Substanzen konnte die Retentionszeit überhaupt nicht bestimmt werden. D.h. es konnte kein Peak innerhalb der Messzeit detektiert werden, weil die Substanz in der Säule so stark zurückgehalten wurde, dass der Stoff wahrscheinlich erst nach sehr langer Zeit eluieren würde (z.B. Diazinon oder Propanil auf Eurosoil 5). Solche Stoffe wurden in der Tab. 3-14 mit einem „-“

gekennzeichnet. In der Tabelle 3-14 sind Substanz/Eurosoil Paare bei denen ein deutlicher Peak im Chromatogramm festgestellt wurde mit „+“ gekennzeichnet.

Tab. 3-14 HPLC- Messungen mit Eurosoil als stationärer Phase: Auf den Eluentenstrom $\dot{m} = 0$ extrapolierte Produkte ($V_{ES} \cdot K_D$).

Substanz	Eurosoil 3			Eurosoil 4			Eurosoil 5		
	$V_{ES} \cdot K_D$		Peak	$V_{ES} \cdot K_D$		Peak	$V_{ES} \cdot K_D$		Peak
	(G)	(M)		(G)	(M)		(G)	(M)	
Atrazin	3,50±0,39	3,55±0,35	(+)	1,81±0,16	1,52±0,25	(+)	5,32±0,49	3,72±0,85	(+)
Amitrol	-	0,85±0,50	(+)	0,27±0,02	0,16±0,05	(+)	0,71±0,07	0,84±0,10	(+)
Vinclozolin	2,75±0,32	2,64±0,45	(+)	-	-		-	-	
2-Nitrophenol	-	2,61±0,70	(+)	0,39±0,03	0,40±0,10	(+)	-	1,76±0,15	(+)
4-Chloranilin	3,44±0,39	4,15±0,40	(+)	-	-		-	6,48±0,55	(+)
o-Kresol	-	2,12±0,50	(+)	1,01±0,09	0,90±0,10	(+)	4,33±0,36	4,40±0,80	(+)
4-Chlorophenol	7,46±0,72	6,92±0,15	(+)	3,11±0,27	3,05±0,25	(+)	-	12,24±1,55	(+)
Metribuzin	-	1,19±0,50	(+)	0,60±0,05	0,47±0,05	(+)	1,51±0,13	0,97±0,30	(+)
Benzamid	-	1,29±0,45	(+)	-	0,58±0,15	(+)	-	-	
Carbofuran	1,32±0,20	2,02±0,40	(+)	0,89±0,07	0,70±0,25	(+)	1,18±0,11	1,13±0,10	(+)
2,4-Dichlorphenoxy-essigsäure	0,41±0,13	1,21±0,35	(+)	-	0,27±0,10	(+)	1,28±0,12	1,59±0,20	(+)
Bromoxynil	1,92±0,25	2,39±0,25	(+)	1,15±0,09	0,86±0,25	(+)	2,95±0,25	1,95±0,45	(+)
n-Methylanilin	0,76±0,16	1,68±0,40	(+)	-	0,44±0,20	(+)	3,12±0,27	2,42±0,30	(+)
Anilin	0,11±0,10	1,07±0,40	(+)	0,29±0,03	0,33±0,10	(+)	1,46±0,12	1,40±0,25	(+)
Phenol	0,40±0,13	1,38±0,40	(+)	0,60±0,05	0,52±0,20	(+)	1,96±0,13	1,73±0,15	(+)
4-tert-Butylphenol	-	-	(-)	5,33±0,46	4,98±0,15	(+)	20,13±1,84	18,76±1,50	(+)
Diazinon	-	-	(-)	0,13±0,01	0,05±0,03	(+)	-	-	(-)
Propanil	-	-	(-)	-	12,48±0,85	(+)	-	-	(-)
Diuron	-	-	(-)	-	9,22±0,85	(+)	-	-	(-)
Methiocarb	-	-	(-)	-	12,08±0,90	(+)	-	-	(-)
Terbutryn	-	-	(-)	-	12,35±1,50	(+)	-	-	(-)
Triadimefon	-	-	(-)	-	8,71±0,95	(+)	-	-	(-)
Bisphenol A	-	-	(-)	-	-	(-)	-	-	(-)

3.4.5 Sorption an Eurosoil 3

Für Eurosoil 3 wurden fünfzehn (V_{ES}·K_D)-Paare ermittelt, neun davon sowohl mit Hilfe einer Extrapolation (G) als auch durch Mittelwertbildung (M), für die restlichen sechs Substanzen konnten nur die Mittelwerte (M) festgelegt werden (vgl. Tab. 3-14). Bei den Substanzen bei denen beide Auswertungen (G und M) möglich waren, unterscheiden sich die Ergebnisse dieser verschiedenen Auswertungen teilweise um weniger als 10 %, jedoch treten vor allem bei den schlecht sorbierenden Substanzen Anilin und Phenol deutlich größere Unterschiede (bis zu einem Faktor 9) auf.
4-Chlorophenol besitzt den höchsten Zahlenwert (V_{ES}·K_D= 7,5), während Anilin den niedrigsten Wert (V_{ES}·K_D=0,11) aufweist.

Es ergab sich folgende Reihenfolge (vom höchstem bis zum niedrigsten Wert des Produktes V_{ES}·K_D: 4-Chlorophenol > Atrazin > 4-Chloranilin > Vinclozolin > 2-Nitrophenol > o-Kresol > Carbofuran > Bromoxynil > n-Methylanilin > Phenol > Benzamid > 2,4-Dichlorphenoxyessigsäure > Metribuzin > Anilin > Amitrol. Die sechs durch Unterstreichung gekennzeichneten Substanzen wurden auch mit der Schüttelkolbenmethode untersucht. Die Reihenfolge für den Verteilungskoeffizienten dieser Substanzen bei den Versuchen mit der Schüttelkolbenmethode (o-Kresol > Phenol > Carbofuran > 4-Chloroanilin > n-Methylanilin > Bromoxynil, (vgl. Kap. 3.3.2)) stimmt nur teilweise mit den Ergebnissen aus den HPLC- Untersuchungen überein.

3.4.6 Sorption an Eurosoil 4

Für Eurosoil 4 wurden zwanzig (V_{ES}·K_D)-Paare ermittelt. Bei 14 Substanzen war neben der Mittelwertbildung (M), auch eine Extrapolation (G) möglich. (vgl. Tab 3-14). Bei den Substanzen bei denen beide Auswertungen (G und M) möglich waren, unterscheiden sich die Ergebnisse dieser verschiedenen Auswertungen teilweise um weniger als 10 %, jedoch treten auch hier vor allem bei den schlecht sorbierenden Substanzen (hier N-Methylanilin und Diazinon) größere Unterschiede (bis zu einem Faktor 3) auf.
Der größte Zahlenwert für das Produkt (und damit auch der größte Verteilungskoeffizient) wurde für Propanil (V_{ES}·K_D=12,5) und der niedrigste Zahlenwert für Diazinon (V_{ES}·K_D=0,05) gefunden. Wie die Tabelle 3-14 zeigt, ergab sich folgende Reihenfolge für das Produkt V_{ES}·K_D Propanil > Terbutryn > Methiocarb

> Diuron > Triadimefon > 4-tert.- Butylphenol > 4-Chlorophenol > Atrazin > Bromoxynil > o-Kresol > Carbofuran > Metribuzin > 2-Nitrophenol > Benzamid > Phenol > Anilin > 2,4- Dichlorphenoxyessigsäure > Amitrol > n-Methylanilin > Diazinon. Die neun durch Unterstreichung gekennzeichneten Substanzen wurden auch mit der Schüttelkolbenmethode untersucht. Die Reihenfolge für den Verteilungskoeffizienten dieser Substanzen bei den Versuchen mit der Schüttelkolbenmethode (o-Kresol > 2-Nitrophenol > Propanil > 4-Chlorophenol > Carbofuran > Phenol > Diuron > 4-tert.-_Butylphenol > n-Methylanilin. (vgl. Kap. 3.3.3)) stimmt nur teilweise mit den Ergebnissen aus den HPLC- Untersuchungen überein.

3.4.7 Sorption an Eurosoil 5

Von den insgesamt 22 untersuchten Stoffen war es nur für 14 möglich, zuverlässige Angaben für das Produkt $V_{ES}\cdot K_D$ auf Eurosoil 5 aufgrund einer Mittelwertbildung (M) zu ermitteln (vgl. Tab 3-14). Für elf dieser Substanzen konnten die ($V_{ES}\cdot K_D$)-Werte auch durch Extrapolation (G) festgelegt werden. Bei den Substanzen bei denen beide Auswertungen (G und M) möglich waren, unterscheiden sich die Ergebnisse teilweise um weniger als 10 %, jedoch treten auch hier bei einigen Substanzen (z.B. Metribuzin) größere Unterschiede (bis zu einem Faktor nahe zwei) auf.

Der höchste Zahlenwert wurde für 4-tert.-Butylphenol ($V_{ES}\cdot K_D$=20,1) ermittelt, der kleinste ($V_{ES}\cdot K_D$=0,71) für Amitrol. Folgende Reihenfolge für den Verteilungskoeffizienten (bzw. für das Produkt $V_{ES}\cdot K_D$)- wurde bei den HPLC-Untersuchungen gefunden:
4- tert.- Butylphenol > 4- Chlorophenol > 4- Chloranilin > Atrazin > o- Kresol > n-Methylanilin > Bromoxynil > Phenol > 2-Nitrophenol > Metribuzin > Anilin > 2,4-Dichlorphenoxyessigsäure > Carbofuran > Amitrol. Die elf durch Unterstreichung gekennzeichneten Substanzen wurden auch mit der Schüttelkolbenmethode untersucht. Die Reihenfolge für den Verteilungskoeffizienten dieser Substanzen bei den Versuchen mit der Schüttelkolbenmethode (4-Chloroanilin > Anilin > n-Methylanilin > Bromoxynil > o- Kresol > Carbofuran> Phenol > 4- tert.- Butylphenol > 4-Chlorophenol > 2-Nitrophenol > Metribuzin. (vgl. Kap. 3.3.4)) stimmt nur teilweise mit den Ergebnissen aus den HPLC- Untersuchungen überein.

4 Vergleich der Boden/Wasser-Verteilungskoeffizienten aus den experimentellen Untersuchungen

In der vorliegenden Arbeit wurden zwei Methoden zur experimentellen Bestimmung von Verteilungskoeffizienten in Boden/Wasser Systemen eingesetzt. Die Schüttelkolbenmethode (die sogenannte „direkte Methode“) und die HPLC-Methode (die zu den „indirekten Methoden“ zählt (vgl. Kap. 2.4)). Ziel der Untersuchungen war die Brauchbarkeit der HPLC-Methode zu überprüfen. Wie schon in den Kapiteln 3.4.5 bis 3.4.7 beschrieben, stimmt die Reihenfolge der in beiden Typen von Experimenten ermittelten Verteilungskoeffizienten der Substanzen auf dem jeweils gleichen Boden nur teilweise überein. Die sehr große Streuung der mit der Batch Methode für Eurosoil 4 und Eurosoil 5 bestimmten Verteilungskoeffizienten (bis zu über 100%) lässt den Vergleich mit der Ergebnissen der HPLC-Methode nicht zu. Obwohl die Vergleichbarkeit der Ergebnisse aus beiden Methoden nicht mehr gewährleistet werden kann, wird trotzdem in diesem Kapitel die Auswertung der Ergebnisse der HPLC-Messungen für Eurosoil 3 weiterverfolgt. Für Eurosoil 3 wird ein Auswertungsversuch mit statistischen Betrachtungen vorgenommen.
Bei der HPLC-Methode können die Verteilungskoeffizienten aufgrund des unbekannten Volumens des in der Säule enthaltenen Bodens, in der Säule nicht direkt bestimmt werden. Deswegen wurden für die weitere Auswertung zwei Substanzen als „Referenzsubstanzen“ ausgewählt:

- Carbofuran (R_1)
- n-Methylanilin (R_2)

Auswertung
Bei der HPLC-Methode sind jeweils zwei ($K_D \cdot V_{ES}$)-Messwerte bestimmt worden, eine aus der Extrapolation und eine aus der Mittelung der Messwerte (vgl. Kap.3.4.4).
Beim Vergleich die beiden Methoden geht man zuerst von Gl. (35) und Gl. (36) aus:

$$V_R = V_g + K_D \cdot V_{ES}$$

mit $$V_R = t_R \cdot \dot{m}$$

Für den Referenzstoff (R_j) gilt folgenden Zusammenhang:

$$V_R = V_g = (t_R \cdot \dot{m})_{Rj} \tag{41}$$

Daraus folgt:

$$(t_R - t_{R,Rj}) = \frac{K_D \cdot V_{ES}}{\dot{m}} \tag{42}$$

wobei die ($K_D \cdot V_{ES}$)-Werte auf den Eluentenstrom $\dot{m} = 0$ extrapoliert sind.

Daraus erhält man folgenden Zusammenhang zwischen den aus der HPLC-Methode und aus der Batchmethode gewonnenen K_D- Werten:

$$\frac{(K_D \cdot V_{ES})_i}{(K_D \cdot V_{ES})_{Rj}} = \frac{K_{D1,i,Batch}}{K_{D1,i,Rj,Batch}} \tag{43}$$

mit $(K_D \cdot V_{ES})_i$ – mittlerer oder extrapolierter Wert für den Wertstoff i

$(K_D \cdot V_{ES})_{Rj}$ – mittlerer oder extrapolierter Wert für den Referenzstoff R_j

$K_{D1,i,Batch}$ – Verteilungskoeffizient K_{D1} aus Batchversuch für den Wertstoff i

$K_{D1,i,Rj,Batch}$ – Verteilungskoeffizient K_{D1} aus Batchversuch für den Referenzstoff R_j

Für die extrapolierten ($K_D \cdot V_{ES}$)-Werte wird die Gl. (43) folgendermaßen umgeschrieben (für die mittlere ($K_D \cdot V_{ES}$)-Werte siehe Anhang F).

$$(K_D \cdot V_{ES})_G \pm \Delta(K_D \cdot V_{ES})_G = \frac{\overline{K_{D1,i,Rj,Batch}} \pm \Delta K_{D1,i,Rj,Batch}}{\overline{(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,G}} \pm \Delta(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,G}} \cdot \overline{K_{D1,i,Batch}} = \overline{K_{D1,i,Batch}} \pm \frac{\Delta K_{D1,i,Batch}}{\overline{K_{D1,i,Batch}}} \tag{44}$$

und daraus ergibt sich (detaillierte Angaben zur Umrechnung siehe Anhang F)

$$K_{Di} = \frac{\overline{(K_D \cdot V_{ES})}_{i,Gbzw.M}}{\overline{(K_D \cdot V_{ES})}_{Rj,Gbzw.M}} \cdot \overline{K_{D1,i,Rj,Batch}} \pm \Delta K_{Di} \tag{45}$$

mit $(K_D \cdot V_{ES})_{i,G}$ – extrapolierter bzw. mittlerer Wert für den Wertstoff i

$(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,G}$ – extrapolierter bzw. mittlerer Wert für den Referenzstoff j

$K_{D1,i,Rj,Batch}$ – K_{D1}-Wert für den Referenzstoff j im Batchversuch

ΔK_{Di} – Unsicherheit in K_{Di}-Wert (detaillierte Angaben im Anhang F)

Die Tabellen 4-1 bis 4-4 fassen der ermittelten K_{Di} -Werte für die Referenzstoffe R_1 und R_2 zusammen. Die Angaben zur Berechnung von Quotienten a*, b*, c* und d* befinden sich im Anhang F.

Tab. 4-1 K_{Di}-Verteilungskoeffizienten für die extrapolierten ($K_D \cdot V_{ES}$)–Werte und die Referenz Substanz R_1 (Carbofuran)

i	Substanz	$K_{D1,i,Batch}$	$K_{D1,R1,Batch}$	$(K_D \cdot V_{ES})_{i,G}$	$(K_D \cdot V_{ES})_{R1,G}$	a*	b*	c*	d*	$K_{Di} \pm \Delta K_{Di}$
1	**Bromoxynil**	2,91±3,10	5,76±0,69	1,92±0,25	1,32±0,20	0,13	0,15	0,12	0,40	**8,38±3,35**
2	**4-Chloroanilin**	5,17±2,69	5,76±0,69	3,44±0,39	1,32±0,20	0,11	0,15	0,12	0,38	**15,01±5,70**
3	**n-Methylanilin**	3,55±0,55	5,76±0,69	0,76±0,16	1,32±0,20	0,21	0,15	0,12	0,48	**3,32±1,59**
4	**Anilin**	2,58±3,21	5,76±0,69	0,11±0,10	1,32±0,20	0,91	0,15	0,12	1,18	**0,48±0,57**
5	**4-Chlorophenol**	3,92±3,58	5,76±0,69	7,46±0,72	1,32±0,20	0,10	0,15	0,12	0,37	**32,5±12,04**
6	**Phenol**	8,24±4,11	5,76±0,69	0,40±0,13	1,32±0,20	0,32	0,15	0,12	0,59	**1,74±1,03**

Tab. 4-2 K_{Di}-Verteilungskoeffizienten für die extrapolierten ($K_D \cdot V_{ES}$) –Werte und die Referenz Substanz R_2 (n- Methylanilin)

i	Substanz	$K_{D1,i,Batch}$	$K_{D1,R1,Batch}$	$(K_D \cdot V_{ES})_{i,G}$	$(K_D \cdot V_{ES})_{R1,G}$	a*	b*	c*	d*	$K_{Di} \pm \Delta K_{Di}$
1	**Bromoxynil**	2,91±3,10	3,55±0,55	1,92±0,25	0,76±0,16	0,13	0,21	0,15	0,49	**8,97±4,39**
2	**4-Chloroanilin**	5,17±2,69	3,55±0,55	3,44±0,39	0,76±0,16	0,11	0,21	0,15	0,47	**16,07±7,55**
3	**Carbofuran**	5,76±0,69	3,55±0,55	1,32±0,20	0,76±0,16	0,15	0,21	0,15	0,51	**6,16±3,14**
4	**Anilin**	2,58±3,21	3,55±0,55	0,11±0,10	0,76±0,16	0,91	0,21	0,15	1,27	**0,51±0,65**
5	**4-Chlorophenol**	3,92±3,58	3,55±0,55	7,46±0,72	0,76±0,16	0,10	0,21	0,15	0,46	**34,85±16,03**
6	**Phenol**	8,24±4,11	3,55±0,55	0,40±0,13	0,76±0,16	0,32	0,21	0,15	0,68	**1,87±1,27**

Tab. 4-3 K_{Di}-Verteilungskoeffizienten für die mittleren ($K_D \cdot V_{ES}$) –Werte und die Referenz Substanz R_1 (Carbofuran)

i	Substanz	$K_{D1,i,Batch}$	$K_{D1,R1,Batch}$	$(K_D \cdot V_{ES})_{i,G}$	$(K_D \cdot V_{ES})_{R1,G}$	a*	b*	c*	d*	$K_{Di} \pm \Delta K_{Di}$
1	**Bromoxynil**	2,91±3,10	5,76±0,69	2,39±0,25	2,02±0,40	0,10	0,20	0,12	0,42	**6,81±2,86**
2	**4-Chloroanilin**	5,17±2,69	5,76±0,69	4,15±0,40	2,02±0,40	0,10	0,20	0,12	0,42	**11,83±4,97**
3	**n-Methylanilin**	3,55±0,55	5,76±0,69	1,68±0,40	2,02±0,40	0,24	0,20	0,12	0,56	**4,79±2,68**
4	**Anilin**	2,58±3,21	5,76±0,69	1,07±0,40	2,02±0,40	0,37	0,20	0,12	0,69	**3,05±2,10**
5	**4-Chlorophenol**	3,92±3,58	5,76±0,69	6,92±0,15	2,02±0,40	0,02	0,20	0,12	0,34	**19,73±6,70**
6	**Phenol**	8,24±4,11	5,76±0,69	1,38±0,40	2,02±0,40	0,29	0,20	0,12	0,61	**3,93±2,40**

Tab. 4-4 K_{Di}-Verteilungskoeffizienten für die mittleren ($K_D \cdot V_{ES}$) –Werte und die Referenz Substanz R_2 (n-Methylanilin)

i	Substanz	$K_{D1,i,Batch}$	$K_{D1,R1,Batch}$	$(K_D \cdot V_{ES})_{i,G}$	$(K_D \cdot V_{ES})_{R1,G}$	a*	b*	c*	d*	$K_{Di} \pm \Delta K_{Di}$
1	**Bromoxynil**	2,91±3,10	3,55±0,55	2,39±0,25	1,68±0,40	0,10	0,24	0,15	0,49	**5,05±2,47**
2	**4-Chloroanilin**	5,17±2,69	3,55±0,55	4,15±0,40	1,68±0,40	0,10	0,24	0,15	0,49	**8,77±4,30**
3	**Carbofuran**	5,76±0,69	3,55±0,55	2,02±0,40	1,68±0,40	0,20	0,24	0,15	0,59	**4,27±2,52**
4	**Anilin**	2,58±3,21	3,55±0,55	1,07±0,40	1,68±0,40	0,37	0,24	0,15	0,76	**2,26±1,72**
5	**4-Chlorophenol**	3,92±3,58	3,55±0,55	6,92±0,15	1,68±0,40	0,02	0,24	0,15	0,41	**14,62±5,99**
6	**Phenol**	8,24±4,11	3,55±0,55	1,38±0,40	1,68±0,40	0,29	0,24	0,15	0,68	**2,92±1,98**

Die Abbildung 4.1 stellt die Verteilungskoeffizienten, die aus den extrapolierten und mittleren ($K_D \cdot V_{ES}$)-Werten mit dem Referenzstoff R_1 bestimmt wurden im Vergleich zu den Verteilungskoeffizienten aus der Batchmethode dar.

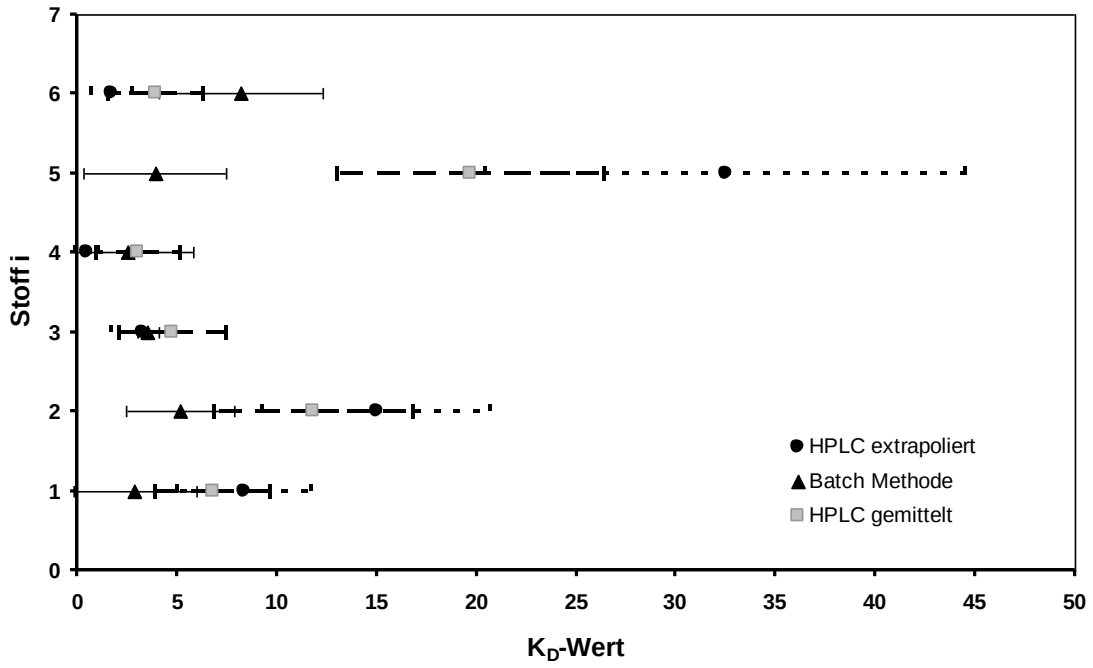

Abb. 4.1 Die K_D-Werte aus HPLC und Batchversuche. Vergleich mit Referenzstoff R_1(Stoff i=1: Bromoxynil, i=2: 4-Chloroanilin, i=3: n-Methylanilin, i=4: Anilin, i=5: 4-Chlorophenol, i=6: Phenol).

Der Vergleich ist nur für sechs Wertstoffe möglich. Bei fast allen Substanzen überschneiden sich die ermittelten Fehlertoleranzen für die interessierenden Wertstoffe aus der Batchmethode und aus der HPLC-Methode. Nur bei 4-Chlorophenol liegen die K_D-Werte und deren Unsicherheiten für die beiden Messmethoden weit auseinander. Für jeden Wertstoff lassen sich die Grenzen bestimmen innerhalb welcher mit höchster Wahrscheinlichkeit die gesuchten K_D-Werte für den jeweiligen Wertstoff liegen. Für Substanz Bromoxynil liegt der K_D- Wert zwischen 5 und 6; für 4-Chloroanilin liegt er zwischen 6,8 und 7,8; der Wertstoff n-Methylanilin, hat einen Verteilungskoeffizienten zwischen 3 und 4, der K_D- Wert für Anilin liegt zwischen 1 und 5 und für Phenol liegt er etwa zwischen 4 und 6.

Auf der Abbildung 4.2 wurden die aus der Batchmethode erzielten Verteilungskoeffizienten im Vergleich zu den Verteilungskoeffizienten, die aus den extrapolierten und mittleren ($K_D \cdot V_{ES}$)-Werten mit der Referenzsubstanz R_2 ermittelt wurden, dargestellt.

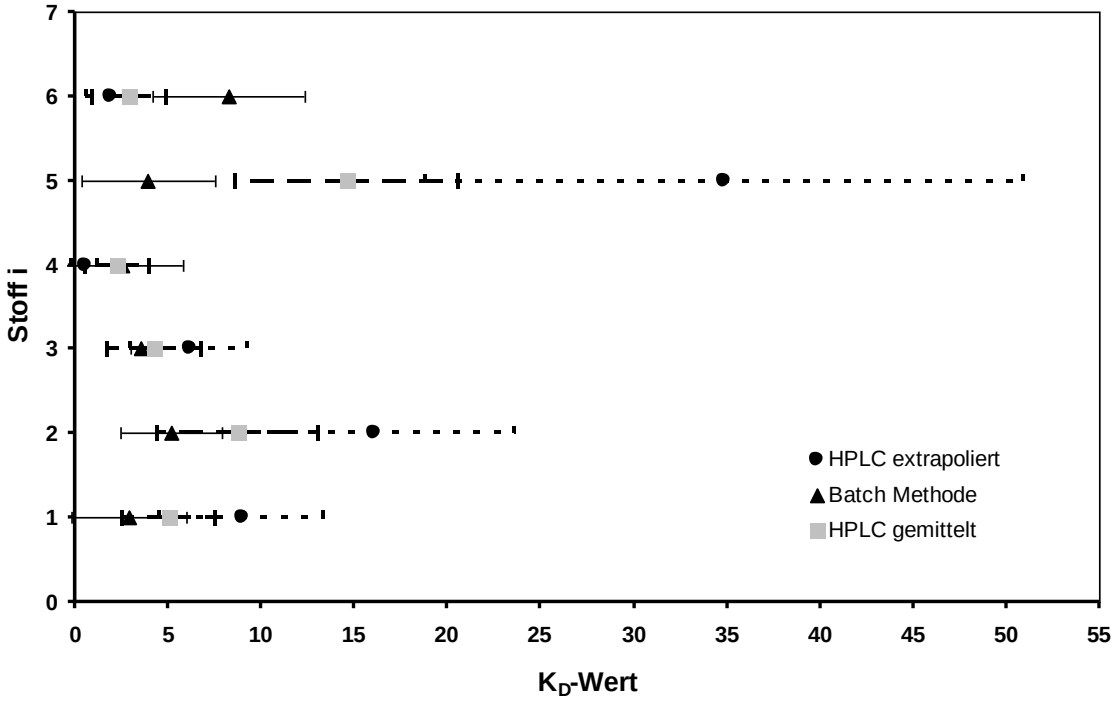

Abb. 4.2 Die K_D-Werte aus HPLC und Batchversuche. Vergleich mit Referenzstoff R_2 (Stoff i=1: Bromoxynil, i=2: 4-Chloroanilin, i=3: Carbofuran, i=4: Anilin, i=5: 4-Chlorophenol, i=6: Phenol).

Der Vergleich war auch hier für sechs Wertstoffe möglich. Wie bei der Auswertung mit der Referenzsubstanz $R_{1,}$ überschneiden sich auch hier die Fehlertoleranzen für den jeweiligen Wertstoff aus der HPLC- und der Batchmethode. Die Ausnahme ist 4-Chlorophenol. Für diese Substanz liegen die K_D-Werte mit deren Unsicherheiten bei den beiden Messmethoden weit auseinander. Für die fünf weiteren Substanzen war es möglich die Grenzen zu bestimmen, innerhalb welchen mit höchster Wahrscheinlichkeit die gesuchten K_D -Werte liegen. Für Bromoxynil liegt der K_D-Wert zwischen 4,5 und 6; für 4- Chloroanilin liegt er zwischen 4,5 und 7,8; der Wertstoff Carbofuran hat einen Verteilungskoeffizienten K_D zwischen 5 und 6,5; für Anilin liegt er zwischen 0,6 und 4 und für Phenol ergibt sich der K_D - Wert etwa zwischen 4 und 5.

Wenn man die neuen K_D-Messwerte aus der HPLC-Methode für den Referenzstoff R_1 und R_2 mit den Literaturangaben vergleicht, findet man den zuvor schon für

Eurosoil 3 bei der Schüttelkolbenmethode erwähnten Befund. Ein Teil der Angaben von Gawlik liegt in der Bandbreite der Ergebnisse der vorliegenden Arbeit, z.B., für 4-Chloroanilin gibt Gawlik (1997) K_D=7,0389 an, aus der vorliegenden Arbeit folgt 4,5< K_D<7,8. Für Anilin gibt Gawlik (1997) K_D= 2,6227 an und bei der eigenen Messungen liegt der K_D zwischen 0,6 und 5. Ein Teil der Ergebnisse von Gawlik liegt außerhalb der Bandbreite der Ergebnisse der vorliegenden Arbeit, z.B. für Phenol gibt Gawlik (1997) K_D=0,6325 (n=1,162) an, die Ergebnise der vorliegenden Arbeit liefern 4< K_D<6. Für n-Methylanilin gibt Gawlik (1997) K_D= 2,2279 an und bei der eigenen Messungen liegt der K_D zwischen 3 und 6,5. Auch hier (wie schon bereits bei der Auswertung der Schüttelkolbenmethode erwähnt) zeigt sich, dass die Anzahl der von Gawlik für die Verteilungskoeffizienten angegebenen Stellen eine zu hohe Messgenauigkeit vortäuscht.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde der Verteilungskoeffizient von endokrinen Stoffen auf Boden/Wasser–Systeme experimentell bestimmt. Dazu wurde der Verteilungskoeffizient von 26 Substanzen mit endokriner Wirkung mit Hilfe von zwei Messmethoden ermittelt. Für die Untersuchungen wurden die klassische Standardmethodeschüttelkolbenmethode und die HPLC-Methode eingesetzt.
Das Ziel dieser Arbeit war die HPLC-Methode gegenüber der Schüttelkolbenmethode zu erproben, um die dabei erzielten Verteilungskoeffizienten mit den vorhandenen Literaturangaben zu vergleichen. Die Verteilung dieser Stoffe wurde in Eurosoil/Wasser – Systemen untersucht. Mit der Schüttelkolbenmethode wurden 17 Substanzen untersucht und mit der HPLC – Methode alle 26 ausgewählten Stoffe.
Die Verteilungskoeffizienten sind, sofern möglich, jeweils für eine Substanz mit zwei Versuchsmethoden bestimmt worden. Die „Sorptionsaffinität“ innerhalb des jeweiligen Bodens verhielt sich wie erwartet. D.h. bei dem „organisch reichsten“ Boden (Eurosoil 5) waren die Verteilungskoeffizienten für die gleiche Substanz am höchsten (z.B. für n-Methylanilin auf Eurosoil 5 liegt der K_D-Wert etwa bei 14,7) und bei weniger organischen bzw. „organisch armen“ Boden (Eurosoil 4) waren die Werte niedriger (für n-Methylanilin K_D liegt im Bereich von 0,4 bis 0,8). Die Ergebnisse der Schüttelkolbenmethode standen dabei nicht im Einklang mit den Ergebnissen aus der HPLC – Methode. Um diese Unterschiede in den Messergebnissen für die beiden Methoden zu verstehen und bewerten zu können, muss man zusätzlich unerklärte Phänomene mit in die Auswertung nehmen: Z.B., welche Prozesse laufen in einer Bodenkolonne wirklich ab? Oder die Art und die Zusammensetzung des Bodenmaterials. Ebenfalls ist unklar, ob bei Sorptionsprozessen nicht nur die Oberflächen und oberflächennaher Schichten des Bodens (in einer Trennsäule), sondern auch die Volumenphase des Bodens am Sorptionsprozess wesentlich beteiligt sind. Bei lösungsgesättigten Säulen bestimmt das Porenvolumen der Säule die Menge der Sorptives, mit der der Feststoff Kontakt hat. Es ist dabei möglich, dass die Sorptionsdaten von Porenvolumen des Sorbenten abhängen. Es ist auch unklar wie sich die Lösungskonzentration und Beladung innerhalb der Säule verteilt. Manche Autoren sprechen von örtlicher Differenzierung bei langen Säulen (Fehse, 2004). Dieses Phänomen soll auch Einfluss auf die Sorption haben. Es gibt auch

Hinweise in der Literatur, dass die ermittelten Sorptionsdaten von den Probenvolumen, die in der HPLC – Anlage eingespritzt worden sind, abhängen (Fehse, 2004). Im Vergleich zu Batchversuchen stehen bei der HPLC – Methode die Berührungsflächen nicht für die Sorption zur Verfügung. Das verkleinert die sorptionsfähige Oberfläche pro Gewichtseinheit. Problematisch ist auch wenn die Sorption so langsam verläuft, dass während des HPLC – Experiments kein Gleichgewicht zwischen den koexistierenden Phasen erreicht wird. In diesem Zusammenhang ist die Frage jedenfalls von Interesse, wie der Stofftransport in beiden Methoden wirklich aussieht. Für den größten Problemfaktor beim Vergleich der beiden Messmethoden untereinander hält der Fehse (2004) das Festsoff – Lösungs - Verhältnis (M:V). Er schreibt in seiner Dissertation, dass die absoluten Feststoffmengen und Lösungsvolumina keine Rolle bei der Adsorption spielen, sondern nur das Verhältnis aus beiden. Damit versucht er seine These zu begründen, dass man ohne dieses Verhältnis zu berücksichtigen die beiden Methoden (Säule - und Schüttelkolbenmethode) für naturelle Böden nicht sinnvoll vergleichen kann.

In der vorliegenden Arbeit wurde wegen zu großer Streuung in den erzielten Ergebnissen nur für den Boden Eurosoil 3 die Standardschüttelkolbenmethode mit der HPLC-Methode verglichen. Ein wichtiges Kriterium, um zu konsistenten Ergebnissen zu gelangen, ist die Messgenauigkeit. In der vorliegenden Arbeit betrug der Messfehler der experimentell bestimmten Verteilungskoeffizienten aufgrund eines sehr geringen Konzentrationenbereichs der Lösungen (bis zu 10^{-6} g/g) manchmal bis zu über 100% vom Messwert.
Die theoretische Korrelation von experimentell erzielten Daten mit Hilfe der QSAR–Modelle war auf Grund der Inkonsistenz der Ergebnisse nicht möglich. Unter einem QSAR–Modell versteht man ein statistisches Verfahren mit dem man univariante oder multivariante Regressionsanalysen durchführen kann. Die grundlegende Idee dabei ist, dass die Abweichungen in der Aktivität innerhalb strukturell ähnlicher Komponenten mit Änderungen in den Parametern, die für die Komponenteneigenschaften verantwortlich sind, korreliert werden können (Reddy, Locke, 1996).

6 Literatur

ATV – DVWK – Arbeitsgruppe IG-5.4: Endokrin wirksame Substanzen in Kläranlagen, (1999)

Bailey, G.W.; White, J.L.; Rothberg, T.: Adsorption of organic herbicides by montmorillonitr: Role of pH and chemical character of adsorbate, Soil Sci.Soc.Amer.Proc, 32, (1968) 222-34

Brockhaus, F.A: Brockhaus Enzyklopädie in zwanzig Bänden, Dritter Band (BLIT-CHOC), Siebzehnte Auflage, F.A. Brockhaus (Ed.), Wiesbaden (1967)

Bruhler DD.; Randall GW.; Koskinen WC.; Wyse DL.: Atrazine and alachlor losses from subsurface tile drainage of a clay loam soil, J. Environ Qual 22, (1993) 583-588

Capriel, P.; Haisch A.; Khan SU.: Distribution and nature of bound (nonextractable) residues of atrazine in a mineral soil nine years after the herbicide application, J Agric Fd. Chem 33 (1985) 567-569

DeBruijn, J. F.; Busser W.; Seinen W. und Hermes J.: Determination of octanol/water partition coefficients for hydrophobic organic chemicals with the "slow-stirring" method, Environ. Tox. Chem. 8 (1989) 499-512

Delle Site, A.: Factors Affecting Sorption of Organic Compounds in Natural Sorbent/Water Systems and Sorption Coefficients for Selected Pollutants. A reveiw, J.Phys.Chem.ref.Data, Vol.30, No.1 (2001)

Eisfeld W.; Maurer G.: “ A Study on the Prediction of Octanol/Water Partition Coefficients from Quantum Chemical Calculations” - J. Phys. Chem. B 103(27) (1999) 5716 – 5729

Elkhatib, E.A; Hern, J.L; Staley, T.E.: A rapid centrifugation method obtaining soil solution, Soil Science Society of America Journal. 51 (1987) 578-583

Erping, Bi.: Sorption and transport of heterocyclic aromatic compounds in soils, Dissertation, Tuebingen University (2006)

European Commission, Directive 79/831/EEC. Sixth amendment to Directive 67/548/EEC on the classification, packaging and labelling of dangerous substances. Official Journal L259 (1979). Annexe V to Directive 79/831/EEC (1984)

Falbe, J., M. Regitz (Hrsg.): Römpp - Chemie - Lexikon, Thieme, Stuttgart (1992)

Fehse, K-U.: Zur Sorption von Zink-Ionen an natürliche und technische Sorbenten unter Berücksichtigung des Feststoff: Lösung- Verhältnisses, Dissertation, Halle/Salle (2004)

Fischer, Ralf G.: Vorkommen und Umweltverhalten der C1–C10 organischen Nitrate in kontinentaler und mariner Luft, Dissertation, Ulm (1999)

Gamble, D.; Khan S.: Atrazine hydrolysis in aqueous suspensions of humic acid at 25°C, Can.J.Chem. 66 (1988) 2605

Garcia-Valcarcel; Sanchez-Brunete; Tadeo, J.T.: Flow equilibration in soil columns, in Buch: Cornejo, J.: Pesticide/Soil Interactions, Paris (2000)

Gawlik, B. M.; et al.: Development and evaluation of alternative screening methods for the adsorption behaviour of organic chemicals, in EUROSOILS II, Laboratory Reference Materials for Soil-related Studies, B. M. Gawlik und H. Muntau (Eds), Office for Official Publications of the European Communities, (1999) 109 -147

Gawlik, B. M.; Kettrup, A.; Muntau, H.: Estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds by HPLC screening using the second generation of the European reference soil set, Chemosphere, 41 (2000) 1337 -1347

Gawlik, B. M.; Feicht, E. A.; Karcher, W.; Kettrup, A.; Muntau, H.: Application of the European reference soil set (EUROSOILS) to a HPLC-screening method for the estimation of soil adsorption coefficients of organic compounds, Chemosphere, 36 (1998) 2903-2919

Gawlik, B.M; Muntau, H.: Eurosoils II. Laboratory Reference Materials for Soil-related Studies, Luxembourg (1999)

Gawlik, B.M.: Europäische Referenzböden für Sorptionsuntersuchungen (EUROSOILS) - Herstellung einer zweiten Version, Charakterisierung und Anwendung zur Bewertung von Alternativmethoden, Dissertation, Technische Universität München (1997)

Goss, K.-U.: The Octanol/Water Partitioning Coefficient - The Remedy of Environmental Chemistry? 15 UWSF 4 (2003) 273-279

Grieve, I.C.: Effects of the centrifuge drainage method on total organic carbon concentrations in soil solutions form peaty soils, Geoderma. 74 (1996) 115-123

Grover, R.; Hance, R.J: Effect of Ratio of Soil To Water on Adsorption of Linuron and Atrazine, Soil Science 109 (1970) 136

Hansch, C.; Leo, A.: Exploring QSAR – Fundamentals and Applications in Chemistry and Biology, ACS Professional Reference Book, American Chemical Society, Washington D.C (1995)

Hansch, C.; Leo, A.: Substituent constants for correlation analysis in chemistry and biology (1979)

Jurkutat B.; Kratz W.: LUA, Abteilung Ökologie und Umweltanalytik, Referat Wirkungsfragen und 50. Umwelttoxikologie Q2 - Band 26 - Endokrin wirksame Stoffe in der Umwelt –Literaturstudie zur Bedeutung dieser Stoffe im Land Brandenburg, Potsdam (2000)

Kenaga, E.; Goring, C.A.I.: Relationship between water solubility, soil sorption, octanol-water partitioning and concentration of chemicals in biota. In: Aquatic Toxicology ASTM STP 707, J.G. Eaton, P.P. Parrish, A.C. Hendricks, American Society for Testing and Materials, (1980), 78-115

Kloas, W.: Amphibians as a model to study endocrine disruptors, Int.Rev. Cytol. 216 (2002) 1-57

Koch, R.; Wagner, B. O.: Umweltchemikalien: physikalisch-chemische Daten, Toxizitäten, Grenz- und Richtwerte, Umweltverhalten, 2. Aufl. – Weinheim; New York; Cambridge; Basel Schweiz (1991)

Kördel, W.; Stutte, J.; Kotthoff, G.: HPLC-Screening method fort he determination of the adsorption-coefficient on soil- comparision of different stationary phases. Chemosphere 30 (1993) 1373-84

Kuhnt, G.; Murphy, P.; Poremski, H.; Hermann, M.: Background and historical evolution of the EUROSOIL-project. In: EUROSOILS- Indetification, collection, treatment, characterization, G.Kuhnt and H.Muntau (Eds.), European Commission, Special Publication No. 1.94.60, Ispra (Italy) (1994)

Kuhnt, G.; Muntau, H.: European reference soils for sorption testing, Fresenius Envir.Bull., 1 (1992) 589-94

Kuhnt, G.; Hertling, T.; Schmotz, W.; Vetter, L.: Auswahl von Referenzböden für die Chemikalienprüfung im EG-Bereich, Bericht (1991)

Kümmel, R.; Worch, E.: Adsorption aus wässrigen Lösungen, VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig (1990)

Leibnitz, E.; Struppe H.G.: „Handbuch der Gas-Chromatographie“, Verlag Chemie, (1970)

Lewin, L.: Gifte und Vergiftungen: Lehrbuch der Toxikologie, Karl F. Haug Fachbuchverlag, Auflage: 6. A. (1992)

Lymann, W. J.; Reehl W. F. und Rosenblatt D. H.: Handbook of chemical property estimation methods, American Chemical Society, Washington D.C. (1990)

Matschonat G.; Vogt R.: Equilibrium solution compositions and exchange properties of disturbed and undisturbed soil samples from an acid forest soil, Plant and soil, 183 (1996) 171-179

Meyer V.: Praxis der Hochleistungs-Flüssigchromatographie, 1 Auflage (1979)

Meyer, P.; Maurer, G.: Correlation of partition coefficients of organic solutes between water and an organic solvent - an application of the Linear Solvation Energy Relationship, Ind. Eng. Chem. Res. 32 (1993) 2105 -2110

Meyer, P.; Maurer, G.: Correlation and prediction of partition coefficients of organic solutes between water and an organic solvent with a generalized form of the Linear Solvation Energy Relationship, Ind. Eng. Chem. Res. 34 (1995) 373 -381

Mückenhausen, E.: Bodenkunde, DLG-Verlag (1985)

Mückenhausen, E.: Die wichtigsten Böden in der Bundesrepublik Deutschland, Zweite Neubearbeitete Auflage, Verlag Kommentator GmbH, Frankfurt am Main (1959)

O`Connor, D.J.; Connolly, J.P.: The effect of concentration of adsorbing solids on the partition coefficient, Water. Res. 14 (1980) 1517-1523

OECD Guideline for Testing Chemicals, “Adsorption/Desorption Using a Batch Equilibrium Method”, Prüflinie 106 (2000)

Reddy N. K.; Locke A. M.: Molecular properties as descriptors of octanol-water partition coefficients of herbicides, Water, Air and Soil Pollution 86 (1996) 389-405

Rippen, G.: Handbuch Umwelt-Chemikalien (2004)

Rongbo, G.; Yuwen, Ni; Lixin, Ma; Jiping, Chen; Qing, Zhang; Xinmiao, Liang: Correlations between soil/water adsorption coefficients and retention factors of compounds on soil column, Chinese Journal of Chromatography; Vol. 21., No. 6 (2003) 606-609

Ross, D.S; Barlett, R.J.: Effects of extraction methods and sample storage on properties of solutions obtained from forested spodsols, Journal of Environmental Quality. 19 (1990) 108-113

Röhr, Ch.; Holzapfel, W.: Der Einsatz von Aktivkohle bei der Sanierung von Grundwasser und Bodenluft; GUT, Internetartikel

Rügner, H.: Einfluss der Aquiferlithologie des Neckartals auf die Sorption und die Sorptionskinetik organischer Schadstoffe, TGS, C39, (1998)

Scheffer, F.; Schachtschabel, P.: Lehrbuch der Bodenkunde, Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg, Berlin , 15 Auflage (2002)

Schinner, F.; Sonnleitner, R.: Bodenökologie: Mikrobiologie und Bodenenzymatik, III Pflanzenschutzmittel, Agrarhilfsstoffe und organische Umweltchemikalien, Springer-Verlag (1997)

Smolka, S; Cameron, P.: WWF Studie 2002: Gefahren durch hormonell wirksame Pestizide und Biozide, Frankfurt am Main, Mai (2002)

Strandberg, J.; Fortkamp, U.: Investigations on methods for site specific determination of the partition coefficient-Kd, for contaminants in soil, IVL Swedish Environmental Research Institute Ltd, Mars (2005)

Tanii, H. und Hashimoto K.: Structure-toxicity relationship of acrylates and methacrylates, Tox. Lett.,11 (1982) 125-129

Toro, D.; Jeris, J.; Clarcia, D.: Diffusion and Partitioning of Hexachlorobiphenyl in Sediments, Environ. Sci. Technol., Vol.19 (1985) No. 12

Tsui-Ling, Hsieh; Ming-Muh, Kao.: Adsorption of carbofuran on lateritic soils, Journal of Hazardous Materials, 58 (1998) 275-284

UBA: Pestizideinträge in Gewässer - Modellierung und Messung, Beiträge der Tagung des Umweltbundesamtes am 12. und 13. Januar 1999 in Berlin, Nr. 85 (1999)

UBA: Umweltbundesamt Webseite- Boden und Altlasten- Aktuelles, Stand 04.07.2007

Winget, P; Cramer, C. J., Truhlar; D. G.: Prediction of soil sorption coefficients using a universal solvation model, Environ. Sci. Technol., 34 (2000) 4733- 4740

Wolt, J.: Soil solution chemistry. Applications to environmental science and agriculture, Wiley, New York (1994)

www.chemie.de/lexikon

www.epa.gov

www.oekorecherche.de, Stand 16.10.2007

www.syrres.com/esc

Yaron, B.; Saltzman, S.: Soil parathion surface interactions, Residue Rev. 69, (1979)1-34

Zabrowski, D.: Limited release of soluble organics from roots during the centrifugal extraction of soil solutions, Soil Science Society of America Journal. 53 (1989) 977-979

Anhang. Experimentelle Ergebnisse.

Anhang A. Ergänzungen zur Eichkurven

Zur Beginn wurden Kalibrierungskurven für die UV-photometrischen Analysen erstellt. Die Wellenlängen, die bei den Analysen eingestellt wurden, hängen von dem Wertstoff ab. Diese Kurven wurden im Verlauf der Messungen regelmäßig überprüft.

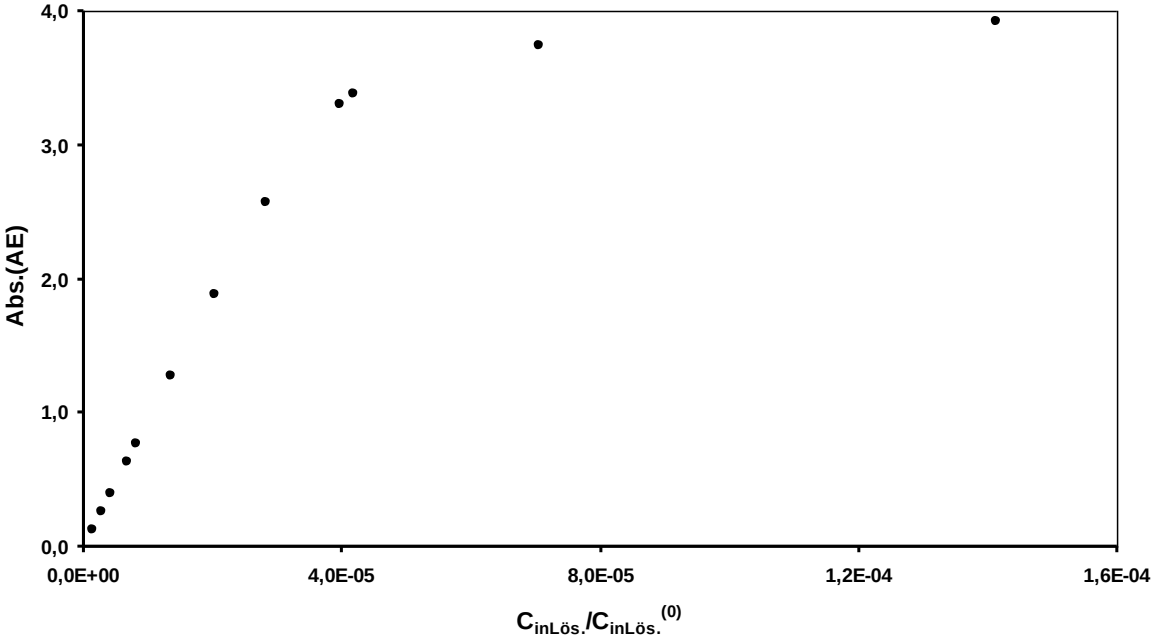

Abb.A1: Eichkurve für Anilin, λ=230 nm

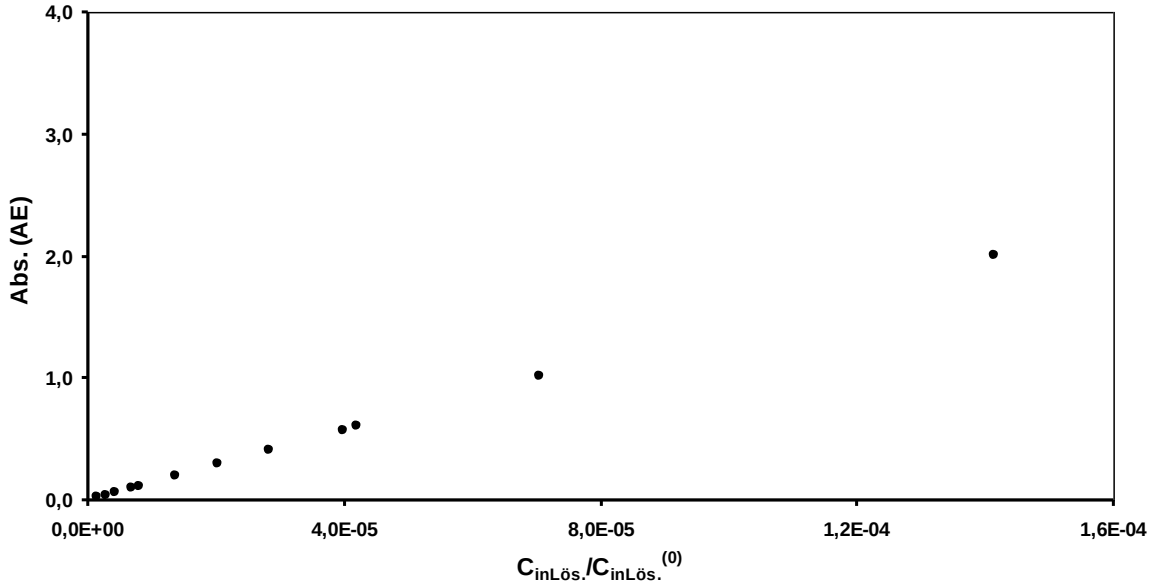

Abb. A2: Eichkurve für Anilin, λ=280nm

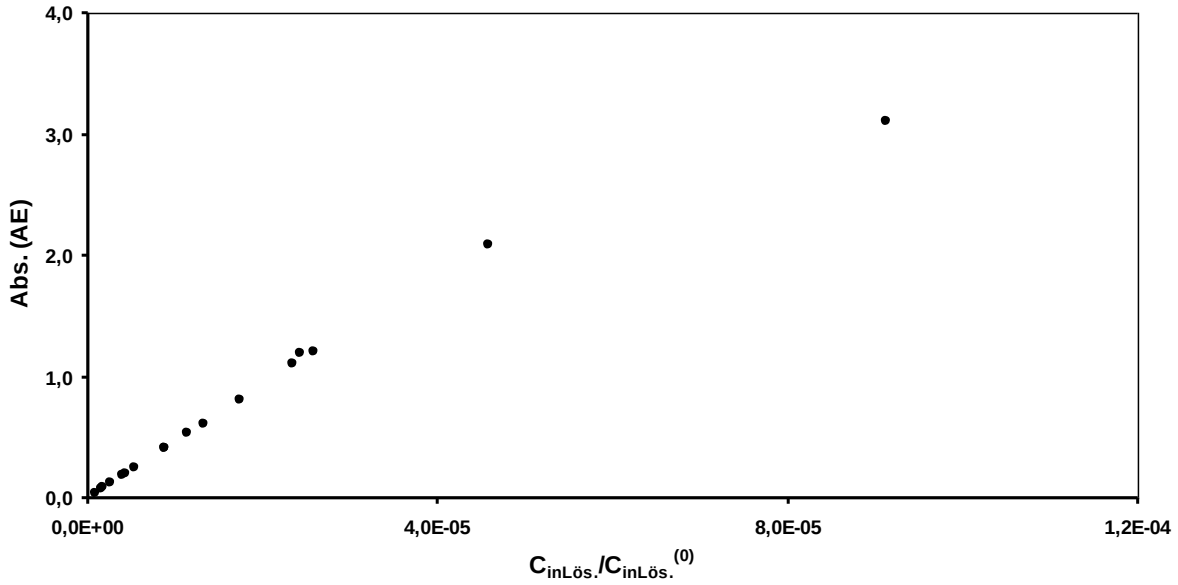

Abb.A3: Eichkurve für Buthylphenol, λ=220nm

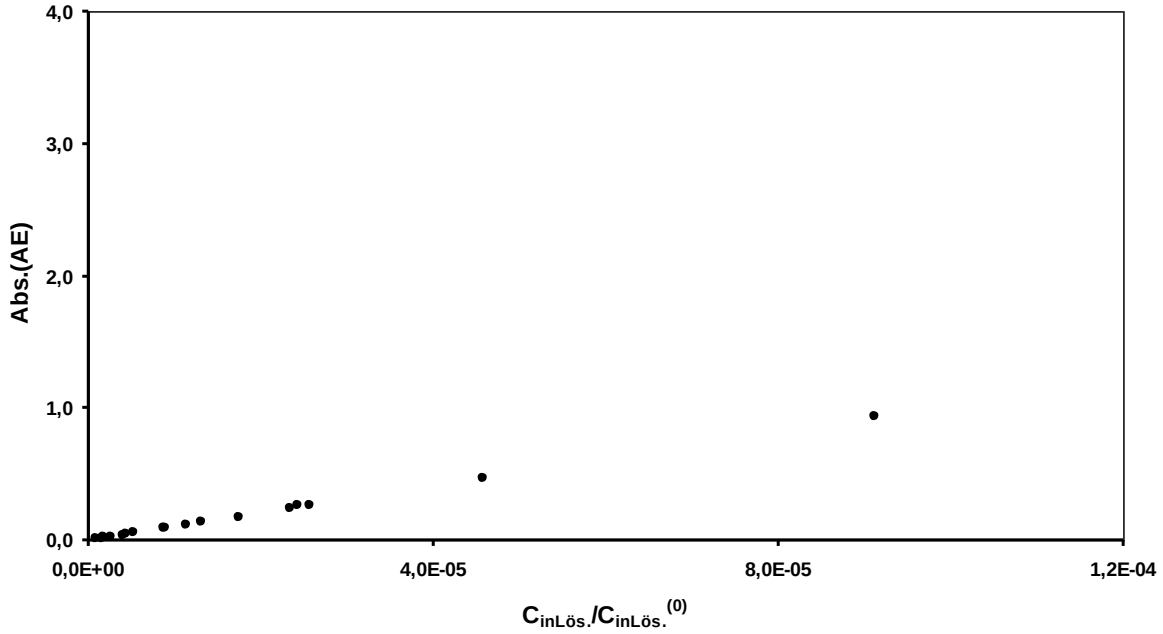

Abb. A4: Eichkurve für Buthylphenol, λ=274nm

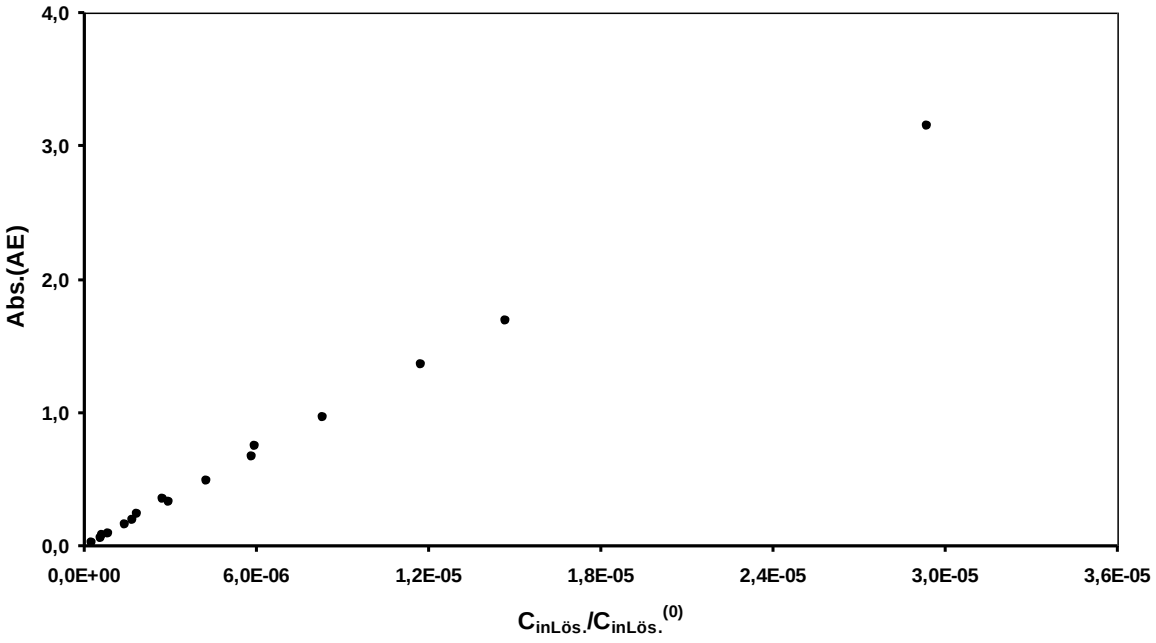

Abb. A5: Eichkurve für Diuron, λ=211 nm

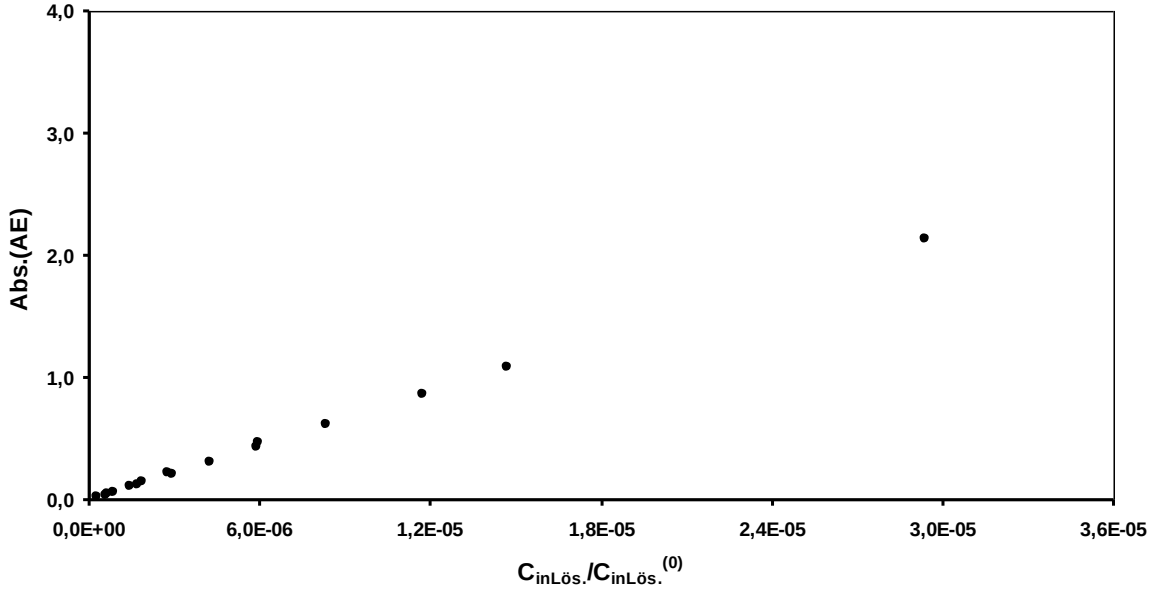

Abb. A6: Eichkurve für Diuron, λ=248 nm

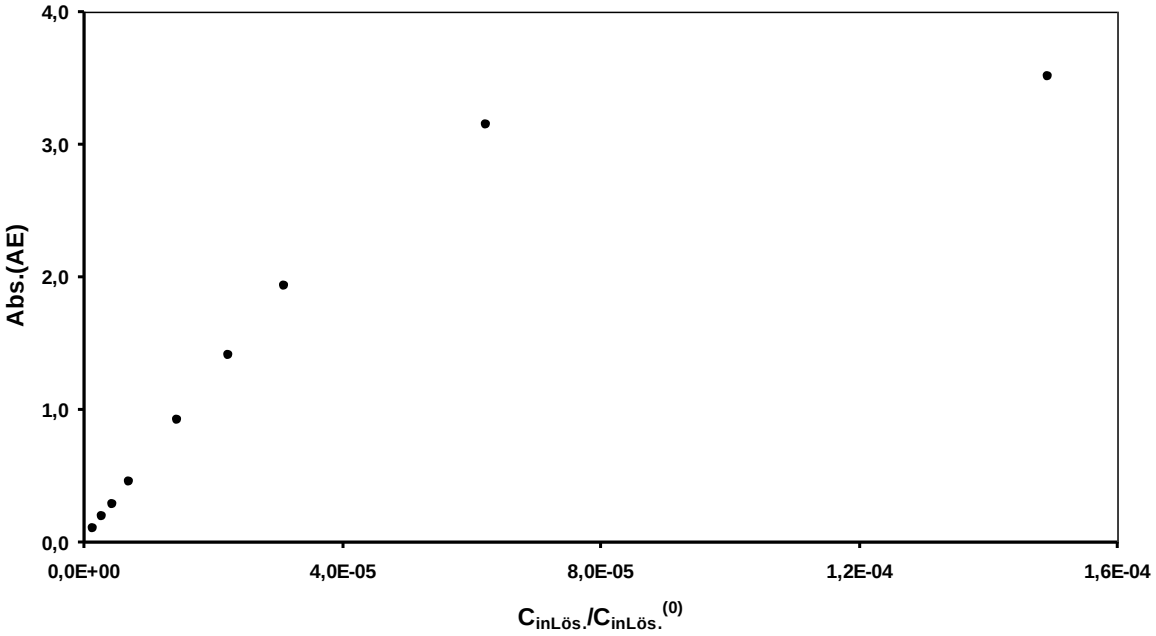

Abb. A7: Eichkurve für Phenol, λ=210 nm

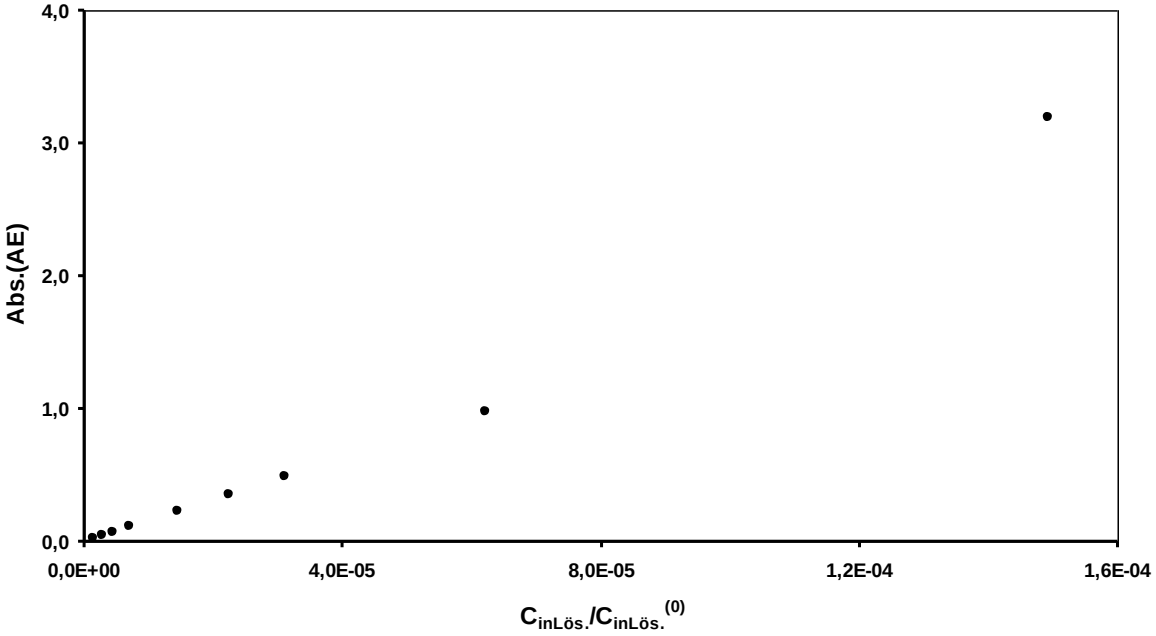

Abb. A8: Eichkurve für Phenol, λ=269 nm

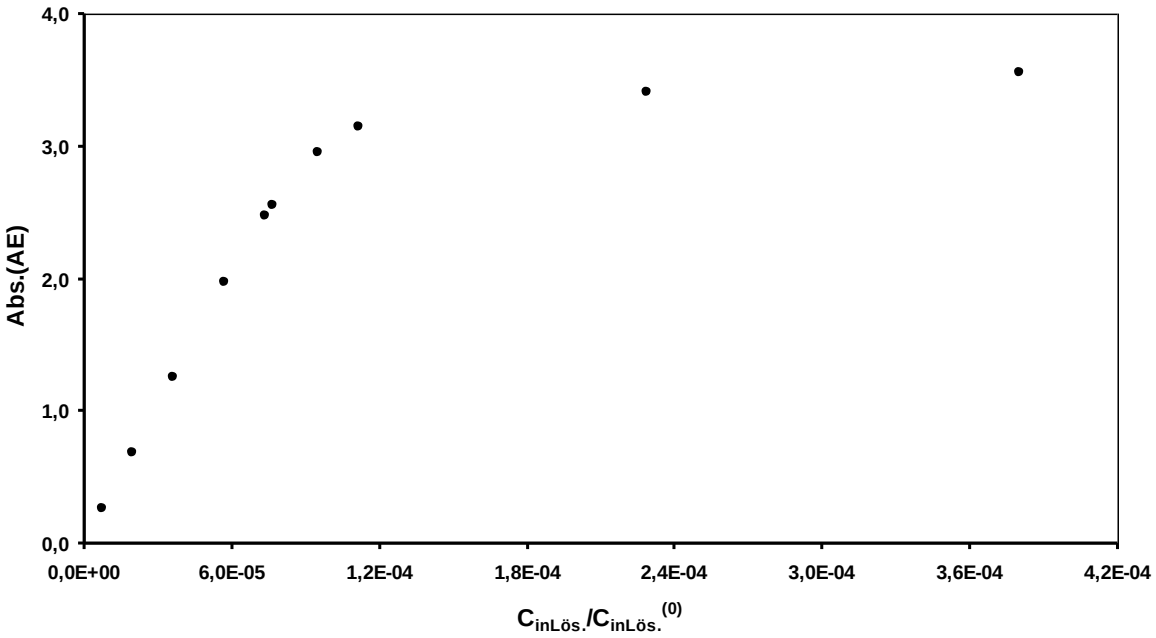

Abb. A9: Eichkurve für 2,4-D, λ=228 nm

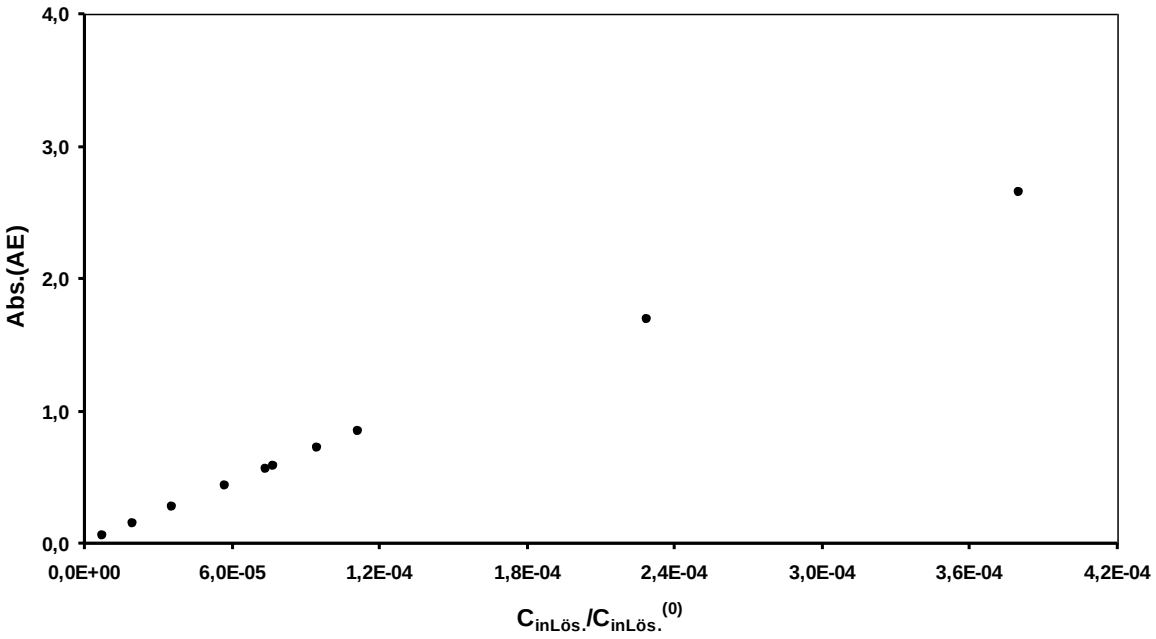

Abb. A10: Eichkurve für 2,4-D, λ=282 nm

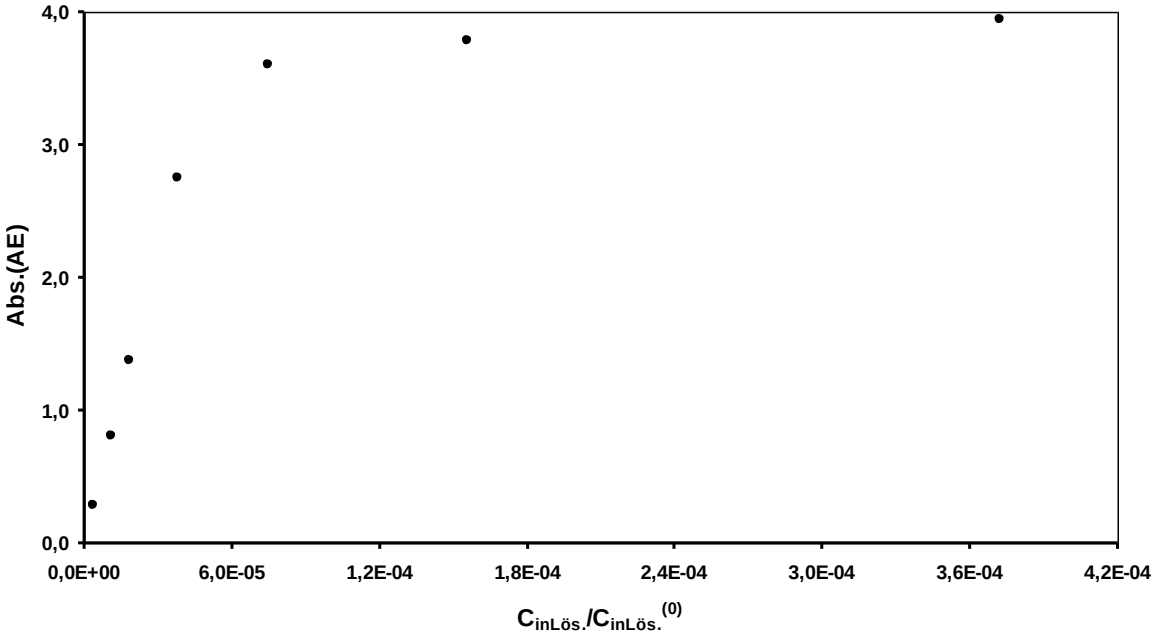

Abb. A11: Eichkurve für Benzamid, λ=226 nm

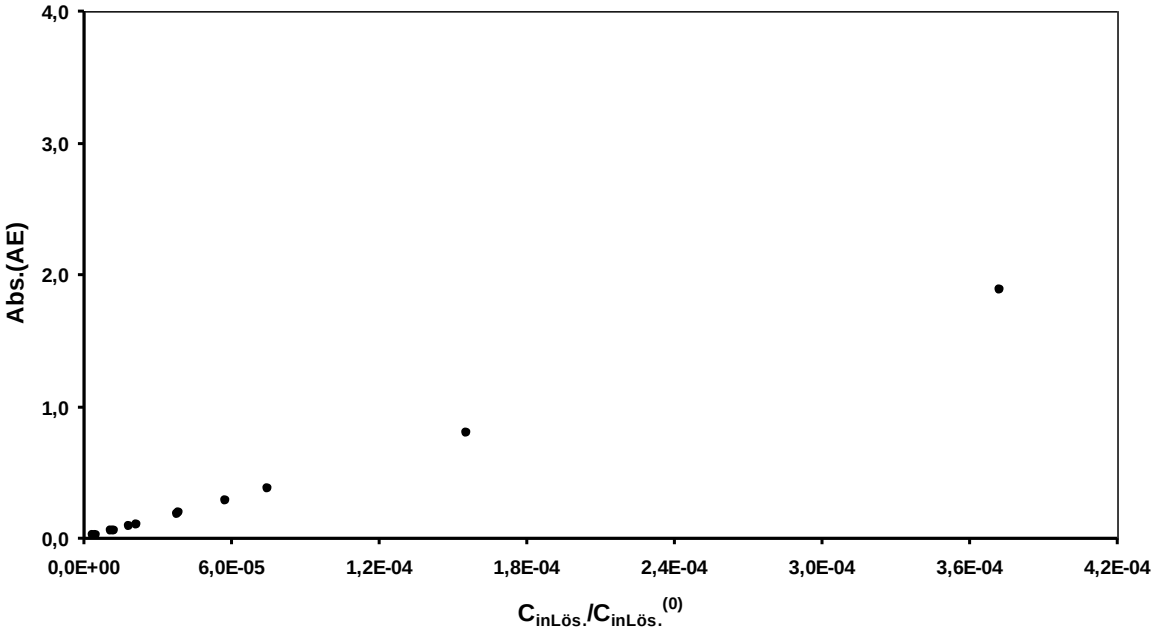

Abb. A12: Eichkurve für Benzamid, λ=268 nm

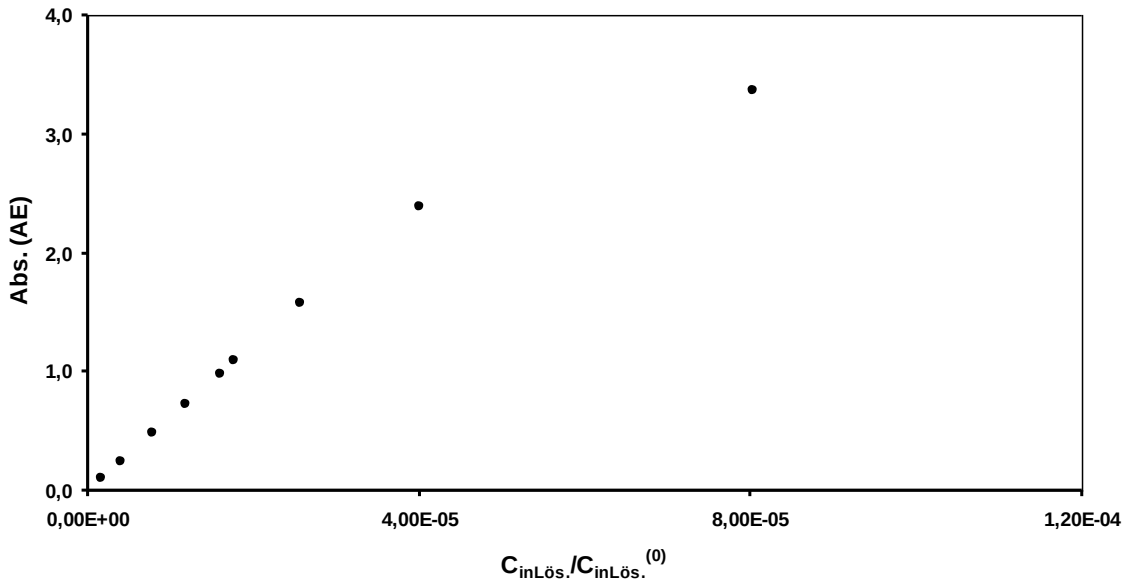

Abb. A13: Eichkurve für Bisphenol A, λ=225 nm

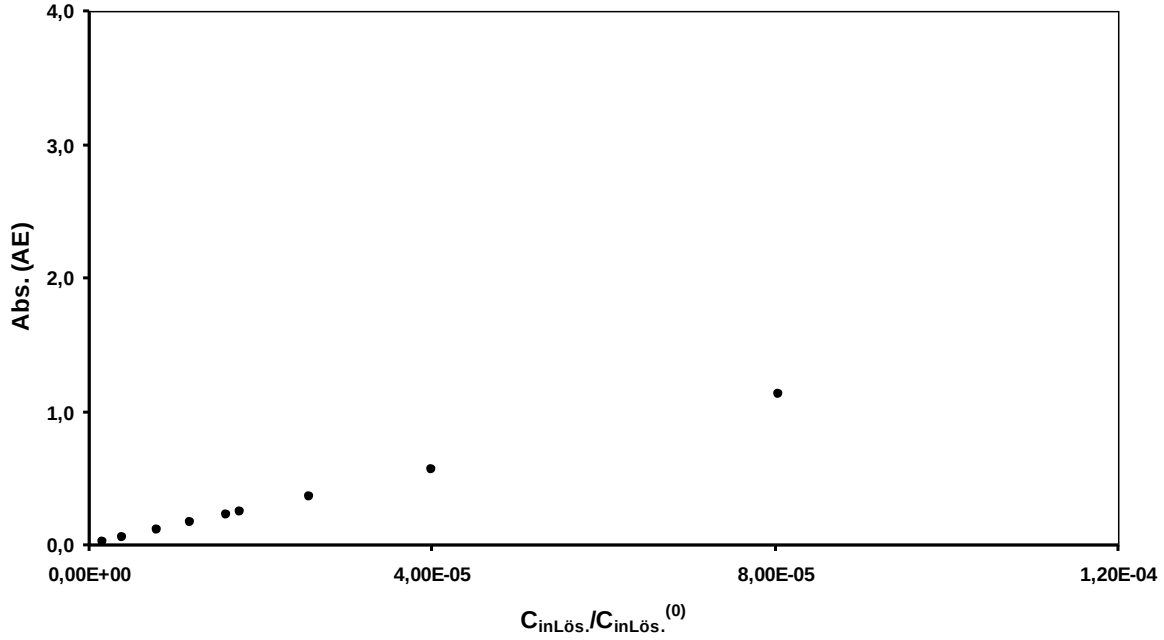

Abb. A14: Eichkurve für Bisphenol A, λ=276 nm

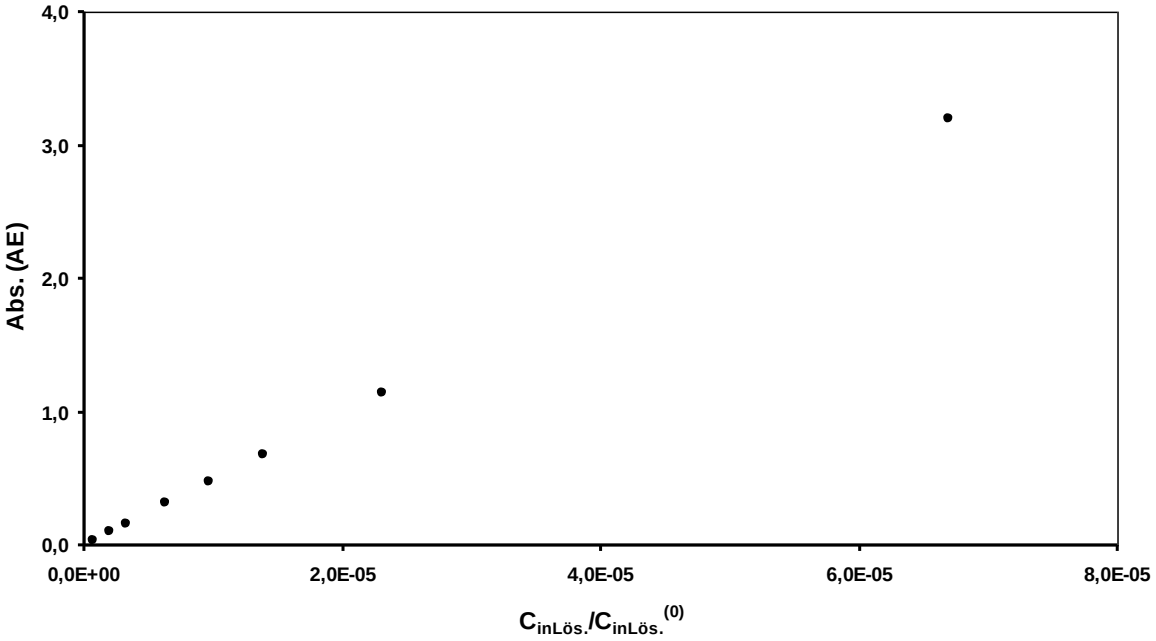

Abb. A15: Eichkurve für Metribuzin, λ=212 nm

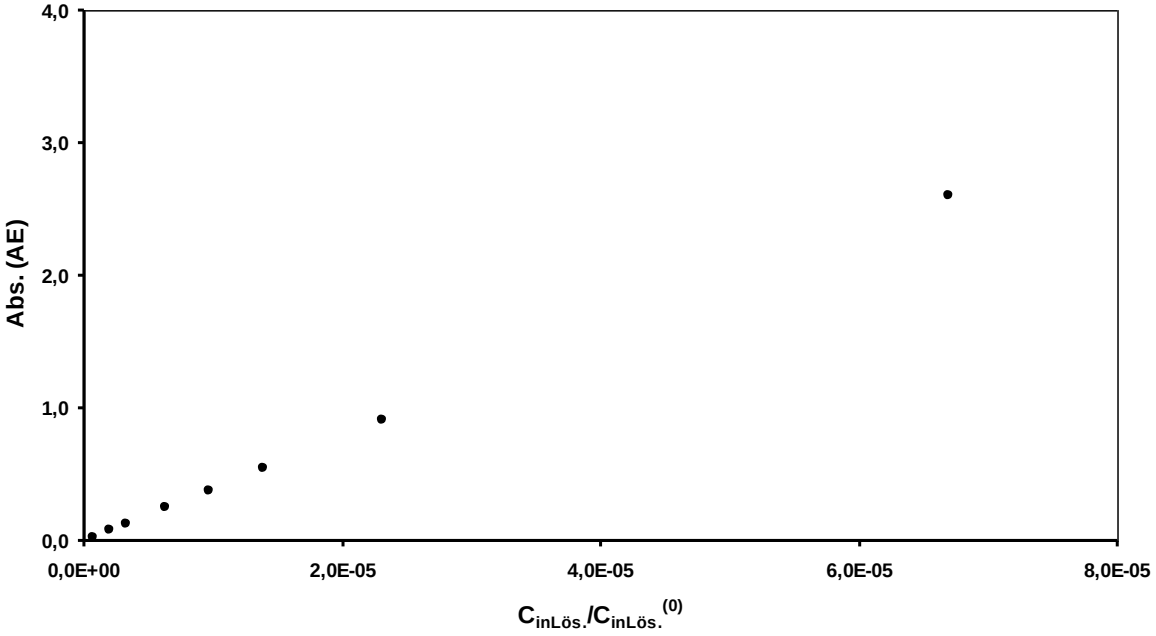

Abb. A16: Eichkurve für Metribuzin, λ=294 nm

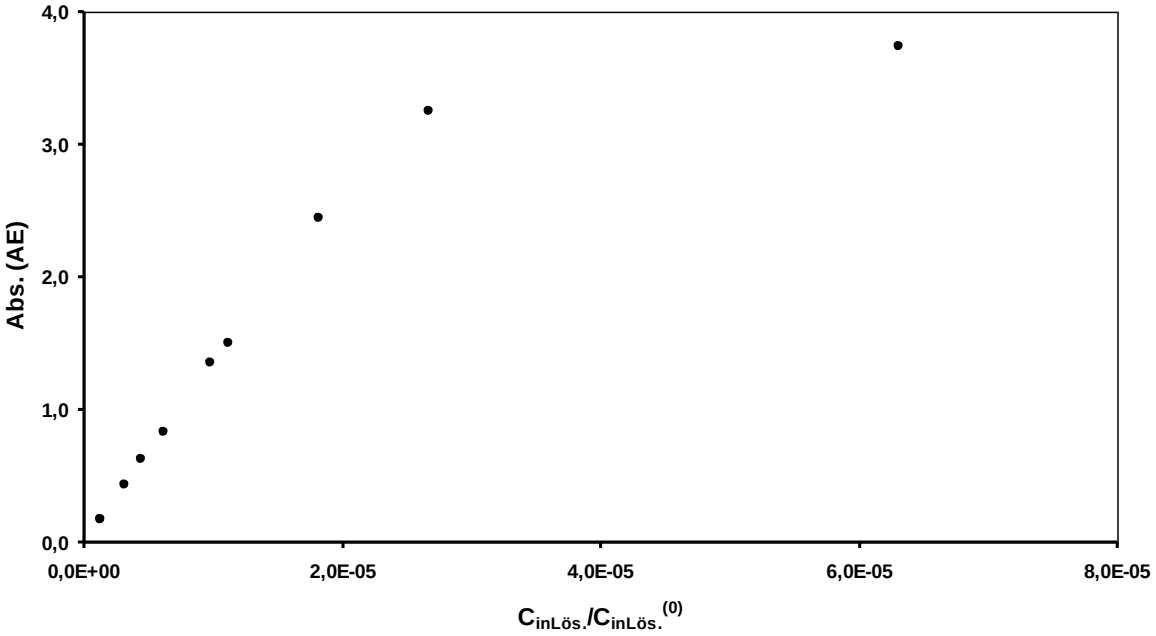

Abb. A17: Eichkurve für Propanil, λ=209 nm

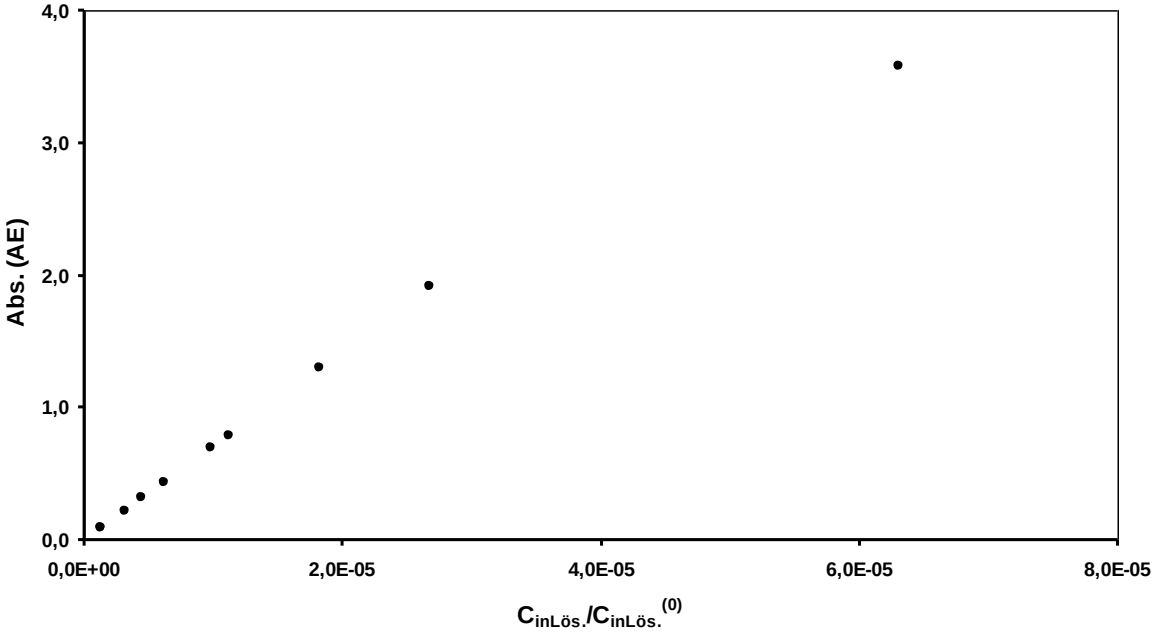

Abb. A18: Eichkurve für Propanil, λ=249 nm

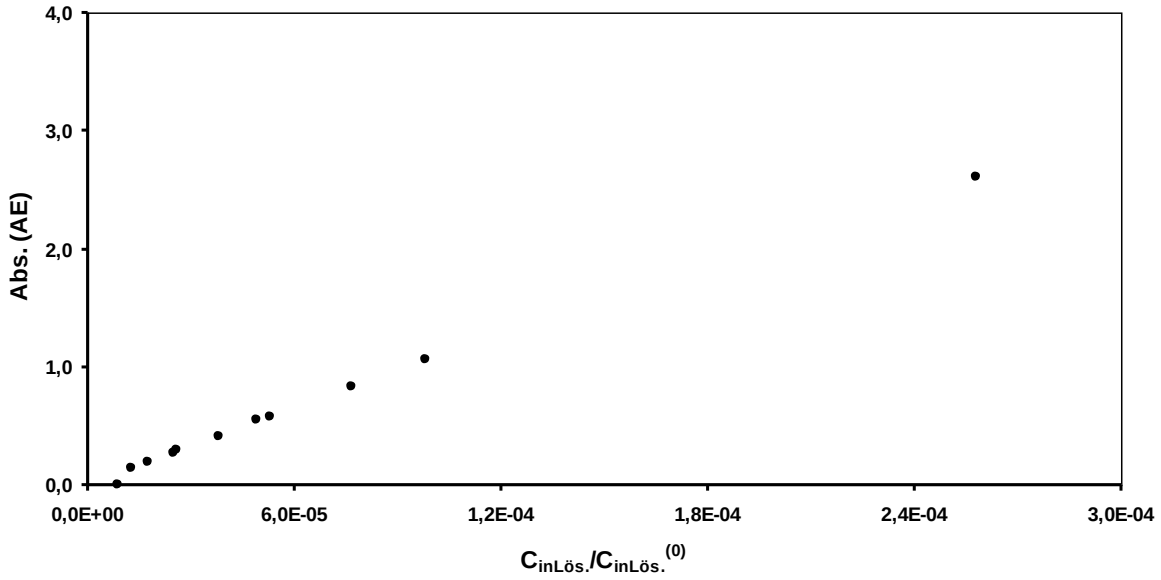

Abb. A19: Eichkurve für Carbofuran, λ=278 nm

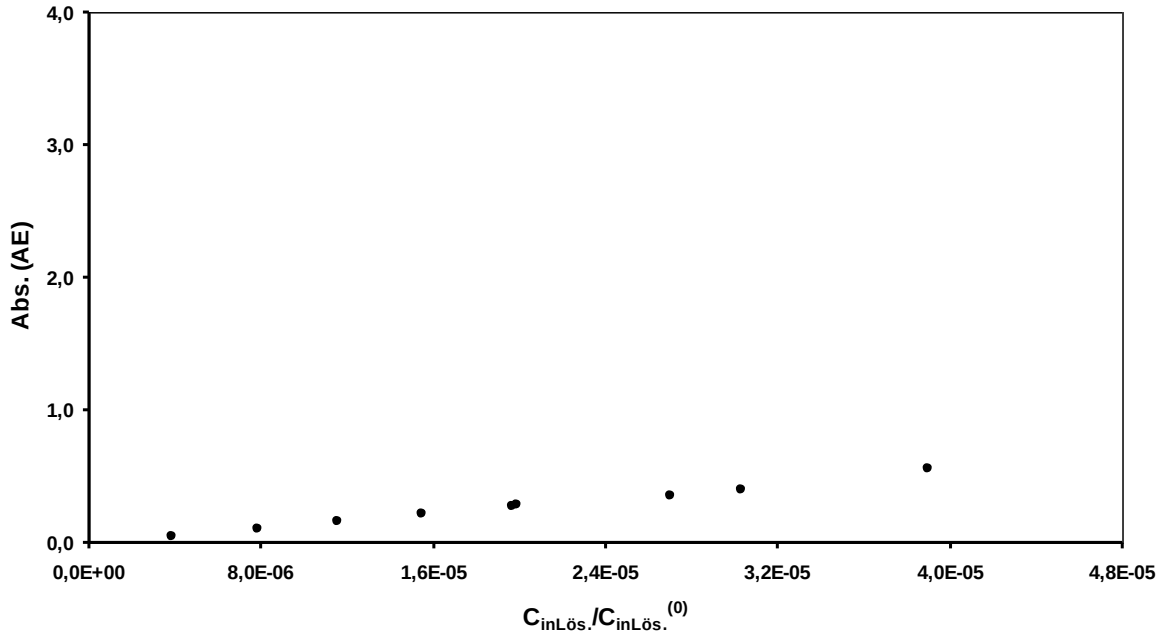

Abb. A20: Eichkurve für Diazinon, λ= 248 nm

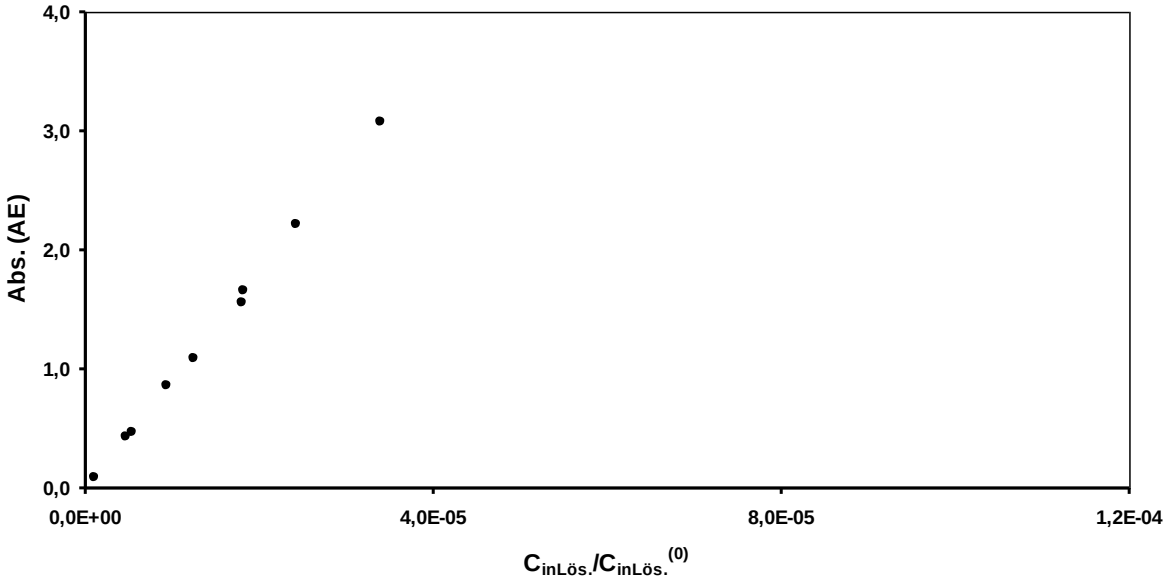

Abb. A21: Eichkurve für Bromoxynil, λ=223 nm

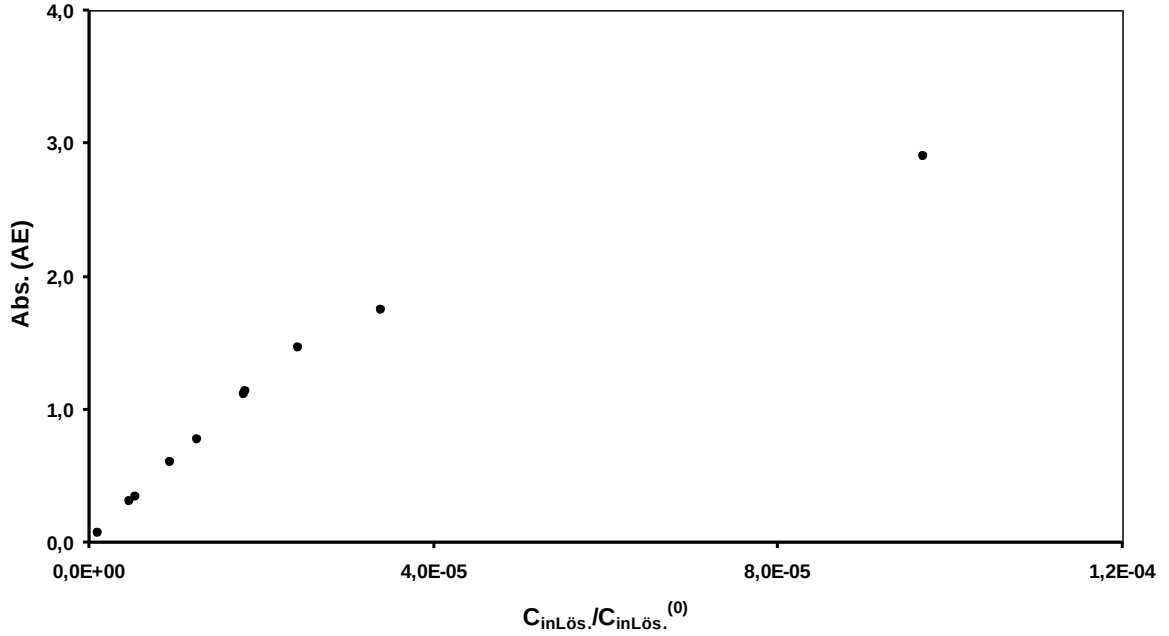

Abb. A22: Eichkurve für Bromoxynil, λ=282 nm

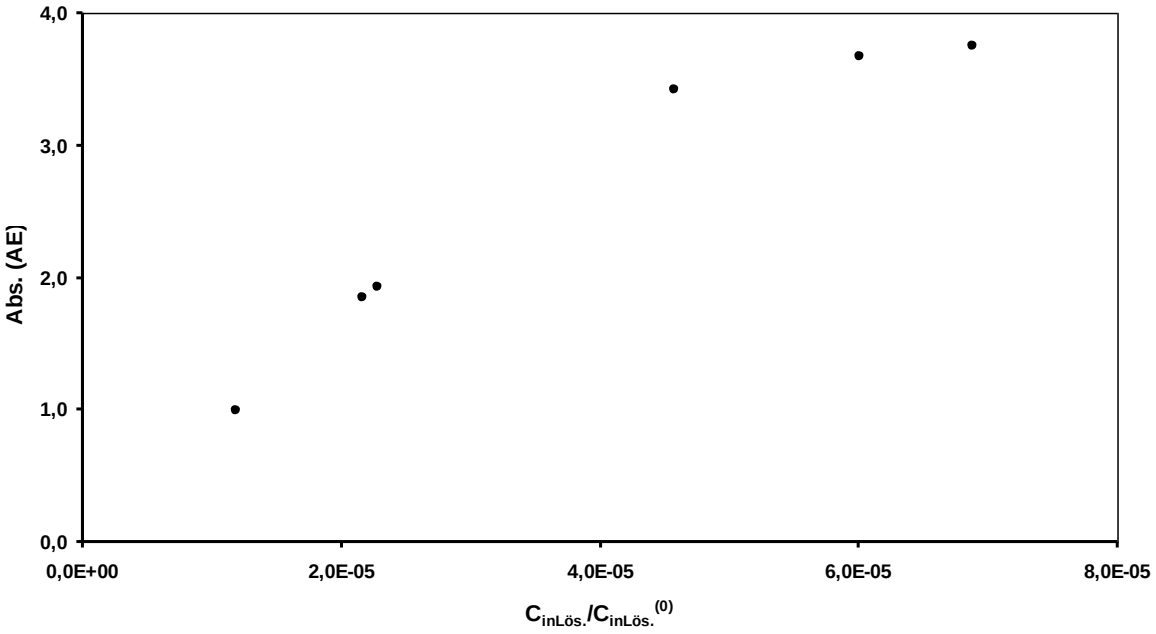

Abb. A23: Eichkurve für n-Methylanilin, λ=235 nm

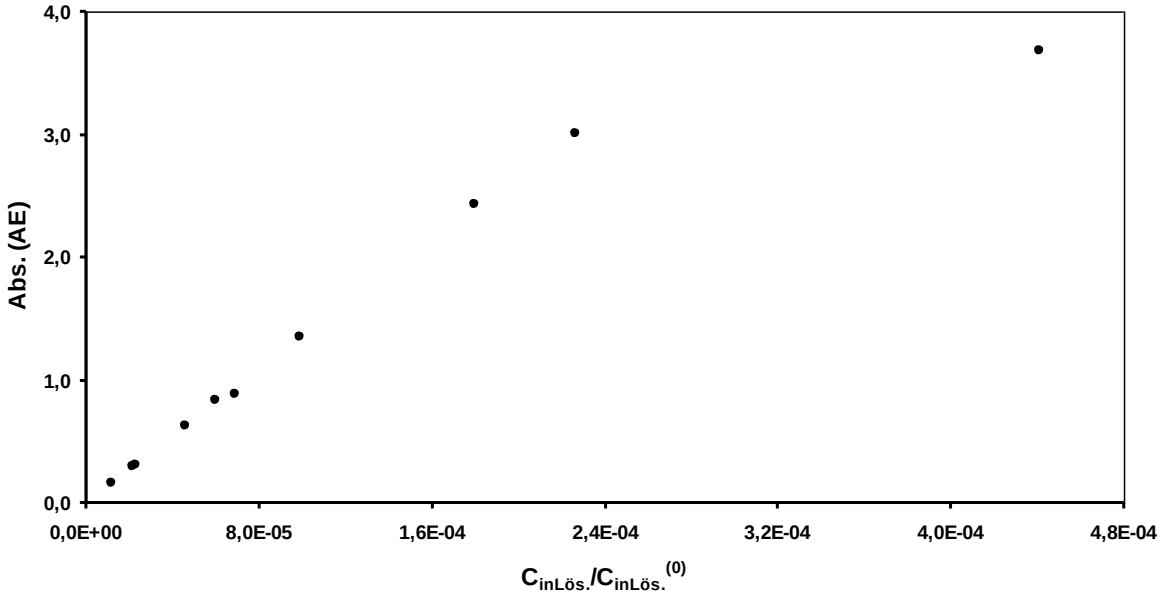

Abb. A24: Eichkurve für n-Methylanilin, λ=284 nm

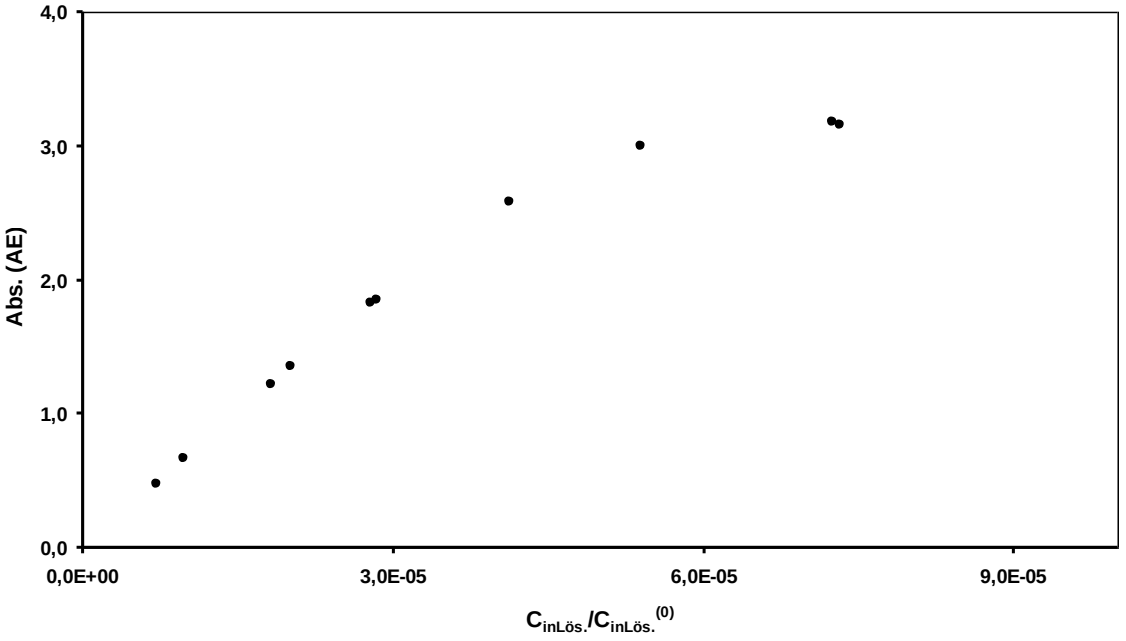

Abb. A25: Eichkurve für 4-Chlorophenol, λ=225 nm

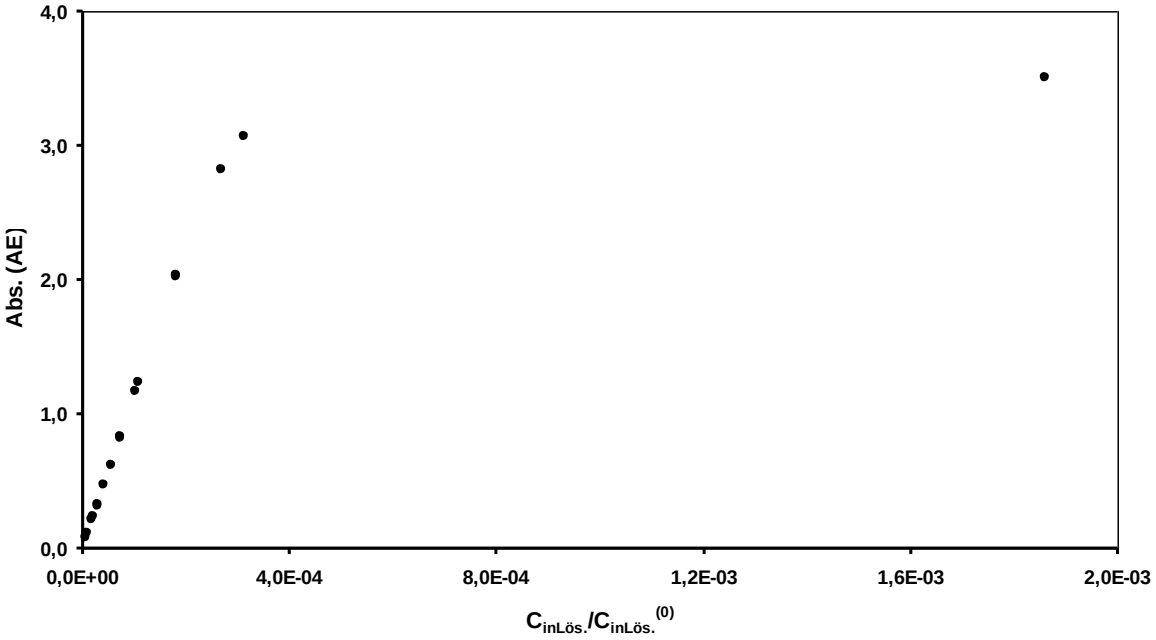

Abb. A26: Eichkurve für 4-Chlorophenol, λ=279 nm

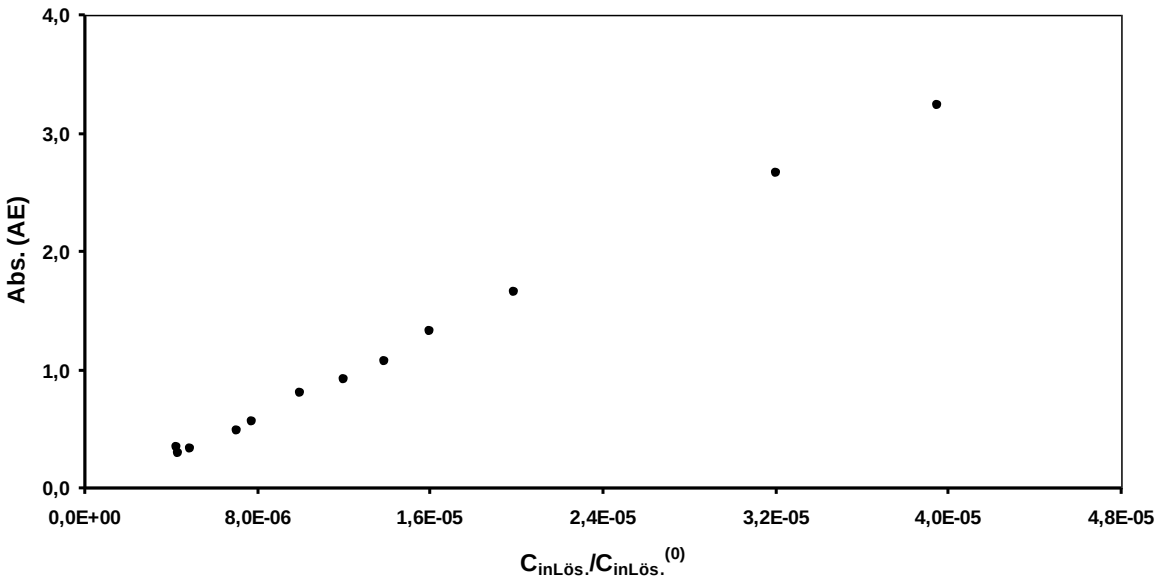

Abb. A27: Eichkurve für 2-Nitrophenol,λ=210 nm

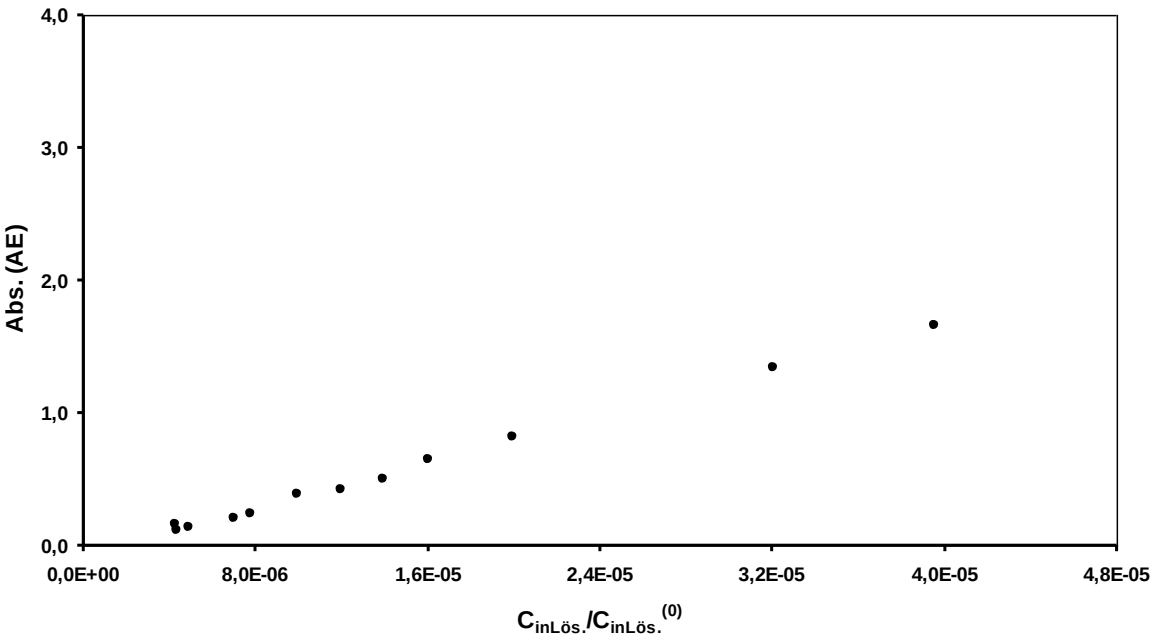

Abb. A28: Eichkurve für 2-Nitrophenol, λ= 279 nm

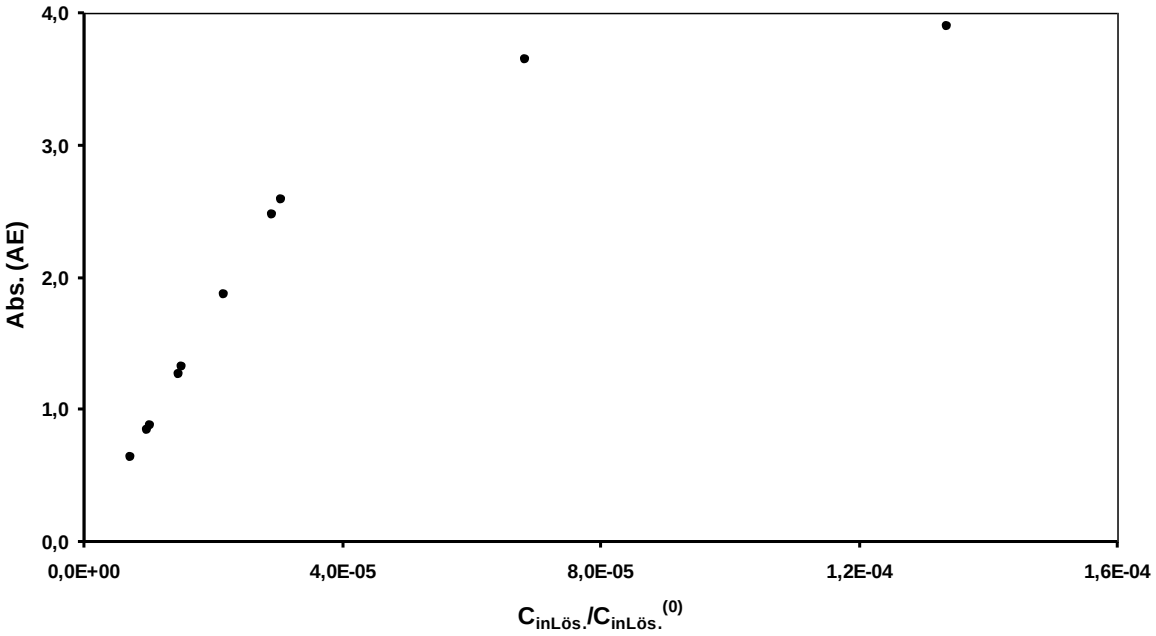

Abb. A29: Eichkurve für 4-Chlororanilin, λ= 238 nm

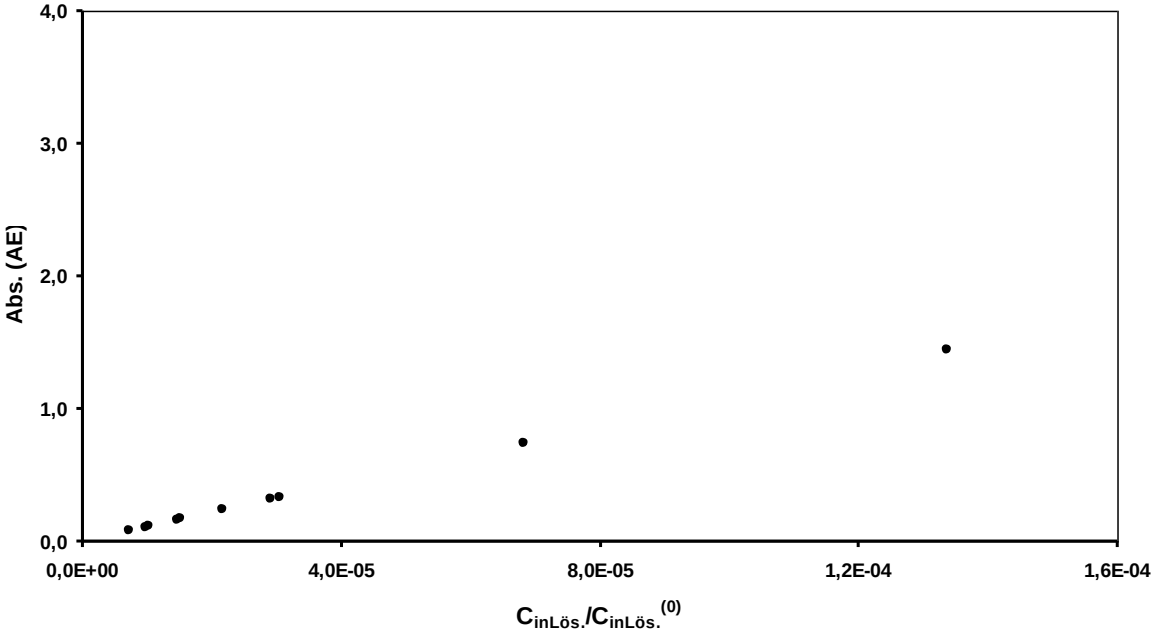

Abb. A30: Eichkurve für 4-Chloroanilin, λ= 290 nm

Anhang B. Ergänzungen zu den Beispielrechnungen

Es wurden auf theoretischer Basis die Beispielrechnungen für 3 Verteilungskoeffizienten K_D, 3 Wertstoff-Konzentrationen in den Stammlösungen C_{SL} und 3 Empfindlichkeiten S des UV-Photometers für jeweils 5 aufeinander folgende Sorptionsschritte ausgerechnet. Aus diesen Beispielrechnungen erhält man maximale und minimale K_D-Werte innerhalb jeweils angenommenen Verteilungskoeffizienten, Wertstoff-Konzentration und Empfindlichkeit des UV-Photometers. Die Tab. B1 fasst die ergänzten Angaben zu den Beispeilrechnungen zusammen.

Tab. B1: Massenbilanz

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=1	**Schritt 1**	**4700**	**$6{,}1 \cdot 10^{-6}$**	1,97·10-6±1,39·10-9	1,97·10-6±1,39·10-9	0,0092±0,05	1,97·10-6±1,39·10-9	∞	0,2
	Schritt 2			3,34·10-6±8,40·10-9	3,34·10-6±8,40·10-9	0,0157±0,05	3,34·10-6±8,40·10-9	∞	0,2
	Schritt 3			4,26·10-6±1,24·10-8	4,26·10-6±1,24·10-8	0,0200±0,05	4,26·10-6±1,24·10-8	∞	0,3
	Schritt 4			4,87·10-6±1,50·10-8	4,87·10-6±1,50·10-8	0,0229±0,05	4,87·10-6±1,50·10-8	∞	0,3
	Schritt 5			5,28·10-6±1,68·10-8	5,28·10-6±1,68·10-8	0,0248±0,05	5,28·10-6±1,68·10-8	∞	0,3
	Schritt 1	**81000**	**$6{,}1 \cdot 10^{-6}$**	1,97·10-6±1,39·10-9	1,97·10-6±1,39·10-9	0,159±0,05	1,97·10-6±6,18·10-7	1,5	0,8
	Schritt 2			3,34·10-6±8,40·10-9	3,34·10-6±8,40·10-9	0,271±0,05	3,34·10-6±6,26·10-7	1,2	0,8
	Schritt 3			4,26·10-6±1,24·10-8	4,26·10-6±1,24·10-8	0,345±0,05	4,26·10-6±6,30·10-7	1,2	0,9
	Schritt 4			4,87·10-6±1,50·10-8	4,87·10-6±1,50·10-8	0,395±0,05	4,87·10-6±6,32·10-7	1,1	0,9
	Schritt 5			5,28·10-6±1,68·10-8	5,28·10-6±1,68·10-8	0,428±0,05	5,28·10-6±6,34·10-7	1,1	0,9

Tab. B1: Massenbilanz (Fortsetzung)

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=1	**Schritt 1**	**132000**	**$6{,}1 \cdot 10^{-6}$**	1,97·10-6±1,39·10-9	1,97·10-6±1,39·10-9	0,259±0,05	1,97·10-6±3,80·10-7	1,2	0,8
	Schritt 2			3,34·10-6±8,40·10-9	3,34·10-6±8,40·10-9	0,441±0,05	3,34·10-6±3,87·10-7	1,1	0,9
	Schritt 3			4,26·10-6±1,24·10-8	4,26·10-6±1,24·10-8	0,562±0,05	4,26·10-6±3,91·10-7	1,1	0,9
	Schritt 4			4,87·10-6±1,50·10-8	4,87·10-6±1,50·10-8	0,643±0,05	4,87·10-6±3,93·10-7	1,1	0,9
	Schritt 5			5,28·10-6±1,68·10-8	5,28·10-6±1,68·10-8	0,697±0,05	5,28·10-6±3,95·10-7	1,1	0,9
K_D=1	**Schritt 1**	**4700**	**$1{,}20 \cdot 10^{-4}$**	3,87·10-5±2,75·10-8	3,87·10-5±2,75·10-8	0,182±0,05	3,87·10-5±1,06·10-5	1,4	0,8
	Schritt 2			2,78·10-5±1,15·10-7	2,78·10-5±1,15·10-7	0,130±0,05	2,78·10-5±1,07·10-5	1,6	0,7
	Schritt 3			2,06·10-5±8,32·10-8	2,06·10-5±8,32·10-8	0,097±0,05	2,06·10-5±1,07·10-5	2,1	0,6
	Schritt 4			1,58·10-5±6,22·10-8	1,58·10-5±6,22·10-8	0,074±0,05	1,58·10-5±1,07·10-5	3,1	0,6
	Schritt 5			1,25·10-5±4,83·10-8	1,25·10-5±4,83·10-8	0,059±0,05	1,25·10-5±1,06·10-5	6,8	0,5

Tab. B1: Massenbilanz (Fortsetzung)

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=1	**Schritt 1**	**81000**	**$1{,}20 \cdot 10^{-4}$**	3,87·10-5±2,75·10-8	3,87·10-5±2,75·10-8	3,135±0,05	3,87·10-5±6,44·10-7	1,0	1,0
	Schritt 2			2,78·10-5±1,15·10-7	2,78·10-5±1,15·10-7	2,255±0,05	2,78·10-5±7,31·10-7	1,0	1,0
	Schritt 3			2,06·10-5±8,32·10-8	2,06·10-5±8,32·10-8	1,668±0,05	2,06·10-5±7,00·10-7	1,0	1,0
	Schritt 4			1,58·10-5±6,22·10-8	1,58·10-5±6,22·10-8	1,277±0,05	1,58·10-5±6,79·10-7	1,0	0,9
	Schritt 5			1,25·10-5±4,83·10-8	1,25·10-5±4,83·10-8	1,016±0,05	1,25·10-5±6,65·10-7	1,1	0,9
K_D=1	**Schritt 1**	**132000**	**$1{,}20 \cdot 10^{-4}$**	3,87·10-5±2,75·10-8	3,87·10-5±2,75·10-8	-	-		
	Schritt 2			2,78·10-5±1,15·10-7	2,78·10-5±1,15·10-7	-	-		
	Schritt 3			2,06·10-5±8,32·10-8	2,06·10-5±8,32·10-8	2,718±0,05	2,06·10-5±1,85·10-5	0,5	0,5
	Schritt 4			1,58·10-5±6,22·10-8	1,58·10-5±6,22·10-8	2,080±0,05	1,58·10-5±1,26·10-5	0,6	0,5
	Schritt 5			1,25·10-5±4,83·10-8	1,25·10-5±4,83·10-8	1,655±0,05	1,25·10-5±8,51·10-6	0,6	0,6

Tab. B1: Massenbilanz (Fortsetzung)

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=1	**Schritt 1**	**4700**	**$3{,}00 \cdot 10^{-4}$**	9,67·10-5±6,88·10-8	9,67·10-5±6,88·10-8	0,454±0,05	9,67·10-5±1,07·10-5	1,1	0,9
	Schritt 2			6,56·10-5±2,82·10-7	6,56·10-5±2,82·10-7	0,312±0,05	6,56·10-5±1,09·10-5	1,2	0,9
	Schritt 3			4,64·10-5±1,95·10-7	4,64·10-5±1,95·10-7	0,218±0,05	4,64·10-5±1,08·10-5	1,3	0,8
	Schritt 4			3,30·10-5±1,37·10-7	3,30·10-5±1,37·10-7	0,155±0,05	3,30·10-5±1,08·10-5	1,5	0,7
	Schritt 5			2,40·10-5±7,29·10-9	2,40·10-5±7,29·10-9	0,113±0,05	2,40·10-5±1,07·10-5	1,8	0,7
K_D=28	**Schritt 1**	**4700**	**$6{,}1 \cdot 10^{-6}$**	1,05·10-6±8,49·10-9	2,94·10-5±2,37·10-7	0,005±0,05	1,05·10-6±1,06·10-5	∞	2,5
	Schritt 2			2,73·10-6±5,75·10-9	7,65·10-5±1,61·10-7	0,013±0,05	2,73·10-6±1,06·10-5	∞	5,7
	Schritt 3			3,86·10-6±1,06·10-8	1,08·10-4±2,97·10-7	0,018±0,05	3,86·10-6±1,06·10-5	∞	7,4
	Schritt 4			4,60·10-6±1,39·10-8	1,29·10-4±3,88·10-7	0,021±0,05	4,60·10-6±1,06·10-5	∞	8,4
	Schritt 5			5,10·10-6±1,60·10-8	1,43·10-4±4,48·10-7	0,024±0,05	5,10·10-6±1,06·10-5	∞	9,0

Tab. B1: Massenbilanz (Fortsetzung)

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=28	**Schritt 1**	**81000**	**$6{,}1 \cdot 10^{-6}$**	1,05·10-6±8,49·10-9	2,94·10-5±2,37·10-7	0,085±0,05	1,05·10-6±6,17·10-7	67,2	17,8
	Schritt 2			2,73·10-6±5,75·10-9	7,65·10-5±1,61·10-7	0,221±0,05	2,73·10-6±6,17·10-7	36,2	22,8
	Schritt 3			3,86·10-6±1,06·10-8	1,08·10-4±2,97·10-7	0,312±0,05	3,86·10-6±6,17·10-7	33,4	24,1
	Schritt 4			4,60·10-6±1,39·10-8	1,29·10-4±3,88·10-7	0,373±0,05	4,60·10-6±6,17·10-7	32,4	24,6
	Schritt 5			5,10·10-6±1,60·10-8	1,43·10-4±4,48·10-7	0,413±0,05	5,10·10-6±6,17·10-7	31,9	24,9
K_D=28	**Schritt 1**	**132000**	**$6{,}1 \cdot 10^{-6}$**	1,05·10-6±8,49·10-9	2,94·10-5±2,37·10-7	0,139±0,05	1,05·10-6±3,79·10-7	43,4	20,7
	Schritt 2			2,73·10-6±5,75·10-9	7,65·10-5±1,61·10-7	0,361±0,05	2,73·10-6±3,79·10-7	32,6	24,5
	Schritt 3			3,86·10-6±1,06·10-8	1,08·10-4±2,97·10-7	0,509±0,05	3,86·10-6±3,79·10-7	31,1	25,4
	Schritt 4			4,60·10-6±1,39·10-8	1,29·10-4±3,88·10-7	0,608±0,05	4,60·10-6±3,79·10-7	30,6	25,8
	Schritt 5			5,10·10-6±1,60·10-8	1,43·10-4±4,48·10-7	0,673±0,05	5,10·10-6±3,79·10-7	30,3	25,9

Tab. B1: Massenbilanz (Fortsetzung)

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=28	**Schritt 1**	**4700**	**$1{,}20 \cdot 10^{-4}$**	2,06·10-5±1,67·10-7	5,79·10-4±4,68·10-6	0,097±0,05	2,06·10-5±1,05·10-5	56,2	18,7
	Schritt 2			1,58·10-5±6,25·10-8	4,43·10-4±1,75·10-6	0,074±0,05	1,58·10-5±1,07·10-5	86,8	16,6
	Schritt 3			1,26·10-5±4,85·10-8	3,52·10-4±1,36·10-6	0,059±0,05	1,26·10-5±1,07·10-5	186,1	15,1
	Schritt 4			1,04·10-5±3,91·10-8	2,92·10-4±1,09·10-6	0,049±0,05	1,04·10-5±1,07·10-5	∞	13,8
	Schritt 5			8,98·10-6±3,28·10-8	2,51·10-4±9,20·10-7	0,042±0,05	8,98·10-6±1,07·10-5	∞	12,7
K_D=28	**Schritt 1**	**81000**	**$1{,}20 \cdot 10^{-4}$**	2,06·10-5±1,67·10-7	5,79·10-4±4,68·10-6	1,67±0,05	2,06·10-5±4,53·10-7	28,4	27,6
	Schritt 2			1,58·10-5±6,25·10-8	4,43·10-4±1,75·10-6	1,28±0,05	1,58·10-5±6,80·10-7	29,4	26,7
	Schritt 3			1,26·10-5±4,85·10-8	3,52·10-4±1,36·10-6	1,02±0,05	1,26·10-5±6,65·10-7	29,7	26,5
	Schritt 4			1,04·10-5±3,91·10-8	2,92·10-4±1,09·10-6	0,84±0,05	1,04·10-5±6,56·10-7	30,0	26,2
	Schritt 5			8,98·10-6±3,28·10-8	2,51·10-4±9,20·10-7	0,73±0,05	8,98·10-6±6,50·10-7	30,3	26,0

Tab. B1: Massenbilanz (Fortsetzung)

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=28	**Schritt 1**	**132000**	**$1{,}20 \cdot 10^{-4}$**	2,06·10-5±1,67·10-7	5,79·10-4±4,68·10-6	2,73±0,05	2,06·10-5±2,14·10-7	28,1	27,9
	Schritt 2			1,58·10-5±6,25·10-8	4,43·10-4±1,75·10-6	2,09±0,05	1,58·10-5±4,41·10-7	28,9	27,1
	Schritt 3			1,26·10-5±4,85·10-8	3,52·10-4±1,36·10-6	1,66±0,05	1,26·10-5±4,27·10-7	29,1	26,9
	Schritt 4			1,04·10-5±3,91·10-8	2,92·10-4±1,09·10-6	1,37±0,05	1,04·10-5±4,18·10-7	29,3	26,8
	Schritt 5			8,98·10-6±3,28·10-8	2,51·10-4±9,20·10-7	1,18±0,05	8,98·10-6±4,11·10-7	29,4	26,7
K_D=28	**Schritt 1**	**4700**	**$3{,}00 \cdot 10^{-4}$**	5,17·10-5±4,17·10-7	1,45·10-3±1,17·10-5	0,24±0,05	5,17·10-5±1,02·10-5	34,6	23,6
	Schritt 2			3,65·10-5±1,52·10-7	1,02·10-3±4,26·10-6	0,17±0,05	3,65·10-5±1,07·10-5	39,9	21,5
	Schritt 3			2,64·10-5±1,08·10-7	7,38·10-4±3,03·10-6	0,12±0,05	2,63·10-5±1,07·10-5	47,4	19,8
	Schritt 4			1,96·10-5±7,89·10-8	5,49·10-4±2,21·10-6	0,09±0,05	1,96·10-5±1,07·10-5	61,9	18,0
	Schritt 5			1,51·10-5±5,94·10-8	4,23·10-4±1,66·10-6	0,07±0,05	1,51·10-5±1,06·10-5	96,2	16,3

Tab. B1: Massenbilanz (Fortsetzung)

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=28	**Schritt 1**	**81000**	**$3{,}00 \cdot 10^{-4}$**	5,17·10-5±4,17·10-7	1,45·10-3±1,17·10-5	Zu hoch	-	-	-
	Schritt 2			3,65·10-5±1,52·10-7	1,02·10-3±4,26·10-6	2,95±0,05	3,65·10-5±7,69·10-7	28,7	27,3
	Schritt 3			2,64·10-5±1,08·10-7	7,38·10-4±3,03·10-6	2,13±0,05	2,64·10-5±7,25·10-7	28,9	27,1
	Schritt 4			1,96·10-5±7,89·10-8	5,49·10-4±2,21·10-6	1,59±0,05	1,96·10-5±6,96·10-7	29,1	26,9
	Schritt 5			1,51·10-5±5,94·10-8	4,23·10-4±1,66·10-6	1,22±0,05	1,51·10-5±6,76·10-7	29,4	26,7
K_D=28	**Schritt 1**	**132000**	**$3{,}00 \cdot 10^{-4}$**	5,17·10-5±4,17·10-7	1,45·10-3±1,17·10-5	Zu hoch	-	-	-
	Schritt 2			3,65·10-5±1,52·10-7	1,02·10-3±4,26·10-6	Zu hoch	-	-	-
	Schritt 3			2,64·10-5±1,08·10-7	7,38·10-4±3,03·10-6	Zu hoch	-	-	-
	Schritt 4			1,96·10-5±7,89·10-8	5,49·10-4±2,21·10-6	2,59±0,05	1,96·10-5±3,79·10-7	28,7	27,4
	Schritt 5			1,51·10-5±5,94·10-8	4,23·10-4±1,66·10-6	1,99±0,05	1,55·10-5±3,79·10-7	28,8	27,2

Tab. B1: Massenbilanz (Fortsetzung)

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=450	**Schritt 1**	**4700**	**$6{,}1 \cdot 10^{-6}$**	1,27·10-7±2,17·10-9	5,71·10-5·±9,79·10-7	0,0005±0,05	1,27·10-7±1,06·10-5	∞	5,4
	Schritt 2			2,12·10-6±3,08·10-9	9,53·10-4±1,39·10-6	0,009±0,05	2,11·10-6±1,06·10-5	∞	74,6
	Schritt 3			3,44·10-6±8,83·10-9	15,5·10-4±3,98·10-6	0,016±0,05	3,44·10-6±1,06·10-5	∞	109,7
	Schritt 4			4,33·10-6±1,27·10-8	19,49·10-4±5,70·10-6	0,02±0,05	4,33·10-6±1,06·10-5	∞	129,7
	Schritt 5			4,92·10-6±1,52·10-8	22,2·10-4±6,85±·10-6	0,023±0,05	4,92·10-6±1,06·10-5	∞	141,7
K_D=450	**Schritt 1**	**81000**	**$6{,}1 \cdot 10^{-6}$**	1,27·10-7±2,17·10-9	5,71·10-5·±9,79·10-7	0,01±0,05	1,27·10-7±6,15·10-7	∞	78,4
	Schritt 2			2,12·10-6±3,08·10-9	9,53·10-4±1,39·10-6	0,17±0,05	2,11·10-6±6,20·10-7	637,3	347,5
	Schritt 3			3,44·10-6±8,83·10-9	15,5·10-4±3,98·10-6	0,28±0,05	3,44·10-6±6,26·10-7	338,6	379,8
	Schritt 4			4,33·10-6±1,27·10-8	19,49·10-4±5,70·10-6	0,35±0,05	4,33·10-6±6,30·10-7	420,1	391,5
	Schritt 5			4,92·10-6±1,52·10-8	22,2·10-4±6,85±·10-6	0,40±0,05	4,92·10-6±6,32·10-7	455,8	397,5

Tab. B1: Massenbilanz (Fortsetzung)

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=450	**Schritt 1**	**132000**	**$6{,}1 \cdot 10^{-6}$**	1,27·10-7±2,17·10-9	5,71·10-5·±9,79·10-7	0,02±0,05	1,27·10-7±3,77·10-7	-	-
	Schritt 2			2,12·10-6±3,08·10-9	9,53·10-4±1,39·10-6	0,28±0,05	2,11·10-6±3,82·10-7	549,8	380,7
	Schritt 3			3,44·10-6±8,83·10-9	15,5·10-4±3,98·10-6	0,45±0,05	3,44·10-6±3,88·10-7	508,3	403,5
	Schritt 4			4,33·10-6±1,27·10-8	19,49·10-4±5,70·10-6	0,57±0,05	4,33·10-6±3,91·10-7	496,2	411,5
	Schritt 5			4,92·10-6±1,52·10-8	22,2·10-4±6,85·10-6	0,65±0,05	4,92·10-6±3,94·10-7	490,7	415,3
K_D=450	**Schritt 1**	**4700**	**$1{,}2 \cdot 10^{-4}$**	2,5·10-6±4,28·10-8	0,00112±1,92·10-5	0,011±0,05	2,5·10-6±1,06·10-5	∞	87,4
	Schritt 2			3,7·10-6±9,94·10-9	0,00166±4,47·10-6	0,020±0,05	3,7·10-6±1,06·10-5	∞	115,7
	Schritt 3			4,5·10-6±1,34·10-8	0,00202±6,03·10-6	0,021±0,05	4,5·10-6±1,06·10-5	∞	133,2
	Schritt 4			5,03·10-6±1,57·10-8	0,00226±7,07·10-6	0,024±0,05	5,03·10-6±1,06·10-5	∞	143,9
	Schritt 5			5,39·10-6±1,73·10-8	0,00242±7,77·10-6	0,025±0,05	5,39·10-6±1,06·10-5	∞	150,7

Tab. B1: Massenbilanz (Fortsetzung)

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=450	**Schritt 1**	**81000**	**$1{,}2 \cdot 10^{-4}$**	2,5·10-6±4,28·10-8	0,00112±1,92·10-5	0,202±0,05	2,5·10-6±5,76·10-7	574,6	372,0
	Schritt 2			3,7·10-6±9,94·10-9	0,00166±4,47·10-6	0,299±0,05	3,7·10-6±6,27·10-7	543,3	383,7
	Schritt 3			4,5·10-6±1,34·10-8	0,00202±6,03·10-6	0,364±0,05	4,5·10-6±6,31·10-7	524,9	393,5
	Schritt 4			5,03·10-6±1,57·10-8	0,00226±7,07·10-6	0,407±0,05	5,03·10-6±6,33·10-7	516,3	398,5
	Schritt 5			5,39·10-6±1,73·10-8	0,00242±7,77·10-6	0,436±0,05	5,39·10-6±6,34·10-7	511,7	401,3
K_D=450	**Schritt 1**	**132000**	**$1{,}2 \cdot 10^{-4}$**	2,5·10-6±4,28·10-8	0,00112±1,92·10-5	0,330±0,05	2,5·10-6±3,37·10-7	511,3	403,2
	Schritt 2			3,7·10-6±9,94·10-9	0,00166±4,47·10-6	0,488±0,05	3,7·10-6±3,89·10-7	504,2	406,1
	Schritt 3			4,5·10-6±1,34·10-8	0,00202±6,03·10-6	0,594±0,05	4,5·10-6±3,92·10-7	494,3	412,7
	Schritt 4			5,03·10-6±1,57·10-8	0,00226±7,07·10-6	0,664±0,05	5,03·10-6±3,94·10-7	489,8	416,0
	Schritt 5			5,39·10-6±1,73·10-8	0,00242±7,77·10-6	0,711±0,05	5,39·10-6±3,96·10-7	487,2	417,8

Tab. B1: Massenbilanz (Fortsetzung)

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=450	**Schritt 1**	**4700**	**$3{,}00 \cdot 10^{-4}$**	6,25·10-6±1,07·10-7	2,8·10-3±4,81·10-5	0,0293±0,05	6,25·10-6±1,05·10-5	∞	170,4
	Schritt 2			6,20·10-6±2,07·10-8	2,79·10-3±9,34·10-6	0,0291±0,05	6,2·10-6±1,06·10-5	∞	166,2
	Schritt 3			6,16·10-6±2,06·10-8	2,77·10-3±9,27·10-6	0,0289±0,05	6,16·10-6±1,06·10-5	∞	165,7
	Schritt 4			6,14·10-6±2,05·10-8	2,76·10-3±9,24·10-6	0,0288±0,05	6,14·10-6±1,06·10-5	∞	164,2
	Schritt 5			6,13·10-6±2,04·10-6	2,77·10-3±9,21·10-6	0,0288±0,05	6,13·10-6±1,06·10-5	∞	163,9
K_D=450	**Schritt 1**	**81000**	**$3{,}00 \cdot 10^{-4}$**	6,25·10-6±1,07·10-7	2,8·10-3±4,81·10-5	0,506±0,05	6,25·10-6±5,14·10-7	481,9	422,9
	Schritt 2			6,20·10-6±2,07·10-8	2,79·10-3±9,34·10-6	0,502±0,05	6,2·10-6±6,38·10-7	499,6	409,4
	Schritt 3			6,16·10-6±2,06·10-8	2,77·10-3±9,27·10-6	0,499±0,05	6,16·10-6±6,38·10-7	499,9	409,2
	Schritt 4			6,14·10-6±2,05·10-8	2,76·10-3±9,24·10-6	0,497±0,05	6,14·10-6±6,38·10-7	503,8	406,3
	Schritt 5			6,13·10-6±2,04·10-6	2,77·10-3±9,21·10-6	0,496±0,05	6,13·10-6±6,38·10-7	503,9	406,2

Tab. B1: Massenbilanz (Fortsetzung)

Verteilungs-Koeffizient		Steigung S (AE/Konz.)	C_{SL} (g/g)	$C_{in\ Lös}$ $\pm \Delta C_{in\ Lös}$ (g/g)	C_{ES} $\pm \Delta C_{ES}$ (g/g)	UV_{Signal} $\pm \Delta UV_{Signal}$	$C_{Lös(neu)}$ $\pm \Delta C_{Lös(neu)}$ (g/g)	$K_{D\ max.}$	$K_{D\ min.}$
K_D=450	**Schritt 1**	**132000**	**$3{,}00 \cdot 10^{-4}$**	6,25·10-6±1,07·10-7	2,8·10-3±4,81·10-5	0,825±0,05	6,25·10-6±2,76·10-7	462,7	438,4
	Schritt 2			6,20·10-6±2,07·10-8	2,79·10-3±9,34·10-6	0,818±0,05	6,2·10-6±3,99·10-7	479,2	424,2
	Schritt 3			6,16·10-6±2,06·10-8	2,77·10-3±9,27·10-6	0,814±0,05	6,16·10-6±3,99·10-7	479,3	424,0
	Schritt 4			6,14·10-6±2,05·10-8	2,76·10-3±9,24·10-6	0,811±0,05	6,14·10-6±3,99·10-7	482,9	421,1
	Schritt 5			6,13·10-6±2,04·10-6	2,77·10-3±9,21·10-6	0,809±0,05	6,13·10-6±3,99·10-7	483,0	412,1

Anhang C. Ergänzungen zu Retentionszeiten

Tab. C1 Retentionszeiten t_R mit Unsicherheiten Δt_R für Substanzen auf Eurosoil 4

	Retentionszeit t_R (min) ± Δt_R				
bei Volumenstrom (ml/min)	**0,6**	**0,8**	**1,0**	**1,2**	**1,5**
Formamid	5,51±0,01	4,09±0,01	3,27±0,01	2,72±0,01	2,17±0,01
Atrazin	8,33±0,08	6,21±0,03	4,51±0,01	3,96±0,01	3,14±0,02
Amitrol	5,85±0,01	4,31±0,01	3,46±0,01	2,85±0,01	2,24±0,01
2-Nitrophenol	6,20±0,02	4,48±0,08	3,79±0,05	3,02±0,04	2,44±0,01
4-Chloroanilin	5,02±0,01	3,73±0,01	2,98±0,01	2,52±0,03	-
o-Kresol	7,09±0,07	5,33±0,01	4,06±0,09	3,47±0,01	2,75±0,01
4-Chlorophenol	10,55±0,32	7,70±0,01	6,69±0,01	5,23±0,04	4,12±0,02
Metribuzin	6,41±0,01	4,71±0,01	3,74±0,01	3,08±0,01	2,46±0,01
Benzamid	6,26±0,01	4,62±0,04	3,99±0,03	3,28±0,01	2,58±0,01
Carbofuran	6,74±0,01	4,83±0,02	4,11±0,01	3,49±0,13	2,44±0,01
2,4- Dichlorphenoxy--essigsäure	5,92±0,03	4,33±0,05	3,67±0,01	3,00±0,01	2,30±0,03
Bromoxynil	7,06±0,03	5,07±0,23	4,35±0,01	3,48±0,01	2,56±0,02
n-Methylanilin	6,04±0,02	4,41±0,01	3,88±0,02	3,18±0,01	2,50±0,01
Anilin	6,03±0,01	4,48±0,01	3,57±0,01	3,11±0,10	2,37±0,01
Phenol	6,41±0,04	4,78±0,01	3,34±0,28	3,16±0,03	2,48±0,01
Diazinon	5,64±0,01	4,19±0,01	3,33±0,01	2,74±0,01	2,18±0,01
4-tert-Butylphenol	14,07±0,08	10,39±0,08	8,23±0,08	6,83±0,02	5,38±0,01
Propanil	26,73±0,37	19,82±0,32	16,37±0,89	13,17±0,08	9,79±0,21
Diuron	19,15±0,34	13,66±0,10	10,59±0,41	8,11±0,23	6,55±0,10
Terbutryn	22,60±0,10	18,45±0,75	12,62±0,33	10,69±0,62	7,87±0,35
Triadimefon	18,50±1,24	12,98±0,58	9,51±0,28	8,30±0,19	6,08±0,19
Methiocarb	24,47±0,36	16,84±0,10	13,93±0,05	11,11±0,05	8,57±0,04

Tab. C2 Retentionszeiten t_R mit Unsicherheiten Δt_R für Substanzen auf Eurosoil 5

bei Volumenstrom (ml/min)	**Retentionszeit t_R (min) ± Δt_R**				
	0,6	**0,8**	**1,0**	**1,2**	**1,5**
Formamid	4,70±0,08	3,49±0,01	2,86±0,01	2,32±0,04	1,78±0,01
Atrazin	14,99±0,06	11,16±0,29	7,85±0,18	6,57±0,23	4,82±0,08
Amitrol	6,22±0,79	4,33±0,08	3,66±0,27	3,09±0,20	2,40±0,02
Vinclozolin	-	8,61±0,60	6,42±0,70	-	3,67±0,31
2-Nitrophenol	7,75±0,04	5,93±0,09	4,60±0,03	3,73±0,04	2,85±0,01
Chloranilin	-	11,90±0,17	9,91±0,07	7,45±0,10	-
o-Kresol	10,65±0,18	9,50±0,97	8,08±0,34	6,06±0,16	4,41±0,26
4-Chlorophenol	-	20,84±1,50	16,17±0,38	11,36±0,10	9,09±0,40
Metribuzin	6,88±0,07	4,91±0,02	3,54±0,39	3,09±0,14	2,32±0,15
Benzamid	4,55±0,01	3,34±0,01	2,65±0,01	2,20±0,01	1,79±0,02
Carbofuran	6,77±0,22	4,93±0,04	3,85±0,01	3,23±0,03	2,58±0,01
2,4- Dichlorphenoxy--essigsäure	7,03±0,16	5,51±0,40	4,56±0,48	3,55±0,19	2,98±0,19
Bromoxynil	9,13±0,47	5,98±0,06	4,58±0,01	3,74±0,02	2,89±0,04
n-Methylanilin	9,40±0,17	6,65±0,06	5,21±0,01	4,17±0,08	3,24±0,08
Anilin	6,66±0,01	5,39±0,26	4,57±0,34	3,46±0,14	2,60±0,02
Phenol	-	5,87±0,10	4,50±0,21	3,76±0,19	2,92±0,04
Diazinon	4,44±0,34	3,35±0,03	2,66±0,08	-	-

Anhang D. Ergänzungen zu Paaren (V_{ES}·K_D)

Die Tab. D1 enthält die (V_{ES}·K_D)–Werte für Eurosoil 4 und die Tab. D2 (V_{ES}·K_D)–Werte für Eurosoil 5.

Tab. D1. Experimentelle Ergebnisse für das Produkt (V_{ES}·K_D) aus den HPLC-Versuchen mit Eurosoil 4

Eurosoil 4					
Substanz (ml/min)	**0,6**	**0,8**	**1,0**	**1,2**	**1,5**
Anilin	0,31±0,31	0,31±0,31	0,30±0,30	0,50±0,40	0,30±0,30
Diazinon	0,07±0,01	0,07±0,01	0,07±0,01	0,02±0,01	0,01±0,01
2-Nitrophenol	0,41±0,03	0,31±0,02	0,52±0,03	0,40±0,02	0,40±0,02
Metribuzin	0,53±0,04	0,50±0,03	0,50±0,02	0,43±0,03	0,43±0,02
4-tert-Butylphenol	5,13±0,43	5,03±0,31	5,00±0,25	4,93±0,33	4,80±0,26
4-Chlorophenol	3,02±0,25	2,90±0,18	3,42±0,17	3,00±0,20	2,92±0,15
n-Methylanilin	0,31±0,03	0,25±0,02	0,61±0,03	0,60±0,04	0,50±0,03
2,4-D	0,24±0,02	0,20±0,01	0,41±0,02	0,33±0,02	0,20±0,01
Bromoxynil	0,92±0,08	0,80±0,05	1,10±0,05	0,91±0,06	0,60±0,03
Carbofuran	0,73±0,06	0,60±0,04	0,84±0,04	0,92±0,06	0,40±0,02
Benzamid	0,44±0,04	0,42±0,03	0,72±0,04	0,70±0,04	0,60±0,03
Propanil	12,73±1,06	12,60±0,79	13,11±0,65	12,53±0,83	11,43±0,61
Diuron	8,20±0,68	7,70±0,48	7,32±0,37	6,50±0,43	6,60±0,35
Phenol	0,54±0,04	0,55±0,03	0,10±0,01	0,52±0,03	0,50±0,02
Terbutryn	10,25±0,85	11,50±0,72	9,35±0,47	9,60±0,64	8,54±0,45
o-Kresol	0,94±0,08	1,00±0,06	0,80±0,04	0,90±0,06	0,90±0,05
Triadimefon	7,80±0,65	7,10±0,44	6,24±0,31	6,70±0,44	5,90±0,31
Atrazin	1,70±0,14	1,70±0,10	1,24±0,06	1,50±0,10	1,50±0,08
Methiocarb	11,40±0,95	10,20±0,64	10,70±0,53	10,10±0,67	9,60±0,51
Amitrol	0,20±0,02	0,20±0,01	0,20±0,01	0,14±0,01	0,10±0,01

Tab. D2. Experimentelle Ergebnisse für das Produkt ($V_{ES} \cdot K_D$) aus den HPLC-Versuchen mit Eurosoil 5

Eurosoil 5					
Substanz (ml/min)	**0,6**	**0,8**	**1,0**	**1,2**	**1,5**
Anilin	1,20±0,10	1,51±0,09	1,71±0,08	1,40±0,09	1,22±0,06
4-tert-Butylphenol	18,34±1,53	19,50±1,22	20,11±1,00	17,12±1,14	-
o-Kresol	3,60±0,30	4,80±0,30	5,22±0,26	4,50±0,30	3,94±0,21
Amitrol	0,91±0,07	0,70±0,04	0,80±0,04	0,92±0,06	0,92±0,05
Vinclozolin	-	-	-	-	-
2,4-D	1,40±0,12	1,61±0,10	1,70±0,08	1,50±0,10	1,80±0,09
Phenol	-	1,90±0,12	1,63±0,08	1,73±0,11	1,70±0,09
Atrazin	6,13±0,51	6,13±0,38	5,00±0,25	5,10±0,34	4,54±0,09
Bromoxynil	2,65±0,22	2,00±0,12	1,72±0,09	1,70±0,11	1,70±0,09
Metribuzin	1,31±0,10	1,13±0,07	0,70±0,03	0,92±0,06	0,81±0,04
Carbofuran	1,24±0,10	1,15±0,07	1,00±0,05	1,10±0,07	1,20±0,06
n-Methylanilin	2,82±0,23	2,53±0,16	2,35±0,11	2,21±0,15	2,20±0,12
4-Chlorophenol	-	13,90±0,87	13,31±0,66	10,84±0,72	11,00±0,58
4-Chloranilin	-	6,73±0,42	7,10±0,35	6,20±0,41	6,00±0,32
2-Nitrophenol	1,83±0,15	1,95±0,12	1,74±0,09	1,70±0,11	1,60±0,08

Anhang E. Freundlich Isothermen

In die Tabellen E1bis E3 befinden sich die erhaltene für Eurosoil 3, Eurosoil 4 und Eurosoil 5 Messwerte aus dem Experiment. Für die Messwerte wurden mit Hilfe des Excelprogramms die Verteilungskoeffiziente K_{D1} und K_D bestimmt.

Tab E.1. Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3

PROPANIL						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A**	**$\sum(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
5,114E-05	4,78787E-06	2,44852E-10	2,29237E-11	1,0337E-08	1,06292E-09	**9,73**
7,83734E-05	8,79035E-06	6,88929E-10	7,72702E-11			
0,000111556	1,17431E-05	1,31001E-09	1,37901E-10			
0,000141404	1,40087E-05	1,98088E-09	1,96243E-10			
3,46939E-05	5,35426E-06	1,8576E-10	2,86681E-11			
7,06005E-05	9,09997E-06	6,42463E-10	8,28095E-11			
0,000103706	1,18866E-05	1,23271E-09	1,41291E-10			
0,000133962	1,40238E-05	1,87865E-09	1,96666E-10			
6,32543E-05	4,40965E-06	2,78929E-10	1,9445E-11			
0,000110271	7,8983E-06	8,70954E-10	6,23831E-11			
4,59034E-05	5,0097E-06	2,29962E-10	2,50971E-11			
9,32989E-05	8,49835E-06	7,92886E-10	7,22219E-11			
Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=C**	**B+$\sum(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
8,67484E-05	6,42972E-06	5,57767E-10	4,13413E-11	6,22677E-08	5,26292E-09	**11,83**
0,000168613	1,36645E-05	2,30401E-09	1,86718E-10			
0,000258755	2,02088E-05	5,22914E-09	4,08396E-10			
0,00034704	2,60253E-05	9,03183E-09	6,77316E-10			
7,16669E-05	7,02363E-06	5,03361E-10	4,93313E-11			
0,000164421	1,41132E-05	2,3205E-09	1,99181E-10			
0,000254603	2,02926E-05	5,16657E-09	4,11791E-10			
0,00034368	2,57359E-05	8,84491E-09	6,62335E-10			
0,000102679	6,17066E-06	6,33599E-10	3,8077E-11			
0,000200036	1,27899E-05	2,55845E-09	1,63582E-10			
0,000343467	1,76103E-05	6,04855E-09	3,10123E-10			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
8,60495E-05	6,7766E-06	5,83123E-10	4,59223E-11			
0,000186059	1,3506E-05	2,51291E-09	1,82412E-10			
0,000323936	1,81012E-05	5,86363E-09	3,27655E-10			
1,55316E-05	1,91958E-05	2,98142E-10	3,68479E-10			
-1,18658E-05	3,14602E-06	-3,73301E-11	9,89745E-12			
-3,56437E-05	3,91621E-06	-1,39588E-10	1,53367E-11			
-6,42325E-05	3,27742E-06	-2,10517E-10	1,07415E-11			
-2,27906E-06	1,99203E-06	-4,53997E-12	3,9682E-12			
-2,32201E-05	3,68489E-06	-8,55636E-11	1,35784E-11			
-4,71923E-05	4,08679E-06	-1,92865E-10	1,67018E-11			**11,83**
-7,57569E-05	3,48057E-06	-2,63677E-10	1,21143E-11			
2,38292E-05	2,31168E-06	5,50856E-11	5,34388E-12			
2,05059E-05	2,64864E-06	5,43129E-11	7,01532E-12			
5,8726E-05	3,00667E-06	1,7657E-10	9,04007E-12			
5,75733E-06	9,49299E-07	5,46543E-12	9,01168E-13			
CARBOFURAN						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A**	**∑$(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
0,000121645	1,90458E-05	2,31682E-09	3,62743E-10	9,0395E-08	1,5693E-08	**5,76**
0,000216661	3,64727E-05	7,90222E-09	1,33026E-09			
0,000277916	4,95191E-05	1,37621E-08	2,45214E-09			
0,000332469	5,98895E-05	1,99114E-08	3,58676E-09			
0,000106895	2,13884E-05	2,28632E-09	4,57465E-10			
0,000218212	3,77583E-05	8,2393E-09	1,42569E-09			
0,000301421	4,99E-05	1,50409E-08	2,49001E-09			
0,00034952	5,98991E-05	2,09359E-08	3,5879E-09			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
0,000315378	2,53472E-05	7,99395E-09	6,4248E-10	3,75342E-07	5,16509E-08	**7,27**
0,000524509	4,92213E-05	2,5817E-08	2,42274E-09			
0,00069689	6,82167E-05	4,75396E-08	4,65352E-09			
0,000873366	8,42045E-05	7,35414E-08	7,0904E-09			
0,000303632	2,79849E-05	8,49713E-09	7,83155E-10			
0,000524428	5,03786E-05	2,642E-08	2,53801E-09			
0,000719472	6,83814E-05	4,91985E-08	4,67602E-09			
0,000883267	8,43657E-05	7,45175E-08	7,11758E-09			
-7,20887E-05	1,27444E-05	-9,18728E-10	1,6242E-10			
-9,1187E-05	2,37241E-05	-2,16333E-09	5,62834E-10			
-0,000141059	3,08214E-05	-4,34764E-09	9,49962E-10			
-0,000208429	3,55745E-05	-7,41478E-09	1,26555E-09			
-8,98426E-05	1,4792E-05	-1,32895E-09	2,18802E-10			
-8,80049E-05	2,5138E-05	-2,21226E-09	6,31918E-10			
-0,00011663	3,14186E-05	-3,66435E-09	9,87128E-10			
-0,000184228	3,54324E-05	-6,52762E-09	1,25545E-09			
4-CHLOROANILIN						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A**	**∑$(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
2,97472E-05	1,21121E-05	3,60302E-10	1,46703E-10	1,10862E-08	2,1443E-09	**5,17**
4,60189E-05	1,57306E-05	7,23906E-10	2,47453E-10			
7,10139E-05	1,80576E-05	1,28234E-09	3,26078E-10			
3,40903E-05	7,06249E-06	2,40763E-10	4,98788E-11			
6,5732E-05	1,17049E-05	7,69386E-10	1,37004E-10			
9,42347E-05	1,50325E-05	1,41659E-09	2,25977E-10			
0,000129967	1,7057E-05	2,21686E-09	2,90942E-10			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
1,71613E-05	7,63289E-06	1,3099E-10	5,82609E-11			
5,31687E-05	1,19551E-05	6,35638E-10	1,42925E-10			
7,72172E-05	1,53577E-05	1,18588E-09	2,3586E-10			
0,000126184	1,68291E-05	2,12357E-09	2,8322E-10			
Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=C	B+$\sum(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
7,22475E-06	1,03235E-05	7,4585E-11	1,06575E-10	6,87376E-08	8,11359E-09	**8,47**
0,000152287	2,00875E-05	3,05907E-09	4,03508E-10			
0,000260377	3,04553E-05	7,92987E-09	9,27526E-10			
0,000380581	3,97155E-05	1,5115E-08	1,57732E-09			
6,53203E-05	8,53727E-06	5,57657E-10	7,28849E-11			
0,000194117	1,96992E-05	3,82395E-09	3,88059E-10			
0,000319289	2,95776E-05	9,44379E-09	8,74832E-10			
0,000449166	3,83349E-05	1,72187E-08	1,46956E-09			
-5,33643E-05	7,40833E-06	-3,9534E-10	5,48833E-11			
-9,27926E-05	4,13671E-06	-3,83856E-10	1,71124E-11			
-0,00016834	1,00594E-06	-1,6934E-10	1,01192E-12			
-0,000238553	-3,60023E-06	8,58847E-10	1,29617E-11			
2,86033E-06	5,58772E-06	1,59827E-11	3,12226E-11			
-6,26531E-05	3,71057E-06	-2,32479E-10	1,37684E-11			
-0,00013082	4,87475E-07	-6,37713E-11	2,37632E-13			
-0,000189232	-4,22085E-06	7,98719E-10	1,78156E-11			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

BROMOXYNIL						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A**	**$\sum(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
1,48991E-05	6,16992E-06	9,1926E-11	3,80679E-11	9,33768E-09	3,20758E-09	**2,91**
3,38359E-05	1,02502E-05	3,46825E-10	1,05067E-10			
5,40028E-05	1,31537E-05	7,10337E-10	1,7302E-10			
4,27262E-05	1,62552E-05	6,94522E-10	2,6423E-10			
2,75567E-05	9,30437E-06	2,56398E-10	8,65713E-11			
4,47733E-05	1,19549E-05	5,3526E-10	1,4292E-10			
8,80016E-05	1,32857E-05	1,16916E-09	1,76509E-10			
1,48215E-05	6,05994E-06	8,98173E-11	3,67229E-11			
2,82992E-05	1,04042E-05	2,9443E-10	1,08247E-10			
5,01372E-05	1,30767E-05	6,5563E-10	1,71E-10			
7,72434E-05	1,49574E-05	1,15536E-09	2,23723E-10			
1,08221E-05	6,31285E-06	6,8318E-11	3,9852E-11			
2,27829E-05	1,06017E-05	2,41538E-10	1,12397E-10			
3,71163E-05	1,36056E-05	5,04987E-10	1,85111E-10			
2,2555E-05	1,66897E-05	3,76436E-10	2,78546E-10			
2,66097E-06	5,59E-06	1,48748E-11	3,12481E-11			
1,06619E-05	9,57368E-06	1,02074E-10	9,16554E-11			
2,44117E-05	1,22562E-05	2,99195E-10	1,50215E-10			
3,17875E-05	1,45212E-05	4,61592E-10	2,10864E-10			
2,73768E-06	6,42529E-06	1,75904E-11	4,12844E-11			
1,33751E-05	1,07463E-05	1,43733E-10	1,15483E-10			
2,95325E-05	1,34931E-05	3,98486E-10	1,82064E-10			
4,55155E-05	1,55813E-05	7,09192E-10	2,42778E-10			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
4,01292E-05	7,39328E-06	2,96686E-10	5,46606E-11	7,42376E-08	1,23001E-08	**6,04**
0,000106344	1,4907E-05	1,58528E-09	2,22218E-10			
0,000174991	2,12001E-05	3,70984E-09	4,49446E-10			
0,000210875	2,78367E-05	5,87006E-09	7,74881E-10			
4,67907E-05	7,91267E-06	3,70239E-10	6,26103E-11			
0,000110649	1,593E-05	1,76264E-09	2,53765E-10			
0,000178649	2,26289E-05	4,04262E-09	5,12066E-10			
0,000216765	2,96165E-05	6,41983E-09	8,77136E-10			
6,34128E-05	5,87623E-06	3,72628E-10	3,453E-11			
Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
0,000174325	1,87151E-05	3,26252E-09	3,50255E-10			**6,04**
0,000267887	2,2848E-05	6,12069E-09	5,22031E-10			
4,49755E-05	7,31675E-06	3,29074E-10	5,35348E-11			
0,000114091	1,49657E-05	1,70746E-09	2,23973E-10			
0,000189161	2,0913E-05	3,95594E-09	4,37355E-10			
0,000272719	2,60388E-05	7,10128E-09	6,78021E-10			
4,45735E-05	7,09876E-06	3,16417E-10	5,03924E-11			
0,000108963	1,41533E-05	1,54218E-09	2,00315E-10			
0,000176902	1,98508E-05	3,51166E-09	3,94056E-10			
0,000240177	2,51856E-05	6,049E-09	6,34316E-10			
4,47118E-05	8,03948E-06	3,59459E-10	6,46332E-11			
0,000117275	1,59528E-05	1,87088E-09	2,54493E-10			
0,000192351	2,22839E-05	4,28634E-09	4,96572E-10			
0,000270846	2,79223E-05	7,56265E-09	7,79657E-10			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
-1,03311E-05	4,94656E-06	-5,11032E-11	2,44685E-11			
-3,86726E-05	5,59342E-06	-2,16312E-10	3,12864E-11			
-6,69857E-05	5,10725E-06	-3,42113E-10	2,6084E-11			
-0,000125423	4,67363E-06	-5,86179E-10	2,18428E-11			
-2,51466E-05	4,71303E-06	-1,18517E-10	2,22126E-11			
-6,50837E-05	5,27347E-06	-3,43217E-10	2,78095E-11			
-0,000104416	4,58222E-06	-4,78459E-10	2,09968E-11			
-0,000171655	3,76289E-06	-6,45921E-10	1,41594E-11			
3,15519E-06	3,53813E-06	1,11635E-11	1,25183E-11			
-5,30513E-05	5,30843E-06	-2,81619E-10	2,81794E-11			
-8,47788E-05	5,19471E-06	-4,40401E-10	2,6985E-11			
-9,1884E-05	3,72334E-06	-3,42116E-10	1,38633E-11			
-1,53325E-05	4,80313E-06	-7,36439E-11	2,30701E-11			
-5,74929E-05	5,84264E-06	-3,3591E-10	3,41364E-11			
-8,8887E-05	5,24038E-06	-4,65801E-10	2,74616E-11			
-0,000118232	3,87593E-06	-4,58258E-10	1,50228E-11			
-3,92516E-05	4,08124E-06	-1,60195E-10	1,66565E-11			
-8,76388E-05	4,99408E-06	-4,37675E-10	2,49408E-11			
-0,000128079	4,66163E-06	-5,97057E-10	2,17308E-11			
-0,000176602	3,85667E-06	-6,81095E-10	1,48739E-11			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

4-CHLOROPHENOL						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A**	**$\sum(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
6,39719E-05	1,76116E-05	1,12664E-09	3,10167E-10	5,04246E-08	1,28481E-08	**3,92**
0,00013909	3,00282E-05	4,17662E-09	9,01694E-10			
6,21181E-05	1,79869E-05	1,11731E-09	3,23529E-10			
0,000153059	2,99832E-05	4,5892E-09	8,98991E-10			
1,29136E-05	3,36068E-05	4,33985E-10	1,12942E-09			
0,000316386	4,19867E-05	1,3284E-08	1,76289E-09			
0,000331191	4,897E-05	1,62184E-08	2,39806E-09			
3,13496E-05	3,31704E-05	1,03988E-09	1,10027E-09			
8,95758E-05	4,09392E-05	3,66717E-09	1,67602E-09			
9,84869E-05	4,84462E-05	4,77132E-09	2,34704E-09			
Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=C**	**B+$\sum(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
0,000109048	1,98231E-05	2,16168E-09	3,92957E-10	1,80568E-07	2,89329E-08	**6,24**
0,000284551	3,89227E-05	1,10755E-08	1,51498E-09			
0,000111234	2,02097E-05	2,24802E-09	4,08434E-10			
0,000310902	3,88825E-05	1,20886E-08	1,51185E-09			
0,000676794	6,26883E-05	4,24271E-08	3,92983E-09			
0,000817841	7,8131E-05	6,38988E-08	6,10446E-09			
1,88955E-05	1,54E-05	2,9099E-10	2,37159E-10			
-6,37157E-06	2,11337E-05	-1,34655E-10	4,46635E-10			
1,30018E-05	1,57641E-05	2,04961E-10	2,48506E-10			
-4,78372E-06	2,10839E-05	-1,0086E-10	4,44531E-10			
-4,40221E-05	2,12851E-05	-9,37017E-10	4,53056E-10			
-0,000155458	1,98089E-05	-3,07946E-09	3,92393E-10			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

n-METHYLANILIN						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES}$·$C_{inLös.})$=A**	**$\sum(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
0,00022241	6,93499E-05	1,54241E-08	4,80941E-09	5,31652E-07	1,49574E-07	**3,55**
0,000340948	0,000118725	4,04791E-08	1,40957E-08			
0,000547487	0,000153363	8,39642E-08	2,35201E-08			
0,000695444	0,000177527	1,2346E-07	3,15157E-08			
0,000214994	6,71056E-05	1,44273E-08	4,50316E-09			
0,000345808	0,000121643	4,2065E-08	1,4797E-08			
0,000546936	0,000155832	8,52298E-08	2,42835E-08			
0,000707188	0,000179023	1,26603E-07	3,20492E-08			
Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+$\sum(C_{aufES}$·$C_{inLös.})$=C**	**B+$\sum(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
0,000414479	7,73139E-05	3,2045E-08	5,97744E-09	1,78427E-06	4,59468E-07	**3,88**
0,000687003	0,000136298	9,36374E-08	1,85773E-08			
0,001055054	0,00018162	1,91619E-07	3,29857E-08			
0,001361134	0,000215462	2,93273E-07	4,64239E-08			
0,000396247	7,50574E-05	2,97413E-08	5,63361E-09			
0,000685369	0,000139737	9,57712E-08	1,95263E-08			
0,001044582	0,000184605	1,92835E-07	3,40791E-08			
0,001357075	0,00021833	2,96291E-07	4,76682E-08			
3,03413E-05	6,13859E-05	1,86253E-09	3,76823E-09			
-5,10709E-06	0,000101152	-5,16592E-10	1,02317E-08			
3,99203E-05	0,000125106	4,99427E-09	1,56515E-08			
2,97545E-05	0,000139591	4,15348E-09	1,94858E-08			
3,37418E-05	5,91537E-05	1,99595E-09	3,49916E-09			
6,24565E-06	0,000103549	6,46732E-10	1,07224E-08			
4,929E-05	0,000127058	6,26267E-09	1,61437E-08			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

4-tert-BUTHYLPHENOL						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A**	**$\sum(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
2,78288E-05	9,16914E-06	2,55166E-10	8,40732E-11	8,73498E-09	2,85191E-09	**3,06**
4,18828E-05	1,66475E-05	6,97244E-10	2,7714E-10			
6,72986E-05	2,10912E-05	1,41941E-09	4,44838E-10			
6,78352E-05	2,51013E-05	1,70275E-09	6,30077E-10			
4,08365E-05	8,74036E-06	3,56926E-10	7,63939E-11			
3,15386E-05	1,7105E-05	5,39467E-10	2,92581E-10			
0,000108625	1,97746E-05	2,14802E-09	3,91034E-10			
6,31052E-05	2,56081E-05	1,616E-09	6,55773E-10			
Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=C**	**B+$\sum(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
8,40894E-05	1,17148E-05	9,85088E-10	1,37236E-10	8,31731E-08	1,14337E-08	**7,27**
0,000159936	2,30559E-05	3,68746E-09	5,31573E-10			
0,000245519	3,1183E-05	7,65602E-09	9,72378E-10			
0,00030998	3,87722E-05	1,20186E-08	1,50329E-09			
0,000212685	1,50962E-05	3,21072E-09	2,27894E-10			
0,000303728	2,95852E-05	8,98585E-09	8,75281E-10			
0,000476849	3,80892E-05	1,81628E-08	1,45079E-09			
0,000533541	4,95058E-05	2,64134E-08	2,45082E-09			
-2,84318E-05	6,62351E-06	-1,88318E-10	4,38709E-11			
-7,61704E-05	1,02392E-05	-7,79922E-10	1,04841E-10			
-0,000110922	1,09994E-05	-1,22008E-09	1,20987E-10			
-0,000174309	1,14304E-05	-1,99243E-09	1,30655E-10			
-0,000131012	2,38455E-06	-3,12404E-10	5,68609E-12			
-0,000240651	4,62485E-06	-1,11298E-09	2,13892E-11			
-0,000259599	1,45991E-06	-3,7899E-10	2,13134E-12			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

DIURON						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A**	**$\sum(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
1,35687E-05	4,01134E-06	5,44289E-11	1,60909E-11	1,46955E-09	7,4897E-10	**1,96**
1,99079E-05	7,33876E-06	1,46099E-10	5,38574E-11			
2,34015E-05	9,76708E-06	2,28564E-10	9,53959E-11			
9,55229E-06	4,47242E-06	4,27218E-11	2,00025E-11			
1,83172E-05	7,74604E-06	1,41886E-10	6,00011E-11			
1,37462E-05	4,00576E-06	5,50641E-11	1,60461E-11			
1,75872E-05	7,41311E-06	1,30376E-10	5,49542E-11			
1,59277E-05	9,97777E-06	1,58923E-10	9,9556E-11			
7,80444E-06	4,53091E-06	3,53612E-11	2,05291E-11			
1,45441E-05	7,85276E-06	1,14212E-10	6,16659E-11			
1,72122E-05	1,03319E-05	1,77835E-10	1,06749E-10			
1,53331E-05	1,20051E-05	1,84075E-10	1,44122E-10			
Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=C**	**B+$\sum(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
4,92032E-05	5,84946E-06	2,87812E-10	3,42161E-11	2,22107E-08	3,32482E-09	**6,68**
0,000108124	1,24509E-05	1,34625E-09	1,55026E-10			
0,000165386	1,80945E-05	2,99258E-09	3,27411E-10			
4,49416E-05	6,43217E-06	2,89072E-10	4,13728E-11			
0,000106137	1,31177E-05	1,39227E-09	1,72074E-10			
5,61821E-05	6,05766E-06	3,40332E-10	3,66953E-11			
0,000114421	1,28592E-05	1,47137E-09	1,65359E-10			
0,000168336	1,87483E-05	3,15601E-09	3,51499E-10			
4,9401E-05	6,6984E-06	3,30907E-10	4,48685E-11			
0,000110536	1,35582E-05	1,49867E-09	1,83824E-10			
0,000169382	1,97129E-05	3,33901E-09	3,88597E-10			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
0,000217364	2,50953E-05	5,45481E-09	6,29775E-10			
-2,20657E-05	2,17323E-06	-4,79539E-11	4,72292E-12			
-6,83085E-05	2,22657E-06	-1,52094E-10	4,95763E-12			
-0,000118583	1,43966E-06	-1,7072E-10	2,07263E-12			
-2,5837E-05	2,51266E-06	-6,49196E-11	6,31346E-12			
-6,95024E-05	2,37437E-06	-1,65025E-10	5,63764E-12			
-2,86897E-05	1,95387E-06	-5,60559E-11	3,8176E-12			
-7,92471E-05	1,967E-06	-1,55879E-10	3,86909E-12			
-0,00013648	1,20723E-06	-1,64764E-10	1,45742E-12			
Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
-8,14478E-05	2,14735E-06	-1,74897E-10	4,61112E-12			**6,68**
-0,000134958	9,51019E-07	-1,28348E-10	9,04437E-13			
-0,000186697	-1,08516E-06	2,02597E-10	1,17758E-12			
-3,37921E-05	2,36342E-06	-7,98649E-11	5,58576E-12			
O-KRESOL						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A**	**∑$(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
6,1298E-05	1,32658E-05	8,13166E-10	1,75981E-10	6,63101E-08	5,97054E-09	**11,11**
0,000202425	1,90568E-05	3,85756E-09	3,6316E-10			
0,000292102	2,49107E-05	7,27646E-09	6,20543E-10			
0,00035966	2,92067E-05	1,05045E-08	8,53033E-10			
8,99182E-05	1,2479E-05	1,12208E-09	1,55724E-10			
0,000260395	1,72785E-05	4,49924E-09	2,98548E-10			
0,000367091	2,27705E-05	8,35887E-09	5,18498E-10			
0,000465824	2,67991E-05	1,24836E-08	7,1819E-10			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
2,99905E-05	1,4513E-05	4,35253E-10	2,10628E-10			
0,000146865	2,05046E-05	3,0114E-09	4,2044E-10			
0,000209971	2,64962E-05	5,56343E-09	7,02051E-10			
0,000274387	3,05572E-05	8,38451E-09	9,33744E-10			
Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
9,9112E-05	1,50647E-05	1,49309E-09	2,26944E-10	2,83655E-07	2,91451E-08	**9,73**
0,000295836	2,4695E-05	7,30567E-09	6,09844E-10			
0,000442444	3,44563E-05	1,52449E-08	1,18723E-09			
0,000563267	4,26489E-05	2,40227E-08	1,81892E-09			
0,000128683	1,42746E-05	1,83691E-09	2,03765E-10			
0,000354243	2,28104E-05	8,08042E-09	5,20315E-10			
0,000515739	3,22058E-05	1,66098E-08	1,03722E-09			
0,00066886	4,019E-05	2,68815E-08	1,61524E-09			
3,8965E-05	2,22467E-05	8,66844E-10	4,94917E-10			
0,000157173	3,55635E-05	5,58963E-09	1,26476E-09			
0,000251069	4,74345E-05	1,19093E-08	2,25003E-09			
0,000294602	5,86241E-05	1,72708E-08	3,43679E-09			
0,000143537	1,88469E-05	2,70524E-09	3,55207E-10			
0,000338589	3,01662E-05	1,02139E-08	9,09998E-10			
0,000479359	4,17804E-05	2,00278E-08	1,7456E-09			
0,000620784	5,15105E-05	3,19769E-08	2,65333E-09			
2,34841E-05	1,14669E-05	2,69289E-10	1,31489E-10			
0,000109014	1,34185E-05	1,4628E-09	1,80056E-10			
0,00014176	1,53651E-05	2,17816E-09	2,36088E-10			
0,000156053	1,57646E-05	2,46012E-09	2,48523E-10			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
5,11532E-05	1,06833E-05	5,46483E-10	1,14132E-10			
0,000166546	1,17467E-05	1,95637E-09	1,37984E-10			
0,000218444	1,33353E-05	2,913E-09	1,77829E-10			
0,000262787	1,34081E-05	3,52348E-09	1,79778E-10			
BISPHENOL A						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A	∑$(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
0,002666496	7,09022E-06	1,89061E-08	5,02713E-11	1,68975E-06	3,78634E-09	**446,27**
0,005267464	1,22482E-05	6,45172E-08	1,50019E-10			
0,007929583	1,6129E-05	1,27897E-07	2,60146E-10			
0,010731666	1,95677E-05	2,09994E-07	3,82895E-10			
0,002413588	7,63059E-06	1,84171E-08	5,82259E-11			
0,004857314	1,31325E-05	6,37885E-08	1,72462E-10			
0,00741654	1,70133E-05	1,2618E-07	2,89451E-10			
0,009913034	2,02063E-05	2,00306E-07	4,08295E-10			
0,005347533	1,1651E-05	6,23043E-08	1,35747E-10			
0,008030309	1,50611E-05	1,20945E-07	2,26837E-10			
0,010826155	1,90395E-05	2,06125E-07	3,62503E-10			
0,002338156	1,01591E-05	2,37536E-08	1,03208E-10			
0,004749399	1,59847E-05	7,59175E-08	2,55509E-10			
0,007289474	1,96078E-05	1,42931E-07	3,84468E-10			
0,009744772	2,33731E-05	2,27766E-07	5,46303E-10			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
0,002730274	1,02759E-05	2,80561E-08	1,05595E-10	5,1686E-06	1,68764E-08	**306,26**
0,005395038	1,94767E-05	1,05078E-07	3,79342E-10			
0,008122529	2,74174E-05	2,22699E-07	7,51715E-10			
0,010993825	3,49009E-05	3,83694E-07	1,21807E-09			
0,002473527	1,07547E-05	2,66021E-08	1,15664E-10			
0,004977749	2,02428E-05	1,00764E-07	4,09771E-10			
0,007600086	2,82208E-05	2,1448E-07	7,96412E-10			
0,01015888	3,55916E-05	3,6157E-07	1,26676E-09			
0,005583007	2,3151E-05	1,29252E-07	5,35969E-10			
0,008355923	3,21784E-05	2,6888E-07	1,03545E-09			
0,011247121	4,16948E-05	4,68947E-07	1,73846E-09			
0,00247788	1,59577E-05	3,95413E-08	2,54649E-10			
0,004972553	2,73327E-05	1,35913E-07	7,47075E-10			
0,007599669	3,66251E-05	2,78338E-07	1,3414E-09			
0,010140666	4,619E-05	4,68397E-07	2,13352E-09			
0,002602719	3,90452E-06	1,01624E-08	1,52453E-11			
0,00513989	5,01976E-06	2,5801E-08	2,5198E-11			
0,007736638	4,84065E-06	3,74503E-08	2,34319E-11			
0,010469508	4,23454E-06	4,43336E-08	1,79314E-11			
0,002353649	4,50644E-06	1,06066E-08	2,0308E-11			
0,00473688	6,02213E-06	2,85261E-08	3,62661E-11			
0,007232994	5,80575E-06	4,1993E-08	3,37068E-11			
0,009667187	4,82108E-06	4,66063E-08	2,32428E-11			
0,005112058	1,51065E-07	7,72254E-10	2,28207E-14			
0,007704695	-2,05618E-06	-1,58422E-08	4,22786E-12			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,01040519	-3,61584E-06	-3,76235E-08	1,30743E-11			
0,002198433	4,36054E-06	9,58635E-09	1,90143E-11			
0,004526244	4,63664E-06	2,09866E-08	2,14985E-11			
0,006979279	2,59061E-06	1,80806E-08	6,71125E-12			
0,009348877	5,56236E-07	5,20018E-09	3,09398E-13			
ANILIN						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A**	**∑$(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
2,92404E-05	1,19861E-05	3,50478E-10	1,43666E-10	6,37412E-09	2,47263E-09	**2,58**
3,11066E-05	2,07742E-05	6,46215E-10	4,31567E-10			
2,91713E-05	2,70213E-05	7,88246E-10	7,30152E-10			
7,71136E-05	1,02897E-05	7,93478E-10	1,05878E-10			
8,87613E-05	1,92659E-05	1,71006E-09	3,71173E-10			
7,93874E-05	2,62716E-05	2,08564E-09	6,90198E-10			
Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
5,66566E-05	1,33109E-05	7,54149E-10	1,7718E-10	3,60537E-08	8,69624E-09	**4,15**
0,000109517	2,5802E-05	2,82577E-09	6,65745E-10			
0,000159697	3,57535E-05	5,70971E-09	1,27831E-09			
3,33827E-05	1,39661E-05	4,66225E-10	1,95052E-10			
0,000191095	1,46819E-05	2,80563E-09	2,15558E-10			
0,000281044	2,9442E-05	8,27449E-09	8,66831E-10			
0,000352253	4,21285E-05	1,48399E-08	1,77481E-09			
1,8243E-06	1,06613E-05	1,94493E-11	1,13662E-10			
-4,73041E-05	1,57464E-05	-7,44867E-10	2,47948E-10			
-0,000101354	1,82892E-05	-1,85368E-09	3,34494E-10			
-2,15367E-05	1,13199E-05	-2,43793E-10	1,28141E-10			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
-3,68674E-05	5,89754E-06	-2,17427E-10	3,4781E-11			
-0,000103521	9,08972E-06	-9,40979E-10	8,2623E-11			
-0,000193478	1,04147E-05	-2,01502E-09	1,08466E-10			
PHENOL						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
0,000130197	1,49212E-05	1,94269E-09	2,22641E-10	1,21714E-07	1,47723E-08	**8,24**
0,000255811	2,45301E-05	6,27506E-09	6,01726E-10			
0,00035928	3,23422E-05	1,16199E-08	1,04602E-09			
0,000462999	3,72795E-05	1,72604E-08	1,38976E-09			
0,000137241	1,49524E-05	2,05209E-09	2,23575E-10			
0,000262561	2,4827E-05	6,51859E-09	6,16378E-10			
0,000352392	3,20766E-05	1,13036E-08	1,02891E-09			
0,000455694	3,74357E-05	1,70593E-08	1,40144E-09			
0,000101567	1,58761E-05	1,61248E-09	2,52049E-10			
0,000189773	2,64388E-05	5,01737E-09	6,99008E-10			
0,000247567	3,5145E-05	8,70076E-09	1,23517E-09			
0,000253157	4,24429E-05	1,07447E-08	1,8014E-09			
9,97613E-05	1,61961E-05	1,61575E-09	2,62315E-10			
0,000169275	2,7527E-05	4,65963E-09	7,57738E-10			
0,000199653	3,59772E-05	7,18295E-09	1,29436E-09			
0,000185022	4,40433E-05	8,14896E-09	1,93981E-09			
Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=C	B+$\sum(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,000174848	1,6811E-05	2,93936E-09	2,82608E-10	2,84361E-07	3,12348E-08	**9,10**
0,000362653	3,03422E-05	1,10037E-08	9,20649E-10			
0,000532128	4,21356E-05	2,24216E-08	1,77541E-09			

Tab.E.1 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 3 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000698584	5,10163E-05	3,56392E-08	2,60266E-09			
0,000211174	1,99323E-05	4,2092E-09	3,97298E-10			
0,000376688	3,55499E-05	1,33912E-08	1,2638E-09			
0,000515715	4,92432E-05	2,53955E-08	2,4249E-09			
0,000598789	6,15024E-05	3,6827E-08	3,78255E-09			
8,55453E-05	1,30314E-05	1,11477E-09	1,69817E-10			
0,000148968	1,8718E-05	2,78838E-09	3,50364E-10			
0,000186432	2,25488E-05	4,20382E-09	5,0845E-10			
0,000227415	2,35427E-05	5,35397E-09	5,5426E-10			
-8,04049E-06	1,18198E-05	-9,50368E-11	1,39707E-10			
2,85847E-06	1,73276E-05	4,95305E-11	3,00247E-10			
-2,058E-05	2,10467E-05	-4,33142E-10	4,42966E-10			
-9,24759E-05	2,33833E-05	-2,16239E-09	5,46779E-10			

Tab. E.2. Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4

PROPANIL						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
1,69241E-05	6,71359E-06	1,13621E-10	4,50723E-11	2,661E-08	6,27126E-09	**4,24**
2,35554E-05	1,18186E-05	2,78393E-10	1,3968E-10			
3,73685E-05	1,50659E-05	5,62991E-10	2,26982E-10			
4,97032E-05	1,72711E-05	8,58427E-10	2,9829E-10			
4,01827E-05	6,66073E-06	2,67646E-10	4,43653E-11			
7,08317E-05	1,15317E-05	8,16807E-10	1,32979E-10			
0,000106289	1,46732E-05	1,55961E-09	2,15304E-10			
2,18712E-05	9,63615E-06	2,10754E-10	9,28554E-11			
4,10117E-05	1,62138E-05	6,64955E-10	2,62888E-10			
7,32873E-05	2,01785E-05	1,47883E-09	4,07173E-10			
0,000116029	2,25423E-05	2,61556E-09	5,08153E-10			
2,4712E-05	9,45401E-06	2,33627E-10	8,93783E-11			
4,16375E-05	1,61005E-05	6,70386E-10	2,59227E-10			
7,38633E-05	2,00728E-05	1,48264E-09	4,02917E-10			
0,000120577	2,22855E-05	2,68711E-09	4,96643E-10			
2,70822E-05	6,37725E-06	1,7271E-10	4,06693E-11			
4,19418E-05	1,13172E-05	4,74663E-10	1,28078E-10			
6,59258E-05	1,43872E-05	9,48487E-10	2,06991E-10			
0,000100193	1,60757E-05	1,61068E-09	2,58428E-10			
4,96381E-05	6,34934E-06	3,15169E-10	4,03141E-11			
3,31516E-05	9,25189E-06	3,06715E-10	8,55975E-11			
5,93845E-05	1,57129E-05	9,33101E-10	2,46894E-10			
9,07057E-05	1,98713E-05	1,80244E-09	3,9487E-10			
3,30584E-05	9,16817E-06	3,03085E-10	8,40553E-11			
6,01896E-05	1,55733E-05	9,37352E-10	2,42528E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
8,67031E-05	1,99132E-05	1,72654E-09	3,96536E-10			
0,000112564	2,28995E-05	2,57765E-09	5,24386E-10			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
5,7811E-05	8,76018E-06	5,06434E-10	7,67407E-11	1,95593E-07	2,65478E-08	**7,37**
0,000126057	1,77431E-05	2,23663E-09	3,14816E-10			
0,000201261	2,49796E-05	5,02743E-09	6,23982E-10			
0,000274041	3,11399E-05	8,5336E-09	9,69693E-10			
8,32466E-05	8,83969E-06	7,35874E-10	7,81401E-11			
0,000176194	1,76347E-05	3,10714E-09	3,10984E-10			
0,000273973	2,47547E-05	6,7821E-09	6,12794E-10			
0,000373485	3,05767E-05	1,14199E-08	9,34935E-10			
7,36784E-05	1,23781E-05	9,11999E-10	1,53217E-10			
0,000156628	2,3015E-05	3,60478E-09	5,2969E-10			
0,000251955	3,10774E-05	7,83012E-09	9,65808E-10			
0,000357604	3,77284E-05	1,34918E-08	1,42343E-09			
7,56983E-05	1,21696E-05	9,21215E-10	1,48098E-10			
0,000155619	2,2891E-05	3,56226E-09	5,23998E-10			
0,000249837	3,10107E-05	7,74762E-09	9,61661E-10			
0,000358316	3,74192E-05	1,34079E-08	1,4002E-09			
6,92216E-05	8,46531E-06	5,85982E-10	7,16614E-11			
0,000139613	1,70941E-05	2,38655E-09	2,92207E-10			
0,000219242	2,39041E-05	5,24077E-09	5,71405E-10			
0,000308243	2,92579E-05	9,01853E-09	8,56023E-10			
9,4069E-05	8,57333E-06	8,06484E-10	7,35019E-11			
0,000198196	1,67283E-05	3,31548E-09	2,79836E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,000377001	2,09984E-05	7,91641E-09	4,40931E-10			
0,000588633	2,37389E-05	1,39735E-08	5,63535E-10			
8,25241E-05	1,19109E-05	9,82937E-10	1,4187E-10			
0,000163743	2,21044E-05	3,61944E-09	4,88605E-10			
0,000249864	2,9967E-05	7,48767E-09	8,98019E-10			
0,000371541	3,54524E-05	1,3172E-08	1,25687E-09			
8,19364E-05	1,18115E-05	9,67793E-10	1,39512E-10			
0,000163225	2,19615E-05	3,58465E-09	4,82305E-10			
0,000243659	3,00531E-05	7,3227E-09	9,03189E-10			
0,000323782	3,6806E-05	1,19171E-08	1,35468E-09			
-2,39628E-05	4,667E-06	-1,11834E-10	2,17809E-11			
-7,89458E-05	5,89421E-06	-4,65323E-10	3,47417E-11			
CARBOFURAN						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A	∑$(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
6,55467E-05	2,99971E-05	1,96621E-09	8,99829E-10	1,5043E-07	3,9991E-08	**3,76**
0,00019535	4,76145E-05	9,3015E-09	2,26714E-09			
0,000318002	5,98991E-05	1,9048E-08	3,5879E-09			
0,000434558	6,86601E-05	2,98368E-08	4,71421E-09			
0,000179929	2,56166E-05	4,60917E-09	6,56211E-10			
0,000345462	4,35197E-05	1,50344E-08	1,89396E-09			
0,000455514	5,76136E-05	2,62438E-08	3,31932E-09			
5,62803E-05	2,69498E-05	1,51674E-09	7,26292E-10			
0,000158936	4,4091E-05	7,00764E-09	1,94402E-09			
0,00016002	5,91372E-05	9,46315E-09	3,49721E-09			
0,000162212	6,91363E-05	1,12147E-08	4,77982E-09			
1,58499E-05	2,80926E-05	4,45263E-10	7,89192E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
6,581E-05	4,71384E-05	3,10217E-09	2,22203E-09			
9,01632E-05	6,09466E-05	5,49514E-09	3,71449E-09			
8,70873E-05	7,05647E-05	6,14529E-09	4,97938E-09			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,00025026	3,70747E-05	9,27829E-09	1,37453E-09	6,39279E-07	1,29916E-07	**4,92**
0,00049477	6,21078E-05	3,07291E-08	3,85738E-09			
0,000731486	8,21914E-05	6,01219E-08	6,75542E-09			
0,000964208	9,88621E-05	9,53237E-08	9,77372E-09			
0,000221573	2,78125E-05	6,1625E-09	7,73537E-10			
0,000455669	5,00114E-05	2,27887E-08	2,50114E-09			
0,000635703	6,86453E-05	4,3638E-08	4,71217E-09			
0,000239199	3,38729E-05	8,10235E-09	1,14737E-09			
0,000453671	5,81306E-05	2,63721E-08	3,37916E-09			
0,000568937	8,03484E-05	4,57132E-08	6,45587E-09			
0,000679504	9,80732E-05	6,66412E-08	9,61836E-09			
0,00020566	3,498E-05	7,19398E-09	1,2236E-09			
0,000376732	6,15361E-05	2,31826E-08	3,7867E-09			
0,000522996	8,26108E-05	4,32051E-08	6,82454E-09			
0,000631803	0,000100179	6,32935E-08	1,00359E-08			
-0,000119166	2,29196E-05	-2,73124E-09	5,25309E-10			
-0,00010407	3,31212E-05	-3,44693E-09	1,09702E-09			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
-9,50913E-05	3,84581E-05	-3,65703E-09	1,47903E-09			**4,92**
0,000138285	2,34207E-05	3,23873E-09	5,48529E-10			
0,000235254	3,70279E-05	8,71098E-09	1,37107E-09			
0,000275325	4,65819E-05	1,28252E-08	2,16987E-09			
-0,000126638	2,00267E-05	-2,53615E-09	4,0107E-10			
-0,0001358	3,00515E-05	-4,08098E-09	9,03093E-10			
-0,000248897	3,7926E-05	-9,43967E-09	1,43838E-09			
-0,00035508	4,01993E-05	-1,4274E-08	1,61599E-09			
-0,00017396	2,12051E-05	-3,68885E-09	4,49658E-10			
-0,000245112	3,27406E-05	-8,02511E-09	1,07195E-09			
-0,000342669	3,92824E-05	-1,34609E-08	1,5431E-09			
-0,000457628	4,09502E-05	-1,874E-08	1,67692E-09			
BISPHENOL A						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A**	**∑$(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
3,70644E-05	9,41542E-06	3,48977E-10	8,86502E-11	9,54887E-08	1,90117E-08	**5,02**
5,84452E-05	1,63583E-05	9,56063E-10	2,67593E-10			
8,13303E-05	2,10087E-05	1,70864E-09	4,41365E-10			
0,000101561	2,42672E-05	2,4646E-09	5,88899E-10			
3,82711E-05	9,34993E-06	3,57832E-10	8,74211E-11			
6,96687E-05	1,58998E-05	1,10772E-09	2,52803E-10			
0,000101382	2,03701E-05	2,06516E-09	4,1494E-10			
0,000133867	2,34158E-05	3,13461E-09	5,48297E-10			
5,8977E-05	1,53267E-05	9,03921E-10	2,34907E-10			
0,000101749	2,62322E-05	2,6691E-09	6,88128E-10			
0,000142483	3,36335E-05	4,79219E-09	1,13121E-09			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000210028	3,77599E-05	7,93066E-09	1,42581E-09			
9,05827E-05	1,41509E-05	1,28182E-09	2,00247E-10			
0,000154883	2,45129E-05	3,79663E-09	6,0088E-10			
0,000215644	3,17013E-05	6,83619E-09	1,00497E-09			
0,000274567	3,67447E-05	1,00889E-08	1,35017E-09			
3,81435E-05	9,37766E-06	3,57697E-10	8,79406E-11			
5,72936E-05	1,64109E-05	9,4024E-10	2,69318E-10			
7,04873E-05	2,13839E-05	1,5073E-09	4,57272E-10			
7,07681E-05	2,52202E-05	1,78479E-09	6,3606E-10			
BISPHENOL A						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=A$**	**$\sum(C_{inLös})^2=B$**	**$K_{D1}=A/B$**
2,2744E-05	9,87496E-06	2,24596E-10	9,75149E-11			**5,02**
4,96159E-05	1,64109E-05	8,14243E-10	2,69318E-10			
8,26371E-05	2,06735E-05	1,7084E-09	4,27393E-10			
0,000105715	2,39415E-05	2,53098E-09	5,73194E-10			
6,27867E-05	1,52032E-05	9,54558E-10	2,31137E-10			
8,81523E-05	2,67121E-05	2,35474E-09	7,13538E-10			
0,000128913	3,39585E-05	4,3777E-09	1,15318E-09			
0,000150057	3,94999E-05	5,92723E-09	1,56024E-09			
9,76499E-05	1,39244E-05	1,35972E-09	1,93889E-10			
0,00015752	2,45098E-05	3,86079E-09	6,0073E-10			
0,000214312	3,18272E-05	6,82095E-09	1,01297E-09			
0,000254323	3,74396E-05	9,52177E-09	1,40172E-09			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
8,70708E-05	1,20077E-05	1,04552E-09	1,44184E-10	4,79093E-07	6,79463E-08	**7,05**
0,000165187	2,28682E-05	3,77752E-09	5,22953E-10			
0,000244847	3,14457E-05	7,6994E-09	9,88834E-10			
0,000322122	3,86717E-05	1,2457E-08	1,4955E-09			
8,98896E-05	1,19323E-05	1,07259E-09	1,42379E-10			
0,000179192	2,23371E-05	4,00263E-09	4,98946E-10			
0,00026874	3,07488E-05	8,26342E-09	9,45487E-10			
0,000359564	3,77176E-05	1,35619E-08	1,42262E-09			
0,000130232	1,89785E-05	2,47161E-09	3,60183E-10			
0,000236648	3,38961E-05	8,02142E-09	1,14894E-09			
0,00034062	4,53793E-05	1,54571E-08	2,05928E-09			
0,000470725	5,36457E-05	2,52523E-08	2,87786E-09			
0,000161763	1,77593E-05	2,87281E-09	3,15394E-10			
0,000288917	3,20659E-05	9,2644E-09	1,02822E-09			
0,000412349	4,32633E-05	1,78396E-08	1,87172E-09			
0,000534739	5,23349E-05	2,79855E-08	2,73894E-09			
0,000164159	1,46298E-05	2,40162E-09	2,14032E-10			
0,000262841	2,7248E-05	7,16191E-09	7,42455E-10			
0,000355696	3,77825E-05	1,34391E-08	1,42752E-09			
0,000435981	4,72213E-05	2,05876E-08	2,22985E-09			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
0,00015302	1,51171E-05	2,31322E-09	2,28526E-10			**7,05**
0,000261253	2,71492E-05	7,09281E-09	7,3708E-10			
0,000375507	3,70263E-05	1,39036E-08	1,37095E-09			
0,000480529	4,58357E-05	2,20254E-08	2,10091E-09			
0,000214547	2,14645E-05	4,60515E-09	4,60725E-10			
0,000326942	3,85792E-05	1,26131E-08	1,48835E-09			
0,000454036	5,14998E-05	2,33828E-08	2,65223E-09			
0,00056093	6,2784E-05	3,52174E-08	3,94183E-09			
0,000250641	2,01544E-05	5,05151E-09	4,062E-10			
0,000396577	3,62703E-05	1,4384E-08	1,31554E-09			
0,000539168	4,91742E-05	2,65131E-08	2,4181E-09			
0,000666037	6,0353E-05	4,01973E-08	3,64248E-09			
-1,29419E-05	6,82317E-06	-8,83048E-11	4,65557E-11			
-4,82962E-05	9,84839E-06	-4,7564E-10	9,69908E-11			
-8,21866E-05	1,05716E-05	-8,68846E-10	1,11759E-10			
-0,000119	9,86275E-06	-1,17367E-09	9,72739E-11			
-1,33475E-05	6,76759E-06	-9,03301E-11	4,58003E-11			
-3,98546E-05	9,46247E-06	-3,77123E-10	8,95384E-11			
-6,59752E-05	9,99136E-06	-6,59182E-10	9,98273E-11			
-9,18289E-05	9,11387E-06	-8,36917E-10	8,30626E-11			
-1,22783E-05	1,16749E-05	-1,43348E-10	1,36303E-10			
-3,31497E-05	1,85683E-05	-6,15535E-10	3,44783E-10			
-5,56554E-05	2,18877E-05	-1,21817E-09	4,79073E-10			
-5,0668E-05	2,18742E-05	-1,10832E-09	4,78481E-10			
1,94022E-05	1,05424E-05	2,04546E-10	1,11142E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
2,08491E-05	1,69598E-05	3,53596E-10	2,87635E-10			
1,89383E-05	2,01393E-05	3,81404E-10	4,05592E-10			
1,43943E-05	2,11546E-05	3,04505E-10	4,47516E-10			
-8,78724E-05	4,12549E-06	-3,62517E-10	1,70197E-11			
-0,000148254	5,5738E-06	-8,26339E-10	3,10672E-11			
-0,000214721	4,98531E-06	-1,07045E-09	2,48533E-11			
-0,000294444	3,2192E-06	-9,47875E-10	1,03632E-11			
-0,000107532	4,63287E-06	-4,98182E-10	2,14634E-11			
-0,000162021	5,67262E-06	-9,19083E-10	3,21786E-11			
4-CHLOROPHENOL						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
7,17035E-05	2,0194E-05	1,44798E-09	4,07797E-10	4,82947E-08	1,13093E-08	**4,27**
0,000172318	3,31662E-05	5,71513E-09	1,1E-09			
2,81977E-05	7,29686E-06	2,05754E-10	5,32442E-11			
5,59438E-05	1,23566E-05	6,91276E-10	1,52686E-10			
8,81007E-05	1,57648E-05	1,38889E-09	2,4853E-10			
0,000119968	1,8092E-05	2,17047E-09	3,27321E-10			
0,000221683	4,22197E-05	9,3594E-09	1,7825E-09			
5,46942E-05	2,07751E-05	1,13628E-09	4,31606E-10			
0,00011845	3,48289E-05	4,12547E-09	1,21305E-09			
0,000160047	4,54784E-05	7,27869E-09	2,06828E-09			
0,000213885	5,20251E-05	1,11274E-08	2,70662E-09			
2,76473E-05	7,31494E-06	2,02238E-10	5,35084E-11			
3,07786E-05	1,31809E-05	4,05688E-10	1,73735E-10			
6,85116E-05	1,61487E-05	1,10638E-09	2,60782E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000119655	2,25705E-05	2,70067E-09	5,09427E-10	5,17443E-07	7,53743E-08	**6,86**
0,000325567	4,26907E-05	1,38987E-08	1,8225E-09			
0,000584993	5,74384E-05	3,36011E-08	3,29917E-09			
0,000884546	6,78435E-05	6,00107E-08	4,60275E-09			
7,14463E-05	9,33563E-06	6,66997E-10	8,7154E-11			
0,00020204	2,11476E-05	4,27267E-09	4,47222E-10			
0,000338688	3,13379E-05	1,06138E-08	9,82063E-10			
0,000474399	4,04256E-05	1,91779E-08	1,63423E-09			
5,84194E-05	2,1781E-05	1,27243E-09	4,74413E-10			
0,000196164	4,13436E-05	8,11013E-09	1,70929E-09			
0,000367575	5,59039E-05	2,05489E-08	3,12525E-09			
0,000590769	6,62506E-05	3,91388E-08	4,38914E-09			
0,000205098	2,66521E-05	5,4663E-09	7,10336E-10			
0,000404168	5,00335E-05	2,02219E-08	2,50335E-09			
0,0005844	7,02577E-05	4,10586E-08	4,93614E-09			
0,00077375	8,6078E-05	6,66029E-08	7,40942E-09			
0,000179655	1,29274E-05	2,32247E-09	1,67118E-10			
0,000493419	3,96395E-05	1,95589E-08	1,57129E-09			
0,000668111	5,05571E-05	3,37778E-08	2,55602E-09			
0,000139929	2,58959E-05	3,6236E-09	6,706E-10			
0,000276637	4,85074E-05	1,3419E-08	2,35296E-09			
0,000413155	6,71147E-05	2,77287E-08	4,50438E-09			
0,000556584	8,21156E-05	4,57042E-08	6,74297E-09			
2,37522E-05	1,78175E-05	4,23203E-10	3,17462E-10			
1,90687E-05	2,36416E-05	4,50815E-10	5,58927E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
6,38005E-05	2,36678E-05	1,51002E-09	5,60165E-10			
0,00015417	1,97788E-05	3,04931E-09	3,91202E-10			
-1,5051E-05	5,25809E-06	-7,91395E-11	2,76475E-11			
-9,01525E-05	3,56561E-06	-3,21448E-10	1,27136E-11			
-0,000162486	1,91751E-07	-3,11568E-11	3,67683E-14			
-0,000234462	-4,2416E-06	9,94493E-10	1,79912E-11			
-3,85801E-05	1,67752E-05	-6,4719E-10	2,81408E-10			
-0,000111676	2,19259E-05	-2,44859E-09	4,80744E-10			
-0,000151243	2,17491E-05	-3,28939E-09	4,73022E-10			
-0,000147403	1,81888E-05	-2,68108E-09	3,30832E-10			
-9,57095E-05	1,48981E-05	-1,42589E-09	2,21955E-10			
-0,000167269	1,96243E-05	-3,28253E-09	3,85114E-10			
-0,000264306	2,0699E-05	-5,47087E-09	4,2845E-10			
-0,000345981	1,79723E-05	-6,21808E-09	3,23003E-10			
-0,00012436	1,70247E-06	-2,1172E-10	2,89842E-12			
-0,000256552	-1,38309E-06	3,54834E-10	1,91293E-12			
-0,000356396	-7,34206E-06	2,61668E-09	5,39058E-11			
-0,000455105	-1,42443E-05	6,48265E-09	2,02899E-10			
-0,000155582	1,39085E-05	-2,16391E-09	1,93447E-10			
-0,00029177	1,78334E-05	-5,20325E-09	3,18031E-10			
-0,000428162	1,7208E-05	-7,36779E-09	2,96114E-10			
-0,000569388	1,44277E-05	-8,21495E-09	2,08158E-10			
0,000493419	3,96395E-05	1,95589E-08	1,57129E-09			
0,000668111	5,05571E-05	3,37778E-08	2,55602E-09			
0,000139929	2,58959E-05	3,6236E-09	6,706E-10			
0,000276637	4,85074E-05	1,3419E-08	2,35296E-09			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

4-CHLOROANILIN						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A**	**$\sum(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
9,48658E-06	6,93451E-06	6,57848E-11	4,80874E-11	8,21701E-09	3,07141E-09	**2,68**
1,97989E-05	1,17514E-05	2,32666E-10	1,38096E-10			
4,95438E-05	1,42762E-05	7,07299E-10	2,03811E-10			
6,02995E-05	1,66963E-05	1,00678E-09	2,78768E-10			
1,39387E-05	9,06373E-06	1,26337E-10	8,21511E-11			
3,43955E-05	1,50442E-05	5,17452E-10	2,26327E-10			
6,00702E-05	1,90699E-05	1,14553E-09	3,63661E-10			
9,0898E-05	2,1618E-05	1,96503E-09	4,67337E-10			
1,62081E-05	1,17712E-05	1,90789E-10	1,38561E-10			
2,3579E-05	1,50818E-05	3,55616E-10	2,27462E-10			
4,58241E-05	1,68291E-05	7,71179E-10	2,8322E-10			
2,55339E-05	1,51738E-05	3,87447E-10	2,30244E-10			
3,80384E-05	1,9588E-05	7,45096E-10	3,8369E-10			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=C**	**B+$\sum(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
3,72887E-05	-1,83156E-05	-6,82965E-10	3,3546E-10	1,26886E-06	1,32862E-06	**0,96**
0,000148442	-0,000108845	-1,61572E-08	1,18471E-08			
0,000277807	-0,000178719	-4,96495E-08	3,19406E-08			
0,000390522	-0,000269923	-1,05411E-07	7,28582E-08			
4,54084E-05	-1,7531E-05	-7,96052E-10	3,07335E-10			
0,000171058	-0,000102267	-1,74936E-08	1,04585E-08			
0,000304071	-0,000183931	-5,59281E-08	3,38305E-08			
0,000442512	-0,000260715	-1,1537E-07	6,79726E-08			
0,000140185	-0,000139897	-1,96115E-08	1,95713E-08			
0,000293565	-0,000261149	-7,66642E-08	6,81988E-08			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
0,000436589	-0,000389431	-1,70021E-07	1,51656E-07			
0	-0,000505831	0	2,55865E-07			
0,000151878	-0,000154762	-2,35049E-08	2,39511E-08			
0,000321262	-0,000270194	-8,6803E-08	7,30048E-08			
0,000479182	-0,000403105	-1,93161E-07	1,62494E-07			
0,000590393	-0,000583615	-3,44562E-07	3,40607E-07			
8,26814E-06	5,60088E-06	4,63088E-11	3,13698E-11			
2,01302E-05	3,37268E-06	6,78926E-11	1,1375E-11			
2,97631E-05	-1,21057E-06	-3,60303E-11	1,46548E-12			
1,04693E-05	7,65818E-06	8,01756E-11	5,86478E-11			
2,32756E-05	6,81276E-06	1,58571E-10	4,64137E-11			
3,43029E-05	3,83689E-06	1,31616E-10	1,47217E-11			
4,37069E-05	-4,70952E-07	-2,05839E-11	2,21796E-13			
1,25695E-05	1,9606E-06	2,46437E-11	3,84393E-12			
2,66556E-05	-3,11323E-06	-8,29851E-11	9,6922E-12			
3,97217E-05	-9,55803E-06	-3,79661E-10	9,13559E-11			
5,10961E-05	-1,74379E-05	-8,91008E-10	3,0408E-10			
1,49338E-05	4,19442E-06	6,26386E-11	1,75932E-11			
2,98567E-05	4,90891E-07	1,46564E-11	2,40974E-13			
4,38017E-05	-4,62573E-06	-2,02615E-10	2,13974E-11			
5,75704E-05	-9,38208E-06	-5,4013E-10	8,80234E-11			
O-KRESOL						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
4,91461E-05	2,03629E-05	1,00076E-09	4,14647E-10	8,63044E-08	1,19234E-08	**7,24**
0,000111628	3,31408E-05	3,69944E-09	1,09831E-09			
0,000244011	3,94196E-05	9,61881E-09	1,55391E-09			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
4,51017E-05	2,07248E-05	9,34724E-10	4,29518E-10			
0,00010764	3,36444E-05	3,62149E-09	1,13194E-09			
0,00025813	3,95298E-05	1,02038E-08	1,5626E-09			
8,08483E-05	1,20855E-05	9,77096E-10	1,4606E-10			
0,000227673	1,81598E-05	4,13449E-09	3,29778E-10			
0,000303368	2,44386E-05	7,4139E-09	5,97245E-10			
8,06028E-05	1,20226E-05	9,69055E-10	1,44543E-10			
0,000248919	1,75461E-05	4,36756E-09	3,07865E-10			
3,13011E-05	1,37141E-05	4,29268E-10	1,88077E-10			
0,00017105	1,9506E-05	3,33651E-09	3,80485E-10			
0,000217462	2,63631E-05	5,73297E-09	6,95013E-10			
0,000274408	3,08901E-05	8,47649E-09	9,54197E-10			
5,69883E-05	1,27821E-05	7,28431E-10	1,63382E-10			
0,000178953	1,95726E-05	3,50258E-09	3,83087E-10			
0,000285043	2,4499E-05	6,98327E-09	6,00203E-10			
0,000350504	2,9026E-05	1,01737E-08	8,4251E-10			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=C	B+$\sum(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,000140672	2,57535E-05	3,6228E-09	6,63242E-10	6,43627E-07	8,24385E-08	**7,81**
0,000260165	4,23931E-05	1,10292E-08	1,79717E-09			
0,000449185	5,24226E-05	2,35474E-08	2,74812E-09			
0,000679799	5,86044E-05	3,98392E-08	3,43448E-09			
0,000140376	2,62154E-05	3,68001E-09	6,87247E-10			
0,000262537	4,29287E-05	1,12704E-08	1,84288E-09			
0,000473019	5,26237E-05	2,4892E-08	2,76925E-09			
0,000747661	5,88355E-05	4,3989E-08	3,46162E-09			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=A$	$\sum(C_{inLös})^2=B$	$K_{D1}=A/B$
0,000120062	1,38318E-05	1,66068E-09	1,91319E-10			**7,81**
0,000324866	2,37271E-05	7,70814E-09	5,62978E-10			
0,000456164	3,39669E-05	1,54945E-08	1,15375E-09			
0,000598052	4,19338E-05	2,50786E-08	1,75844E-09			
0,000120394	1,37557E-05	1,6561E-09	1,8922E-10			
0,000347962	2,31355E-05	8,05026E-09	5,35249E-10			
0,000517947	3,22706E-05	1,67145E-08	1,04139E-09			
0,000665435	4,00568E-05	2,66551E-08	1,60454E-09			
0,000190905	2,90864E-05	5,55275E-09	8,46017E-10			
0,000279132	4,89147E-05	1,36537E-08	2,39265E-09			
0,000407128	6,2572E-05	2,54748E-08	3,91526E-09			
0,000566789	7,2349E-05	4,10066E-08	5,23437E-09			
0,000188166	2,96378E-05	5,57682E-09	8,78398E-10			
0,000263639	4,99502E-05	1,31688E-08	2,49502E-09			
0,000407448	6,32242E-05	2,57606E-08	3,9973E-09			
0,000593158	7,30182E-05	4,33113E-08	5,33165E-09			
0,000147791	1,80004E-05	2,6603E-09	3,24015E-10			
0,000369474	2,92419E-05	1,08041E-08	8,55086E-10			
0,00049451	4,18387E-05	2,06896E-08	1,75048E-09			
0,000632814	5,16328E-05	3,2674E-08	2,66595E-09			
0,000175821	1,70574E-05	2,99905E-09	2,90956E-10			
0,00038147	2,93686E-05	1,12032E-08	8,62515E-10			
0,000569019	3,96887E-05	2,25836E-08	1,57519E-09			
0,000714026	4,93246E-05	3,52191E-08	2,43292E-09			
-4,238E-05	1,49723E-05	-6,34525E-10	2,24169E-10			
-3,69096E-05	2,38886E-05	-8,8172E-10	5,70665E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
0,00016457	2,45781E-05	4,04481E-09	6,04082E-10			**7,81**
-5,01724E-05	1,52342E-05	-7,64339E-10	2,32082E-10			
-4,72566E-05	2,436E-05	-1,15117E-09	5,93411E-10			
4,3241E-05	2,64359E-05	1,14311E-09	6,98857E-10			
0,000192558	2,50394E-05	4,82153E-09	6,2697E-10			
4,16343E-05	1,03393E-05	4,30469E-10	1,06901E-10			
0,00013048	1,25924E-05	1,64305E-09	1,58569E-10			
0,000150573	1,49103E-05	2,24508E-09	2,22316E-10			
0,000177386	1,53781E-05	2,72785E-09	2,36486E-10			
4,0812E-05	1,02895E-05	4,19934E-10	1,05873E-10			
0,000149876	1,19567E-05	1,79203E-09	1,42962E-10			
0,000204705	1,35223E-05	2,76808E-09	1,82852E-10			
0,000239691	1,40764E-05	3,374E-09	1,98145E-10			
-0,000139836	1,32544E-05	-1,85344E-09	1,75678E-10			
-0,000211455	2,21857E-05	-4,69128E-09	4,92206E-10			
-0,000242833	2,5305E-05	-6,14487E-09	6,40341E-10			
-0,000231011	2,365E-05	-5,46341E-09	5,59321E-10			
-0,000152442	1,3635E-05	-2,07854E-09	1,85913E-10			
-0,000245433	2,32806E-05	-5,71382E-09	5,41986E-10			
-0,000270533	2,58511E-05	-6,99358E-09	6,68278E-10			
-0,000261723	2,4978E-05	-6,53731E-09	6,23898E-10			
-8,51888E-05	9,42785E-06	-8,03147E-10	8,88844E-11			
-2,73735E-05	9,77019E-06	-2,67444E-10	9,54567E-11			
-5,95857E-05	1,08875E-05	-6,48738E-10	1,18537E-10			
-8,39975E-05	1,01474E-05	-8,52352E-10	1,02969E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
-6,18442E-05	8,50678E-06	-5,26095E-10	7,23653E-11			**7,81**
-2,35634E-05	9,77659E-06	-2,3037E-10	9,55817E-11			
1,0659E-06	9,3094E-06	9,92292E-12	8,66649E-11			
-1,30182E-05	8,72747E-06	-1,13616E-10	7,61687E-11			
PHENOL						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A	∑$(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
4,22448E-05	1,8546E-05	7,83472E-10	3,43954E-10	2,42914E-08	1,06222E-08	**2,29**
9,65227E-05	3,10298E-05	2,99508E-09	9,62848E-10			
2,10671E-05	1,9671E-05	4,14409E-10	3,86946E-10			
8,07788E-05	3,17173E-05	2,56208E-09	1,00598E-09			
2,44251E-05	1,91409E-05	4,67519E-10	3,66374E-10			
9,07473E-05	4,10985E-05	3,72958E-09	1,68909E-09			
0,00012653	4,65399E-05	5,8887E-09	2,16596E-09			
6,51931E-05	4,00743E-05	2,61257E-09	1,60595E-09			
0,000105698	4,57717E-05	4,83797E-09	2,09505E-09			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,000139203	2,38591E-05	3,32126E-09	5,69258E-10	2,88101E-07	5,61789E-08	**5,13**
0,000262244	4,06461E-05	1,06592E-08	1,65211E-09			
0,000474329	5,10775E-05	2,42276E-08	2,60891E-09			
0,000678048	5,85063E-05	3,96701E-08	3,42299E-09			
0,000121655	2,51008E-05	3,05363E-09	6,30049E-10			
0,00025166	4,138E-05	1,04137E-08	1,71231E-09			
0,000446214	5,01315E-05	2,23694E-08	2,51317E-09			
0,000639607	5,84942E-05	3,74133E-08	3,42157E-09			
0,000184466	2,656E-05	4,89941E-09	7,05433E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000270074	4,60345E-05	1,24327E-08	2,11918E-09			
0,000424142	5,91684E-05	2,50958E-08	3,5009E-09			
0,000541901	6,97002E-05	3,77706E-08	4,85812E-09			
0,000146329	2,84384E-05	4,16138E-09	8,08744E-10			
0,000245905	4,69126E-05	1,1536E-08	2,20079E-09			
0,000389062	5,83635E-05	2,2707E-08	3,4063E-09			
0,000508957	6,96806E-05	3,54644E-08	4,85538E-09			
-5,47133E-05	1,32329E-05	-7,24015E-10	1,75109E-10			
-6,91989E-05	2,14135E-05	-1,48179E-09	4,58538E-10			
-3,16841E-06	2,34815E-05	-7,4399E-11	5,51382E-10			
6,81398E-05	2,27711E-05	1,55162E-09	5,18524E-10			
-7,95208E-05	1,42411E-05	-1,13247E-09	2,0281E-10			
-9,01018E-05	2,20545E-05	-1,98715E-09	4,86401E-10			
-1,58622E-05	2,23026E-05	-3,53768E-10	4,97407E-10			
4,90914E-05	2,17521E-05	1,06784E-09	4,73153E-10			**5,13**
-0,000135616	1,17218E-05	-1,58966E-09	1,37401E-10			
-0,000216589	2,02865E-05	-4,39383E-09	4,1154E-10			
-0,000242648	2,30286E-05	-5,58784E-09	5,30318E-10			
-0,000288841	2,33796E-05	-6,753E-09	5,46607E-10			
-0,000180838	1,34283E-05	-2,42834E-09	1,80319E-10			
-0,000252714	2,12009E-05	-5,35775E-09	4,49477E-10			
-0,000258675	2,1785E-05	-5,63526E-09	4,74588E-10			
-0,000297561	2,18628E-05	-6,50554E-09	4,77984E-10			
4,90914E-05	2,17521E-05	1,06784E-09	4,73153E-10			
-0,000135616	1,17218E-05	-1,58966E-09	1,37401E-10			
-0,000216589	2,02865E-05	-4,39383E-09	4,1154E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
-0,000242648	2,30286E-05	-5,58784E-09	5,30318E-10			
-0,000288841	2,33796E-05	-6,753E-09	5,46607E-10			
-0,000180838	1,34283E-05	-2,42834E-09	1,80319E-10			
-0,000252714	2,12009E-05	-5,35775E-09	4,49477E-10			
-0,000258675	2,1785E-05	-5,63526E-09	4,74588E-10			
-0,000297561	2,18628E-05	-6,50554E-09	4,77984E-10			
2-NITROPHENOL						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
0,000106582	9,8244E-06	1,0471E-09	9,65188E-11	1,93556E-08	2,2435E-09	**8,63**
0,000176547	1,77278E-05	3,12979E-09	3,14273E-10			
7,9888E-05	1,0744E-05	8,58319E-10	1,15434E-10			
0,000130687	1,9011E-05	2,48448E-09	3,61416E-10			
0,000197622	2,40248E-05	4,74783E-09	5,77192E-10			
0,00025401	2,79046E-05	7,08805E-09	7,78668E-10			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=C	B+$\sum(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
4,05341E-05	1,12603E-05	4,56425E-10	1,26794E-10	2,55803E-07	4,06345E-08	**6,30**
0,000144943	2,52157E-05	3,65484E-09	6,3583E-10			
0,000242447	3,69251E-05	8,95239E-09	1,36346E-09			
0,000347357	4,69208E-05	1,62983E-08	2,20156E-09			
3,19494E-05	1,51907E-05	4,85334E-10	2,30757E-10			
0,000123701	3,17987E-05	3,93353E-09	1,01116E-09			
0,000228291	4,45855E-05	1,01785E-08	1,98787E-09			
0,00032106	5,62333E-05	1,80543E-08	3,16219E-09			
0,000141966	1,15311E-05	1,63702E-09	1,32966E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000315746	2,65318E-05	8,37731E-09	7,03936E-10			
0,000533497	3,75016E-05	2,0007E-08	1,40637E-09			
0,000730319	4,82961E-05	3,52716E-08	2,33251E-09			
5,16116E-05	1,36119E-05	7,0253E-10	1,85283E-10			
0,00014918	2,95835E-05	4,41326E-09	8,75181E-10			
0,000237771	4,32499E-05	1,02835E-08	1,87055E-09			
0,000331222	5,51686E-05	1,82731E-08	3,04358E-09			
3,64472E-05	1,82101E-05	6,63707E-10	3,31608E-10			
0,00010837	3,76513E-05	4,08029E-09	1,41762E-09			
0,000193743	5,29265E-05	1,02541E-08	2,80121E-09			
0,000262532	6,71906E-05	1,76397E-08	4,51458E-09			
0,000155431	1,38342E-05	2,15026E-09	1,91386E-10			
0,000334826	3,05066E-05	1,02144E-08	9,30653E-10			
0,000528158	4,42242E-05	2,33574E-08	1,95578E-09			
0,000714309	5,69777E-05	4,06997E-08	3,24646E-09			
-2,6299E-05	8,02751E-06	-2,11116E-10	6,4441E-11			
-0,00012653	7,84176E-06	-9,92215E-10	6,14932E-11			
-0,000231351	5,64729E-06	-1,3065E-09	3,18919E-11			
-0,000331186	1,73709E-06	-5,75301E-10	3,0175E-12			
-4,05573E-05	1,17297E-05	-4,75726E-10	1,37586E-10			
-0,000157744	1,41774E-05	-2,2364E-09	2,00998E-10			
-0,000257813	1,302E-05	-3,35672E-09	1,6952E-10			
-0,000372605	1,03714E-05	-3,86445E-09	1,07567E-10			
7,11972E-05	8,11771E-06	5,77958E-10	6,58972E-11			
3,7349E-05	8,92371E-06	3,33291E-10	7,96326E-11			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
5,03255E-05	5,4318E-06	2,73358E-10	2,95044E-11			**6,30**
3,75969E-05	1,59948E-06	6,01355E-11	2,55834E-12			
-9,30787E-05	7,63743E-06	-7,10882E-10	5,83303E-11			
-0,000248007	6,94622E-06	-1,72271E-09	4,82499E-11			
-0,000409426	3,96413E-06	-1,62302E-09	1,57143E-11			
-0,000568644	-9,11296E-07	5,18203E-10	8,30461E-13			
-0,00012818	1,15747E-05	-1,48365E-09	1,33974E-10			
-0,00032676	1,37409E-05	-4,48998E-09	1,88812E-10			
-0,000504601	1,17167E-05	-5,91226E-09	1,37281E-10			
-0,000704614	7,95789E-06	-5,60724E-09	6,3328E-11			
4,34521E-06	7,65383E-06	3,32575E-11	5,85811E-11			
-7,34527E-05	7,51531E-06	-5,5202E-10	5,64798E-11			
-0,000132915	3,82549E-06	-5,08463E-10	1,46344E-11			
-0,000206289	-1,16849E-06	2,41048E-10	1,36538E-12			
4-tert-BUTHYLPHENOL						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A**	**∑$(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
1,3957E-05	1,04914E-05	1,46428E-10	1,1007E-10	1,2693E-08	8,20159E-09	**1,55**
3,22308E-05	1,74712E-05	5,63112E-10	3,05244E-10			
6,25771E-05	2,18932E-05	1,37001E-09	4,79313E-10			
7,95257E-05	2,53615E-05	2,01689E-09	6,43203E-10			
3,36601E-05	2,32155E-05	7,81435E-10	5,38959E-10			
6,30953E-05	3,92127E-05	2,47414E-09	1,53764E-09			
8,64389E-06	1,05781E-05	9,14361E-11	1,11896E-10			
1,74773E-05	1,77313E-05	3,09895E-10	3,144E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=A$	$\sum(C_{inLös})^2=B$	$K_{D1}=A/B$
3,24838E-05	2,24785E-05	7,30187E-10	5,05282E-10			
3,69361E-05	2,60334E-05	9,61572E-10	6,77739E-10			
2,77613E-05	1,75005E-05	4,85836E-10	3,06267E-10			
5,11312E-05	2,21475E-05	1,13243E-09	4,90513E-10			
2,42818E-05	2,35317E-05	5,71392E-10	5,53743E-10			
2,62337E-05	4,03401E-05	1,05827E-09	1,62733E-09			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
5,96375E-05	1,24355E-05	7,41619E-10	1,54641E-10	5,26629E-07	7,10211E-08	**7,42**
0,00018446	2,65665E-05	4,90046E-09	7,05779E-10			
0,000323021	3,81923E-05	1,23369E-08	1,45865E-09			
0,000448315	4,90177E-05	2,19754E-08	2,40274E-09			
9,09203E-05	2,58504E-05	2,35032E-09	6,68241E-10			
0,000233855	4,92738E-05	1,15229E-08	2,42791E-09			
0,000400618	6,61711E-05	2,65093E-08	4,37862E-09			
0,000589006	7,94722E-05	4,68096E-08	6,31583E-09			
5,60754E-05	1,25117E-05	7,01598E-10	1,56542E-10			
0,000173982	2,6706E-05	4,64637E-09	7,1321E-10			
0,000298496	3,85448E-05	1,15054E-08	1,4857E-09			
0,000410383	4,92425E-05	2,02083E-08	2,42483E-09			
0,0001619	1,66591E-05	2,69711E-09	2,77525E-10			
0,000329308	3,28485E-05	1,08173E-08	1,07903E-09			
0,000497137	4,70996E-05	2,34149E-08	2,21837E-09			
0,000671043	5,99185E-05	4,02079E-08	3,59023E-09			
0,000194164	2,99644E-05	5,81801E-09	8,97866E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000346546	5,65635E-05	1,96018E-08	3,19943E-09			
0,000481407	7,77249E-05	3,74173E-08	6,04117E-09			
0,000639481	9,46942E-05	6,05551E-08	8,96698E-09			
0,000162406	1,67501E-05	2,72032E-09	2,80565E-10			
0,000310925	3,33978E-05	1,03842E-08	1,11541E-09			
0,000446392	4,83234E-05	2,15712E-08	2,33515E-09			
0,000607232	6,06824E-05	3,68483E-08	3,68235E-09			
5,96375E-05	8,54735E-06	5,09743E-10	7,30572E-11			
0,00018446	8,37595E-06	1,54503E-09	7,01565E-11			
0,000323021	5,59417E-06	1,80703E-09	3,12947E-11			
0,000448315	1,70517E-06	7,64451E-10	2,90759E-12			
9,09203E-05	2,05806E-05	1,8712E-09	4,23562E-10			
0,000233855	2,91516E-05	6,81725E-09	8,49817E-10			
0,000400618	3,14163E-05	1,25859E-08	9,86984E-10			
0,000589006	2,98639E-05	1,759E-08	8,9185E-10			
5,60754E-05	8,64454E-06	4,84746E-10	7,4728E-11			
0,000173982	8,75669E-06	1,52351E-09	7,66795E-11			
0,000410383	2,82433E-06	1,15906E-09	7,97683E-12			
0,0001619	5,09294E-06	8,24547E-10	2,5938E-11			
0,000329308	2,15244E-06	7,08817E-10	4,63301E-12			
0,000497137	-2,80455E-06	-1,39425E-09	7,86551E-12			
0,000671043	-9,69108E-06	-6,50313E-09	9,39171E-11			
0,000194164	1,70991E-05	3,32002E-09	2,92378E-10			
0,000346546	2,41167E-05	8,35755E-09	5,81616E-10			
0,000481407	2,58938E-05	1,24655E-08	6,7049E-10			

Tab. E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
0,000639481	2,31623E-05	1,48118E-08	5,36491E-10			
0,000162406	5,1997E-06	8,44465E-10	2,70369E-11			
0,000310925	2,98742E-06	9,28863E-10	8,92467E-12			
0,000446392	-1,06215E-06	-4,74136E-10	1,12817E-12			
0,000607232	-7,88431E-06	-4,78761E-09	6,21623E-11			
DIURON						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
9,39482E-06	2,84329E-06	2,67122E-11	8,08429E-12	2,60485E-09	1,17529E-09	**2,22**
1,67552E-05	4,81054E-06	8,06016E-11	2,31413E-11			
2,02886E-05	6,26292E-06	1,27066E-10	3,92242E-11			
2,61811E-05	7,18507E-06	1,88113E-10	5,16252E-11			
8,7778E-06	2,70497E-06	2,37437E-11	7,31684E-12			
1,54904E-05	4,61842E-06	7,1541E-11	2,13298E-11			
1,54747E-05	6,14765E-06	9,51334E-11	3,77936E-11			
2,30756E-05	6,93916E-06	1,60125E-10	4,8152E-11			
1,74004E-05	7,82289E-06	1,36121E-10	6,11975E-11			
5,54011E-06	4,55695E-06	2,5246E-11	2,07658E-11			
1,47592E-05	7,60003E-06	1,1217E-10	5,77605E-11			
1,81304E-05	1,00207E-05	1,81679E-10	1,00414E-10			
2,50318E-05	1,15653E-05	2,895E-10	1,33755E-10			
6,36572E-06	2,94326E-06	1,8736E-11	8,66278E-12			
1,24139E-05	4,92172E-06	6,10976E-11	2,42233E-11			
1,55873E-05	6,3506E-06	9,89888E-11	4,03301E-11			
2,0455E-05	7,27877E-06	1,48887E-10	5,29804E-11			
8,23866E-06	2,72343E-06	2,24374E-11	7,41708E-12			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
1,28823E-05	4,70189E-06	6,05711E-11	2,21078E-11			
1,57498E-05	6,10635E-06	9,6174E-11	3,72875E-11			
1,97465E-05	7,03451E-06	1,38907E-10	4,94844E-11			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
4,40337E-05	4,73306E-06	2,08414E-10	2,24019E-11	7,63918E-08	9,00061E-09	**8,49**
0,000104277	1,01743E-05	1,06095E-09	1,03517E-10			
0,000160273	1,51022E-05	2,42047E-09	2,28076E-10			
0,000218626	1,96296E-05	4,29155E-09	3,8532E-10			
4,11111E-05	4,52394E-06	1,85984E-10	2,0466E-11			
9,7663E-05	9,83844E-06	9,60851E-10	9,67948E-11			
0,000146995	1,47553E-05	2,16894E-09	2,17717E-10			
0,000203777	1,89435E-05	3,86025E-09	3,58855E-10			
4,00159E-05	6,99428E-06	2,79882E-10	4,89199E-11			
0,000111286	1,3206E-05	1,46964E-09	1,74398E-10			
0,000158415	1,87555E-05	2,97117E-09	3,5177E-10			
0,000217099	2,34895E-05	5,09955E-09	5,51758E-10			
3,90032E-05	6,49754E-06	2,53425E-10	4,22181E-11			
9,53665E-05	1,28321E-05	1,22376E-09	1,64664E-10			
0,000147257	1,8719E-05	2,7565E-09	3,50401E-10			
0,000203467	2,35486E-05	4,79136E-09	5,54536E-10			
4,76086E-05	5,05099E-06	2,40471E-10	2,55125E-11			
0,000108518	1,0638E-05	1,15442E-09	1,13168E-10			
0,000166085	1,56756E-05	2,60347E-09	2,45723E-10			
0,000225351	2,03488E-05	4,58562E-09	4,14073E-10			
4,69514E-05	4,76089E-06	2,23531E-10	2,26661E-11			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,000103297	1,02724E-05	1,06111E-09	1,05521E-10			
0,000157319	1,51938E-05	2,39028E-09	2,30852E-10			
0,000212328	1,9648E-05	4,17182E-09	3,86045E-10			
4,8652E-05	7,13217E-06	3,46995E-10	5,08679E-11			
0,000111301	1,38218E-05	1,53839E-09	1,91042E-10			
0,000159913	1,94042E-05	3,10299E-09	3,76524E-10			
0,000215145	2,43407E-05	5,23677E-09	5,92468E-10			
4,41111E-05	6,74646E-06	2,97593E-10	4,55147E-11			
0,00010043	1,32481E-05	1,33051E-09	1,75512E-10			
0,000151567	1,93197E-05	2,92822E-09	3,73249E-10			
0,00020589	2,43389E-05	5,01113E-09	5,9238E-10			
-2,5244E-05	9,53517E-07	-2,40706E-11	9,09195E-13			
-7,07664E-05	-5,53236E-07	3,91505E-11	3,0607E-13			
-0,000119695	-2,57635E-06	3,08378E-10	6,6376E-12			
-0,000166264	-5,25945E-06	8,74458E-10	2,76618E-11			
-2,35555E-05	8,85993E-07	-2,087E-11	7,84984E-13			
-6,66822E-05	-6,01591E-07	4,01154E-11	3,61912E-13			
-0,000116045	-2,45995E-06	2,85465E-10	6,05134E-12			
-0,000157626	-5,06515E-06	7,98401E-10	2,56558E-11			
-3,75947E-05	2,93418E-06	-1,1031E-10	8,60942E-12			
-7,64854E-05	2,43979E-06	-1,86608E-10	5,95256E-12			
-0,000132602	1,7315E-06	-2,296E-10	2,99811E-12			
-0,000183963	1,02085E-07	-1,87798E-11	1,04213E-14			
-2,7923E-05	2,61635E-06	-7,30562E-11	6,84528E-12			
-6,58481E-05	2,36793E-06	-1,55924E-10	5,60711E-12			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
-0,000110996	1,32234E-06	-1,46774E-10	1,74858E-12			
-0,000153403	-4,18056E-07	6,41312E-11	1,74771E-13			
-3,48772E-05	8,35531E-07	-2,9141E-11	6,98112E-13			
-8,36907E-05	-7,94611E-07	6,65015E-11	6,31406E-13			
-0,00013491	-2,97436E-06	4,01271E-10	8,84681E-12			
-0,000184441	-5,79124E-06	1,06814E-09	3,35385E-11			
-3,04741E-05	6,8597E-07	-2,09043E-11	4,70555E-13			
-7,75327E-05	-8,68587E-07	6,73439E-11	7,54444E-13			
-0,00012582	-2,98112E-06	3,75083E-10	8,88705E-12			
-0,000172835	-5,57899E-06	9,64243E-10	3,11252E-11			
-4,19767E-05	2,66241E-06	-1,11759E-10	7,08842E-12			
-9,37708E-05	2,39666E-06	-2,24737E-10	5,74399E-12			
-0,000151815	1,50391E-06	-2,28317E-10	2,26176E-12			
-0,000210324	-1,35111E-07	2,84171E-11	1,82551E-14			
-3,50315E-05	2,43749E-06	-8,5389E-11	5,94136E-12			
-7,61825E-05	2,11548E-06	-1,61162E-10	4,47524E-12			
-0,000125336	1,00227E-06	-1,2562E-10	1,00454E-12			
-0,000172958	-7,68349E-07	1,32892E-10	5,9036E-13			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

n-METHYLANILIN						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A**	**$\sum(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
3,02463E-05	7,78035E-05	2,35327E-09	6,05339E-09	5,03955E-08	1,19048E-07	**0,42**
2,01828E-05	0,000131892	2,66195E-09	1,73955E-08			
3,51296E-05	0,000167726	5,89216E-09	2,81322E-08			
9,66133E-05	0,000190544	1,84091E-08	3,6307E-08			
2,93821E-06	7,93895E-05	2,33263E-10	6,3027E-09			
2,40767E-05	3,79292E-05	9,13211E-10	1,43863E-09			
1,49696E-05	6,47864E-05	9,69828E-10	4,19728E-09			
3,82974E-05	8,20678E-05	3,14298E-09	6,73512E-09			
1,78833E-05	9,50849E-05	1,70043E-09	9,04114E-09			
5,6055E-05	6,60968E-06	3,70505E-10	4,36879E-11			
5,54157E-05	1,25983E-05	6,98143E-10	1,58717E-10			
5,54216E-05	1,71233E-05	9,48999E-10	2,93207E-10			
5,21775E-05	2,03625E-05	1,06246E-09	4,14631E-10			
5,4593E-05	6,40406E-06	3,49617E-10	4,1012E-11			
5,54826E-05	1,22521E-05	6,79779E-10	1,50114E-10			
5,89788E-05	1,65298E-05	9,7491E-10	2,73236E-10			
5,84375E-05	1,97443E-05	1,15381E-09	3,89838E-10			
6,58108E-05	6,28413E-06	4,13564E-10	3,94903E-11			
6,97123E-05	1,2269E-05	8,55302E-10	1,50529E-10			
7,83837E-05	1,66081E-05	1,3018E-09	2,75828E-10			
8,11244E-05	1,98249E-05	1,60829E-09	3,93028E-10			
5,66983E-05	6,32902E-06	3,58844E-10	4,00565E-11			
5,91745E-05	1,21942E-05	7,21586E-10	1,48699E-10			
6,95654E-05	1,6234E-05	1,12933E-09	2,63543E-10			
7,76207E-05	1,92265E-05	1,49237E-09	3,69657E-10			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
0,000209375	8,5965E-05	1,79989E-08	7,38998E-09			
0,000349129	0,000150142	5,2419E-08	2,25427E-08			
0,000514369	0,000196154	1,00895E-07	3,84763E-08			
0,000727471	0,000229236	1,66762E-07	5,2549E-08			
0,000191277	8,76127E-05	1,67583E-08	7,67599E-09			
-0,000724621	0,000187389	-1,35786E-07	3,51145E-08			
-0,000577414	0,000222292	-1,28355E-07	4,94138E-08			
-2,98483E-05	0,000235829	-7,03911E-09	5,56156E-08			
0,000195319	4,54045E-05	8,86837E-09	2,06157E-09			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=C	B+$\sum(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,000331272	8,20764E-05	2,71896E-08	6,73654E-09	4,49838E-07	5,94251E-07	**0,76**
0,000499677	0,00010907	5,44996E-08	1,18962E-08			
0,000623691	0,000132003	8,23291E-08	1,74248E-08			
0,000110739	9,31484E-06	1,03151E-09	8,67662E-11			
0,000219404	2,25296E-05	4,94308E-09	5,07581E-10			
0,00033742	3,49082E-05	1,17787E-08	1,21858E-09			
0,000458759	4,61318E-05	2,11634E-08	2,12814E-09			
0,000105075	9,07023E-06	9,53056E-10	8,22691E-11			
0,00020558	2,19723E-05	4,51708E-09	4,82784E-10			
0,000311989	3,38756E-05	1,05688E-08	1,14756E-09			
0,000419216	4,5033E-05	1,88785E-08	2,02797E-09			
0,000205882	1,18386E-05	2,43736E-09	1,40152E-10			
0,000336684	2,66545E-05	8,97414E-09	7,10463E-10			
0,000482888	4,03888E-05	1,95033E-08	1,63125E-09			
0,000630679	5,29995E-05	3,34256E-08	2,80894E-09			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,00018746	1,18566E-05	2,22264E-09	1,40579E-10			
0,000305638	2,63616E-05	8,05709E-09	6,94932E-10			
0,000436151	3,96165E-05	1,72788E-08	1,56947E-09			
0,000569762	5,2049E-05	2,96555E-08	2,7091E-09			
-0,000148883	6,96421E-05	-1,03685E-08	4,85002E-09			
-0,000308763	0,000113642	-3,50884E-08	1,29145E-08			
-0,00044411	0,000139299	-6,18641E-08	1,94043E-08			
-0,000534245	0,000151852	-8,11261E-08	2,3059E-08			
-0,000185401	7,11664E-05	-1,31943E-08	5,06465E-09			
-0,001432323	0,000150309	-2,15291E-07	2,25927E-08			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
-0,001600418	0,000164781	-2,63718E-07	2,71526E-08			**0,76**
-0,001363733	0,000158126	-2,15641E-07	2,50038E-08			
-0,000147166	3,0454E-05	-4,48178E-09	9,27444E-10			
-0,000301333	4,74964E-05	-1,43122E-08	2,25591E-09			
-0,000423082	5,50659E-05	-2,32974E-08	3,03226E-09			
-0,000587925	5,81669E-05	-3,41977E-08	3,38338E-09			
1,37108E-06	3,90452E-06	5,35341E-12	1,52453E-11			
-0,000108573	2,66702E-06	-2,89567E-10	7,11302E-12			
-0,000226577	-6,61575E-07	1,49897E-10	4,37681E-13			
-0,000354404	-5,4068E-06	1,91619E-09	2,92335E-11			
4,11081E-06	3,73789E-06	1,53657E-11	1,39718E-11			
-9,46152E-05	2,53189E-06	-2,39555E-10	6,41046E-12			
-0,000194032	-8,15924E-07	1,58315E-10	6,65732E-13			
-0,000302341	-5,54432E-06	1,67628E-09	3,07395E-11			

Tab.E.2 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 4 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
-7,42605E-05	7,29663E-07	-5,41851E-11	5,32408E-13			
-0,000197259	-2,11647E-06	4,17493E-10	4,47944E-12			
-0,000326121	-7,17264E-06	2,33915E-09	5,14467E-11			
-0,00046843	-1,33496E-05	6,25335E-09	1,78212E-10			
-7,40631E-05	8,01421E-07	-5,93557E-11	6,42276E-13			
-0,000187289	-1,97315E-06	3,69548E-10	3,89331E-12			
-0,00029702	-7,14849E-06	2,12324E-09	5,11009E-11			
-0,00041452	-1,35961E-05	5,63586E-09	1,84854E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5

PROPANIL						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
9,42703E-05	4,735E-06	4,4637E-10	2,242E-11	1,01409E-07	4,13749E-09	**24,51**
0,000153665	9,4474E-06	1,45173E-09	8,9253E-11			
0,000205951	1,2936E-05	2,66425E-09	1,6735E-10			
0,000228443	1,6388E-05	3,74361E-09	2,6855E-10			
0,00011251	4,4027E-06	4,9535E-10	1,9384E-11			
0,000186905	8,5864E-06	1,60485E-09	7,3727E-11			
0,000267026	1,1464E-05	3,0611E-09	1,3142E-10			
0,000103052	4,3725E-06	4,50597E-10	1,9119E-11			
0,000196096	7,5065E-06	1,472E-09	5,6348E-11			
0,000247179	9,4776E-06	2,34265E-09	8,9824E-11			
0,000140642	4,0402E-06	5,68227E-10	1,6324E-11			
0,000257172	7,3857E-06	1,8994E-09	5,4549E-11			
0,000359308	1,0074E-05	3,61973E-09	1,0149E-10			
0,000432967	1,2566E-05	5,44077E-09	1,5791E-10			
0,000125569	4,4556E-06	5,59482E-10	1,9852E-11			
0,000225854	8,3523E-06	1,88641E-09	6,9762E-11			
0,000307027	1,132E-05	3,47561E-09	1,2815E-10			
0,000375953	1,3843E-05	5,20414E-09	1,9162E-10			
9,86192E-05	5,1881E-06	5,11648E-10	2,6917E-11			
0,000197845	8,4732E-06	1,67638E-09	7,1795E-11			
0,000274761	1,1501E-05	3,16016E-09	1,3228E-10			
0,000341631	1,3941E-05	4,76258E-09	1,9434E-10			
0,000100075	4,5352E-06	4,53862E-10	2,0568E-11			
0,000160323	9,2798E-06	1,48776E-09	8,6115E-11			
0,000216161	1,2699E-05	2,74496E-09	1,6126E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=A$	$\sum(C_{inLös})^2=B$	$K_{D1}=A/B$
0,000234787	1,6355E-05	3,83988E-09	2,6748E-10			
0,000108681	4,5352E-06	4,92894E-10	2,0568E-11			
0,000169755	9,1403E-06	1,5516E-09	8,3544E-11			
0,000254554	1,168E-05	2,97319E-09	1,3642E-10			
9,67765E-05	4,605E-06	4,45657E-10	2,1206E-11			
0,000185563	7,8285E-06	1,45269E-09	6,1286E-11			
0,000238009	9,6705E-06	2,30168E-09	9,3519E-11			
0,00014751	3,8236E-06	5,64013E-10	1,462E-11			
0,000269625	7,061E-06	1,90383E-09	4,9858E-11			
0,000380169	9,5868E-06	3,64461E-09	9,1907E-11	1,01409E-07	4,13749E-09	**24,51**
0,000464385	1,1889E-05	5,52122E-09	1,4136E-10			
0,000129199	4,3399E-06	5,60707E-10	1,8835E-11			
0,000241886	7,8843E-06	1,90711E-09	6,2163E-11			
0,000330029	1,0773E-05	3,55538E-09	1,1606E-10			
0,000405889	1,3243E-05	5,37515E-09	1,7537E-10			
9,55004E-05	5,2888E-06	5,05082E-10	2,7971E-11			
0,00019694	8,4704E-06	1,66816E-09	7,1748E-11			
0,000279879	1,1303E-05	3,16354E-09	1,2776E-10			
0,000352324	1,362E-05	4,79853E-09	1,855E-10			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000128311	6,4902E-06	8,3276E-10	4,2122E-11	4,19815E-07	1,96531E-08	**21,36**
0,000237381	1,4339E-05	3,40376E-09	2,056E-10			
0,000339483	2,1128E-05	7,17248E-09	4,4638E-10			
0,0004132	2,794E-05	1,15448E-08	7,8064E-10			
0,000494127	3,3448E-05	1,65275E-08	1,1188E-09			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,000146318	6,1799E-06	9,04237E-10	3,8192E-11			
0,000269247	1,356E-05	3,65096E-09	1,8387E-10			
0,000399664	1,9723E-05	7,88264E-09	3,89E-10			
0,000134225	6,1269E-06	8,22376E-10	3,7538E-11			
0,000270228	1,2381E-05	3,34557E-09	1,5328E-10			
0,000349495	1,7388E-05	6,07687E-09	3,0233E-10			
0,000137403	6,4036E-06	8,79865E-10	4,1005E-11			
0,000242902	1,4168E-05	3,44148E-09	2,0074E-10			
0,000343629	2,0695E-05	7,11156E-09	4,283E-10			
0,000407301	2,7434E-05	1,11738E-08	7,5262E-10			
0,000482307	3,2645E-05	1,57448E-08	1,0657E-09			
0,000146483	6,4507E-06	9,44914E-10	4,1611E-11			
0,000252249	1,4162E-05	3,57227E-09	2,0055E-10			
0,000383507	1,9844E-05	7,61021E-09	3,9377E-10			
0,000131884	6,5051E-06	8,5792E-10	4,2317E-11			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
0,000261058	1,2798E-05	3,34092E-09	1,6378E-10	4,19815E-07	1,96531E-08	**21,36**
0,000339794	1,761E-05	5,98386E-09	3,1012E-10			
0,000180214	5,9844E-06	1,07847E-09	3,5813E-11			
0,000356586	1,2924E-05	4,60851E-09	1,6703E-10			
0,000518774	1,9181E-05	9,95063E-09	3,6791E-10			
0,000650173	2,525E-05	1,6417E-08	6,3757E-10			
0,000165332	6,4144E-06	1,0605E-09	4,1145E-11			
0,00032741	1,3989E-05	4,58005E-09	1,9568E-10			
0,000467956	2,062E-05	9,64908E-09	4,2517E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000597575	2,6886E-05	1,60662E-08	7,2284E-10			
0,000137977	7,1427E-06	9,85525E-10	5,1018E-11			
0,000294187	1,4076E-05	4,14096E-09	1,9813E-10			
0,000429118	2,0698E-05	8,88204E-09	4,2842E-10			
0,000554244	2,6936E-05	1,4929E-08	7,2554E-10			
0,000191763	5,9154E-06	1,13435E-09	3,4992E-11			
0,000370877	1,2703E-05	4,71109E-09	1,6136E-10			
0,000537975	1,8691E-05	1,00552E-08	3,4935E-10			
0,000675674	2,4407E-05	1,64913E-08	5,9571E-10			
0,00017288	6,4236E-06	1,11051E-09	4,1262E-11			
0,000343814	1,3573E-05	4,66644E-09	1,8421E-10			
0,000487129	1,9983E-05	9,73429E-09	3,9932E-10			
0,000618876	2,5998E-05	1,60894E-08	6,7588E-10			
0,000138425	7,3585E-06	1,0186E-09	5,4147E-11			
0,000293294	1,4107E-05	4,13757E-09	1,9901E-10			
0,000430061	2,0388E-05	8,76791E-09	4,1565E-10			
0,00055618	2,6301E-05	1,46282E-08	6,9175E-10			
6,02296E-05	2,9798E-06	1,79475E-10	8,8795E-12			
6,99481E-05	4,5559E-06	3,18679E-10	2,0756E-11			
7,242E-05	4,7449E-06	3,43629E-10	2,2515E-11			
4,36859E-05	4,8351E-06	2,11226E-10	2,3378E-11			
2,34768E-05	3,541E-06	8,31324E-11	1,2539E-11			
7,87015E-05	2,6255E-06	2,06632E-10	6,8933E-12			
0,000104563	3,613E-06	3,77788E-10	1,3054E-11			
0,000134388	3,2042E-06	4,30608E-10	1,0267E-11			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
7,18797E-05	2,6182E-06	1,88194E-10	6,8548E-12	4,19815E-07	1,96531E-08	**21,36**
0,000121964	2,6325E-06	3,21073E-10	6,9302E-12			
0,000144863	1,5676E-06	2,27084E-10	2,4573E-12			
6,27464E-05	2,6669E-06	1,67341E-10	7,1125E-12			
7,77432E-05	4,3914E-06	3,41405E-10	1,9285E-11			
8,86937E-05	4,7019E-06	4,17027E-10	2,2108E-11			
6,22718E-05	5,2757E-06	3,28529E-10	2,7833E-11			
4,77408E-05	4,3069E-06	2,05617E-10	1,855E-11			
7,08787E-05	2,6198E-06	1,85689E-10	6,8634E-12			
8,72615E-05	4,1188E-06	3,59412E-10	1,6964E-11			
0,000125601	3,5162E-06	4,41645E-10	1,2364E-11			
6,16694E-05	2,7049E-06	1,6681E-10	7,3165E-12			
0,000110068	2,8594E-06	3,14732E-10	8,1764E-12			
0,000136225	1,7308E-06	2,35778E-10	2,9957E-12			
0,000101069	2,0961E-06	2,11851E-10	4,3936E-12			
0,000157759	1,8474E-06	2,91447E-10	3,413E-12			
0,000199842	9,6727E-07	1,933E-10	9,356E-13			
0,00021576	-1,1766E-07	-2,53865E-11	1,3844E-14			
8,58055E-05	2,4968E-06	2,14237E-10	6,2339E-12			
0,000124299	2,7159E-06	3,37589E-10	7,3764E-12			
0,000146098	2,0208E-06	2,95233E-10	4,0836E-12			
0,000154331	7,994E-07	1,23372E-10	6,3904E-13			
5,92611E-05	3,2336E-06	1,91625E-10	1,0456E-11			
0,000101504	2,8704E-06	2,91355E-10	8,2391E-12			
0,000120405	2,3046E-06	2,7748E-10	5,311E-12			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,000129019	9,4553E-07	1,21992E-10	8,9403E-13			
0,000103257	1,7317E-06	1,78814E-10	2,9989E-12			
0,000168373	1,4195E-06	2,39002E-10	2,0149E-12			
0,000222364	4,8282E-07	1,07363E-10	2,3312E-13			
0,000253097	-6,2856E-07	-1,59087E-10	3,9509E-13			
8,55172E-05	2,2562E-06	1,92941E-10	5,0903E-12			
0,000139958	2,1961E-06	3,07364E-10	4,8229E-12			
0,00017293	1,5629E-06	2,70269E-10	2,4426E-12			
0,000192902	4,8804E-07	9,4143E-11	2,3818E-13			
4-CHLOROANILIN						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A	∑$(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
0,000140521	2,1874E-06	3,07372E-10	4,7846E-12	7,27485E-08	2,30566E-09	**31,55**
0,00023537	5,2008E-06	1,22412E-09	2,7049E-11			
0,000326417	7,3649E-06	2,40404E-09	5,4242E-11			
0,000400304	9,4709E-06	3,79122E-09	8,9697E-11			
0,000193271	2,7691E-06	5,3519E-10	7,668E-12			
0,000285925	8,1212E-06	2,32206E-09	6,5954E-11			
0,00037534	1,1716E-05	4,39763E-09	1,3727E-10			
0,000156495	2,3503E-06	3,67803E-10	5,5237E-12			
0,000259249	5,4801E-06	1,4207E-09	3,0031E-11			
0,00034316	8,2725E-06	2,83878E-09	6,8434E-11			
0,000398611	1,0867E-05	4,33172E-09	1,1809E-10			
9,11663E-05	4,3631E-06	3,97768E-10	1,9037E-11			
0,000178417	7,1206E-06	1,27044E-09	5,0703E-11			
0,000249935	9,6454E-06	2,41072E-09	9,3033E-11			
0,000315412	1,16E-05	3,6588E-09	1,3456E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
9,52817E-05	4,3282E-06	4,12399E-10	1,8733E-11			
0,000181603	6,9228E-06	1,2572E-09	4,7925E-11			
0,000253752	9,2963E-06	2,35897E-09	8,6422E-11			
0,000323256	1,1216E-05	3,62567E-09	1,258E-10			
0,000164	1,3702E-06	2,24719E-10	1,8776E-12			
0,000236353	5,4258E-06	1,2824E-09	2,9439E-11			
0,000322453	7,6881E-06	2,47904E-09	5,9106E-11			
0,000405361	9,3802E-06	3,80236E-09	8,7988E-11			
0,000264689	9,2698E-06	2,45362E-09	8,593E-11			
0,000212658	2,1611E-05	4,59579E-09	4,6704E-10			
0,000122304	2,8855E-06	3,52903E-10	8,3259E-12			
0,000226537	5,6197E-06	1,27306E-09	3,1581E-11			
0,000320012	7,7489E-06	2,47973E-09	6,0045E-11			
0,00038925	9,9479E-06	3,87221E-09	9,8961E-11			
0,000139927	2,4201E-06	3,38633E-10	5,8567E-12			
0,000258579	4,7471E-06	1,22749E-09	2,2535E-11			
0,000368485	6,7599E-06	2,49092E-09	4,5696E-11			
0,000449185	8,8309E-06	3,96672E-09	7,7985E-11			
0,000109174	3,3842E-06	3,69467E-10	1,1453E-11			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=C	B+$\sum(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,000167806	3,4869E-06	5,85116E-10	1,2158E-11	7,7498E-07	4,04124E-08	**19,18**
0,000362229	1,3369E-05	4,84266E-09	1,7873E-10			
0,000553071	2,2326E-05	1,23478E-08	4,9845E-10			
0,000727977	3,1308E-05	2,27917E-08	9,8021E-10			
0,000882678	4,0132E-05	3,54232E-08	1,6105E-09			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000221789	4,154E-06	9,21311E-10	1,7256E-11			
0,000415268	1,6423E-05	6,81978E-09	2,697E-10			
0,000604179	2,6744E-05	1,61583E-08	7,1525E-10			
0,000761408	3,7002E-05	2,81736E-08	1,3692E-09			
0,000934717	4,5911E-05	4,2914E-08	2,1078E-09			
0,000306201	6,6692E-06	2,04213E-09	4,4479E-11			
0,000514928	2,0116E-05	1,03582E-08	4,0464E-10			
0,000737537	3,164E-05	2,33359E-08	1,0011E-09			
0,000958457	4,2726E-05	4,09511E-08	1,8255E-09			
0,001144156	5,4323E-05	6,21538E-08	2,951E-09			
0,000374038	6,8209E-06	2,55127E-09	4,6525E-11			
0,000545082	2,4042E-05	1,31047E-08	5,78E-10			
0,000678944	3,953E-05	2,68384E-08	1,5626E-09			
0,000763497	5,4723E-05	4,1781E-08	2,9946E-09			
0,000936085	6,5399E-05	6,12187E-08	4,277E-09			
0,00014852	4,2719E-06	6,34459E-10	1,8249E-11			
0,000348716	1,4224E-05	4,9603E-09	2,0233E-10			
0,000537778	2,3172E-05	1,24616E-08	5,3696E-10			
0,000701285	3,1824E-05	2,2318E-08	1,0128E-09			
0,000168323	3,7727E-06	6,35026E-10	1,4233E-11			
0,000385966	1,2846E-05	4,95813E-09	1,6502E-10			
0,000598225	2,1421E-05	1,28145E-08	4,5885E-10			
0,000776433	2,9704E-05	2,30631E-08	8,8233E-10			
0,000240583	8,7664E-06	2,10905E-09	7,685E-11			
0,000538852	1,8832E-05	1,01475E-08	3,5464E-10			
0,000865518	2,7018E-05	2,33847E-08	7,2998E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,001118248	3,7541E-05	4,19802E-08	1,4093E-09			
0,000281322	7,8797E-06	2,21673E-09	6,2089E-11			
0,000595982	1,7328E-05	1,0327E-08	3,0025E-10			
0,000951328	2,526E-05	2,4031E-08	6,3809E-10			
0,001206052	3,5854E-05	4,32416E-08	1,2855E-09			
0,000113236	8,8789E-07	1,00542E-10	7,8835E-13			
0,000108512	-2,9674E-06	-3,21997E-10	8,8054E-12			
9,97643E-05	-7,5961E-06	-7,5782E-10	5,7701E-11			
7,26308E-05	-1,2367E-05	-8,98196E-10	1,5293E-10			
3,08828E-05	-1,735E-05	-5,35824E-10	3,0103E-10			
0,000164753	1,3842E-06	2,28057E-10	1,9161E-12			
0,000156583	-1,8023E-07	-2,82204E-11	3,2481E-14			
0,000146501	-3,3114E-06	-4,85123E-10	1,0965E-11			
0,000105296	-6,565E-06	-6,91269E-10	4,3099E-11			
7,74434E-05	-1,1542E-05	-8,93816E-10	1,3321E-10			
2,1798E-05	-3,9288E-06	-8,56394E-11	1,5435E-11			
-4,22228E-05	-9,2642E-06	3,91161E-10	8,5826E-11			
-9,26319E-05	-1,6264E-05	1,50658E-09	2,6452E-10			
-0,000147735	-2,3966E-05	3,54058E-09	5,7435E-10			
-0,000230145	-3,1332E-05	7,21095E-09	9,8171E-10			
8,83955E-05	-3,9333E-06	-3,47683E-10	1,5471E-11			
-1,57048E-05	-5,502E-06	8,64083E-11	3,0272E-11			
-0,000152899	-8,2808E-06	1,26613E-09	6,8572E-11			
-0,000338181	-1,1501E-05	3,88937E-09	1,3227E-10			
-0,000439287	-1,9785E-05	8,69142E-09	3,9146E-10			
9,60872E-05	1,4991E-06	1,44041E-10	2,2472E-12			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
0,000104357	-2,9851E-06	-3,11514E-10	8,9107E-12			
0,000102245	-7,6746E-06	-7,84695E-10	5,89E-11			
7,7214E-05	-1,1929E-05	-9,21061E-10	1,4229E-10			
0,000111531	1,0675E-06	1,19058E-10	1,1395E-12			
0,000131191	-3,3519E-06	-4,3974E-10	1,1235E-11			
0,000138745	-7,9011E-06	-1,09623E-09	6,2427E-11			
0,000121936	-1,2042E-05	-1,46837E-09	1,4501E-10			
-2,22361E-05	-1,998E-06	4,44273E-11	3,9919E-12			
1,31482E-05	-1,1659E-05	-1,53291E-10	1,3593E-10			
7,85518E-05	-2,1813E-05	-1,71345E-09	4,7581E-10			
7,40281E-05	-2,8639E-05	-2,1201E-09	8,202E-10			
ANILIN						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A**	**$\sum(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
0,000271283	0,00001	2,71283E-09	1E-10	1,21077E-07	4,39757E-09	**27,53**
0,000439374	0,00002062	9,0599E-09	4,2518E-10			
0,000196083	4,84649E-06	9,50313E-10	2,3488E-11			
0,00029897	1,12176E-05	3,35372E-09	1,2583E-10			
0,000369816	1,66714E-05	6,16536E-09	2,7794E-10			
0,000546996	2,4282E-05	1,32822E-08	5,8962E-10			
0,000216512	4,12757E-06	8,93669E-10	1,7037E-11			
0,000359307	9,40789E-06	3,38032E-09	8,8508E-11			
0,000476514	1,38081E-05	6,57978E-09	1,9066E-10			
0,000564117	1,78242E-05	1,00549E-08	3,177E-10			
0,000278866	0,00000974	2,71615E-09	9,4868E-11			
0,00026001	2,63446E-06	6,84987E-10	6,9404E-12			
0,000328601	1,08735E-05	3,57305E-09	1,1823E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
0,000371734	1,73685E-05	6,45644E-09	3,0166E-10			
0,000657218	2,07984E-05	1,36691E-08	4,3257E-10			
0,000233816	3,52478E-06	8,24149E-10	1,2424E-11			
0,000354009	9,77888E-06	3,46181E-09	9,5627E-11			
0,000468438	1,41575E-05	6,63191E-09	2,0043E-10			
0,000537728	1,8682E-05	1,00458E-08	3,4902E-10			
0,000222407	7,2247E-06	1,60682E-09	5,2196E-11			
0,000376894	1,38656E-05	5,22585E-09	1,9225E-10			
0,000496561	1,96307E-05	9,74786E-09	3,8537E-10			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=C	B+$\sum(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,00030133	1,14324E-05	3,44493E-09	1,307E-10	1,53949E-06	4,42368E-08	**34,80**
0,000520004	2,55629E-05	1,32928E-08	6,5346E-10			
0,003100886	3,82997E-05	1,18763E-07	1,4669E-09			
0,00045557	2,96541E-05	1,35095E-08	8,7937E-10			
0,00065526	5,94885E-05	3,89804E-08	3,5389E-09			
0,002707049	7,85204E-05	2,12559E-07	6,1655E-09			
0,000398979	1,42937E-05	5,70291E-09	2,0431E-10			
0,000619375	3,18306E-05	1,97151E-08	1,0132E-09			
0,003064218	4,33022E-05	1,32687E-07	1,8751E-09			
0,003193869	5,69475E-05	1,81883E-07	3,243E-09			
0,000222308	6,02957E-06	1,34042E-09	3,6356E-11			
0,000377575	1,59595E-05	6,02591E-09	2,5471E-10			
0,00050161	2,49153E-05	1,24978E-08	6,2077E-10			
0,000783229	4,01059E-05	3,14121E-08	1,6085E-09			
0,000242458	5,3078E-06	1,28692E-09	2,8173E-11			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000437588	1,41972E-05	6,21251E-09	2,0156E-10			
0,00060744	2,20301E-05	1,33819E-08	4,8532E-10			
0,00074777	2,95632E-05	2,21065E-08	8,7398E-10			
0,000373698	6,84393E-06	2,55756E-09	4,6839E-11			
0,000523519	2,05052E-05	1,07348E-08	4,2046E-10			
0,000648812	3,2322E-05	2,09709E-08	1,0447E-09			
0,001090396	4,72661E-05	5,15388E-08	2,2341E-09			
0,000346852	7,73886E-06	2,68424E-09	5,989E-11			
0,000547937	1,95151E-05	1,06931E-08	3,8084E-10			
0,000743518	2,90593E-05	2,16061E-08	8,4444E-10			
0,000894174	3,89828E-05	3,48574E-08	1,5197E-09			
0,000342523	5,61774E-06	1,9242E-09	3,1559E-11			
0,000615144	1,4537E-05	8,94233E-09	2,1132E-10			
0,000845176	2,321E-05	1,96166E-08	5,387E-10			
0,000344908	1,16429E-05	4,01572E-09	1,3556E-10			
0,000581453	2,37005E-05	1,37807E-08	5,6171E-10			
0,000783686	3,4825E-05	2,72919E-08	1,2128E-09			
0,000241235	8,56759E-06	2,06681E-09	7,3404E-11			
0,000358744	1,56771E-05	5,62406E-09	2,4577E-10			
0,00282347	2,06603E-05	5,83337E-08	4,2685E-10			
0,000202754	1,92403E-05	3,90104E-09	3,7019E-10			
0,00022188	3,68408E-05	8,17422E-09	1,3572E-09			
0,002264202	5,56108E-05	1,25914E-07	3,0926E-09			
0,000158752	5,18625E-06	8,23328E-10	2,6897E-11			
0,000213177	1,11694E-05	2,38106E-09	1,2476E-10			
0,002648936	2,24978E-05	5,95951E-08	5,0615E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=A$	$\sum(C_{inLös})^2=B$	$K_{D1}=A/B$
0,002614038	2,51925E-05	6,58541E-08	6,3466E-10			
0,000169858	3,6634E-06	6,22258E-10	1,3421E-11			
0,000220366	6,47562E-06	1,42701E-09	4,1934E-11			
0,000238023	8,42753E-06	2,00594E-09	7,1023E-11			
0,000310763	8,45812E-06	2,62848E-09	7,154E-11			
0,000190566	2,94734E-06	5,61662E-10	8,6868E-12			
0,000281027	4,6186E-06	1,29795E-09	2,1331E-11			
0,000345588	5,58623E-06	1,93053E-09	3,1206E-11			
0,000380465	6,0851E-06	2,31517E-09	3,7028E-11			
0,000146323	-1,57501E-06	-2,3046E-10	2,4807E-12			
0,000133683	1,2419E-06	1,66021E-10	1,5423E-12			
9,46554E-05	2,41489E-06	2,28583E-10	5,8317E-12			
0,000224041	-5,66937E-06	-1,27017E-09	3,2142E-11			
0,00012078	-6,8931E-07	-8,32547E-11	4,7515E-13			
0,000160081	4,26164E-08	6,82205E-12	1,8162E-15			
0,000193358	-7,44322E-07	-1,43921E-10	5,5401E-13			
0,000181281	-1,61868E-06	-2,93436E-10	2,6201E-12			
0,000282317	2,8853E-06	8,14569E-10	8,325E-12			
0,000448597	4,77461E-06	2,14188E-09	2,2797E-11			
0,000571748	6,46387E-06	3,6957E-09	4,1782E-11			
9,99057E-05	2,80652E-06	2,80387E-10	7,8766E-12			
0,000172335	4,0307E-06	6,94629E-10	1,6247E-11			
0,000209437	4,43644E-06	9,29154E-10	1,9682E-11			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

n-METHYLANILIN						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A**	**$\sum(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
9,46344E-05	3,62247E-06	3,4281E-10	1,3122E-11	2,03643E-06	1,38323E-07	**14,72**
0,000158087	7,05949E-06	1,11602E-09	4,9836E-11			
0,000237351	9,02527E-06	2,14216E-09	8,1456E-11			
0,000255168	1,23139E-05	3,14212E-09	1,5163E-10			
0,000136743	3,65585E-06	4,99912E-10	1,3365E-11			
0,000213049	8,02507E-06	1,70973E-09	6,4402E-11			
0,000258863	1,20926E-05	3,13033E-09	1,4623E-10			
0,000148825	3,23932E-06	4,82093E-10	1,0493E-11			
0,000251238	6,8527E-06	1,72166E-09	4,6959E-11			
0,000314852	1,06755E-05	3,36122E-09	1,1397E-10			
0,000929378	3,95003E-05	3,67107E-08	1,5603E-09			
0,001422516	8,16189E-05	1,16104E-07	6,6616E-09			
0,001849579	0,000112217	2,07554E-07	1,2593E-08			
0,001939467	0,000144161	2,79595E-07	2,0782E-08			
0,000882142	4,18942E-05	3,69566E-08	1,7551E-09			
0,001274038	8,73794E-05	1,11325E-07	7,6352E-09			
0,001611789	0,000120745	1,94616E-07	1,4579E-08			
0,001551801	0,000155532	2,41355E-07	2,419E-08			
0,001272407	3,46375E-05	4,4073E-08	1,1998E-09			
0,001848324	7,90005E-05	1,46019E-07	6,2411E-09			
0,002130979	0,000121568	2,59059E-07	1,4779E-08			
0,002156519	0,000160171	3,45411E-07	2,5655E-08			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000143015	5,88781E-06	8,42045E-10	3,4666E-11	6,45664E-06	4,39942E-07	**14,68**
0,000314715	1,60181E-05	5,04113E-09	2,5658E-10			
0,000503883	2,46472E-05	1,24193E-08	6,0748E-10			
0,000634955	3,48133E-05	2,21049E-08	1,212E-09			
0,001103752	4,70169E-05	5,1895E-08	2,2106E-09			
0,001745207	9,8387E-05	1,71706E-07	9,68E-09			
0,002320921	0,00013817	3,20683E-07	1,9091E-08			
0,002562274	0,000179544	4,6004E-07	3,2236E-08			
0,001060202	4,94565E-05	5,24339E-08	2,4459E-09			
0,001603967	0,000104498	1,67611E-07	1,092E-08			
0,002097265	0,000147489	3,09324E-07	2,1753E-08			
0,002193864	0,000191858	4,2091E-07	3,6809E-08			
5,98091E-05	1,45564E-05	8,70604E-10	2,1189E-10			
5,89807E-05	3,09778E-05	1,82709E-09	9,5963E-10			
0,000191428	4,06637E-05	7,78417E-09	1,6535E-09			
9,91382E-05	5,7229E-05	5,67358E-09	3,2752E-09			
0,001443678	4,23327E-05	6,11148E-08	1,7921E-09			
0,002161464	9,62558E-05	2,08054E-07	9,2652E-09			
0,002590594	0,000148931	3,8582E-07	2,218E-08			
0,002765157	0,000198302	5,48335E-07	3,9324E-08			
0,000207764	7,73354E-06	1,60675E-09	5,9808E-11			
0,00038995	1,89993E-05	7,40875E-09	3,6097E-10			
0,000542865	3,04482E-05	1,65293E-08	9,2709E-10			
0,000305383	1,02658E-05	3,13501E-09	1,0539E-10			
0,000535561	2,23494E-05	1,19695E-08	4,995E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000726407	3,52415E-05	2,55997E-08	1,242E-09			
4,62537E-05	1,35714E-06	6,27725E-11	1,8418E-12			
1,45984E-06	-1,89911E-06	-2,7724E-12	3,6066E-12			
-2,91811E-05	-6,59662E-06	1,92497E-10	4,3515E-11			
-0,000124619	-1,01854E-05	1,26929E-09	1,0374E-10			
0,000755003	3,19836E-05	2,41477E-08	1,023E-09			
0,001099825	6,48508E-05	7,13245E-08	4,2056E-09			
0,001378237	8,62629E-05	1,18891E-07	7,4413E-09			
0,00131666	0,000108778	1,43224E-07	1,1833E-08			
0,000704081	3,4332E-05	2,41725E-08	1,1787E-09			
0,000944108	7,02608E-05	6,63338E-08	4,9366E-09			
0,001126312	9,40009E-05	1,05874E-07	8,8362E-09			
0,000909738	0,000119207	1,08447E-07	1,421E-08			
-0,000226998	3,99675E-06	-9,07254E-10	1,5974E-11			
-0,00049514	3,58491E-06	-1,77503E-09	1,2852E-11			
-0,000633786	-3,25812E-06	2,06495E-09	1,0615E-11			
-0,001001418	-3,66423E-06	3,66942E-09	1,3427E-11			
0,001101136	2,69424E-05	2,96672E-08	7,2589E-10			
0,001535184	6,17452E-05	9,47903E-08	3,8125E-09			
0,001671363	9,4205E-05	1,57451E-07	8,8746E-09			
0,001547882	0,00012204	1,88903E-07	1,4894E-08			
6,57223E-05	-4,21834E-07	-2,77239E-11	1,7794E-13			
3,6148E-05	-2,94911E-06	-1,06605E-10	8,6973E-12			
-2,51397E-05	-6,26292E-06	1,57448E-10	3,9224E-11			
-7,7326E-06	-3,78718E-06	2,92848E-11	1,4343E-11			
-3,30845E-05	-8,64403E-06	2,85984E-10	7,4719E-11			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

DIAZINON						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A**	**$\sum(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
0,000133805	7,84202E-06	1,0493E-09	6,1497E-11	4,05609E-08	1,59967E-09	25,36
0,000313039	1,16592E-05	3,64978E-09	1,3594E-10			
0,000491279	1,4275E-05	7,01303E-09	2,0378E-10			
0,000141433	7,58906E-06	1,07334E-09	5,7594E-11			
0,00032129	1,12855E-05	3,62592E-09	1,2736E-10			
0,000488579	1,43498E-05	7,01099E-09	2,0592E-10			
0,000185352	9,0242E-06	1,67266E-09	8,1436E-11			
0,000333371	1,63602E-05	5,45404E-09	2,6766E-10			
0,00046757	2,14126E-05	1,00119E-08	4,585E-10			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=C**	**B+$\sum(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
0,000289916	1,46338E-05	4,24256E-09	2,1415E-10	1,79823E-07	7,88605E-09	22,80
0,000550572	2,39508E-05	1,31866E-08	5,7364E-10			
0,000810355	3,17553E-05	2,57331E-08	1,0084E-09			
0,000296863	1,44148E-05	4,27922E-09	2,0779E-10			
0,000556859	2,35028E-05	1,30878E-08	5,5238E-10			
0,000804821	3,20808E-05	2,58193E-08	1,0292E-09			
0,000343548	1,57949E-05	5,42629E-09	2,4948E-10			
0,00057659	2,89022E-05	1,66647E-08	8,3533E-10			
0,000790609	3,95056E-05	3,12335E-08	1,5607E-09			
-2,23063E-05	1,05029E-06	-2,3428E-11	1,1031E-12			
7,55065E-05	-6,32383E-07	-4,7749E-11	3,9991E-13			
0,000172203	-3,20526E-06	-5,51955E-10	1,0274E-11			
-1,3998E-05	7,63307E-07	-1,06848E-11	5,8264E-13			
8,57204E-05	-9,31803E-07	-7,98745E-11	8,6826E-13			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
0,000172336	-3,38121E-06	-5,82705E-10	1,1433E-11			
2,71567E-05	2,25352E-06	6,11984E-11	5,0784E-12			
9,01532E-05	3,81833E-06	3,44235E-10	1,458E-11			
0,00014453	3,31951E-06	4,79768E-10	1,1019E-11			
BISPHENOL A						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A	∑$(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
0,000110322	7,77796E-06	8,58079E-10	6,0497E-11	6,3111E-08	5,88597E-09	**10,72**
0,000176805	1,45571E-05	2,57377E-09	2,1191E-10			
0,000203454	2,03537E-05	4,14103E-09	4,1427E-10			
0,000230175	2,43327E-05	5,60078E-09	5,9208E-10			
0,000110529	7,77796E-06	8,5969E-10	6,0497E-11			
0,000157947	1,49337E-05	2,35873E-09	2,2301E-10			
0,000218389	1,95186E-05	4,26263E-09	3,8098E-10			
0,000200577	2,51351E-05	5,04152E-09	6,3177E-10			
8,90379E-05	8,2037E-06	7,30441E-10	6,7301E-11			
0,000143507	1,51302E-05	2,17129E-09	2,2892E-10			
0,000200046	1,98133E-05	3,96359E-09	3,9257E-10			
0,000119323	6,02587E-06	7,19026E-10	3,6311E-11			
0,000176589	1,21991E-05	2,15423E-09	1,4882E-10			
0,00022649	1,66039E-05	3,76062E-09	2,7569E-10			
0,000236869	2,09432E-05	4,96079E-09	4,3862E-10			
0,000120031	7,45951E-06	8,95371E-10	5,5644E-11			
0,000157805	1,52742E-05	2,41034E-09	2,333E-10			
0,000127012	7,24638E-06	9,20374E-10	5,251E-11			
0,000196597	1,97499E-05	3,88277E-09	3,9006E-10			
0,000137713	5,40637E-06	7,44528E-10	2,9229E-11			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=A$	$\sum(C_{inLös})^2=B$	$K_{D1}=A/B$
0,000184555	1,2127E-05	2,23811E-09	1,4706E-10			
0,000214463	1,72279E-05	3,69474E-09	2,968E-10			
0,000183135	2,27621E-05	4,16855E-09	5,1812E-10			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,00016313	1,03421E-05	1,68711E-09	1,0696E-10	3,36662E-07	3,73215E-08	**9,02**
0,000289299	2,09259E-05	6,05384E-09	4,3789E-10			
0,000375995	3,03775E-05	1,14218E-08	9,2279E-10			
0,000462847	3,80624E-05	1,76171E-08	1,4487E-09			
0,000518027	4,54726E-05	2,35561E-08	2,0678E-09			
0,000164171	1,03358E-05	1,69684E-09	1,0683E-10			
0,000270685	2,11736E-05	5,73138E-09	4,4832E-10			
0,00039099	2,94829E-05	1,15275E-08	8,6924E-10			
0,000433471	3,88411E-05	1,68365E-08	1,5086E-09			
0,000254072	1,26881E-05	3,22368E-09	1,6099E-10			
0,000375989	2,59097E-05	9,74176E-09	6,7131E-10			
0,000418807	3,87579E-05	1,62321E-08	1,5022E-09			
0,000463663	4,92138E-05	2,28186E-08	2,422E-09			
0,000481633	5,88709E-05	2,83542E-08	3,4658E-09			
0,000263186	1,24659E-05	3,28087E-09	1,554E-10			
0,000318291	2,74192E-05	8,72728E-09	7,5181E-10			
0,000499987	3,54499E-05	1,77245E-08	1,2567E-09			
0,000422765	5,0791E-05	2,14726E-08	2,5797E-09			
0,000139253	1,07482E-05	1,49671E-09	1,1552E-10			
0,000250622	2,14943E-05	5,38694E-09	4,62E-10			
0,000364388	3,00161E-05	1,09375E-08	9,0097E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000397884	3,97316E-05	1,58086E-08	1,5786E-09			
0,000153843	1,55857E-05	2,39775E-09	2,4292E-10			
0,000194709	3,04757E-05	5,9339E-09	9,2877E-10			
0,000329725	3,91786E-05	1,29182E-08	1,535E-09			
0,000209553	5,53793E-05	1,16049E-08	3,0669E-09			
5,75139E-05	5,21381E-06	2,99866E-10	2,7184E-11			
6,43118E-05	8,18824E-06	5,266E-10	6,7047E-11			
3,09124E-05	1,03299E-05	3,19321E-10	1,0671E-10			
-2,49768E-06	1,06031E-05	-2,64831E-11	1,1243E-10			
-6,5872E-05	1,05287E-05	-6,93545E-10	1,1085E-10			
5,68866E-05	5,22014E-06	2,96956E-10	2,725E-11			
4,52082E-05	8,69377E-06	3,9303E-10	7,5582E-11			
4,57874E-05	9,55423E-06	4,37464E-10	9,1283E-11			
-3,23168E-05	1,14291E-05	-3,69352E-10	1,3062E-10			
-1,40101E-05	2,23094E-06	-3,12557E-11	4,9771E-12			
-6,03802E-05	4,63878E-06	-2,8009E-10	2,1518E-11			
-0,000185469	7,27792E-06	-1,34983E-09	5,2968E-11			
-0,000308741	7,33632E-06	-2,26502E-09	5,3822E-11			
-0,000455755	6,48855E-06	-2,95719E-09	4,2101E-11			
-9,16307E-06	2,02681E-06	-1,85718E-11	4,108E-12			
-0,000120608	6,53933E-06	-7,88694E-10	4,2763E-11			
-0,000106794	4,04996E-06	-4,32511E-10	1,6402E-11			
-0,000351737	8,88505E-06	-3,1252E-09	7,8944E-11			
3,88233E-05	5,65922E-06	2,1971E-10	3,2027E-11			
3,63926E-05	8,7661E-06	3,19021E-10	7,6845E-11			
3,57048E-05	9,61052E-06	3,43142E-10	9,2362E-11			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
-4,64476E-05	1,17176E-05	-5,44254E-10	1,373E-10			
-0,000102216	5,15879E-06	-5,27313E-10	2,6613E-11			
-0,000221532	9,16626E-06	-2,03062E-09	8,402E-11			
-0,000247163	6,99931E-06	-1,72997E-09	4,899E-11			
-0,000528224	1,25377E-05	-6,62273E-09	1,5719E-10			
O-KRESOL						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
9,20269E-05	2,12441E-05	1,95503E-09	4,5131E-10	1,34478E-07	2,1974E-08	**6,12**
0,000223313	3,39906E-05	7,59054E-09	1,1554E-09			
9,93325E-05	2,11497E-05	2,10085E-09	4,4731E-10			
0,000220226	3,4919E-05	7,69009E-09	1,2193E-09			
0,00015066	1,99852E-05	3,01096E-09	3,9941E-10			
0,000272475	3,2889E-05	8,96144E-09	1,0817E-09			
9,41962E-05	2,11704E-05	1,99417E-09	4,4818E-10			
0,000169884	3,58165E-05	6,08466E-09	1,2828E-09			
0,000263332	4,53365E-05	1,19386E-08	2,0554E-09			
0,000124503	2,03049E-05	2,52803E-09	4,1229E-10			
0,000186113	3,63491E-05	6,76505E-09	1,3213E-09			
0,000210372	4,85986E-05	1,02238E-08	2,3618E-09			
0,000236776	5,70535E-05	1,35089E-08	3,2551E-09			
0,00022718	1,75088E-05	3,97765E-09	3,0656E-10			
0,000316168	3,22216E-05	1,01874E-08	1,0382E-09			
0,000369863	4,36056E-05	1,61281E-08	1,9014E-09			
0,00037239	5,32588E-05	1,9833E-08	2,8365E-09			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000193861	2,72879E-05	5,29008E-09	7,4463E-10	7,38789E-07	8,9358E-08	**8,27**
0,000428134	4,68914E-05	2,00758E-08	2,1988E-09			
0,000736152	6,02032E-05	4,43187E-08	3,6244E-09			
0,000201458	2,71382E-05	5,4672E-09	7,3648E-10			
0,000427345	4,80197E-05	2,0521E-08	2,3059E-09			
0,000730531	6,18857E-05	4,52095E-08	3,8298E-09			
0,000235683	2,4621E-05	5,80274E-09	6,0619E-10			
0,000461658	4,42343E-05	2,04211E-08	1,9567E-09			
0,00075524	5,76908E-05	4,35704E-08	3,3282E-09			
0,000269975	2,97283E-05	8,02592E-09	8,8377E-10			
0,000471786	5,2758E-05	2,48905E-08	2,7834E-09			
0,000691172	7,08966E-05	4,90018E-08	5,0263E-09			
0,000301891	2,88194E-05	8,70033E-09	8,3056E-10			
0,000491506	5,35966E-05	2,63431E-08	2,8726E-09			
0,000643943	7,45373E-05	4,79978E-08	5,5558E-09			
0,0008011	9,16922E-05	7,34547E-08	8,4075E-09			
0,00038994	2,46603E-05	9,61603E-09	6,0813E-10			
0,000606097	4,75927E-05	2,88458E-08	2,2651E-09			
0,000786805	6,71748E-05	5,28535E-08	4,5125E-09			
0,000918198	8,47916E-05	7,78555E-08	7,1896E-09			
-9,80741E-06	1,52003E-05	-1,49075E-10	2,3105E-10			
1,84916E-05	2,10898E-05	3,89984E-10	4,4478E-10			
0,000120971	2,03671E-05	2,46383E-09	4,1482E-10			
-2,79288E-06	1,51612E-05	-4,23434E-11	2,2986E-10			
1,31075E-05	2,18183E-05	2,85983E-10	4,7604E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
0,00010732	2,15171E-05	2,30922E-09	4,6299E-10			
6,5636E-05	1,53495E-05	1,00748E-09	2,3561E-10			
8,32921E-05	2,15438E-05	1,79443E-09	4,6413E-10			
0,000169625	2,16206E-05	3,66739E-09	4,6745E-10			
-8,1583E-05	1,26124E-05	-1,02896E-09	1,5907E-10			
-0,000132017	1,88751E-05	-2,49183E-09	3,5627E-10			
-0,000164507	1,97764E-05	-3,25336E-09	3,9111E-10			
-5,28849E-05	1,17904E-05	-6,23534E-10	1,3901E-10			
-0,00011928	1,91016E-05	-2,27843E-09	3,6487E-10			
2-NITROPHENOL						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES}\cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
4,53501E-05	8,70272E-06	3,94669E-10	7,5737E-11	1,89741E-08	5,99105E-09	**3,17**
5,32958E-05	1,59485E-05	8,4999E-10	2,5436E-10			
5,68118E-05	2,42516E-05	1,37778E-09	5,8814E-10			
4,93845E-05	1,10492E-05	5,4566E-10	1,2209E-10			
7,58085E-05	1,9378E-05	1,46902E-09	3,7551E-10			
7,89221E-05	2,56569E-05	2,0249E-09	6,5828E-10			
9,96644E-05	2,9499E-05	2,94E-09	8,7019E-10			
4,92198E-05	7,98071E-06	3,92809E-10	6,3692E-11			
7,71036E-05	1,39115E-05	1,07262E-09	1,9353E-10			
0,000106251	1,81919E-05	1,93291E-09	3,3095E-10			
1,82847E-05	9,16686E-06	1,67613E-10	8,4031E-11			
3,12213E-05	1,58067E-05	4,93507E-10	2,4985E-10			
7,16322E-05	1,9507E-05	1,39733E-09	3,8052E-10			
7,5992E-05	2,29365E-05	1,74299E-09	5,2608E-10			
2,97923E-05	8,56537E-06	2,55182E-10	7,3366E-11			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=A$	$\sum(C_{inLös})^2=B$	$K_{D1}=A/B$
2,97951E-05	1,5161E-05	4,51724E-10	2,2986E-10			
2,2271E-05	2,0145E-05	4,4865E-10	4,0582E-10			
4,50648E-05	2,25624E-05	1,01677E-09	5,0906E-10			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
7,91104E-05	1,03192E-05	8,16357E-10	1,0649E-10	2,43306E-07	3,2276E-08	**7,54**
0,000189762	2,45697E-05	4,6624E-09	6,0367E-10			
0,000279325	3,68042E-05	1,02803E-08	1,3545E-09			
0,000398948	4,65494E-05	1,85708E-08	2,1668E-09			
1,15899E-05	7,08621E-06	8,21284E-11	5,0214E-11			
-8,31705E-05	7,32736E-06	-6,0942E-10	5,369E-11			
-0,000198815	6,10344E-06	-1,21346E-09	3,7252E-11			
-0,000285324	1,95378E-06	-5,5746E-10	3,8173E-12			
8,59686E-05	1,26883E-05	1,09079E-09	1,6099E-10			
0,000221664	2,79975E-05	6,20604E-09	7,8386E-10			
0,000332144	4,12086E-05	1,36872E-08	1,6981E-09			
0,000463986	5,20087E-05	2,41313E-08	2,7049E-09			
0,000586653	6,19418E-05	3,63384E-08	3,8368E-09			
1,28003E-05	9,41017E-06	1,20453E-10	8,8551E-11			
-7,00473E-05	1,07586E-05	-7,53612E-10	1,1575E-10			
-0,0001743	1,01052E-05	-1,76134E-09	1,0212E-10			
-0,000264657	6,98931E-06	-1,84977E-09	4,885E-11			
-0,000358464	2,52273E-06	-9,04308E-10	6,3642E-12			
8,21346E-05	9,51204E-06	7,81267E-10	9,0479E-11			
-6,26097E-05	4,46658E-06	-2,79651E-10	1,995E-11			
1,39786E-05	1,39786E-05	1,95402E-10	1,954E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
5,04546E-06	5,04546E-06	2,54567E-11	2,5457E-11			
8,61336E-05	9,48598E-06	8,17061E-10	8,9984E-11			
0,000220626	2,17705E-05	4,80314E-09	4,7396E-10			
0,000361126	3,244E-05	1,17149E-08	1,0524E-09			
0,000502209	4,11022E-05	2,06419E-08	1,6894E-09			
5,16298E-05	1,07138E-05	5,53149E-10	1,1478E-10			
0,000168549	2,437E-05	4,10753E-09	5,939E-10			
0,000319106	3,49479E-05	1,11521E-08	1,2214E-09			
0,000427507	4,52242E-05	1,93336E-08	2,0452E-09			
1,2306E-05	6,47544E-06	7,96865E-11	4,1931E-11			
-6,64186E-05	6,05237E-06	-4,0199E-10	3,6631E-11			
-0,000148624	3,94376E-06	-5,86137E-10	1,5553E-11			
-0,000221865	5,93456E-07	-1,31667E-10	3,5219E-13			
-1,50605E-05	7,61996E-06	-1,1476E-10	5,8064E-11			
-0,000106106	7,24343E-06	-7,68572E-10	5,2467E-11			
-0,000175841	4,06607E-06	-7,14982E-10	1,6533E-11			
-0,000275523	6,48791E-07	-1,78757E-10	4,2093E-13			
0,000108959	1,13422E-05	1,23583E-09	1,2865E-10			
0,000239092	2,53724E-05	6,06635E-09	6,4376E-10			
0,000367887	3,79008E-05	1,39432E-08	1,4365E-09			
0,000520184	4,74341E-05	2,46744E-08	2,25E-09			
-4,9374E-05	5,78853E-06	-2,85803E-10	3,3507E-11			
-0,000179502	4,94962E-06	-8,88467E-10	2,4499E-11			
-0,000323345	2,38929E-06	-7,72563E-10	5,7087E-12			
-0,000430054	-2,30917E-06	9,93067E-10	5,3323E-12			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

BROMOXYNIL						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
2,95079E-05	5,92796E-06	1,74922E-10	3,5141E-11	3,53083E-08	3,80792E-09	**9,27**
8,36708E-05	9,22739E-06	7,72063E-10	8,5145E-11			
0,000143851	1,1185E-05	1,60898E-09	1,2511E-10			
0,000188986	1,29887E-05	2,45468E-09	1,6871E-10			
5,55287E-05	4,46522E-06	2,47948E-10	1,9938E-11			
0,000112249	7,78664E-06	8,74039E-10	6,0632E-11			
0,000180691	9,7333E-06	1,75872E-09	9,4737E-11			
5,23504E-05	5,03712E-06	2,63695E-10	2,5373E-11			
8,67605E-05	9,1284E-06	7,91985E-10	8,3328E-11			
0,000114596	1,20869E-05	1,38511E-09	1,4609E-10			
0,000113616	1,50124E-05	1,70564E-09	2,2537E-10			
4,41897E-05	5,46604E-06	2,41543E-10	2,9878E-11			
4,70473E-05	1,04812E-05	4,93111E-10	1,0985E-10			
4,65579E-05	1,41105E-05	6,56956E-10	1,9911E-10			
6,19228E-05	4,81716E-06	2,98292E-10	2,3205E-11			
0,00010412	8,68848E-06	9,04648E-10	7,549E-11			
0,000132028	1,20429E-05	1,58999E-09	1,4503E-10			
0,000151541	1,44735E-05	2,19333E-09	2,0948E-10			
2,48792E-05	6,08796E-06	1,51464E-10	3,7063E-11			
7,33829E-05	9,52549E-06	6,99009E-10	9,0735E-11			
0,000128645	1,15495E-05	1,48578E-09	1,3339E-10			
0,000162581	1,36056E-05	2,212E-09	1,8511E-10			
4,9122E-05	4,65834E-06	2,28827E-10	2,17E-11			
0,000101189	8,06374E-06	8,15965E-10	6,5024E-11			
0,000164881	1,00716E-05	1,66062E-09	1,0144E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=A	$\sum(C_{inLös})^2$=B	K_{D1}=A/B
4,7232E-05	5,18842E-06	2,45059E-10	2,692E-11			
7,38714E-05	9,46124E-06	6,98915E-10	8,9515E-11			
9,23579E-05	1,25936E-05	1,16312E-09	1,586E-10			
9,08662E-05	1,53886E-05	1,3983E-09	2,3681E-10			
4,1046E-05	5,57394E-06	2,28788E-10	3,1069E-11			
4,3047E-05	1,05857E-05	4,55681E-10	1,1206E-10			
6,1418E-05	1,35252E-05	8,30693E-10	1,8293E-10			
5,66549E-05	4,99566E-06	2,83029E-10	2,4957E-11			
9,36025E-05	8,99541E-06	8,41993E-10	8,0917E-11			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})$=C	B+$\sum(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
5,68432E-05	7,24245E-06	4,11684E-10	5,2453E-11	2,07127E-07	1,82263E-08	**11,36**
0,000165364	1,41616E-05	2,34181E-09	2,0055E-10			
0,000280278	1,9563E-05	5,48309E-09	3,8271E-10			
0,000379771	2,49449E-05	9,47337E-09	6,2225E-10			
8,4767E-05	5,67297E-06	4,80881E-10	3,2183E-11			
0,000196332	1,23158E-05	2,41798E-09	1,5168E-10			
0,000319479	1,74232E-05	5,56635E-09	3,0357E-10			
0,000427973	2,25523E-05	9,65179E-09	5,0861E-10			
6,21291E-05	7,74517E-06	4,81201E-10	5,9988E-11			
0,000170657	1,50921E-05	2,57557E-09	2,2777E-10			
0,000285764	2,08331E-05	5,95335E-09	4,3402E-10			
0,000379497	2,67908E-05	1,0167E-08	7,1774E-10			
8,94993E-05	6,20185E-06	5,55061E-10	3,8463E-11			
0,000201501	1,31841E-05	2,6566E-09	1,7382E-10			
0,000324863	1,85963E-05	6,04125E-09	3,4582E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000426993	2,42642E-05	1,03607E-08	5,8875E-10			
9,74313E-05	7,13584E-06	6,95255E-10	5,092E-11			
0,000188859	1,45127E-05	2,74085E-09	2,1062E-10			
0,000272893	2,06438E-05	5,63355E-09	4,2617E-10			
0,000328735	2,66685E-05	8,76687E-09	7,1121E-10			
7,05604E-05	6,72394E-06	4,74444E-10	4,5211E-11			
0,000123549	1,52322E-05	1,88192E-09	2,3202E-10			
0,000173485	2,2383E-05	3,88311E-09	5,01E-10			
0,000216282	2,87025E-05	6,20783E-09	8,2383E-10			
8,82004E-05	6,05718E-06	5,34246E-10	3,6689E-11			
0,000180771	1,34863E-05	2,43794E-09	1,8188E-10			
0,000260857	2,04659E-05	5,33867E-09	4,1885E-10			
0,000330279	2,64399E-05	8,73253E-09	6,9907E-10			
0,000103617	7,6213E-06	7,89697E-10	5,8084E-11			
0,000193551	1,54545E-05	2,99124E-09	2,3884E-10			
0,000274253	2,20417E-05	6,04502E-09	4,8584E-10			
0,000335992	2,82337E-05	9,48629E-09	7,9714E-10			
7,77846E-05	7,18768E-06	5,59091E-10	5,1663E-11			
0,000135261	1,59947E-05	2,16346E-09	2,5583E-10			
0,000209343	2,27778E-05	4,76839E-09	5,1883E-10			
0,000272913	2,9094E-05	7,94011E-09	8,4646E-10			
9,34508E-05	6,59211E-06	6,16038E-10	4,3456E-11			
0,00018522	1,44328E-05	2,67324E-09	2,0831E-10			
0,000267353	2,17501E-05	5,81497E-09	4,7307E-10			
0,000342931	2,79255E-05	9,57651E-09	7,7983E-10			
2,17256E-06	4,61348E-06	1,0023E-11	2,1284E-11			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
1,97782E-06	4,29321E-06	8,49117E-12	1,8432E-11			
7,42342E-06	2,80704E-06	2,08378E-11	7,8795E-12			
-1,80008E-06	1,03252E-06	-1,85862E-12	1,0661E-12			
2,62904E-05	3,25747E-06	8,56401E-11	1,0611E-11			
2,81653E-05	3,25749E-06	9,17481E-11	1,0611E-11			
4,19028E-05	2,0434E-06	8,56243E-11	4,1755E-12			
4,06657E-05	5,8763E-07	2,38964E-11	3,4531E-13			
-1,23707E-05	4,43076E-06	-5,48117E-11	1,9632E-11			
-2,38915E-05	3,95891E-06	-9,45841E-11	1,5673E-11			
-2,84741E-05	2,26581E-06	-6,45168E-11	5,1339E-12			
-5,43359E-05	4,2035E-07	-2,28401E-11	1,7669E-13			
8,74479E-06	3,11482E-06	2,72384E-11	9,7021E-12			
8,78126E-07	2,94341E-06	2,58469E-12	8,6637E-12			
4,89841E-06	1,54701E-06	7,5779E-12	2,3932E-12			
-1,34295E-05	5,55024E-08	-7,45368E-13	3,0805E-15			
7,26946E-06	2,93839E-06	2,13605E-11	8,6342E-12			
-1,53376E-05	3,74407E-06	-5,7425E-11	1,4018E-11			
-4,37001E-05	3,52993E-06	-1,54258E-10	1,246E-11			
-0,000101504	3,35629E-06	-3,40675E-10	1,1265E-11			
1,7819E-05	4,20814E-06	7,49847E-11	1,7708E-11			
-2,94542E-05	5,73017E-06	-1,68778E-10	3,2835E-11			
-8,0369E-05	5,83805E-06	-4,69198E-10	3,4083E-11			
-0,000142865	5,2816E-06	-7,54553E-10	2,7895E-11			
3,56452E-05	3,57713E-06	1,27507E-10	1,2796E-11			
2,74697E-05	3,89063E-06	1,06875E-10	1,5137E-11			
3,19862E-06	3,61987E-06	1,15786E-11	1,3103E-11			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C**	**B+∑$(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
-9,15318E-06	2,75554E-06	-2,52219E-11	7,593E-12	2,07127E-07	1,82263E-08	**11,36**
-4,58084E-05	3,46797E-06	-1,58862E-10	1,2027E-11			
-8,95374E-05	3,14539E-06	-2,8163E-10	9,8935E-12			
-0,000154259	2,54346E-06	-3,92352E-10	6,4692E-12			
4,30744E-06	3,9602E-06	1,70583E-11	1,5683E-11			
-4,91673E-05	5,17662E-06	-2,54521E-10	2,6797E-11			
-8,65074E-05	4,27265E-06	-3,69616E-10	1,8256E-11			
-0,000139739	3,06459E-06	-4,28243E-10	9,3917E-12			
1,9859E-05	3,39922E-06	6,75049E-11	1,1555E-11			
1,98525E-06	3,55801E-06	7,06353E-12	1,2659E-11			
-3,10914E-05	2,98725E-06	-9,2878E-11	8,9237E-12			
-6,57837E-05	1,40597E-06	-9,24897E-11	1,9767E-12			
4-tert-BUTYLPHENOL						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A**	**∑$(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
0,000108948	1,98123E-05	2,15851E-09	3,9253E-10	1,29329E-07	3,09334E-08	**4,18**
0,000117611	3,61563E-05	4,25239E-09	1,3073E-09			
0,000141	4,71896E-05	6,65373E-09	2,2269E-09			
0,000127716	1,88368E-05	2,40577E-09	3,5483E-10			
0,000174918	3,40971E-05	5,96421E-09	1,1626E-09			
0,000211263	4,48486E-05	9,47484E-09	2,0114E-09			
0,000273721	5,11348E-05	1,39967E-08	2,6148E-09			
0,000120142	1,52169E-05	1,82819E-09	2,3155E-10			
0,000122667	2,09611E-05	2,57125E-09	4,3937E-10			
7,82464E-05	2,04843E-05	1,60282E-09	4,196E-10			
0,000108398	5,57085E-05	6,03867E-09	3,1034E-09			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=A$	$\sum(C_{inLös})^2=B$	$K_{D1}=A/B$
2,57315E-05	1,73195E-05	4,45656E-10	2,9996E-10			
2,20067E-05	1,00579E-05	2,2134E-10	1,0116E-10			
2,58128E-05	1,7623E-05	4,54897E-10	3,1057E-10			
0,000101191	1,17703E-05	1,19105E-09	1,3854E-10			
0,000166579	2,25002E-05	3,74804E-09	5,0626E-10			
0,000227615	2,86346E-05	6,51767E-09	8,1994E-10			
0,000268247	3,40971E-05	9,14644E-09	1,1626E-09			
6,91564E-05	1,35044E-05	9,33918E-10	1,8237E-10			
0,000136207	2,37791E-05	3,23888E-09	5,6544E-10			
0,000238063	2,84612E-05	6,77557E-09	8,1004E-10			
0,00030448	3,34034E-05	1,01707E-08	1,1158E-09			
0,000158332	1,83904E-05	2,91179E-09	3,382E-10			
4,25995E-05	3,87582E-05	1,65108E-09	1,5022E-09			
0,000169343	1,74016E-05	2,94684E-09	3,0282E-10			
0,000161081	3,5001E-05	5,63798E-09	1,2251E-09			
8,53229E-05	4,92387E-05	4,20119E-09	2,4244E-09			
5,3947E-05	5,73463E-05	3,09366E-09	3,2886E-09			
0,000108139	7,01997E-06	7,59134E-10	4,928E-11			
6,07691E-05	1,7105E-05	1,03946E-09	2,9258E-10			
9,97053E-05	1,97746E-05	1,97163E-09	3,9103E-10			
0,00019095	8,4734E-06	1,618E-09	7,1799E-11			
4,74468E-05	1,42377E-05	6,75533E-10	2,0271E-10			
0,000127231	2,38284E-05	3,0317E-09	5,6779E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000176257	2,24995E-05	3,96569E-09	5,0623E-10	5,71977E-07	1,38705E-07	**4,12**
0,000308483	4,589E-05	1,41563E-08	2,1059E-09			
0,000456822	6,40529E-05	2,92608E-08	4,1028E-09			
0,000182306	2,13988E-05	3,90113E-09	4,5791E-10			
0,000336653	4,3831E-05	1,47559E-08	1,9212E-09			
0,000481373	6,1685E-05	2,96935E-08	3,805E-09			
0,000649311	7,50819E-05	4,87515E-08	5,6373E-09			
0,000166504	8,4472E-06	1,40649E-09	7,1355E-11			
0,000269388	2,43282E-05	6,55374E-09	5,9186E-10			
0,000377633	3,72758E-05	1,40766E-08	1,3895E-09			
0,000179141	5,8805E-05	1,05344E-08	3,458E-09			
0,000137524	2,31994E-05	3,19046E-09	5,3821E-10			
0,000237135	4,80934E-05	1,14046E-08	2,313E-09			
0,00034503	6,6792E-05	2,30453E-08	4,4612E-09			
0,000507333	8,02176E-05	4,0697E-08	6,4349E-09			
0,00035823	2,48952E-05	8,91821E-09	6,1977E-10			
0,000405741	5,46357E-05	2,2168E-08	2,9851E-09			
0,000451921	7,84263E-05	3,54425E-08	6,1507E-09			
0,000334183	2,37648E-05	7,94181E-09	5,6477E-10			
0,000468227	5,08328E-05	2,38013E-08	2,584E-09			
0,000535911	7,44264E-05	3,98859E-08	5,5393E-09			
0,000644177	9,19778E-05	5,92501E-08	8,4599E-09			
0,000263294	1,27859E-05	3,36646E-09	1,6348E-10			
0,000356686	3,24813E-05	1,15856E-08	1,055E-09			
0,000445758	4,91283E-05	2,18993E-08	2,4136E-09			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000555496	6,2567E-05	3,47557E-08	3,9146E-09			
0,000274069	2,62958E-05	7,20688E-09	6,9147E-10			
0,000254146	5,89155E-05	1,49731E-08	3,471E-09			
0,000211573	8,45616E-05	1,7891E-08	7,1507E-09			
0,000251256	0,000102592	2,57768E-08	1,0525E-08			
4,16393E-05	1,71251E-05	7,13077E-10	2,9327E-10			
-7,32608E-05	2,64226E-05	-1,93574E-09	6,9815E-10			
-0,000174822	3,03264E-05	-5,30173E-09	9,1969E-10			
7,3126E-05	1,62749E-05	1,19012E-09	2,6487E-10			
1,31834E-05	2,43631E-05	3,21188E-10	5,9356E-10			
-5,88469E-05	2,80121E-05	-1,64843E-09	7,8468E-10			
-0,000101868	2,71876E-05	-2,76956E-09	7,3917E-10			
7,8415E-05	4,60203E-06	3,60868E-10	2,1179E-11			
-2,91036E-05	6,10551E-06	-1,77693E-10	3,7277E-11			
-0,000132299	4,64651E-06	-6,14726E-10	2,159E-11			
-0,00054303	1,18602E-05	-6,44046E-09	1,4066E-10			
1,89692E-05	1,77691E-05	3,37066E-10	3,1574E-10			
-0,000108143	2,80343E-05	-3,03172E-09	7,8592E-10			
-0,000225919	3,23128E-05	-7,30007E-09	1,0441E-09			
-0,000290537	3,11994E-05	-9,06458E-09	9,734E-10			
-4,15656E-05	1,18855E-05	-4,94028E-10	1,4126E-10			
-0,000320542	2,28806E-05	-7,33419E-09	5,2352E-10			
-0,000604935	2,77631E-05	-1,67949E-08	7,7079E-10			
4,50255E-06	1,10384E-05	4,97009E-11	1,2185E-10			
-0,000146065	1,91692E-05	-2,79995E-09	3,6746E-10			
-0,000365265	2,4051E-05	-8,78498E-09	5,7845E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	C_{aufES}·$C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	A+∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=C	B+∑$(C_{inLös})^2$=D	K_D=C/D
-0,000536284	2,27147E-05	-1,21815E-08	5,1596E-10			
-4,70156E-05	1,254E-06	-5,89578E-11	1,5725E-12			
-0,000235148	1,72875E-06	-4,06511E-10	2,9886E-12			
-0,000428659	-8,78379E-07	3,76525E-10	7,7155E-13			
-0,000597926	-6,40725E-06	3,83106E-09	4,1053E-11			
-7,4659E-05	1,32533E-05	-9,8948E-10	1,7565E-10			
-0,000395294	2,65107E-05	-1,04795E-08	7,0282E-10			
-0,00073663	3,30971E-05	-2,43803E-08	1,0954E-09			
-0,000997604	3,1875E-05	-3,17986E-08	1,016E-09			
4-CHLOROPHENOL						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**∑(C_{aufES}·$C_{inLös.}$)=A**	**∑$(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
9,58171E-05	2,0254E-05	1,94068E-09	4,1023E-10	8,11248E-08	2,60245E-08	**3,12**
0,000172143	3,42322E-05	5,89283E-09	1,1718E-09			
3,98571E-05	7,7623E-06	3,09383E-10	6,0253E-11			
5,66706E-05	1,36178E-05	7,7173E-10	1,8544E-10			
9,73251E-05	1,6981E-05	1,65267E-09	2,8835E-10			
7,43589E-05	2,13801E-05	1,5898E-09	4,5711E-10			
7,94882E-05	1,68849E-05	1,34215E-09	2,851E-10			
0,00013325	2,91514E-05	3,88443E-09	8,498E-10			
0,000211734	3,65834E-05	7,74595E-09	1,3383E-09			
3,77461E-05	6,89148E-06	2,60127E-10	4,7492E-11			
8,04778E-06	1,10654E-05	8,90519E-11	1,2244E-10			
8,81695E-05	2,05133E-05	1,80864E-09	4,2079E-10			
0,000147076	4,60021E-05	6,76579E-09	2,1162E-09			
3,96627E-05	7,76885E-06	3,08134E-10	6,0355E-11			
0,00013367	1,52758E-05	2,04192E-09	2,3335E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=A$	$\sum(C_{inLös})^2=B$	$K_{D1}=A/B$
0,000103115	3,11627E-05	3,21336E-09	9,7111E-10			
7,66969E-05	5,62151E-05	4,31152E-09	3,1601E-09			
0,000161996	7,0007E-05	1,13409E-08	4,901E-09			
0,000237255	0,000078125	1,85356E-08	6,1035E-09			
6,31295E-05	1,74406E-05	1,10102E-09	3,0418E-10			
8,56586E-05	3,05779E-05	2,61926E-09	9,3501E-10			
8,99272E-05	4,00314E-05	3,59991E-09	1,6025E-09			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000145392	2,27045E-05	3,30106E-09	5,1549E-10	2,36671E-06	3,99107E-07	**5,93**
0,000327905	4,37239E-05	1,43373E-08	1,9118E-09			
0,000610618	5,73122E-05	3,49959E-08	3,2847E-09			
0,002214393	2,25199E-05	4,9868E-08	5,0715E-10			
8,33449E-05	9,89252E-06	8,2449E-10	9,7862E-11			
0,000201532	2,26112E-05	4,55687E-09	5,1127E-10			
0,000347269	3,28837E-05	1,14195E-08	1,0813E-09			
0,000429406	4,42688E-05	1,90093E-08	1,9597E-09			
0,000240706	2,64538E-05	6,3676E-09	6,998E-10			
0,000332429	5,3558E-05	1,78042E-08	2,8685E-09			
0,000575234	7,02685E-05	4,04208E-08	4,9377E-09			
0,000525024	9,41585E-05	4,94355E-08	8,8658E-09			
0,000189091	1,34732E-05	2,54765E-09	1,8153E-10			
0,000292763	2,99939E-05	8,7811E-09	8,9963E-10			
0,000554046	3,91122E-05	2,167E-08	1,5298E-09			
0,000535065	5,77187E-05	3,08833E-08	3,3314E-09			
0,000259961	3,7273E-05	9,68951E-09	1,3893E-09			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000372287	7,136E-05	2,65664E-08	5,0923E-09			
0,000598944	9,43101E-05	5,64865E-08	8,8944E-09			
0,0004337	0,000125714	5,45222E-08	1,5804E-08			
0,000410006	8,50862E-05	3,48859E-08	7,2397E-09			
0,000576225	0,00015299	8,81565E-08	2,3406E-08			
0,000925027	0,00019877	1,83868E-07	3,9509E-08			
0,001042011	0,000239916	2,49995E-07	5,7559E-08			
0,000153743	2,10368E-05	3,23427E-09	4,4255E-10			
0,001149865	9,6161E-05	1,10572E-07	9,2469E-09			
0,00216127	0,000164712	3,55988E-07	2,713E-08			
0,000240438	2,50938E-05	6,0335E-09	6,297E-10			
0,001236466	0,000103117	1,275E-07	1,0633E-08			
0,002204297	0,000175677	3,87244E-07	3,0862E-08			
4,62421E-05	1,78036E-05	8,23275E-10	3,1697E-10			
1,63806E-05	2,47405E-05	4,05263E-10	6,1209E-10			
8,3583E-05	2,40943E-05	2,01387E-09	5,8054E-10			
0,001537843	-2,25199E-05	-3,46321E-08	5,0715E-10			
-3,63063E-06	5,63208E-06	-2,0448E-11	3,172E-11			
-8,81902E-05	4,62437E-06	-4,07825E-10	2,1385E-11			
-0,000152619	1,07819E-06	-1,64553E-10	1,1625E-12			
-0,000280688	-1,50857E-06	4,23439E-10	2,2758E-12			
-6,43675E-05	1,45727E-05	-9,38011E-10	2,1236E-10			
-0,000245728	2,34322E-05	-5,75795E-09	5,4907E-10			
-0,000281082	2,17357E-05	-6,10951E-09	4,7244E-10			
-0,000610194	2,75245E-05	-1,67953E-08	7,576E-10			
-0,000109765	2,06454E-06	-2,26615E-10	4,2623E-12			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
-0,000271962	3,8324E-07	-1,04227E-10	1,4687E-13			
-0,000286706	-8,56055E-06	2,45436E-09	7,3283E-11			
-0,000581352	-8,31227E-06	4,83236E-09	6,9094E-11			
-5,37296E-05	2,50524E-05	-1,34606E-09	6,2762E-10			
-0,000218893	4,10701E-05	-8,98996E-09	1,6868E-09			
-0,000274951	4,57039E-05	-1,25663E-08	2,0888E-09			
-0,000723653	5,88181E-05	-4,25639E-08	3,4596E-09			
6,45042E-05	7,11638E-05	4,59036E-09	5,0643E-09			
-5,6773E-05	0,00011988	-6,80597E-09	1,4371E-08			
-8,08026E-06	0,000146028	-1,17994E-09	2,1324E-08			
-0,00019071	0,00016808	-3,20545E-08	2,8251E-08			
5,23324E-06	1,27329E-05	6,66344E-11	1,6213E-10			
-0,000883365	-3,78582E-05	3,34426E-08	1,4332E-09			
-0,001737802	-9,15457E-05	1,59088E-07	8,3806E-09			
-0,000114179	9,78752E-06	-1,11753E-09	9,5795E-11			
-0,001065149	-4,19611E-05	4,46948E-08	1,7607E-09			
-0,002024443	-9,56141E-05	1,93565E-07	9,1421E-09			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

PHENOL						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**$\sum(C_{aufES}$·$C_{inLös.})$=A**	**$\sum(C_{inLös})^2$=B**	**K_{D1}=A/B**
5,80913E-05	1,80773E-05	1,05013E-09	3,2679E-10	7,78972E-08	1,41334E-08	5,51
0,000146063	2,95924E-05	4,32234E-09	8,7571E-10			
0,000288204	3,51702E-05	1,01362E-08	1,2369E-09			
5,98954E-05	1,83741E-05	1,10053E-09	3,3761E-10			
0,000144435	2,97017E-05	4,28997E-09	8,8219E-10			
0,000267634	3,60452E-05	9,6469E-09	1,2993E-09			
5,88197E-05	1,80526E-05	1,06185E-09	3,259E-10			
0,000139173	2,98316E-05	4,15176E-09	8,8993E-10			
0,000249998	3,63613E-05	9,09025E-09	1,3221E-09			
0,000348793	4,12266E-05	1,43795E-08	1,6996E-09			
6,73667E-05	1,81166E-05	1,22046E-09	3,2821E-10			
0,000118162	3,06638E-05	3,62331E-09	9,4027E-10			
0,000146765	3,98182E-05	5,84393E-09	1,5855E-09			
0,000174833	4,56437E-05	7,98002E-09	2,0833E-09			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	**$C_{inLös.}$(g/g)**	**C_{aufES}·$C_{inLös.}$**	**$(C_{inLös})^2$**	**A+$\sum(C_{aufES}$·$C_{inLös.})$=C**	**B+$\sum(C_{inLös})^2$=D**	**K_D=C/D**
0,000153966	2,34124E-05	3,6047E-09	5,4814E-10	4,19394E-07	5,51333E-08	**7,61**
0,000309629	3,92007E-05	1,21377E-08	1,5367E-09			
0,00051735	4,86971E-05	2,51935E-08	2,3714E-09			
0,000753652	5,57257E-05	4,19978E-08	3,1054E-09			
0,000155976	2,38172E-05	3,7149E-09	5,6726E-10			
0,000306913	3,92632E-05	1,20504E-08	1,5416E-09			
0,000497383	4,96847E-05	2,47123E-08	2,4686E-09			
0,000702542	5,70304E-05	4,00663E-08	3,2525E-09			
0,000216934	2,54947E-05	5,53065E-09	6,4998E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000380046	4,27102E-05	1,62319E-08	1,8242E-09			
0,000571972	5,41398E-05	3,09665E-08	2,9311E-09			
0,000751819	6,42631E-05	4,83143E-08	4,1297E-09			
0,000223894	2,5643E-05	5,7413E-09	6,5756E-10			
0,000356587	4,34166E-05	1,54818E-08	1,885E-09			
0,000468203	5,76765E-05	2,70043E-08	3,3266E-09			
0,00057431	6,87693E-05	3,94949E-08	4,7292E-09			
-3,77829E-05	1,27422E-05	-4,81437E-10	1,6236E-10			
-1,75041E-05	1,9984E-05	-3,49802E-10	3,9936E-10			
5,90585E-05	2,16433E-05	1,27822E-09	4,6843E-10			
0,000165533	2,03332E-05	3,36581E-09	4,1344E-10			
-3,6185E-05	1,29311E-05	-4,67912E-10	1,6721E-10			
-1,80431E-05	2,01403E-05	-3,63393E-10	4,0563E-10			
3,78839E-05	2,24056E-05	8,48813E-10	5,0201E-10			
0,000117633	2,14034E-05	2,51774E-09	4,581E-10			
-9,92943E-05	1,06106E-05	-1,05357E-09	1,1258E-10			
-0,0001017	1,6953E-05	-1,72413E-09	2,8741E-10			
-7,19762E-05	1,85828E-05	-1,33752E-09	3,4532E-10			
-5,42327E-05	1,819E-05	-9,86492E-10	3,3088E-10			
-8,91602E-05	1,05903E-05	-9,44233E-10	1,1215E-10			
-0,000120262	1,79111E-05	-2,15403E-09	3,2081E-10			
-0,000174672	2,19599E-05	-3,83577E-09	4,8224E-10			
-0,000224644	2,25181E-05	-5,05856E-09	5,0707E-10			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

METRIBUZIN						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=A$	$\sum(C_{inLös})^2=B$	$K_{D1}=A/B$
1,70526E-05	7,81183E-06	1,33212E-10	6,1025E-11	4,50128E-09	2,7172E-09	**1,66**
2,75643E-05	1,3462E-05	3,71072E-10	1,8123E-10			
1,8947E-05	1,79565E-05	3,40222E-10	3,2244E-10			
2,42793E-05	6,27087E-06	1,52252E-10	3,9324E-11			
4,34945E-05	1,08081E-05	4,70095E-10	1,1682E-10			
4,05913E-05	1,74001E-05	7,06291E-10	3,0276E-10			
1,14427E-05	8,00287E-06	9,15743E-11	6,4046E-11			
2,33836E-05	1,35433E-05	3,16692E-10	1,8342E-10			
1,71807E-05	1,79295E-05	3,08042E-10	3,2147E-10			
1,02672E-05	2,09306E-05	2,14899E-10	4,3809E-10			
1,46757E-05	6,59211E-06	9,67437E-11	4,3456E-11			
3,46139E-05	1,1004E-05	3,8089E-10	1,2109E-10			
3,29935E-05	1,46976E-05	4,84925E-10	2,1602E-10			
2,48306E-05	1,74935E-05	4,34372E-10	3,0602E-10			
mit Fehler						
C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
4,30391E-05	1,36015E-05	5,85396E-10	1,85E-10	6,32085E-08	2,1435E-08	**2,95**
7,90282E-05	2,46664E-05	1,94934E-09	6,0843E-10			
6,46821E-05	3,49944E-05	2,26351E-09	1,2246E-09			
6,20093E-05	4,29502E-05	2,66331E-09	1,8447E-09			
7,4802E-05	1,06074E-05	7,93456E-10	1,1252E-10			
0,000144522	2,02533E-05	2,92705E-09	4,102E-10			
0,000195231	2,87544E-05	5,61376E-09	8,2682E-10			
0,000247096	3,58061E-05	8,84752E-09	1,2821E-09			
7,89056E-05	8,79789E-06	6,94203E-10	7,7403E-11			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
0,000157244	1,7242E-05	2,7112E-09	2,9729E-10			
0,000235167	2,41922E-05	5,6892E-09	5,8526E-10			
0,000271351	3,18006E-05	8,62914E-09	1,0113E-09			
5,93067E-05	1,33479E-05	7,91623E-10	1,7817E-10			
0,000104631	2,43233E-05	2,54496E-09	5,9162E-10			
0,000114839	3,40602E-05	3,91145E-09	1,1601E-09			
0,000132202	4,17496E-05	5,51937E-09	1,743E-09			
7,42998E-05	1,09724E-05	8,15246E-10	1,2039E-10			
0,000146102	2,05864E-05	3,00772E-09	4,238E-10			
0,000199838	2,90451E-05	5,80432E-09	8,4362E-10			
0,000252436	3,61618E-05	9,12853E-09	1,3077E-09			
7,46509E-05	9,29806E-06	6,94108E-10	8,6454E-11			
0,000154727	1,77071E-05	2,73977E-09	3,1354E-10			
0,000212363	2,5397E-05	5,3934E-09	6,4501E-10			
0,000263688	3,23219E-05	8,52289E-09	1,0447E-09			
-7,52154E-05	8,31444E-06	-6,25374E-10	6,913E-11			
-0,000150455	1,2488E-05	-1,87888E-09	1,5595E-10			
-0,000277101	1,58146E-05	-4,38225E-09	2,501E-10			
-0,000391442	1,65909E-05	-6,49438E-09	2,7526E-10			
-4,06967E-05	5,01625E-06	-2,04145E-10	2,5163E-11			
-8,93935E-05	6,67076E-06	-5,96323E-10	4,4499E-11			
-0,000157337	7,15863E-06	-1,12632E-09	5,1246E-11			
-0,000223251	6,0996E-06	-1,36174E-09	3,7205E-11			
-3,0347E-05	3,74384E-06	-1,13614E-10	1,4016E-11			
-7,02553E-05	4,37434E-06	-3,07321E-10	1,9135E-11			

Tab.E.3 Verteilungskoeffizienten auf Eurosoil 5 (Fortsetzung)

C_{aufES}(g/g)	$C_{inLös.}$(g/g)	$C_{aufES} \cdot C_{inLös.}$	$(C_{inLös})^2$	$A+\sum(C_{aufES} \cdot C_{inLös.})=C$	$B+\sum(C_{inLös})^2=D$	$K_D=C/D$
-0,000108768	3,5024E-06	-3,80948E-10	1,2267E-11			
-0,000190169	2,99945E-06	-5,70402E-10	8,9967E-12			
-6,7383E-05	7,78784E-06	-5,24768E-10	6,0651E-11			
-0,000134687	1,1741E-05	-1,58135E-09	1,3785E-10			
-0,000236499	1,44188E-05	-3,41002E-09	2,079E-10			
-0,000330665	1,48861E-05	-4,92232E-09	2,216E-10			
-5,14144E-05	5,03335E-06	-2,58787E-10	2,5335E-11			
-9,93351E-05	6,50026E-06	-6,45704E-10	4,2253E-11			
-0,000165477	6,81391E-06	-1,12754E-09	4,6429E-11			
-0,000231902	5,69941E-06	-1,3217E-09	3,2483E-11			
-4,52995E-05	3,88616E-06	-1,76041E-10	1,5102E-11			
-8,54994E-05	4,30078E-06	-3,67714E-10	1,8497E-11			
-0,000146376	3,99812E-06	-5,8523E-10	1,5985E-11			
-0,000214027	2,66504E-06	-5,7039E-10	7,1024E-12			

Anhang F. Auswertung mit statistischer Betrachtung

Die in der statistischen Betrachtung angegebenen Werte (Tab. 4-1 bis Tab. 4-4) wurden folgendermaßen bestimmt:

F1. Für die extrapolierte (V_{ES}·K_D)- Werte

$$(K_D \cdot V_{ES})_G \pm \Delta(K_D \cdot V_{ES})_G \cdot \frac{\overline{K_{Di,Rj,Batch}} \pm \Delta K_{Di,Rj,Batch}}{\overline{(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,G}} \pm \Delta(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,G}} = \overline{K_{D1,i,Batch}} \pm \frac{\Delta K_{D1,i,Batch}}{\overline{K_{D1,i,Batch}}} \quad \text{(F-1)}$$

$$\frac{(K_D \cdot V_{ES})_{i,G} \pm \Delta(K_D \cdot V_{ES})_{i,G}}{(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,G} \pm \Delta(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,G}} \cdot \overline{K_{Di,Rj,Batch}} \pm \Delta K_{Di,Rj,Batch} = \overline{K_{D1,i,Batch}} \pm \frac{\Delta K_{D1,i,Batch}}{K_{D1,i,Batch}} \quad \text{(F-2)}$$

$$\frac{(K_D \cdot V_{ES})_{i,G} \pm a}{(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,G} \pm b} \cdot (\overline{K_{Di,Rj,Batch}} \pm c) = \overline{K_{D1,i,Batch}} \pm d \quad \text{(F-3)}$$

$$K_{Di} = K_{D1,i,Batch} = \frac{(K_D \cdot V_{ES})_{i,G}}{(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,G}} \cdot K_{Di,Rj,Batch} \cdot \underbrace{\left[\left(1 \pm \frac{a}{(K_D \cdot V_{ES})_{i,G}}\right) \cdot \left(1 \pm \frac{b}{(K_D \cdot V_{Es})_{Rj,G}}\right) \cdot \left(1 \pm \frac{c}{K_{Di,Rj,Batch}}\right)\right]}_{d^*} \quad \text{(F-4)}$$

daraus folgt

$$K_{Di} = \frac{\overline{(K_D \cdot V_{Es})_{i,G}}}{(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,G}} \cdot \overline{K_{D1,Rj,Batch}} \pm K_{Di} \cdot d^* \quad \text{(F-5)}$$

wobei

$$d^* = a^* + b^* + c^* \quad \text{(F-6)}$$

mit

$$a^* = \frac{(\Delta(K_D \cdot V_{ES}))_{i,G}}{(K_D \cdot V_{ES})_{i,G}} \quad \text{(F-7)}$$

$$b^* = \frac{(\Delta(K_D \cdot V_{ES}))_{R,G}}{(K_D \cdot V_{ES})_{R,G}}$$

(F-8)

$$c^* = \frac{\Delta K_{D1,Rj,Batch}}{K_{D1,Rj,Batch}} \quad \text{(F-9)}$$

F2. Für die mittlere (V_{ES}·K_D)- Werte

$$(K_D \cdot V_{ES})_M \pm \Delta(K_D \cdot V_{ES})_M \cdot \frac{\overline{K_{Di,Rj,Batch}} \pm \Delta K_{Di,Rj,Batch}}{\overline{(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,M}} \pm \Delta(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,M}} = \overline{K_{D1,i,Batch}} \pm \frac{\Delta K_{D1,i,Batch}}{\overline{K_{D1,i,Batch}}} \quad \text{(F-10)}$$

$$\frac{(K_D \cdot V_{ES})_{i,M} \pm \Delta(K_D \cdot V_{ES})_{i,M}}{(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,M} \pm \Delta(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,M}} \cdot \overline{K_{Di,Rj,Batch}} \pm \Delta K_{Di,Rj,Batch} = \overline{K_{D1,i,Batch}} \pm \frac{\Delta K_{D1,i,Batch}}{K_{D1,i,Batch}} \quad \text{(F-11)}$$

$$\frac{(K_D \cdot V_{ES})_{i,M} \pm a}{(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,M} \pm b} \cdot (\overline{K_{Di,Rj,Batch}} \pm c) = \overline{K_{D1,i,Batch}} \pm d \quad \text{(F-12)}$$

$$K_{Di} = K_{D1,i,Batch} = \frac{(K_D \cdot V_{ES})_{i,M}}{(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,M}} \cdot K_{Di,Rj,Batch} \cdot \underbrace{\left[\left(1 \pm \frac{a}{(K_D \cdot V_{ES})_{i,M}}\right) \cdot \left(1 \pm \frac{b}{(K_D V_{ES})_{Rj,M}}\right) \cdot \left(1 \pm \frac{c}{K_{Di,Rj,Batch}}\right)\right]}_{d^*}$$

(F-13)

daraus folgt

$$K_{Di} = \frac{\overline{(K_D \cdot V_{ES})}_{i,M}}{(K_D \cdot V_{ES})_{Rj,M}} \cdot \overline{K_{D1,Rj,Batch}} \pm K_{Di} \cdot d^* \quad \text{(F-14)}$$

wobei

$$d^* = a^* + b^* + c^* \quad \text{(F-15)}$$

mit

$$a^* = \frac{(\Delta(K_D \cdot V_{ES}))_{i,M}}{(K_D \cdot V_{ES})_{i,M}} \quad \text{(F-16)}$$

$$b^* = \frac{(\Delta(K_D \cdot V_{ES}))_{R,M}}{(K_D \cdot V_{ES})_{R,M}} \quad \text{(F-17)}$$

$$c^* = \frac{\Delta K_{D1,Rj,Batch}}{K_{D1,Rj,Batch}} \quad \text{(F-18)}$$

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name:	Danuta Kohne
Geburtsdaten:	24.05.1978 in Danzig, Polen
Familienstand:	verheiratet

Schulbildung

09/1993 – 05/ 1997	II. Gymnasium in Danzig Profil: mathematisch-physisch Abschluss: Abitur

Studium

10/1997 – 06/2003	Technische Universität Danzig Fachgebiet Bau- und Umweltingenieur-wissenschaften Abschluss: Dipl.-Ing.

Berufstätigkeit

06/2003 – 04/2008	Wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik an der TU Kaiserslautern Prof. Dr.-Ing. G. Maurer
seit 05/2008	Mitarbeiterin bei der KSB AG, Frankenthal