

DIPLOMARBEIT Master Thesis

Grundlagen für die Entfernung ausgewählter Arzneimittel mit pulverisierter Aktivkohle

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades
eines Diplom-Ingenieurs

unter der Leitung von

Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.-Ing. Jörg Krampe

Ass.Prof. Mag.rer.nat. Dr.rer.nat. Norbert Kreuzinger

E 226

Institut für Wassergüte, Ressourcenmanagement und Abfallwirtschaft

eingereicht an der Technischen Universität Wien
Fakultät für Bauingenieurwesen

von

B.Sc. Soroush Foroughi

0526027

Kornfeldgasse 28/D1, 2512 Tribuswinkel

Wien, am 18. November 2014

Kurzfassung

Eine Problematik, die in den letzten Jahrzehnten in zunehmendem Maße aufgetreten ist, ist das immer häufigere Auffinden von anthropogenen und chemischen Spurstoffen in Oberflächengewässern und im Grundwasser.

Kläranlagen können nicht alle Arzneimittel in der konventionellen Abwasserreinigung zur Gänze entfernen. Dies wirkt sich negativ auf die aquatische Umwelt aus. [38]

Im Rahmen der Diplomarbeit wurde zum einen experimentell untersucht, inwieweit der Einsatz von pulverisierter Aktivkohle (PAK), welche von der Firma Donauchemie AG zur Verfügung gestellt wurde, zur Entfernung der ausgewählten Arzneimittel Diclofenac, Carbamazepin, Ibuprofen und Sulfamethoxazol geeignet ist. Weiters werden die Grundlagen für die Dimensionierungsansätze für einen großtechnischen Einsatz von pulverisierter Aktivkohle untersucht. Dafür wurden im Labor Versuche mit Trinkwasser und gereinigtem Abwasser (Kläranlagenablauf) durchgeführt. Die Versuche fanden mit unterschiedlichen Aktivkohlemengen in unterschiedlichen Volumina statt, um die Entfernung der Medikamente durch Adsorption zu veranschaulichen und ihre Eigenschaften zu untersuchen. Bei der verwendeten Aktivkohle handelt es sich um das Produkt Epibon A. Die Wahl fiel auf die bereits genannten Arzneimittel, da sie ein großes Spektrum von gering bis gut adsorbierbar abdecken. Um einen deutlichen Unterschied zwischen den Arzneimitteln zu sehen, wurden sie einzeln, aber auch in einer Mischung aus allen vier Arzneimitteln, untersucht.

Die Adsorption von Arzneimitteln durch pulverisierte Aktivkohle ist eine effektive Methode zur Entfernung von Pharmaka. Weiters wird im Rahmen der Diplomarbeit festgestellt, dass die angewendete Methodik für alle untersuchten Arzneimittel, mit Ausnahme von Sulfamethoxazol, geeignet ist, um in verschiedenen Abwassermatrizen das Adsorptionsverhalten zu charakterisieren, sowohl als Einzelsubstanzen, als auch in einer Mischung der vier ausgewählten Arzneimittel. Die Methodik liefert auch über das Adsorptionsverhalten reproduzierbare Ergebnisse. Die angewendete Methodik liefert nicht nur für die Untersuchungen mit Trinkwasser reproduzierbare Ergebnisse, sondern auch für die Untersuchungen mit Kläranlagenablauf, wobei das Arzneimittel Sulfamethoxazol wieder eine Ausnahme darstellt.

Schlagwörter: Aktivkohle, Adsorption, organische Spurenstoffe, weitergehende Abwasserreinigung

Abstract

A problem that has occurred increasingly in recent decades, is the more frequent finding of anthropogenic and chemical trace pollutants in surface waters and groundwater. Sewage treatment plants cannot remove entirely drugs through the conventional wastewater treatment.

As part of the thesis experimental investigation was realised whether the use of powdered activated carbon (PAC), which was provided by the company Donau Chemie AG with the product name Epibon A, is suitable for the removal of the selected drugs diclofenac, carbamazepine, ibuprofen and sulfamethoxazole. Another purpose is to examine the basis for the dimensioning for an industrial application. Experiments were carried out at laboratory with drinking water and treated wastewater (final effluent). The tests were carried out with different concentration of activated carbon in different volumes to illustrate the removal of the drugs by adsorption and examine their properties. To see a clear difference between the drugs, they were studied individually, but also in a mixture with all the selected drugs.

The adsorption of drugs by powdered activated carbon is an effective method for the removal of pharmaceuticals. In the thesis it's discovered, that the methodology used for all investigated drugs, with the exception of sulfamethoxazole, is suited to characterize the adsorption behaviour in different matrixes of wastewater, individually and in a mixture with all four pharmaceuticals. The methodology also provides reproducible results about the adsorption behavior. The applied methodology doesn't provide reproducible results only for the studies with drinking water, but also for the investigation with wastewater, whereas the drug sulfamethoxazole is again an exception.

Keywords: activated carbon, adsorption, organic trace pollutants, advanced wastewater treatment

Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle bei all jenen bedanken, die durch ihren fachlichen und persönlichen Beitrag mich beim Verfassen dieser Diplomarbeit unterstützt haben.

Besonders bedanken möchte ich mich bei meinem Diplomarbeitsbetreuer Ass. Prof. Mag. Dr. Norbert Kreuzinger, der für meine Fragen und Probleme stets ein offenes Ohr hatte und ebenso für sein Engagement und seine Geduld.

Herzlichen Dank an Dipl. Ing. Heidi Schaar für das Bereitstellen dieses interessanten Themas für diese Diplomarbeit. Heidi Schaar stand mir im Labor immerzu mit Rat und Tat zur Seite; auch dafür herzlichen Dank.

Außerdem danke ich den lieben Labormitarbeitern, Dipl. Ing. Dr. Ernis Saracevic und Dipl. Ing. Zdravka Saracevic, die für ein angenehmes Klima im Labor gesorgt haben. Ernis Saracevic hatte immer ein offenes Ohr für Fragen bezüglich den Versuchen und hat bei allen Problemen weitergeholfen. Die Auslesung der Messergebnisse durch ihn stellt eine wichtige Grundlage für die Diplomarbeit dar.

Zuallerletzt, möchte ich auch meiner geliebten Familie unendlichen Dank aussprechen, insbesondere meinen Eltern, die mir Vertrauen, Verständnis und Unterstützung entgegengebracht haben.

Inhaltsverzeichnis

Abstract	5
Danksagung	7
Inhaltsverzeichnis	9
Abbildungsverzeichnis	11
Tabellenverzeichnis	12
Formelzeichen und Abkürzungen	17
1 Einleitung	19
2 Zielsetzung	21
3 Grundlagen	22
3.1 Aktivkohle	22
3.1.1 Herstellung	22
3.1.2 Formen der Aktivkohle.....	23
3.1.3 Einsatz von Pulveraktivkohle	24
3.1.4 Einsatz von Kornaktivkohle	25
3.1.5 Einsatz von Pulveraktivkohle in der Abwasserreinigung.....	27
3.2 Adsorption	28
3.2.1 Grundbegriffe der Adsorption	28
3.2.2 Gleichgewicht der Adsorption.....	29
3.2.3 Adsorptionsgleichgewicht von Einzelstoffen.....	30
4 Material und Methoden	32
4.1 Verwendete Materialien	32
4.1.1 Pulveraktivkohle.....	32
4.1.2 Arzneimittel.....	32
4.1.3 Bezugsquellen der verwendeten Arzneimittel.....	36
4.2 Versuchsmedien	36
4.2.1 Leitungswasser	36
4.2.2 Deionisiertes Wasser	37
4.2.3 Kläranlagenablauf.....	37

4.3	Verwendete Nomenklatur	38
4.4	Versuchsaufbau	39
4.4.1	Vorversuche	39
4.4.2	Hauptversuche.....	40
4.5	Analytische Methoden	42
4.5.1	Photometer	42
4.5.2	HPLC-Gerät	42
4.6	Isothermenberechnung.....	46
5	Versuchsdurchführung.....	50
5.1	Einleitung.....	50
5.2	Vorversuche	50
5.3	Hauptversuche.....	51
6	Ergebnisse.....	58
6.1	Einleitung.....	58
6.2	Vorversuche	58
6.3	Hauptversuche.....	62
6.3.1	Entfernung der Arzneimittel	63
6.3.2	Isothermenberechnung.....	75
7	Diskussion	87
7.1	Carbamazepin	87
7.2	Ibuprofen.....	88
7.3	Diclofenac	89
7.4	Sulfamethoxazol	90
7.5	Mix.....	90
8	Zusammenfassung.....	92
	Literaturverzeichnis.....	94
	Anhang I Übersicht über die Eigenschaften der untersuchten Medikamente	97
	Anhang II Vorversuche-Tabellen	101
	Anhang III Entfernung der Einzelsubstanzen: Hauptversuche-Tabellen.....	108
	Anhang IV Isothermenberechnung: Tabellen.....	120

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Pulveraktivkohle	23
Abbildung 2: Kornaktivkohle	23
Abbildung 3: Aktivkohlepellets	23
Abbildung 4: Schematische Darstellung des ein- und zweistufigen Pulverkohlenverfahrens	24
Abbildung 5: Schema der Betriebsweise von Aktivkohlefiltern	26
Abbildung 6: Aufbauschritte einer Kläranlage mit Einsatz von Pulveraktivkohle	27
Abbildung 7: Veranschaulichung verschiedener Grundbegriffe der Adsorption	29
Abbildung 8: Aufnahme eines Isothermenpunktes in einem Batch-Versuch	31
Abbildung 9: Analytische Waage	41
Abbildung 10: Erlenmeyerkolben	41
Abbildung 11: Schüttler der Firma B. Braun	41
Abbildung 12: Fläschchen mit Teflondeckel	41
Abbildung 13: Aufbau des HPLC-Geräts	44
Abbildung 14: Chromatogramm mit SMX und CBZ	45
Abbildung 15: Chromatogramm mit DCF und IBF	46
Abbildung 16: Beispiel einer Isothermenberechnung (Versuch CBZ in TW)	49
Abbildung 17: Tritationskolben mit unterschiedlichen Mengen an Aktivkohle und Stammlösung mit einer Konzentration von 1 g/L Methylenblau	51
Abbildung 18: Kiste als Aufsatz für Schüttler	56
Abbildung 19: Ansicht innerhalb der Kiste mit Kolben und Bechern	56
Abbildung 20: Entfernung von CBZ in DW	63
Abbildung 21: Entfernung von CBZ in Ablauf aus HKA	64
Abbildung 22: Entfernung von IBF in TW	65
Abbildung 24: Entfernung von IBF in AW	66
Abbildung 25: Entfernung von IBF in AW	66
Abbildung 26: Entfernung von DCF in AW	67
Abbildung 27: Entfernung von DCF in TW	67
Abbildung 28: Entfernung von DCF in AW	68
Abbildung 29: Entfernung von DCF in TW	69
Abbildung 30: Entfernung von SMX in AW	70
Abbildung 31: Entfernung von SMX in TW	70

Abbildung 32: Entfernung von SMX in AW	71
Abbildung 33: Entfernung von SMX in TW	71
Abbildung 34: Entfernung von SMX, CBZ, DCF und IBF in AW	72
Abbildung 35: Entfernung von SMX, CBZ, DCF und IBF in TW	73
Abbildung 36: Entfernung von SMX, CBZ, DCF und IBF in AW	74
Abbildung 37: Entfernung von SMX, CBZ, DCF und IBF in TW	74
Abbildung 38: Isotherme für Versuch 1, CBZ in DW	75
Abbildung 39: Isotherme für Versuch 2, CBZ in AW	76
Abbildung 40: Isotherme für Versuch 3, IBF in TW	77
Abbildung 41: Isotherme für Versuch 5 und Versuch 6, IBF in AW	77
Abbildung 42: Isotherme für Versuch 7 und Versuch 8, DCF in AW	78
Abbildung 43: Isotherme für Versuch 7 und Versuch 8, DCF in TW	79
Abbildung 44: Isotherme für Versuch 9, SMX in AW	79
Abbildung 45: Isotherme für Versuch 9, SMX in TW	80
Abbildung 46: Isotherme für Versuch 10, SMX in AW	80
Abbildung 47: Isotherme für Versuch 10, SMX in TW	81
Abbildung 48: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), Ibuprofen in TW	82
Abbildung 49: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), Ibuprofen in AW	83
Abbildung 50: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), Carbamazepin in TW	83
Abbildung 51: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), Carbamazepin in AW	84
Abbildung 52: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), Diclofenac in TW	84
Abbildung 53: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), Diclofenac in AW	85
Abbildung 54: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), SMX in TW	85
Abbildung 55: Isotherme für Versuch 11 (Mix), SMX in AW	86
Abbildung 56: Isotherme für Versuch 12 (Mix), SMX in AW	86
Abbildung 57: Vergleich der Isothermen für Carbamazepin in AW und TW	87
Abbildung 58: Vergleich der Isothermen für Ibuprofen in AW und TW	88
Abbildung 59: Vergleich der Isothermen für Diclofenac in AW und TW	89

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Adsorption von verschiedenen Arzneimitteln	27
Tabelle 2: Chemische Struktur und Molekularformel von CBZ	33
Tabelle 3: Chemische Struktur und Molekularformel von DFC	34
Tabelle 4: Chemische Struktur und Molekularformel von IBF	35
Tabelle 5: Chemische Struktur und Molekularformel von SMX	35
Tabelle 6: Bezugsquelle der verwendeten Medikamente	36
Tabelle 7: Überblick über die verwendete Medien.....	37
Tabelle 8: Bestimmungs- und Nachweisgrenzen der eingesetzten Medikamente.....	43
Tabelle 9: Ergebnisse einem Versuch mit CBZ und AW.....	47
Tabelle 10: Beispiel einer Isothermenberechnung (Versuch 2 CBZ in TW)	48
Tabelle 11: Übersicht über die durchgeführten Hauptversuche	52
Tabelle 12: Übersicht über die durchgeführten Vorversuche	58
Tabelle 13: Übersicht über die Rahmenbedingungen zu den Hauptversuchen	63
Tabelle 14: Isothermen aus den Einzelversuchen in TW ind AW	81
Tabelle 15: Isothermen aus Mixtur in TW und AW	91
Tabelle 16: Diclofenac.....	97
Tabelle 17: Carbamazepin	98
Tabelle 18: Ibuprofen.....	99
Tabelle 19: Sulfamethoxazol	100
Tabelle 20: Ergebnisse von Versuch 1 mit Anwendung von zwei verschiedenen Filtern und Auswertung mit zwei verschiedenen Photometern	101
Tabelle 21: Ergebnisse für die erste Eichgerade.....	101
Tabelle 22: Ergebnisse von Versuch 2 mit zwei unterschiedlichen Entnahmezeiten...	101
Tabelle 23: Ergebnisse von Versuch 3 mit drei unterschiedlichen Entnahmezeiten ...	102
Tabelle 24: Ergebnisse für die Eichgerade	102
Tabelle 25: Ergebnisse von Versuch 4 mit drei unterschiedlichen Entnahmezeiten	103
Tabelle 26: Ergebnisse von Versuch 5 mit drei unterschiedlichen Entnahmezeiten	103
Tabelle 27: Ergebnisse für die Eichgerade	104
Tabelle 28: Ergebnisse von Versuch 6 von der Entnahme nach 15 Minuten	104
Tabelle 29: Ergebnisse von Versuch 6 von der Entnahme nach 30 Minuten	104
Tabelle 30: Ergebnisse von Versuch 7 von der Entnahme nach 15 Minuten	105
Tabelle 31: Ergebnisse von Versuch 7 von der Entnahme nach 30 Minuten	105
Tabelle 32: Ergebnisse für die Eichgerade	106

Tabelle 33: Ergebnisse von Versuch 8 von der Entnahme nach 15 Minuten	106
Tabelle 34: Ergebnisse von Versuch 8 von der Entnahme nach 30 Minuten	106
Tabelle 35: Ergebnisse von Versuch 9 mit einer Schüttelzeit von 30 Minuten	107
Tabelle 36: Ergebnisse von Versuch 10 mit einer Schüttelzeit von 30 Minuten	107
Tabelle 37: Ergebnisse vom Versuch 1 mit CBZ und DW	108
Tabelle 38: Ergebnisse vom Versuch 2 mit CBZ und Ablauf aus HKA.....	108
Tabelle 39: Ergebnisse vom Versuch 3 mit IBF und TW	109
Tabelle 40: Ergebnisse vom ersten Versuch 4 mit IBF und AW aus Mistelbach.....	110
Tabelle 41: Ergebnisse vom zweiten Versuch 5 mit IBF und AW aus Mistelbach.....	110
Tabelle 42: Ergebnisse vom Versuch 6 mit IBF und AW aus HKA.....	111
Tabelle 43: Ergebnisse vom Versuch 7 mit DCF und AW aus HKA	112
Tabelle 44: Ergebnisse vom Versuch 7 mit DCF und TW	112
Tabelle 45: Ergebnisse vom Versuch 8 mit DCF und AW aus HKA	113
Tabelle 46: Ergebnisse vom Versuch 8 mit DCF und TW	114
Tabelle 47: Ergebnisse vom Versuch 9 mit SMX und AW aus HKA	114
Tabelle 48: Ergebnisse vom Versuch 9 mit SMX und TW.....	115
Tabelle 49: Ergebnisse vom Versuch 10 mit SMX und AW aus HKA	115
Tabelle 50: Ergebnisse vom Versuch 10 mit SMX und TW.....	116
Tabelle 51: Ergebnisse vom Versuch 11 mit SMX, CBZ, DCF und IBP mit AW aus HKA	116
Tabelle 52: Ergebnisse vom Versuch 11 mit SMX, CBZ, DCF und IBP mit TW	117
Tabelle 53: Ergebnisse vom Versuch 12 mit SMX, CBZ, DCF und IBP mit TW	118
Tabelle 54: Ergebnisse vom Versuch 12 mit SMX, CBZ, DCF und IBP mit AW aus HKA	118
Tabelle 55: Isothermenberechnung für Versuch 1, CBZ in DW.....	120
Tabelle 56: Isothermenberechnung für Versuch 2, CBZ in AW.....	120
Tabelle 57: Isothermenberechnung für Versuch 3, IBF in TW.....	121
Tabelle 58: Isothermenberechnung für Versuch 5 und Versuch 6, IBF in AW.....	122
Tabelle 59: Isothermenberechnung für Versuch 7 und Versuch 8, DCF in AW	123
Tabelle 60: Isothermenberechnung für Versuch 7 und Versuch 8, DCF in TW.....	123
Tabelle 61: Isothermenberechnung für Versuch 9, SMX in AW.....	124
Tabelle 62: Isothermenberechnung für Versuch 9, SMX in TW	124
Tabelle 63: Isothermenberechnung für Versuch 10, SMX in AW.....	125
Tabelle 64: Isothermenberechnung für Versuch 10, SMX in TW	125
Tabelle 65: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, IBF in TW.....	126

Tabelle 66: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, IBF in AW	126
Tabelle 67: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, CBZ in TW.....	127
Tabelle 68: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, CBZ in AW	128
Tabelle 69: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, DCF in TW.....	128
Tabelle 70: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, DCF in AW	129
Tabelle 71: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, SMX in TW.....	130
Tabelle 72: Isothermenberechnung für Versuch 11, SMX in AW	130
Tabelle 73: Isothermenberechnung für Versuch 12, SMX in AW	131

Formelzeichen und Abkürzungen

AW	Abwasser
BSB	Biochemischer Sauerstoffbedarf
c	Konzentration
CBZ	Carbamazepin
CSB	Chemischer Sauerstoffbedarf
DCF	Diclofenac
DW	Deionisiertes Wasser
g	Gramm
GAK / GAC	Kornaktivkohle
HKA	Hauptkläranlage Wien
HPLC	Hochleistungs-Flüssigkeitschromatographie
IBF	Ibuprofen
kg	Kilogramm
L	Liter
LW	Leitungswasser / Trinkwasser
mg	Milligramm
min	Minuten
MIX	Mixtur aus CBZ, DCF, IBF und SMX
mL	Milliliter
nm	Nanometer
Pa	Pascal
PAK / PAC	Pulveraktivkohle
SMX	Sulfamethoxazol
T	Temperatur
TOC	Gesamter organischer Kohlenstoff
TW	Trinkwasser / Leitungswasser
V	Volumen

1 Einleitung

„Rückstände von Arzneimittelwirkstoffen in der Umwelt und besonders im Wasser sind seit Mitte der 90er Jahre immer wieder Thema in den Medien: »Die Apotheke im Wasserhahn«, »Heilssubstanzen verderben das Lebenselixier«, »Medikamente aus dem Wasserhahn« oder »Pille im Brunnen« sind Schlagzeilen aus Presseberichten“ [Zitat aus 1].

Abwässer werden in Abwasserreinigungsanlagen behandelt, bevor sie in das empfangende Gewässer eingeleitet werden. Eine Abwasserreinigungsanlage besteht aus mehreren Stufen. Nach einer mechanischen Reinigung zur Abtrennung der Grobstoffe wird das Abwasser biologisch gereinigt. Der Belebtschlamm ist ein Adsorbens und adsorbiert die gelösten Abwasserinhaltsstoffe. Während der biologischen Reinigung werden die Abwasserinhaltsstoffe durch Mikroorganismen ab- und umgebaut. In der anschließenden Nachklärung erfolgt die Abtrennung des Klärschlammes vom gereinigten Abwasser. Die derart behandelten Abwässer erreichen im Allgemeinen die geforderten Grenzwerte hinsichtlich der Konzentration von Kohlenstoffen (CSB, TOC, BSB) und den Nährstoffen, Stickstoff ($\text{NH}_4\text{-N}$) und Phosphor [2]. Kommunale Abwasserreinigungsanlagen sind für den Abbau der klassischen Abwasserparameter, wie Kohlenstoff und Nährstoffe, ausgelegt. Andere Inhaltsstoffe wie, Pharmazeutika und Körperpflegeprodukte (PPCP), Industriechemikalien und hormonell wirksame Stoffe werden in unterschiedlichem Ausmaß entfernt.

Viele Arzneimittel werden im menschlichen Körper gar nicht oder nur teilweise abgebaut und gelangen somit unverändert oder durch eine Modifikation, z.B. in Glukuronsäurekonjugate, über die natürliche Ausscheidung, wie Urin oder Fäkalien, in das Abwassersystem. Ein nicht zu vernachlässigender Anteil der im Abwassersystem vorhandenen Arzneimittel wird aber auch durch unsachgemäße Entsorgung über die Toilette eingetragen. [38]

Aufgrund der künstlichen Herstellung durch die Menschen werden diese Stoffe auch anthropogene Spurenstoffe genannt. Bedeutsam sind Wirkstoffe, die unter anderem als Antibiotika, Lipidsenker, synthetische Hormone oder Psychopharmaka eingesetzt werden, aber auch Industrie- und Haushaltschemikalien, sowie Körperpflegemittel.

Eine Möglichkeit zum Abbau dieser anthropogenen Spurenstoffe ist die Behandlung von gereinigtem Abwasser (Kläranlagenablauf) mit Ozon. Nach bisherigen Erkenntnissen ist die Ozonierung des Wassers eine wirksame Variante für den Abbau von Arzneimittelwirkstoffen und Hormonen aus Trinkwasser, Oberflächenwasser und aus Kläranlagenablauf [4].

Eine weitere Möglichkeit zur Entfernung dieser anthropogenen Spurenstoffe ist die Behandlung von gereinigtem Abwasser (Kläranlagenablauf) mit Aktivkohle durch Adsorption.

Vor 1920 wurde Aktivkohle in der Zuckerindustrie für die Entfärbung von Zuckerlösungen eingesetzt, sowie beispielsweise auch zur Abluftreinigung, Lösungsmittelrückgewinnung und bei der Herstellung verschiedener pharmazeutischer und chemischer Produkte. Nach 1927 setzte sich in den USA der Einsatz von Aktivkohle auch bei der Wasserreinigung durch, nachdem es bei der Trinkwasserversorgung in Chicago gelang, mit pulverförmiger Aktivkohle Chlorphenol aus dem Rohwasser zu entfernen. [5]

Die Adsorption mit Hilfe von Aktivkohle ist für die Wassertechnik ein bedeutender Vorgang und stellt die Grundlage für ein wirksames Verfahren zur Entfernung gelöster organischer Störstoffe bei der Trinkwasseraufbereitung. Die adsorptive Störstoffentfernung ist dann umso wirkungsvoller, je unpolarer die Störstoffe sind. Das ist darin begründet, dass einerseits die Aktivkohleoberfläche unpolare Eigenschaften besitzt; andererseits handelt es sich bei Wasser um ein starkes polares Lösungsmittel. Organische Stoffe mit unpolarem Charakter (beispielsweise Kohlenwasserstoffe, Chlorkohlenwasserstoffe und eine große Anzahl von Pflanzenschutzmittelwirkstoffen) haben daher das Bestreben, sich aus dem polaren Lösungsmittel Wasser heraus an die unpolare Aktivkohleoberfläche anzureichern. [5]

In der Abwasserreinigung gewinnt die Adsorption unter Anwendung der Aktivkohle immer mehr an Bedeutung. Vorallem bei der Entfernung toxischer oder biologisch schwer abbaubarer organischer Substanzen kommt es zum Einsatz von Aktivkohle. Die Verunreinigungen im Abwasser weisen ein sehr unterschiedliches Adsorptionsverhalten auf. Daher ist es zur Festlegung von Auslegungsdaten für eine Aktivkohleanlage erforderlich Versuche durchzuführen. [3]

2 Zielsetzung

Ziel dieser Diplomarbeit war es, Grundlagen für die Entfernung ausgewählter Arzneimittel aus gereinigtem Kläranlagenablauf mit Hilfe von pulverisierter Aktivkohle und die Grundlage für die Dimensionierungsansätze für einen großtechnischen Einsatz von pulverisierter Aktivkohle zu untersuchen. Die Entfernung der Arzneimittel Diclofenac, Carbamazepin, Ibuprofen und Sulfamethoxazol wurde bei unterschiedlichen Aktivkohlekonzentrationen untersucht, um die Adsorption zu veranschaulichen und ihre Eigenschaften zu untersuchen. In dem Zusammenhang wird eine Methode für die Charakteristik der Anwendbarkeit entwickelt.

In methodischer Hinsicht werden im Laufe der Arbeit folgende Fragestellungen behandelt:

- Ist die angewendete Methodik zur Charakterisierung des Adsorptionsverhaltens in verschiedenen Abwassermatrizen geeignet und liefert sie reproduzierbare Ergebnisse über das Adsorptionsverhalten?
- Kann diese Methodik für die Medien Leitungswasser und Kläranlagenablauf angewendet werden?
- Liefert die angewendete Methodik für die unterschiedlichen Anfangskonzentrationen von Arzneimitteln vergleichbare Ergebnisse?

Folgende Fragestellungen werden zum Thema Adsorption behandelt:

- Beeinflusst die Abwassermatrix das Adsorptionsverhalten? Wie zeigen sich Unterschiede im Adsorptionsverhalten bei Anwendung in Leitungswasser bzw. in unterschiedlichen Proben von gereinigtem Abwasser?
- Charakterisieren die ausgewählten Substanzen einen breiten Adsorptionsbereich, von sehr gut bis sehr schlecht adsorbierbar?
- Unterscheidet sich im hohen Konzentrationsbereich das Adsorptionsverhalten einer Mischung von Einzelsubstanzen?

Zur Behandlung der Fragestellung wurden vier Stoffe ausgewählt und einzeln, aber auch in einer Mischung (Mixtur), untersucht. Die Versuche fanden mit Leitungswasser (Trinkwasser) und mit Kläranlagenablauf statt.

3 Grundlagen

3.1 Aktivkohle

3.1.1 Herstellung

Die Herstellung von Aktivkohle erfolgt über verschiedene kohlenstoffhaltige Naturprodukte, wie zum Beispiel Holz, Torf, Anthrazit, Steinkohle, Braunkohle, Kokosnussschalen oder Olivenkerne. Das jeweilige Rohmaterial hat einen großen Einfluss auf die späteren Charakteristika und die Leistungsfähigkeit der Aktivkohle. [5]

Die Aktivierung dieser Stoffe kann nach zwei verschiedenen Verfahren erfolgen [Zitat aus 12]:

„Bei der **Gasaktivierung** wird von bereits verkorktem Material ausgegangen und setzt dieses dem oxidierenden Einfluss eines Gasstromes, wie z.B. Wasserdampf, Kohlendioxid, Luft oder deren Gemischen aus. Die Aktivierungstemperatur liegt bei etwa 700 bis 1000 °C.“

„Bei der **chemischen Aktivierung** werden meist unverkohltes kohlenstoffhaltiges Material mit dehydratisierenden und oxidierend wirkenden Chemikalien gemischt. Anschließend wird die "Maische" auf 400 bis 800 °C erhitzt. Die Aktivierungsmittel (es können dafür Zinkchlorid, Phosphorsäure, Schwefelsäure u. a. in Frage kommen) werden anschließend ausgewaschen und zurück gewonnen. Die Aktivierung selbst wird in Drehrohr-, Etagen-, Schacht- und Wirbelschichtöfen oder auch Fließbettreaktoren ausgeführt.“

Bei der Gasaktivierung (thermische Aktivierung) muss keine Chemikalienrückgewinnung erfolgen, wie bei der chemischen Aktivierung und deshalb wird diese Methode bei der Herstellung von Wasserreinigungskohlen verwendet. Ein weiterer Grund ist die Erzeugung einer feinporigen Struktur der Aktivkohle bei der Gasaktivierung. Ein Porensystem entsteht im Inneren der Aktivkohle durch einen gezielten Abbrand von Kohlenstoff während des Aktivierungsprozesses. Deshalb weisen Aktivkohlen eine innere Oberfläche von bis zu rund 1000 m²/g, auf der sich aktive Zentren befinden, an denen der Adsorptionsvorgang stattfindet. [5]

3.1.2 Formen der Aktivkohle

Die häufigsten Formen der Aktivkohle sind [13]:

Pulveraktivkohle (PAC, PAK): Diese Form von Aktivkohle wird häufig bei der Abgasbehandlung oder in der Flüssigphase angewendet. Sie ist pulverisierte Aktivkohle mit einer Korngröße von weniger als 0,18 mm.



Abbildung 1: Pulveraktivkohle (Quelle: www.desotec.com)

Kornaktivkohle (GAC; GAK): Sie kommt bei flüssigen und gasförmigen Phasen zum Einsatz. Die Kornaktivkohle besteht aus unregelmäßig geformten Körnern, oder auch Granulat genannt, mit einer Korngröße zwischen 0,2 und 5 mm.



Abbildung 2: Kornaktivkohle (Quelle: www.turbo-hefe.de)

Aktivkohlepellets: Die Kombination von geringer Druckverlust und geringem Staunabteil bzw. hoher mechanischer Härte sind der Grund, warum Pellets hauptsächlich in der Gasphase verwendet werden. Aktivkohlepellets sind stranggepresste, zylindrische Pellets mit einem Durchmesser zwischen 0,8 und 5 mm.



Abbildung 3: Aktivkohlepellets (Quelle: www.donauchem.hu)

3.1.3 Einsatz von Pulveraktivkohle

Die Grundlagen über den Einsatz von pulverisierter Aktivkohle (PAK) sind aus [5] entnommen:

Die pulverisierte Aktivkohle wird als Suspension an einer bzw. mehreren Stellen der Trinkwasseraufbereitungsanlage zudosiert. Bei diesem Einsatz sind mehrere Teilschritte notwendig:

- Die Pulverkohle wird dem Wasser zugeführt und damit intensiv vermischt
- Die Störstoffe werden während dem Rühren adsorbiert und entfernt
- Nach einer möglichst vollständigen Einstellung des Adsorptionsgleichgewichtes kommt es zur Trennung der Aktivkohle

Das ständige und intensive Rühren fördert das Einstellen des Adsorptionsgleichgewichtes. Es kommt durch das Rühren zu einem Energieeintrag und mit zunehmendem Energieeintrag nimmt die Dicke des Grenzfilms ab, der das Aktivkohlepartikel umgibt. Dies führt zu einer Verringerung des Stofftransportwiderstandes und der durch den Grenzfilm hindurch an die äußere Oberfläche der Aktivkohlepartikels diffundierende Stoffstrom nimmt zu.

In der Praxis haben sich zwei Verfahren durchgesetzt: das einstufige und das zweistufige Pulverkohlenverfahren.

In der folgenden Abbildung 4 sind die beiden Verfahren schematisch dargestellt:

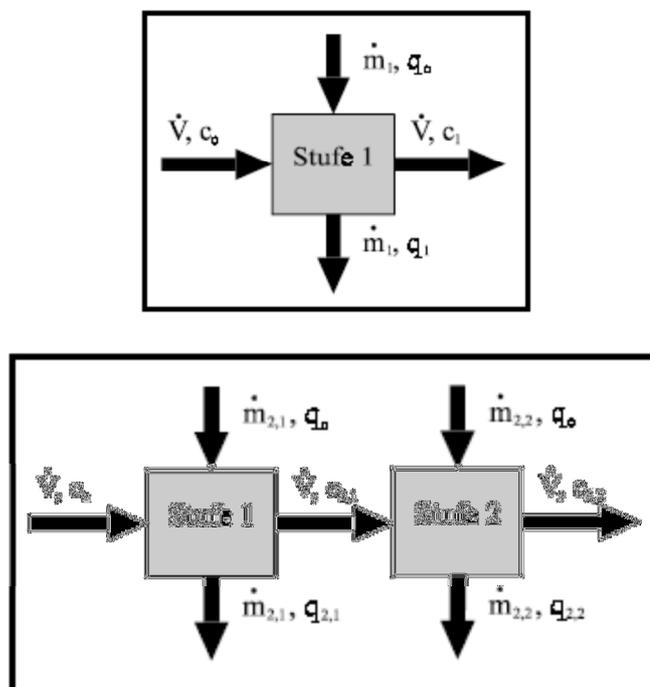


Abbildung 4: Schematische Darstellung des ein- und zweistufigen Pulverkohlenverfahrens [5]

Die insgesamt benötigte Aktivkohlemenge beim zweistufigen Pulverkohleverfahren kann zum Teil deutlich kleiner sein als beim einstufigen Verfahren. Dies führt einerseits zu geringeren Kosten, aber andererseits ist auf die höheren Investitionskosten bei der zweistufigen Pulverkohleanlage zu achten.

Aktivkohlen in Pulverform werden trocken oder als wässrige Lösungen vor oder simultan in die Flockungsstufe zudosiert. Die Vorteile von Pulverkohlen liegen in der Flexibilität der Dosierung je nach Abwasserbelastung und den verringerten Investitionskosten durch bereits existierende Belebungs- und Nachklärbecken.

Pulveraktivkohle kommt bei einem einstufigen Prozess vor oder in einer Flockungs- bzw. Fällungsstufe zum Einsatz. Dies ist ein Vorteil, da die Aktivkohle zusammen mit dem Schlamm aus der Flockungs- bzw. Fällungsstufe in einem Sedimentationsbecken abgezogen wird und sie kann wieder in das biologische Behandlungsbecken zugeführt werden. Es sollte aber beachtet werden, dass nicht alle Pulveraktivkohlepartikel in der Sedimentationsstufe entfernt werden können, aufgrund der niedrigen Sinkgeschwindigkeit der Feinstanteile. Daher sollte eine Tiefenfiltration folgen, beispielsweise in Form eines Schnellsandfilters.

Beim zweistufigen Prozess kann die zweite Dosierung beispielsweise zwischen der Sedimentationsstufe und dem Schnellfilter stattfinden. Es sollte nach der Dosierung ein Reaktionsbehälter für den Adsorptionsvorgang eingeplant werden. Die Abscheidung erfolgt dann über einem Schnellsandfilter.

3.1.4 Einsatz von Kornaktivkohle

Die Grundlagen über den Einsatz von Kornaktivkohle (GAK) sind aus [5] entnommen:

Kornaktivkohle wird nicht wie Pulveraktivkohle dem Wasserstrom zudosiert, sondern deren Einsatz erfolgt in Schüttungen, die von dem aufzubereitenden Wasser durchströmt wird.

In der Abbildung 5 zeigt einen Aktivkohlefilter zu verschiedenen Filterlaufzeiten t_F . Sie wird von einem konstanten Wasserstrom durchströmt, welches einen einzelnen Störstoff mit der Konzentration c_0 beinhaltet.

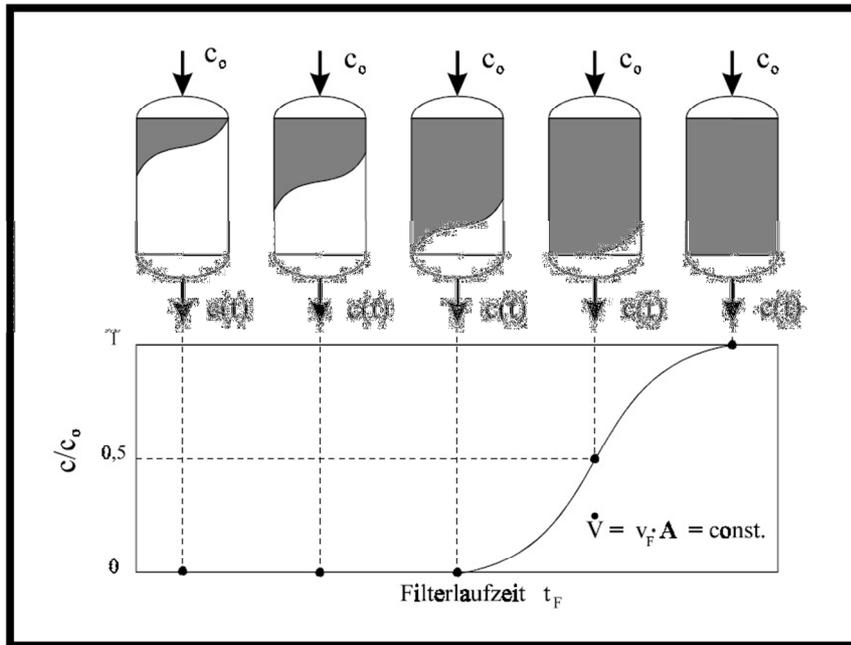


Abbildung 5: Schema der Betriebsweise von Aktivkohlefiltern [5]

Es bildet sich in der Schüttung eine Adsorptionsfront aus, welche auch Massenübergangszone bezeichnet wird. Hier findet der sogenannte Adsorptionsvorgang statt. Die Form der Zone ist abhängig von der Adsorptionskinetik und Adsorptionsgleichgewicht.

Ein Vorteil der Aktivkohlefiltern liegt daran, dass das Wasser in diesem Verfahren im Gegensatz zur Pulverkohleverfahren eine bestimmte Zeit lang störstofffrei ist. Ein weiterer Vorteil ist, dass die Ausnutzung der Adsorptionskapazität der Aktivkohle deutlich besser ist als beim Pulverkohleverfahren. Auch ein Vorteil ist, dass im Vergleich zum Pulverkohlenverfahren ein von adsorbierbaren organischen Störstoffen praktisch freies Wasser aufbereitet werden kann. Außerdem kann die erschöpfte Kornkohle durch thermische Prozesse reaktiviert werden, was bei Pulverkohle nicht möglich ist.

Diese Vorteile eines Aktivkohlefilters müssen allerdings mit hohen Inverstitionskosten erkaufte werden. Es ist aber auch die höheren Anschaffungskosten der Kornkohle zu berücksichtigen.

Die Kornaktivkohlefilter werden meist in einer Höhe von 2 bis 3 m aufgeschüttet und mit einer Filtergeschwindigkeit von 10 bis 25 m/h betrieben. Die Kohlefilter können eine offene oder eine geschlossene Bauweise vorweisen. Üblicherweise wird der Filterkessel aus Stahl produziert, die im Inneren mit einer Schutzschicht versehen sind um die Kesselwand vor Korrosion zu schützen.

3.1.5 Einsatz von Pulveraktivkohle in der Abwasserreinigung

In kommunalen Kläranlagen wird die pulverförmige Aktivkohle als wässrige Lösung oder trocken vor oder simultan in die Flockungsstufe zudosiert. Die Pulveraktivkohle ist eine effektive und kostengünstige Lösung für die Entfernung der Rückstände von Arzneimittel, endokrinen Substanzen, und Röntgenkontrastmittel, die im Ablauf kommunaler Kläranlagen vorkommen.

Nach einer mechanischen Reinigung zur Abtrennung der Grobstoffe erfolgt eine biologische Reinigung und einer abschließenden Adsorptions- bzw. Flockungsphase. Ein Teil der Pulveraktivkohle kann durch Sedimentation aus dem Abwasser abgetrennt werden und wieder in das biologische Behandlungsbecken zurückgeführt werden. Die Vorteile des Einsatzes von Aktivkohle liegt darin, dass eine Flexibilität in der Dosierung, je nach Abwasserbelastung, vorliegt. Weiters sind die Inverstitutionskosten verringert aufgrund bereits existierende Belebungs- und Nachklärbecken. [10]

Laut [26] führt der Einsatz von Pulveraktivkohle, zwischen Nachklärbecken und Kontaktbecken (siehe Abbildung 6), zu einer Adsorption wie in Tabelle 1 aufgelistet.

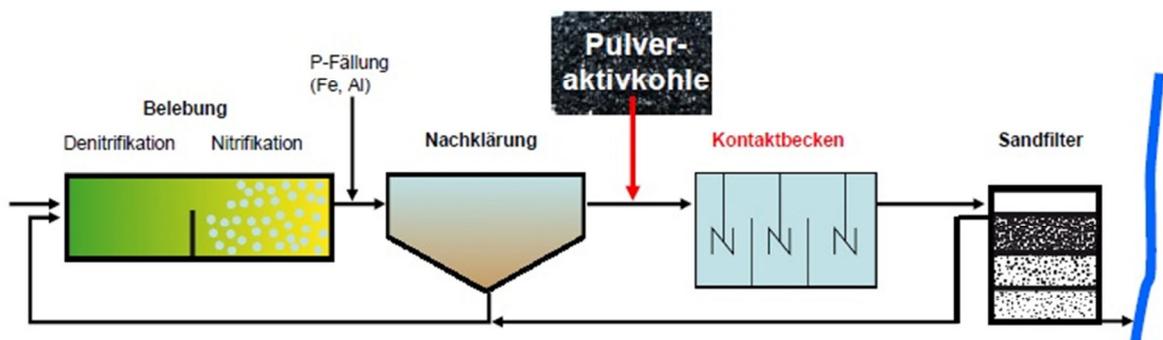


Abbildung 6: Aufbauschritte einer Kläranlage mit Einsatz von Pulveraktivkohle (<http://www.pills-project.eu>)

Tabelle 1: Adsorption von verschiedenen Arzneimitteln (<http://www.pills-project.eu>)

Adsorption	Arzneimittel
> 80 %	Diclofenac
50 – 80 %	Carbamazepin
< 20 %	Sulfamethoxazol

3.2 Adsorption

Unter dem Begriff Sorption ist allgemein die Anreicherung von Molekülen eines Stoffes aus einer molekulardispersen flüssigen oder gasförmigen Lösung an eine andere oder in eine anderen Phase zu verstehen. Während die Moleküle bei der Absorption in einer anderen Phase angereichert werden, verläuft die Anreicherung bei der Adsorption an der Grenzfläche zwischen fester und fluider Phase, wobei letztere sowohl flüssig als auch gasförmig sein kann. Ursache für den Sorptionsvorgang sind elektrodynamische (Van der Waals-Kräfte) und elektrostatische Wechselwirkungen, also sogenannte Oberflächenkräfte, und nicht eine chemische Bindung. Daher wird der Adsorptionsvorgang auch als Physisorption bezeichnet [5].

Der dabei ablaufende Vorgang lässt sich in einzelne Schritte unterteilen, mit verschiedenen chemischen bzw. physikalischen Aktivitäten als Ursache:

- Auf Geschwindigkeitsgradienten basierende Transport von Adsorbat und Adsorbens zueinander (im Wasser gelöste organische Verbindung und z.B. Aktivkohle). Dabei unterscheidet man zwei verschiedene Verfahren, das Einmischverfahren und das Säulenverfahren. Beim Einmischverfahren ist entweder das Adsorbat oder das Adsorbens in Bewegung und beim Säulenverfahren ist nur das Adsorbat in Bewegung und das Adsorbens in Ruhelage.
- Aufgrund der Brown'sche Diffusion erfolgt der Transport des Adsorbates durch die Trennschicht an der Phasengrenze fest-flüssig.

3.2.1 Grundbegriffe der Adsorption

Folgende Begriffe aus [11] werden bei der Adsorption verwendet:

- **Adsorbens:** Ein Adsorbens oder ein Substrat wird als ein Stoff bezeichnet, der Teilchen aus einer benachbarten gasförmigen oder flüssigen Phase an seiner Grenzfläche anreichert bzw. adsorbiert.
- **Adsorptiv:** Adsorptiv sind jene Teilchen, die sich in der benachbarten gasförmigen oder flüssigen Phase befinden und sich auf dem Adsorbens anlagern.
- **Adsorbat:** Ein an der Oberfläche eines Adsorbens angelagertes (adsorbiertes) Teilchen wird als Adsorbat bezeichnet. Oft wird auch die Kombination aus dem Adsorbens mit dem an ihm adsorbierten Stoff (Adsorptiv) als Adsorbat bezeichnet.

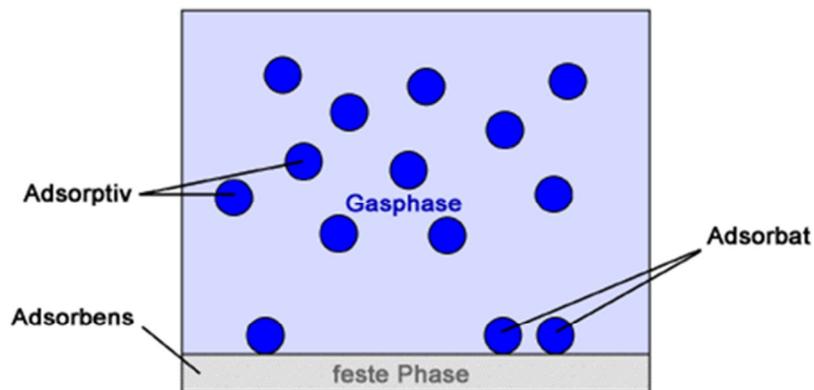


Abbildung 7: Veranschaulichung verschiedener Grundbegriffe der Adsorption
(Quelle: <http://www.chemgapedia.de>)

Der **Bedeckungsgrad** ist ein Maß für die Adsorption an einer Oberfläche und lässt sich aus dem Quotient der Anzahl der besetzten Adsorptionsplätze durch die Anzahl der vorhandenen Adsorptionsplätze.

Liegt der Bedeckungsgrad bei 0, heißt es, dass alle Plätze frei sind und liegt er bei 1, dann sind alle Plätze besetzt.

Die **Adsorptionsgeschwindigkeit** hängt von mehreren Faktoren, vorallem von der Oberflächendiffusion, ab. Das heißt, sie hängt davon ab, wie schnell die Energieaufnahme des auftretendes Teilchens durch das Adsorbens erfolgt. Der Anteil der Stöße, die zu einer Adsorption führen, wird als Adsorptionswahrscheinlichkeit bezeichnet. Sie lässt sich aus dem Quotient der Häufigkeit der Adsorption der Teilchen durch Häufigkeit des Auftreffens von Teilchen.

3.2.2 Gleichgewicht der Adsorption

Die Grundlagen über das Gleichgewicht der Adsorption sind aus [5] entnommen:

Bei der Adsorption werden Teilchen adsorbiert, aber gleichzeitig auch andere Teilchen desorbiert, also freigesetzt. Teilchen in einer Flüssigkeit oder in einer Gasphase haften sich an die Oberfläche des Feststoffes, werden für eine kurze Zeit festgehalten, lösen sich dann und kehren wieder in die Flüssigkeit bzw. in die Gasphase zurück. Im gleichen Moment haften andere Teilchen an der Oberfläche des Feststoffes usw. Nach einer Zeit tritt ein Gleichgewicht zwischen der Anzahl der haftenden Teilchen und der gelösten Teilchen. Dieses Gleichgewicht wird Adsorptionsgleichgewicht genannt. Das Adsorptionsgleichgewicht liegt vor, wenn sich in einem Zeitintervall genau so viele Teilchen von der Oberfläche lösen, wie gebunden werden.

Ein Gleichgewicht, welches sich nach hinreichend langer Zeit zwischen sich in einer fluiden Phase befindenden Adsorptivmolekülen und dem Adsorpt einstellt, wird Adsorptionsgleichgewicht genannt. Im Gleichgewicht liegt dann ein Anteil der Adsorptivmoleküle an der Adsorbensoberfläche adsorbiert vor, während der andere Teil sich in der fluiden Phase befindet.

Beim Adsorptionsgleichgewicht muss zwischen dem Gleichgewicht von Einzelstoffen und dem Adsorptionsgleichgewicht von Mehrstoffsystemen unterschieden werden. Also ob es sich um die Adsorption eines einzelnen Adsorptivs handelt, oder ob weitere Adsorptivs vorhanden sind, die sich um Plätze auf der Oberfläche konkurrieren.

3.2.3 Adsorptionsgleichgewicht von Einzelstoffen

Die Grundlagen über das Adsorptionsgleichgewicht von Einzelstoffen sind aus [5] entnommen:

In einer Lösung mit einem Volumen von V mit einem Adsorptiv der Konzentration von c_0 wird eine Aktivkohlemenge m hinzugefügt und durchmischt. Nach einer hinreichend langer Zeit entsteht in dieser Lösung eine Konzentration c des Adsorptivs. Diese Konzentration c ist mit der an der Aktivkohle adsorbierten Adsorptivs im Gleichgewicht. Die Menge an der Aktivkohle adsorbierten Adsorptivs wird als Beladung q bezeichnet und kann mit Hilfe der folgenden Massenbilanz beschrieben werden:

$$V \cdot c_0 + m \cdot q_0 = V \cdot c + m \cdot q$$

Ist die Anfangsbeladung der Aktivkohle gleich null ($q_0 = 0$), dann folgt draus:

$$q = \frac{V}{m} \cdot (c_0 - c)$$

Auf der folgenden Abbildung 8 ist der Adsorptionsvorgang grafisch dargestellt:

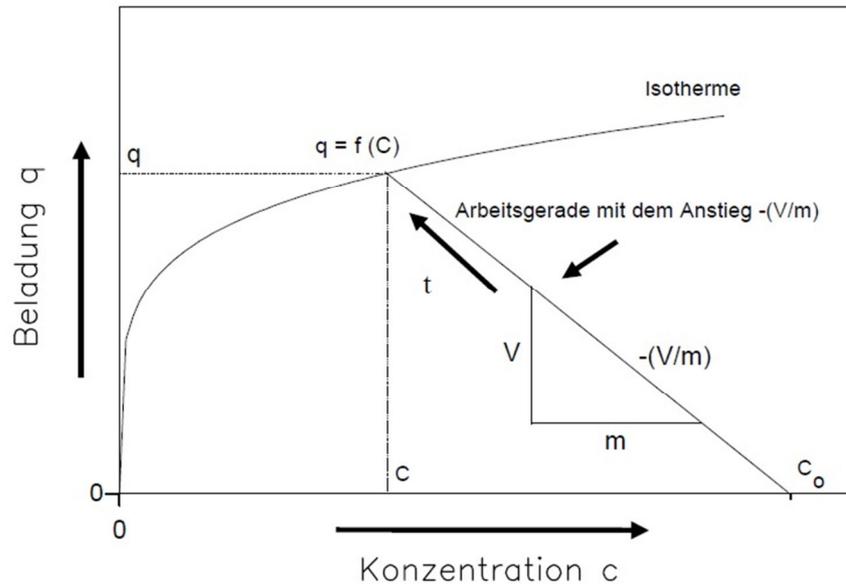


Abbildung 8: Aufnahme eines Isothermenpunktes in einem Batch-Versuch [5]

Aus der Grafik ist zu erkennen, dass die Beladung q von der Konzentration c abhängig ist. Der Anfangszustand des Systems ist durch den Punkt $c = c_0$ und $q = 0$ auf der x-Achse gekennzeichnet. Die Arbeitsgerade hat einen negativen Anstieg von V/m , welches vom System mit alle q/c -Werte durchlaufen wird. Nach einer hinreichend langer Zeit erreicht es eine Gleichgewichtszustand, in dem q und c konstant sind. Dieser Gleichgewichtszustand befindet sich auf der Adsorptionsisothermen.

Mehreren Lösungen mit dem gleichen Volumen und der gleichen Anfangskonzentration c_0 werden unterschiedliche Mengen an Aktivkohle zudosiert. Die Isothermenpunkte werden über Arbeitsgeraden mit unterschiedlich großer Steigung erreicht und erhält durch die unterschiedlichen Isothermenpunkte den Verlauf der Isothermen.

Wenn bei niedrigen Gleichgewichtskonzentration hohe Beladungen erreicht werden so wird von sogenannte günstige Isothermen gesprochen. Die Kurve hat dabei einen konvexen Verlauf bezüglich der x-Achse und in der Praxis führt dies zu einer guten Ausnutzung der Aktivkohle.

4 Material und Methoden

4.1 Verwendete Materialien

4.1.1 Pulveraktivkohle

Die verwendete Pulveraktivkohle wurde von der Firma Donauchemie AG mit Sitz in Pischelsdorf in Niederösterreich zur Verfügung gestellt.

Es handelt sich dabei um das Produkt Epibon A, das für die Behandlung von Flüssigkeiten in der Perkulation verwendet wird [22].

4.1.2 Arzneimittel

Für die Versuche wurden vier verschiedene Arzneimittel verwendet: Carbamazepin, Ibuprofen, Sulfamethoxazol und Diclofenac. Es wurde aber auch Versuche mit einem Mix aus allen vier Arzneimittel durchgeführt. Es wurden die genannten vier Arzneimittel gewählt, weil sie ein großes Spektrum von gering bis gut adsorbierbar abdecken (siehe Tabelle 1).

Pharmazeutika werden in reiner Form oder als Metabolit ausgeschieden und gelangen auf unterschiedliche Weise in aquatische Systeme. Die Substanzen werden am häufigsten im Abwasser der Industrie, der Landwirtschaft und von Krankenhäusern gefunden.

Da Pharmazeutika oft nicht gut in Abwasserkläranlagen behandelt werden, gelangen sie als Kontamination in Flüsse, Seen, Grundwasser und Trinkwasser.

Die in der Tiermedizin verwendeten Medikamente gelangen zudem über den Dung auf die Felder oder durch den direkten Gebrauch bei der Fischzucht ins Wasser. Durch den Wassertransport und die Nahrungskette gelangen die Substanzen somit direkt oder indirekt in verschiedene Organismen. Diclofenac zeigt eine hohe Tendenz zur Bioakkumulation mit Biokonzentrationsfaktoren bis zu 2700 in der Leber und bis 1000 in der Niere von Fischen. [18]

In den nachfolgenden Kapiteln werden die einzelnen Arzneimittel genauer beschrieben. Weitere Eigenschaften der einzelnen Arzneimittel sind im Anhang I Übersicht über die Eigenschaften der untersuchten Medikamenteausgeführt.

4.1.2.1 Carbamazepin

Tabelle 2: Chemische Struktur und Molekularformel von CBZ

Molekularformel	Strukturformel ¹⁾
$C_{15}H_{12}N_2O$	

¹⁾ Quelle: www.sigmaaldrich.com [letzter Zugriff: 02.03.2014]

Carbamazepin (CBZ) ist ein Antiepileptikum, wird aber auch bei der Behandlung von Depressionen und Multipler Sklerose eingesetzt. CBZ hemmt die Erregbarkeit der Nervenzellen und die Erregungsausbreitung im Gehirn [6]. Die Dosierung von Carbamazepin beträgt zwischen 200 und 1600 mg pro Tag. Es wird im Körper zu 97 % bis 98 % metabolisiert, sodass nur 2 % bis 3 % des verabreichten CBZ unverändert wieder ausgeschieden werden und in die Kläranlage gelangen. Die Substanz wird weder in Kläranlagen noch im Untergrund und Uferfiltrat nennenswert abgebaut bzw. durch Adsorption zurückgehalten und verfügt über eine hohe Mobilität in der (un)gesättigten Zone. Die Abnahme der Konzentration von Carbamazepin im Grundwasser erfolgt vorwiegend durch Verdünnung [14].

„Bei Nutzung des Grundwassers als Trinkwasser können Spuren von CBZ im Trinkwasser enthalten sein. (...) Die amerikanische Umweltbehörde EPA wies darauf hin, dass Carbamazepin, da es sich durch hohe Persistenz auszeichnet, möglicherweise das am weitesten verbreitete Arzneimittel in der Umwelt ist und auch ins Trinkwasser gelangen kann. Bei Berechnen der durchschnittlichen Aufnahmemenge durch das Trinkwasser während der gesamten Lebenszeit würde aber in Summe nicht mehr als eine therapeutische Tagesdosis (200 – 1600 mg) erreicht werden. Wenn man von einer Konzentration von 100 ng/l Carbamazepin im Trinkwasser, einer Aufnahme von drei Litern Trinkwasser pro Tag und einer Lebensdauer von 80 Jahren ausginge, würde man in Summe 8,76 mg Carbamazepin während der gesamten Lebenszeit aufgenommen haben. Dies deutet darauf hin, dass keine Gefährdung der menschlichen Gesundheit durch Aufnahme von geringen Spuren Carbamazepin (im Nanogramm-Bereich) im Trinkwasser besteht“ [Zitat aus 14].

4.1.2.2 Diclofenac

Tabelle 3: Chemische Struktur und Molekularformel von DFC

Molekularformel	Strukturformel ¹⁾
$C_{14}H_{11}Cl_2NO_2$	

¹⁾ Quelle: www.sigmaaldrich.com [letzter Zugriff: 02.03.2014]

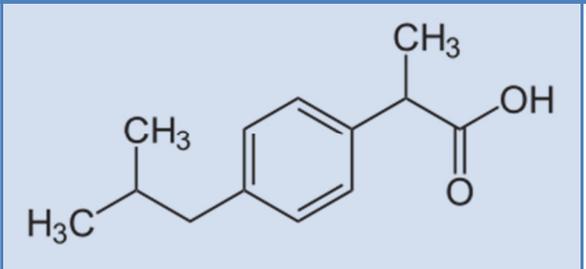
„Diclofenac (DFC) ist ein Wirkstoff aus der Gruppe der nicht-steroidalen Entzündungshemmer mit schmerzlindernden, fiebersenkenden und entzündungshemmenden Eigenschaften. Die Wirkungen beruhen auf der Hemmung der Cyclooxygenase und damit der reduzierten Prostaglandinsynthese. Diclofenac wird zur Behandlung von Schmerzen und Entzündungszuständen verschiedener Ursache eingesetzt“ [Zitat aus 17].

Der Verbrauch von Diclofenac in Deutschland beträgt nach pharmazeutischen Berichten bei 86 t, wobei die Dunkelziffer weit höher anzusetzen ist [18] und daher eines der bedeutendsten Pharmazeutika im Wasserkreislauf. Da dieser Stoff nur teilweise in Abwasserreinigungsanlagen entfernt wird, sind weitreichende Effekte möglich und diese können in Form von Bioakkumulation, Reaktion mit anderen Stoffen oder Störung des Hormonsystems verschiedener Organismen auftreten [19].

Laut [20] werden 15 % der verabreichten Dosis in unveränderter Form und weniger als ein Prozent in Form von Glukuronsäurekonjugate wieder ausgeschieden. Bei der konventionellen Abwasserbehandlung wurden wie bei CBZ maximal 10 % des DCF abgebaut. In Kläranlagen wurden in Zuflüssen und Abflüssen Konzentrationen von 3,0 bzw. 2,5 µg/L gemessen [21].

4.1.2.3 Ibuprofen

Tabelle 4: Chemische Struktur und Molekularformel von IBF

Molekularformel	Strukturformel ¹⁾
$C_{13}H_{18}O_2$	

¹⁾ Quelle: www.sigmaaldrich.com [letzter Zugriff: 02.03.2014]

Ibuprofen (IBF) ist wie DFC nichtsteroidales Antiphlogistikum (NSAID). Es wirkt entzündungshemmend, fiebersenkend, abschwellend und schmerzstillend. Es wird eingesetzt bei leichten bis mäßigen Schmerzen, wie zum Beispiel Regelschmerzen, Kopf und Zahnschmerzen, Rückenschmerzen sowie gegen Fieber. IBP ist weit verbreitet, weil es in vielen nicht verschreibungspflichtigen Schmerzmitteln enthalten ist. 1 bis 8 % werden unverändert, rund 15 % als Glukuronsäurekonjugate wieder ausgeschieden [15].

4.1.2.4 Sulfamethoxazol

Tabelle 5: Chemische Struktur und Molekularformel von SMX

Molekularformel	Strukturformel ¹⁾
$C_{10}H_{11}N_3O_3S$	

¹⁾ Quelle: www.sigmaaldrich.com [letzter Zugriff: 02.03.2014]

Sulfamethoxazol (SMX) ist ein Antibiotikum aus der Gruppe der Sulfonamide, das vor allem bei der Bekämpfung von Harnwegsinfekten und Lungenentzündungen verwendet wird.

Sulfomethoxazol führt zu einer Hemmung der bakteriellen Folsäuresynthese. Dabei wird das Enzym Dihydrofolsäuresynthetase inhibiert. Alleine wirkt es nur bakteriostatisch, erst in Kombination mit Trimethoprim (in Kombination Cotrimoxazol bezeichnet) entsteht eine synergistische, bakterizide Wirkung. [16]

4.1.3 Bezugsquellen der verwendeten Arzneimittel

Für jedes Medikament wurde eine Stammlösung hergestellt, indem das Arzneimittel mit einer Konzentration von 1 g/L in Ethanol gelöst wurde. Es wurde Ethanol mit einer Reinheit von 99,9% von der Firma VWR Chemicals verwendet. In Tabelle 6 sind Informationen zur Herkunft der verwendeten Medikamente zusammengestellt.

Tabelle 6: Bezugsquelle der verwendeten Medikamente

Arzneimittel	Abkürzung	Hersteller	CAS-Nr.
Carbamazepin	<i>CBZ</i>	SIGMA	298-46-4
Ibuprofennatriumsalz	<i>IBF</i>	SIGMA	31121-93-4
Sulfamethoxazol	<i>SMX</i>	SIGMA	723-47-6
Diclofenacnatriumsalz	<i>DFC</i>	SIGMA	15307-79-6

4.2 Versuchsmedien

4.2.1 Leitungswasser

Für alle Versuche mit allen Arzneimitteln kam Leitungswasser (LW) aus der Wasserversorgung der Stadt Wien zum Einsatz. Entnommen wurde das Leitungswasser direkt aus dem Wasserhahn. Da die Entnahmestelle im 4. Wiener Bezirk liegt, kommt das Leitungswasser durch die I. Hochquellenwasserleitung aus dem Rax- und Schneeberggebiet.

Die Wasserhärte im 4. Bezirk liegt zwischen 6°dH und 11°dH, was einem mittelharten Wasser entspricht [24].

Im Laufe der Arbeit wird der Begriff „Leitungswasser“ durch „Trinkwasser“ (TW) ersetzt.

4.2.2 Deionisiertes Wasser

Deionisiertes Wasser (DW) wurde bei allen Vorversuchen verwendet und beim ersten Versuch mit einem Arzneimittel. Weiters wurden alle Laborutensilien, die gewaschen wurden, zusätzlich mit DW ausgespült.

Deionisiertes Wasser wurde durch einen Ionenaustauscher (Mischbettharz, von der Firma BVS Wassertechnik, TYPE SD2800) aus Leitungswasser hergestellt. Dabei werden die Mineralstoffe entfernt, daher wird es auch demineralisiertes Wasser genannt.

4.2.3 Kläranlagenablauf

Kläranlagenablauf oder gereinigtes Abwasser wurde bei allen Versuchen mit Arzneimittel eingesetzt. In Tabelle 7 ist vorzufinden, welcher Ablauf aus welcher Kläranlage und von welchem Tag verwendet wurde.

Für die Hauptversuche wurden Abläufe aus der Hauptkläranlage Wien (HKA Wien) und aus der Kläranlage Mistelbach eingesetzt.

Die Tabelle 7 zeigt einen Überblick über alle Versuche, die durchgeführt wurden und unter anderem auch die Information darüber, welches Medium zur Anwendung kam.

Tabelle 7: Überblick über die verwendete Medien (TW...Trinkwasser, DW...deionisiertes Wasser)

	TW	DW	Kläranlagenablauf	Arzneimittel
Versuch 1		X		CBZ
Versuch 2			HKA Wien 25.06.13	CBZ
Versuch 3	X			IBF
Versuch 4			Mistelbach 10.09.13	IBF
Versuch 5			Mistelbach 10.09.13	IBF
Versuch 6			HKA Wien 16.09.13	IBF
Versuch 7	X		HKA Wien 16.09.13	DCF

Versuch 8	X		HKA Wien 16.10.13	DCF
Versuch 9	X		HKA Wien 16.10.13	SMX
Versuch 10	X		HKA Wien 21.10.13	SMX
Versuch 11	X		HKA Wien 21.10.13	MIX
Versuch 12	X		HKA Wien 03.02.14	MIX

4.3 Verwendete Nomenklatur

In diesem Kapitel wird die verwendete Nomenklatur für die Hauptversuche beschrieben um eine leichtere Übersicht über die Versuche und Ergebnisse zu haben.

Bei Versuchen (Versuch 1 bis Versuch 6) mit unterschiedlichen Volumina (200 ml und 400 ml) gilt folgende Nomenklatur:

1. Die ersten drei Großbuchstaben geben an, welches Arzneimittel verwendet wurde (*SMX*, *CBZ*, *IBF*, *DFC* und *MIX*, steht für eine Mixtur aller vier Arzneimittel)
2. Die nächsten zwei Kleinbuchstaben geben an, welches Medium verwendet wurde (*aw* steht für gereinigtes Abwasser, *lw* für Leitungswasser/Trinkwasser und *dw* für deionisiertes Wasser)
3. Die nächsten Stellen geben das Volumen der verwendeten Kolben an (*0,5L* mit 200 ml Versuchsmedium und *1L* mit 400ml Versuchsmedium)
4. Die vorletzte Stelle ist abhängig von der Konzentration der Pulveraktivkohle (*0* steht für keine Pulveraktivkohle, *1* hat die niedrigste Konzentration und dann aufsteigend, mit der Ausnahme von *4*)
5. Und die letzte Stelle zur Unterscheidung der Wiederholungen (*A*, *B* und *C*)

Bei allen anderen Versuchen (Versuch 6 bis Versuch 12) betrug das Volumen nur 200 ml, weshalb der dritte Punkt mit *0,5L* und *1L* entfällt.

Bei einzelnen Proben wurden keine Arzneimittel verwendet. Diese Proben haben am Anfang ihrer Benennung „ohne“ stehen.

Zum Beispiel:

- **CBZaw1L0A:** Diese Abkürzung steht dafür, dass als Arzneimittel Carbamazepin verwendet wurde. Als Medium kam Abwasser zum Einsatz in einem Kolben mit einem Fassungsvermögen von einem Liter. Es kam keine Pulveraktivkohle zum Einsatz und dieser Versuch ist der erste von zwei bzw. drei Wiederholungen, wie durch das A am Ende erkenntlich wird.

- **ohneDCFlw4B:** Diese Abkürzung steht dafür, dass kein Diclofenac zum Einsatz kam. Aktivkohle wurde in Leitungswasser gelöst und es handelt sich hier um eine Wiederholung.

4.4 Versuchsaufbau

Im folgenden Kapitel wird der Versuchsaufbau der Vorversuche und Hauptversuche erläutert sowie die verwendeten Materialien.

4.4.1 Vorversuche

Für die Vorversuche wurden folgende Utensilien und Geräte verwendet:

- Methylenblau von der Firma MERCK, Art. 6040
- Pulveraktivkohle von der Firma Donauchemie AG (Epibon A)
- Ethanol (Ethanol absolut 99,9%, VWR Chemicals) zur gründlichen Reinigung der verwendeten Utensilien, um Fehler bzw. Fälschungen durch vorhandene Reste zu vermeiden
- Eine analytische Waage der Firma Mettler mit der Nummer AE 200 (Empfindlichkeit von 0,1 mg) zum Abwiegen der Pulveraktivkohle, die eingesetzt wurde (Abbildung 9)
- Zwei Schüttler der Firma B. Braun, CERTOMAT U (Abbildung 11), mit jeweils einem Aufsatz zum Durchmischen der Proben
- Photometer der Firma Hachlange (DR 2800) und der Firma Dr. Lange (CADA 100)
- Ein Temperaturmessgerät der Firma Dostmann, P 650
- Papierfilter mit einem Durchmesser von 110 mm von der Firma Whatman mit unterschiedlicher durchschnittlicher Porengröße (Größen 1, 2 und 4)
- Messkolben in unterschiedlichen Größen
- Erlenmeyerkolben mit einem Fassungsvermögen von 0,5 Liter (Abbildung 10)
- Glasbecher
- Pipetiergeräte
- Reagenzgläser
- Filterhalterungen

Folgende Versuchsvorbereitungen waren für die Vorversuche notwendig:

- Kalibrierung der analytischen Waage
- Sorgfältige Reinigung aller Gefäße unter anderem mit Ethanol
- Herstellung einer Stammlösung mit einer Konzentration von 1 g/L Methylenblau

- Herstellung einer Verdünnungsreihe mit 0; 0,5; 2,0; und 10,0 mg/L Metylenblau

4.4.2 Hauptversuche

Für die Versuche wurden folgende Utensilien und Geräte zur Hilfe genommen:

- Pulveraktivkohle von der Firma Donauchemie AG (Epibon A)
- Eine analytische Waage der Firma Mettler mit der Nummer AE 200 (Empfindlichkeit von 0,1 mg) zum Abwiegen der Pulveraktivkohle, die eingesetzt wurde (Abbildung 9)
- Zwei Schüttler der Firma B. Braun, CERTOMAT U (Abbildung 11), mit unterschiedlichen Aufsätzen zum Durchmischen der Proben
- Ein HPLC-Gerät (Abbildung 13) der Firma HITACHI, Primaide, zum Messen der Arzneimittelkonzentrationen
- Ein Temperaturmessgerät der Firma Dostmann, P 650
- Glasmikrofaserfilter (Durchmesser von 24 mm) von der Firma VWR, Cat. No. 516-0881, mit 1 µm Porengröße zum Abfiltern der Aktivkohle vor dem Messen im HPLC-Gerät
- Spritzen mit einem Fassungsvermögen von 10 mL zur Entnahme der Probe und anschließend zum Filtrieren
- Erlenmeyerkolben mit einem Fassungsvermögen von 0,5 Liter und 1 Liter (Abbildung 10)
- Glasbecher mit einem Fassungsvermögen von einem Liter
- Messkolben in unterschiedlichen Größen
- Ethanol (Ethanol absolut 99,9%, VWR Chemicals) zur gründlichen Reinigung der verwendeten Utensilien, um Fehler bzw. Fälschungen durch vorhandene Reste zu vermeiden
- Fläschchen (english: vials) aus Glas (2 ml) mit Teflondeckel wurden nach dem Filtrieren mit der Probe befüllt für die anschließenden Messungen im HPLC-Gerät (Abbildung 12)
- Eine Edelstahlhalterung für Membranfilter
- Pipetiergeräte
- Diclofenac, Ibuprofen, Carbamazepin und Sulfamethoxazol (genauere Beschreibung über die Bezugsquelle siehe Tabelle 6)
- Glasschiffchen zum Abwiegen der Pulveraktivkohle



Abbildung 9: Analytische Waage



Abbildung 11: Schüttler der Firma B. Braun



Abbildung 10: Erlenmeyerkolben
(<http://www.chemoline.de>)



Abbildung 12: Fläschchen (vials) mit Teflondeckel
(<http://www.reiss-laborbedarf.de>)

Für die Laborversuche waren einige Versuchsvorbereitungen notwendig, die im folgenden aufgelistet sind:

- Kalibrierung der analytischen Waage
- Sorgfältige Reinigung aller Gefäße unter anderem mit Ethanol
- Herstellung der Medikamenten-Stammlösung: Es wurden Stammlösungen mit einer Konzentration von 1 g/L hergestellt. Dabei wurden 0,25 g eines Arzneimittels in 250 ml Ethanol gelöst
- Anschaffung des Ablaufes aus einer Kläranlage

4.5 Analytische Methoden

4.5.1 Photometer

Die Adsorption von Methylenblau an pulverförmige Aktivkohle bei Zimmertemperatur wurde untersucht und die Auswertung der Vorversuche erfolgte mittels einem Photometer. Die Bestimmung der Restkonzentration an Methylenblau wurde photometrisch durchgeführt.

Es kamen zwei verschiedene Photometer zum Einsatz, der CADAS 100 (Firma Dr. Lange) und DR 2800 (Firma Hachlange). Der DR 2800 ist ein Spektralphotometer und beim CADAS 100 handelt es sich um ein Filterphotometer.

Beim **Spektralphotometer** kommt es zu einer Messung des Absorptionsvermögens einer Substanz für Licht einer bestimmten Wellenlänge. Eine quantitative Analyse ist dann möglich wenn die Substanz bekannt ist und in gelöster Form vorliegt. Dabei kann durch das Messen Adsorption bei einer bestimmten Wellenlänge die Konzentration des gelösten Stoffes bestimmen werden. [24]

Ein Spektralphotometer besteht aus, einer Lichtquelle, einem Monochromator, einer Filtereinrichtung, den Küvetten zur Aufnahme der Messlösung, einem Strahlungsempfänger und einer Verstärker- und Anzeigeeinheit. Wolfram- bzw. Halogenlampen dienen zur Messung im sichtbaren Bereich (> 330 nm). Für den Ultraviolettbereich werden Niedervolt-D2 oder Hg-Lampen verwendet. [25]

Bei einem **Filterphotometer** kommt es zum Einsatz von festen Wellenlängen über Filter und ist ein mechanikfreies Messinstrument.

4.5.2 HPLC-Gerät

Für die Bestimmung des Adsorptionsverhaltens der einzelnen Stoffe wurden Proben in Fläschchen (*englisch: vials*, Glas, 2 mL) gefüllt. Die Fläschchen wurden mit Schraubkappen inklusive Septum verschlossen und bis zur Analyse gekühlt gelagert. Die Proben wurden noch am Probenentnahmetag (ein Tag nachdem die Versuche gestartet wurden) über HPLC (high performance liquid chromatography) analysiert.

Die Funktionsweise des HPLC-Geräts wird in Kapitel 4.5.2.1 erläutert.

Die Bestimmungs- und Nachweisgrenzen der eingesetzten Medikamente für den eingesetzten HPLC-Gerät sind in Tabelle 8 aufgelistet.

Tabelle 8: Bestimmungs- und Nachweisgrenzen der eingesetzten Medikamente

Arzneimittel	Abkürzung	Bestimmungsgrenze [ng/L]	Nachweisgrenze [ng/L]
Carbamazepin	<i>CBZ</i>	260	135
Ibuprofen	<i>IBP</i>	1300	650
Sulfamethoxazol	<i>SMX</i>	215	110
Diclofenac	<i>DFC</i>	260	135

4.5.2.1 Funktionsweise des HPLC-Geräts

„Die Hochleistungs-Flüssigkeitschromatographie (kurz: HPLC) ist ein Chromatographie-Verfahren, das sich in den 60er Jahren aus der Säulenchromatographie entwickelt hat. Bei der HPLC findet die chromatographische Trennung in einer Säule zwischen einer stationären und einer mobilen Phase statt. Die stationäre Phase ist eine Säule, die sehr kleine, poröse Teilchen enthält, und die mobile Phase ist ein Lösungsmittel bzw. -gemisch, welches mit hohem Druck durch die Säule gepreßt wird. Da mit hohem Druck gearbeitet wird, wird die HPLC auch Hoch-Druck-Flüssigkeits-Chromatographie (High Pressure Liquid Chromatography) genannt“ [Zitat aus 23].

Die HPLC-Messungen erfolgten für die Versuche in einem Gerät der Firma HITACHI Primaide. Ein Aufbau dieses Gerätes wird in Abbildung 13 dargestellt.

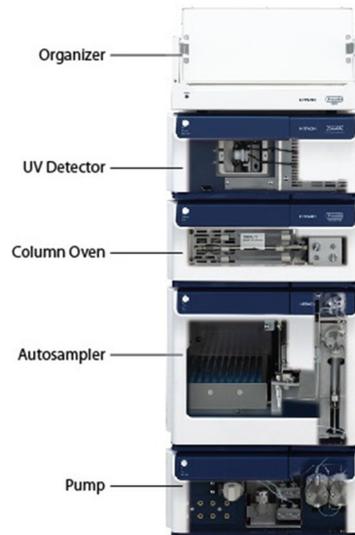


Abbildung 13: Aufbau des HPLC-Geräts (<http://hitachi-hta.com>)

Die Messungen wurden unter folgenden Randbedingungen durchgeführt:

- Die Mobile Phase (Elutionsmittel) des verwendeten Geräts setzte sich aus 60 % Puffer, 0,1 % Essigsäure und 40 % Acetonitril zusammen. Sie besaß einen pH-Wert von 5 und hatte eine Geschwindigkeit von 0,8 mL/min. Es wurden 50 µL eingespritzt.
- Die Trennsäule war 125 mm lang und enthielt die Stationäre Phase – in diesem fall RP-18 mit Partikeldurchmessern von 5 µm. RP-18 bezeichnet ein chemisch modifiziertes Kieselgel mit einer C₁₈-Kette ($-(\text{-CH}_2)_{17}\text{CH}_3$), eine unpolare lipophile Phase, die eine sogenannte Umkehrphase bildet.
- Der verwendete Detektor war ein Massenspektrometer von der Firma AB SCIEX 3200 Q TRAP.
- Die Messungen wurden bei einer Raumtemperatur von 21 °C durchgeführt.

Die Mobile Phase wurde in das HPLC-Gerät eingespritzt. Die Trennung der enthaltenen Stoffe für die letzten zwei Versuche (Versuche wo alle Arzneimittel zugefügt wurden) erfolgte in der Trennsäule. Die unterschiedliche Größe der Stoffmoleküle führte zu einer Bindung an die Stationäre Phase zu unterschiedlichen Zeiten. Die Retentionszeit in der Trennsäule ist abhängig von den Substanzeigenschaften und gibt Information über die Identität des Stoffes an. Die Höhe des Signals am Detektor ist abhängig von der Konzentration der Substanz und aus der darunter liegende Peakfläche kann die Konzentration der Stoffe in der Probe abgelesen werden.

Um herauszufinden, welcher Stoff nach welcher Retentionszeit im Chromatogramm auftritt, mussten zuerst Standardde der einzelnen untersuchten Arzneimittel und ein Mischstandard, der alle Arzneimittel enthielt, im HPLC-Gerät analysiert werden. Mit

der Eingabe der bekannten Konzentrationen der jeweiligen Stoffe in den Standards und der anschließenden Analyse der Proben aus den Versuchen konnten die ersten Ergebnisse festgestellt werden. Über die Retentionszeit glich der Computer ab, welches Arzneimittel den Peak verursacht und errechnete die jeweilige Konzentration über die Peakfläche.

Die Abbildung 14 und Abbildung 15 zeigen ein Chromatogramm mit den Medikamenten.

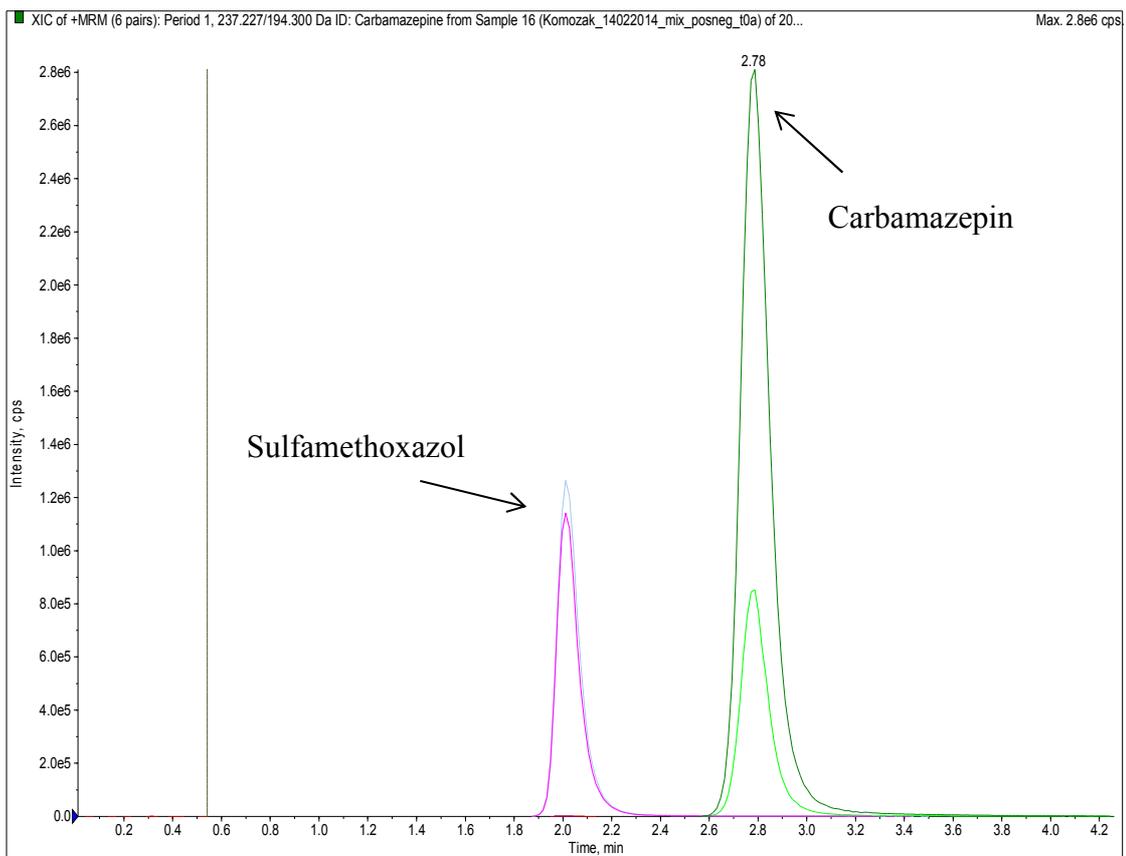


Abbildung 14: Chromatogramm mit SMX und CBZ

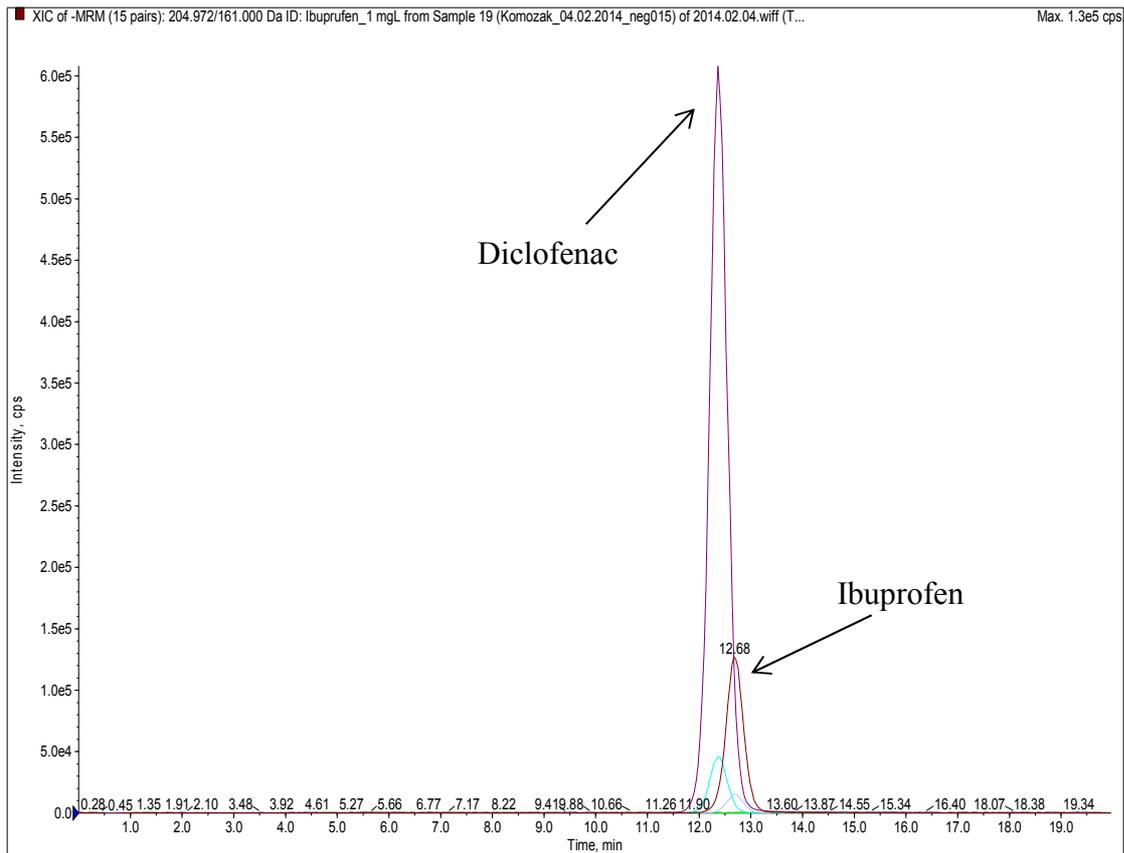


Abbildung 15: Chromatogramm mit DCF und IBF

4.6 Isothermenberechnung

Eine empirische Beschreibung der Adsorption erfolgt über die Bestimmung des Gleichgewichtszustandes zwischen den Adsorptivmolekülen und dem Adsorpt, welcher mittels Adsorptionsisotherme dargestellt wird.

Für die Berechnung der Isothermen und für die grafische Auswertung müssen die eingesetzte Aktivkohlemenge, die Konzentration der Arzneimittel aus den Proben ohne Aktivkohle und die verbliebene Konzentration der Arzneimittel aus den Proben mit Zugabe von PAK bekannt sein. Die Ergebnistabelle der chemischen Analytik von Carbamazepin soll als Beispiel für die Isothermenberechnung dienen.

Tabelle 9: Ergebnisse einem Versuch mit CBZ und AW

Probenname	c PAK [mg/L]	c CBZ [µg/L]	Probenname	c PAK [mg/L]	c CBZ [µg/L]
CBZaw0,5L0A	0	887	CBZaw1L0A	0	922
CBZaw0,5L0B	0	873	CBZaw1L0B	0	822
CBZaw0,5L0C	0	897	CBZaw1L0C	0	961
CBZaw0,5L1A	24,5	40	CBZaw1L1A	24,5	43
CBZaw0,5L1B	25	14	CBZaw1L1B	25,25	24
CBZaw0,5L1C	26	10	CBZaw1L1C	27,25	17
CBZaw0,5L2A	49,5	6	CBZaw1L2A	49,75	6
CBZaw0,5L2B	53,5	4	CBZaw1L2B	50,5	5
CBZaw0,5L2C	50,5	4	CBZaw1L2C	53	7
CBZaw0,5L3A	100	2			
CBZaw0,5L3B	112,5	1			
CBZaw0,5L3C	99	2			

Es wird ein Mittelwert c_0 aus den Konzentrationen an Arzneimitteln aus den Proben ohne Zugabe von Aktivkohle ermittelt und in die Tabelle für die Berechnung der Isotherme eingetragen. Anschließend wird die Differenz aus dem Mittelwert c_0 und aus den Konzentrationen an Arzneimitteln c (Versuchsergebnisse aus Tabelle 9) ermittelt. Mit dieser Differenz ($c_0 - c$, bezogen auf pro Liter) und der tatsächlich verwendeten Versuchsmedienmenge kann die adsorbierte Menge an Arzneimitteln ermittelt werden (Menge ads). Der weitere Schritt wäre die Berechnung des Quotienten aus der Menge an adsorbierten Arzneimitteln und der absoluten Menge an eingesetzter PAK in $\mu\text{g}/\text{mg}$ und in $\mu\text{g}/\text{g}$. Für die Berechnung der Beladung muss das Produkt aus der von Menge an Arzneimitteln, die adsorbiert wurden, durch 1000 mit 100 durch die absolute Menge an eingesetzter PAK errechnet werden. Zur Ermittlung der Isotherme k und d wird der Logarithmus von den Versuchsergebnissen c aus Tabelle 9 und der Logarithmus vom Quotienten aus der Menge an adsorbierten Arzneimitteln und der absoluten Menge an eingesetzter PAK festgelegt. Für die grafische Auswertung der Isothermenberechnung werden die letzteren ermittelten Werte auf der x-Achse bzw. y-Achse im Koordinatensystem eingetragen.

Tabelle 10: Beispiel einer Isothermenberechnung (Versuch 2 CBZ in TW)

AK ¹⁾ [mg]	c ₀ ²⁾ [µg/l]	c ₀ - c ³⁾ [µg/l]	Menge ads ⁴⁾ [µg]	AK ⁵⁾ [µg/mg]	AK ⁶⁾ [µg/g]	Beladung ⁷⁾ [%]	log c ⁸⁾ µg/l	log belad ⁹⁾ µg/mg
0	885,7	-1,3	-0,27	-	-	-	-	-
0	885,7	12,7	2,53	-	-	-	-	-
0	885,7	-11,3	-2,27	-	-	-	-	-
4,9	885,7	845,7	169,13	34,517	0,0345	3,45	1,60	1,54
5	885,7	871,7	174,33	34,867	0,0349	3,49	1,15	1,54
5,2	885,7	875,7	175,13	33,679	0,0337	3,37	1,00	1,53
9,9	885,7	879,7	175,93	17,771	0,0178	1,78	0,78	1,25
10,7	885,7	881,7	176,33	16,480	0,0165	1,65	0,60	1,22
10,1	885,7	881,7	176,33	17,459	0,0175	1,75	0,60	1,24
20	885,7	883,7	176,73	8,837	0,0088	0,88	0,30	0,95
22,5	885,7	884,7	176,93	7,864	0,0079	0,79	0,00	0,90
19,8	885,7	883,7	176,73	8,926	0,0089	0,89	0,30	0,95
0	901,7	-20,3	-8,13	-	-	-	-	-
0	901,7	79,7	31,87	-	-	-	-	-
0	901,7	-59,3	-23,73	-	-	-	-	-
9,8	901,7	858,7	343,47	35,048	0,0350	3,50	1,63	1,54
10,1	901,7	877,7	351,07	34,759	0,0348	3,48	1,38	1,54
10,9	901,7	884,7	353,87	32,465	0,0325	3,25	1,23	1,51
19,9	901,7	895,7	358,27	18,003	0,0180	1,80	0,78	1,26
20,2	901,7	896,7	358,67	17,756	0,0178	1,78	0,70	1,25
21,2	901,7	894,7	357,87	16,881	0,0169	1,69	0,85	1,23
							Steigung	Schnittpunkt
							0,46	0,90

Erklärung zur Tabelle 10:

- 1) Absolute Menge an eingesetzter PAK, nicht bezogen auf pro Liter
- 2) Mittelwert der Konzentration an Arzneimitteln aus den Proben ohne Aktivkohle in µg/L
- 3) Differenz aus c₀ und der Konzentration c aus Tabelle 9 in µg/L
- 4) Die Menge an Arzneimitteln, die adsorbiert wurde in µg
- 5) Der Quotient aus der Menge an adsorbiertem Arzneimittel und der absoluten Menge an eingesetzter PAK in µg/mg
- 6) Wie 5) nur in µg/g
- 7) Das Produkt aus der von Menge an Arzneimittel, die adsorbiert wurde, durch 1000 mit 100 durch absolute Menge an eingesetzter PAK
- 8) Der Logarithmus von der Konzentration c aus der Tabelle 9
- 9) Der Logarithmus vom Quotienten aus der Menge an adsorbiertem Arzneimittel und der absoluten Menge an eingesetzter PAK

Eine grafische Auswertung der Isothermenberechnung ist in der Abbildung 16 dargestellt. Aus der allgemeinen linearen Funktionsgleichung $y = k \cdot x + d$ wird der k-Wert und der d-Wert herausgelesen. Der k-Wert und der d-Wert aus der grafischen Auswertung haben den gleichen Wert, wie in der Tabelle 10 angeführt.

R^2 ist das Bestimmtheitsmaß und definiert die Größe der Streuung von y, die durch x erklärt werden kann. Das Bestimmtheitsmaß liegt stets zwischen 0 und 1. Es ist gleich 1, wenn alle Punkte im Streudiagramm exakt auf der Regressionsgeraden liegen.

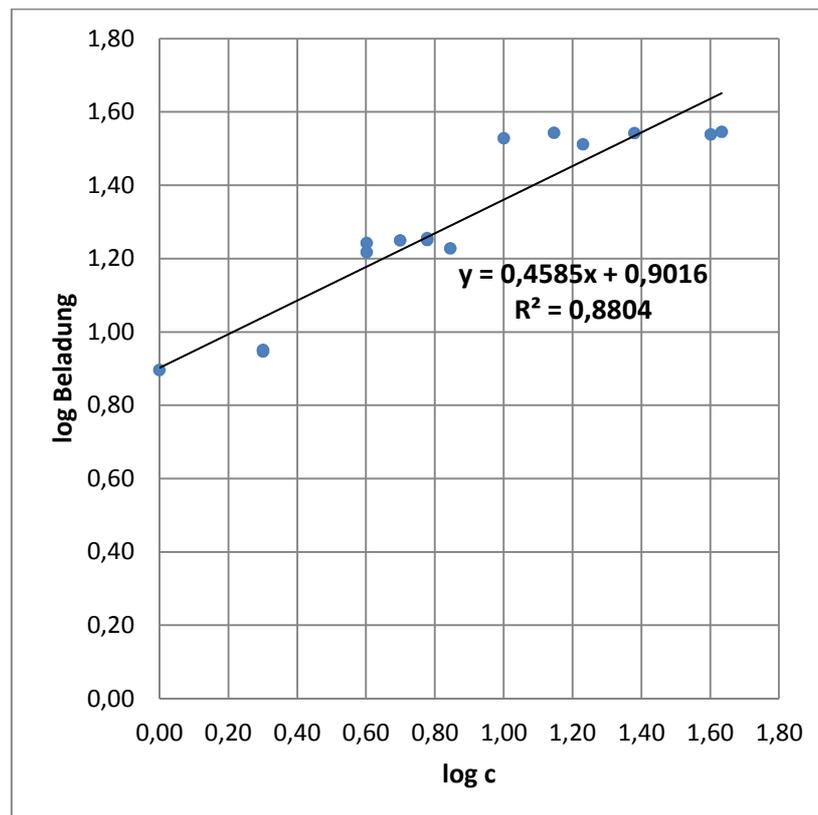


Abbildung 16: Beispiel einer Isothermenberechnung (Versuch CBZ in TW)

5 Versuchsdurchführung

5.1 Einleitung

Zum Einarbeiten in die Methodik wurden zuerst Versuche mit Aktivkohle und Methylenblau durchgeführt. Im Kapitel 5.2 Vorversuche wird die genaue Vorgehensweise bei diesen Versuchen erläutert und beschrieben. Im darauf folgenden Kapitel 5.3 werden die Hauptversuche beschrieben.

Es ist nochmals zu erwähnen, dass sowohl bei den Vorversuchen als auch bei den Hauptversuchen die gleiche pulverförmige Aktivkohle verwendet wurde.

5.2 Vorversuche

Für die Vorversuche wurde die Adsorption von Methylenblau an pulverförmige Aktivkohle bei Zimmertemperatur untersucht. Die Bestimmung der Restkonzentration an Methylenblau wurde photometrisch durchgeführt.

Für die photometrische Bestimmung von Methylenblau wurde zunächst eine Verdünnungsreihe mit 0; 0,5; 2,0; und 10,0 mg/L Methylenblau hergestellt werden. Es wurde ein Spektrum erstellt zur Bestimmung jener Wellenlänge mit maximaler Extinktion. Von jeder dieser Lösungen wurde die Extinktion bei der ermittelten Wellenlänge gemessen und eine Eichkurve aufgestellt. Mittels der Eichkurve konnte die Restkonzentration ermittelt werden.

Es wurde zunächst eine Stammlösung mit einer Konzentration von 1 g/L Methylenblau hergestellt. Den Tritationskolbenolben wurden unterschiedliche Mengen Pulveraktivkohle hinzugefügt und anschließend mit je 50 mL Stammlösung gefüllt. Die Suspension wurde anschließend auf einem Schüttler mit 130 Umdrehungen pro Minute zwischen 15 und 60 Minuten lang geschüttelt. Anschließend wurde mit Hilfe eines Pipetiergerätes eine Probe entnommen und die Pulveraktivkohle wurde abgefiltert. Dafür wurden unterschiedliche Papierfilter mit einem Durchmesser von 110 mm von der Firma Whatman mit unterschiedlicher durchschnittlicher Porengröße (Größen 1, 2 und 4) verwendet. Anschließend wurde die Suspension in Küvetten gefüllt und die Restkonzentration wurde im Photometer, mit einer Wellenlänge von $\lambda = 665 \text{ nm}$, bestimmt.

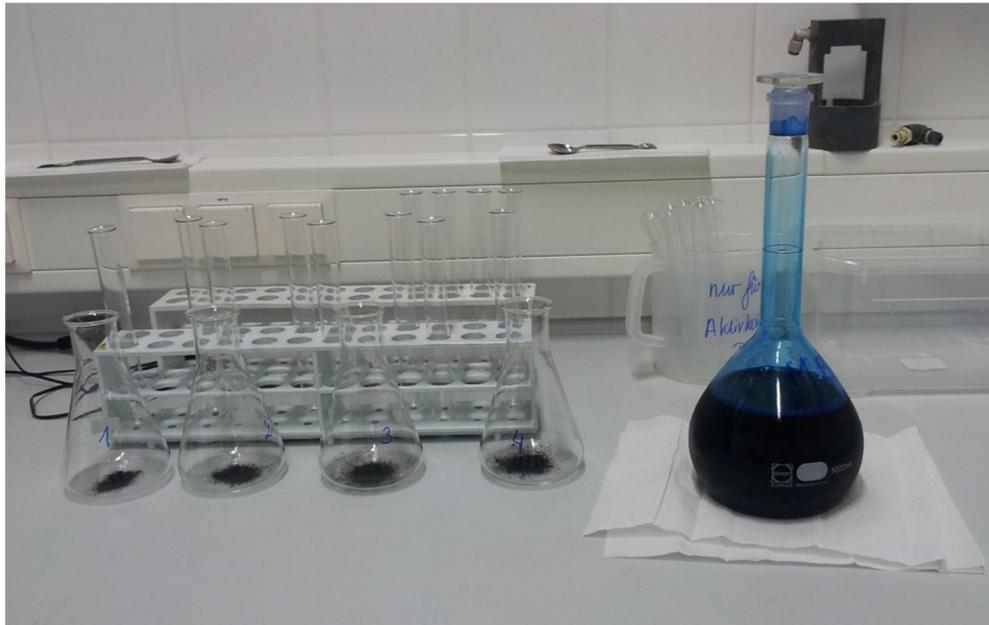


Abbildung 17: Tritationskolben mit unterschiedlichen Mengen an Aktivkohle und Stammlösung mit einer Konzentration von 1 g/L Methylenblau

Für die ersten Versuche wurden zwei unterschiedliche Photometer verwendet (CADAS 100 und DR 2800). Die restlichen Messungen fanden nur mit dem Photometer DR 2800 statt, da die Versuchsergebnisse der zwei Photometer minimal voneinander abweichen.

Die Vorgehensweise der einzelnen Versuche werden im Kapitel 6.2 genauer beschrieben.

5.3 Hauptversuche

Bei den Hauptversuchen wurden Kolben mit unterschiedlicher Fassungsvermögen verwendet und teilweise auch Becher. Weiters kamen auch unterschiedliche Kläranlagenabläufe zum Einsatz und unterschiedliche Konzentrationen an Pulveraktivkohle.

In der nachfolgenden Tabelle 11 ist eine Übersicht über die einzelnen Versuche ersichtlich:

Tabelle 11: Übersicht über die durchgeführten Hauptversuche (TW...Trinkwasser, DW...deionisiertes Wasser)

Versuch	Kolben 0,5 L (200 ml)	Kolben 1 L (400 ml)	Becher 1 L (200 ml)	c PAK [mg/L]	TW	DW	Ablauf	Arzneimittel
1	X			0; 50 ; 200;		X		CBZ
2	X	X		0; 5; 10; 20;			HKA 25.06	CBZ
3	X	X		0; 6,25; 12,5; 25;	X			IBP
4		X		6,25; 12,5; 25			Mistelbach 10.09	IBP
5	X	X		0; 6,25; 12,5; 17,5;			Mistelbach 10.09	IBP
6	X	X		0; 6,25; 12,5; 17,5;			HKA 16.09	IBP
7	X		X	0; 10; 20; 50;	X		HKA 16.09	DCF
8	X		X	0; 10; 20; 50;	X		HKA 16.10	DCF
9	X		X	0; 10; 20; 50;	X		HKA 16.10	SMX
10	X		X	0; 10; 20; 50;	X		HKA 21.10	SMX
11	X		X	0; 10; 20; 50;	X		HKA 21.10	MIX
12	X		X	0; 10; 20; 50;	X		HKA 03.02	MIX

Als Vorbereitung für die Versuche wurden die Kolben beschriftet und aufgestellt. Die Beschriftung war dreistellig. Die erste Stelle war abhängig vom verwendeten Wasser. Kolben für Trinkwasser wurden mit einem T beschriftet und Kolben für Ablauf mit einem A. Die zweite Stelle war abhängig von der Konzentration an Pulveraktivkohle. Und die letzte Stelle zur Unterscheidung der Wiederholungen.

Es wurden 200 ml Trinkwasser bzw. Kläranlagenablauf abgemessen und eine kleine Menge davon wurde in den Kolben eingeschüttet. Dies diente dazu, dass die hinzugefügte PAK direkt in einer Flüssigkeit im Kolben landet und nicht aufgrund der Elektrostatik sich auf die Glasinnenwand verteilt. Es folgte die Kalibrierung der Waage. Die Pulveraktivkohle wurde in einem Glasschiffchen abgewogen und in den Kolben übertragen. Danach wurde der Rest der 200 ml hinzugeschüttet. Es sollte auch erwähnt werden, dass die restliche Flüssigkeit teilweise auch über dem Glasschiffchen in die Kolben geschüttet wurde, damit Reste der Aktivkohle, die sich noch auf dem Glasschiffchen befanden, auch in den Kolben transferiert. Das Glasschiffchen wurde nach jedem dritten Abwiegevorgang mit Ethanol gewaschen und an der Luft getrocknet. Das Trocknen mit Tüchern führt nur dazu, dass sich das Glas elektrisch aufladet und die Aktivkohle beim nächsten Abwiegevorgang sich auf dem Glasschiffchen verbreitet. Die Kolben wurden dann mit einer Aluminiumfolie abgedeckt damit die Aktivkohle einen

möglichst kurzen Kontakt mit der Luft hat. Nachdem alle Gefäße mit Trinkwasser oder/und Ablauf aufgefüllt wurden, kam es zum Einsatz der Arzneimittel. Pro Gefäß wurden 0,2 ml der Medikamenten-Stammlösung beigelegt damit eine Konzentration von 1 mg/L erreicht wird. Die Menge von 0,2 ml wurde mit einem Pipettiergerät beigegeben. Es wurde darauf geachtet, dass die Stammlösung möglichst kurz bei Raumtemperatur steht.

Nachdem in allen Gefäßen (außer bei manchen Versuchen wurden Proben ohne Arzneimittel auch untersucht) die Arzneimittel hinzugefügt wurden, kamen die Gefäße auf den Schüttler und es begann der Schüttelvorgang, der immer kreisförmig war. Zusätzlich wurden für die Nullproben Versuche ohne Arzneimittel untersucht. Geschüttelt wurde immer mit 150 Umdrehungen pro Minute und über 18 Stunden lang.

Nach dem Schüttelvorgang begann die Probenentnahme. Für die Proben wurden jeweils für Ablauf und Trinkwasser drei Spritzen mit Spitze verwendet. Es wurde drauf geachtet, dass für die Probe ohne Pulveraktivkohle eine eigene Spritze verwendet wurde, für die Probe ohne Arzneimittel eine und für die Proben mit Aktivkohle und Arzneimittel eine weitere. Wobei bei den letzteren Proben begann die Entnahme mit den Proben mit der höchsten Aktivkohlekonzentration, da in diesen Proben die Konzentration an Arzneimitteln am geringsten war. Dies war notwendig, um eine Verschleppung durch Arzneimittelreste zu verhindern.

Als Vorbereitung für die Probenentnahme wurden die Weithalsflaschen beschriftet und in eine Edelstahlhalterung für Membranfilter wurde ein Glasfaserfilter (1 µm Porengröße) eingesetzt. Nach jeder Probenentnahme wurde der Glasfaserfilter entfernt und ein neuer Filter wurde eingesetzt. Die Edelstahlhalterung wurde nach den Entnahmen der Proben ohne Aktivkohle mit Ethanol gereinigt, nach den Proben ohne Arzneimittel und auch nach den Proben mit Aktivkohle und Arzneimittel.

Für die Probenentnahme wurde die Spritze vorher drei mal mit Probenflüssigkeit durchgespült. Danach wurden 5 mL von der Probe entnommen, die Spitze wurde entfernt und die Edelstahlhalterung mit Glasfaserfilter wurde aufgesetzt. Bei der Entnahme wurde darauf geachtet, dass möglichst wenig Pulveraktivkohle mitaufgenommen wird. Die ersten 3 mL wurden verworfen und die restlichen 2 mL wurden in Fläschchen gefüllt. Das Verwerfen der ersten 3 mL ist notwendig damit sich die Poren im Glasfaserfilter vollständig öffnen und falls Rückstände auf dem Filter vorhandenen sind, ausgespült werden.

Die verwendete Nomenklatur für die Proben in den Fläschchen wird im Kapitel 4.3 genau beschrieben.

In weiterer Folge werden die Versuchsbedingungen für die Hauptversuche genauer beschrieben:

Versuch 1 (28.08.2013):

Der erste Versuch fand mit dem Arzneimittel Carbamazepin im deionisierten Wasser statt. Es wurden neun 0,5 L Kolben verwendet und mit jeweils 200 mL deionisiertem Wasser gefüllt.

Der Schüttler wurde am 27.08.2013 um 18:10 Uhr mit 150 Umdrehungen pro Minute gestartet und wurde am nächsten Tag um 14:45 Uhr gestoppt.

Die Temperatur während der Probenentnahme betrug 24,33 °C.

Versuch 2 (10.09.2013):

Dieser Versuch fand auch mit CBZ statt, aber statt deionisiertem Wasser wurde Ablauf aus der Hauptläranlage Wien von 25.06.2013 (wurde bis dahin gekühlt gelagert) verwendet. Der Ablauf wurde im Verhältnis 1:2 verdünnt damit eine größere Menge für die Versuche vorhanden ist.

Es wurden zwölf Kolben mit einem Fassungsvermögen von 0,5 L mit jeweils 200 mL gefüllt und neun Kolben mit einem Fassungsvermögen von 1 L mit jeweils 400 mL.

Die Kolben wurden dann auf zwei Schüttler aufgesetzt und am 09.09.2013 um 14:50 gestartet. Am nächsten Tag um 10:00 wurden die Schüttler wieder ausgeschaltet, damit die Proben entnommen werden konnten. Die Temperatur beim Start und bei der Entnahme betrug ca. 23,5 °C.

Versuch 3 (11.09.2013):

Der Versuch wurde mit dem Arzneimittel Ibuprofen und Trinkwasser statt. Beim ersten Versuch mit Ibuprofen wurden wieder Kolben mit unterschiedlichen Fassungsvermögen (0,5 L bzw. 1 L) verwendet. Die Kolben wurden mit 200 mL bzw. 400 mL Leitungswasser (Wasser aus dem Wasserhahn) gefüllt.

Der Schüttler wurde am 10.09.2013 um 15:00 gestartet und am nächsten Tag um 10:40 gestoppt (150 Umdrehungen pro Minute).

Versuch 4 (12.09.2013):

In diesem Versuch mit Ibuprofen wurden nur Kolben (neun Kolben) mit einem Fassungsvermögen von einem Liter verwendet. Diese Kolben wurden mit 400 ml gereinigtem Kläranlagenablauf aus Mistelbach (10.09.2013) gefüllt.

Der Schüttler wurde am 27.08.2013 um 14:10 Uhr mit 150 Umdrehungen pro Minute gestartet und wurde am nächsten Tag um 10:45 Uhr gestoppt.

Versuch 5 (13.09.2013):

Dieser Versuch mit IBP fand wieder in zwei verschiedenen großen Kolben (0,5 L und 1 L) statt und wieder mit Ablauf aus Mistelbach (10.09.2013). Bei dem Versuch wurden zum ersten Mal auch Proben ohne Zugabe von Arzneimitteln untersucht.

Am 12.09.2014 um 15:05 wurde der Schüttler gestartet und am nächsten Tag um 11:00 wieder ausgeschaltet. Der Schüttelvorgang fand bei 150 Umdrehungen pro Minute statt.

Die Temperatur beim Start und bei der Entnahme betrug ca. 23,0 °C.

Versuch 6 (18.09.2013):

Für den Versuch mit Ibuprofen (Versuch 6) wurde Ablauf aus der Hauptkläranlage Wien (16.09.2013) verwendet.

Es wurden zwölf Kolben mit einem Fassungsvermögen von 0,5 L mit jeweils 200 mL gefüllt und neune Kolben mit einem Fassungsvermögen von 1 L mit jeweils 400 mL. Hier wurden nicht nur drei Proben ohne Aktivkohle angestezt, sondern auch drei Proben ohne Zugabe von Arzneimitteln.

Die Kolben wurden dann auf zwei Schüttler aufgesetzt und am 17.09.2013 um 13:30 gestartet. Am nächsten Tag um 10:20 wurden die Schüttler wieder ausgeschaltet, damit die Proben entnommen werden konnten. Die Temperatur beim Start und bei der Entnahme betrug ca. 21,2 °C.

Versuch 7 (19.09.2013):

Die Versuche mit Diclofenac fanden in Kolben (0,5 L) und Bechern (1 L) statt. In beide Gefäße wurden 200 mL hinzugefügt.

Der Versuch mit Diclofenac (Versuch 7) fand gleichzeitig mit Ablauf aus der Hauptkläranlage Wien von 16.09.2013 und Trinkwasser statt. Insgesamt kamen 19 Kolben und 9 Becher zum Einsatz. 14 Kolben wurden für die Proben mit Ablauf verwendet. Die restlichen fünf Kolben und die Becher wurden für die Proben mit Leitungswasser verwendet. Da im Labor nur zwei Schüttler vorhanden waren, wurde eine Kiste zu einem Aufsatz für einen Schüttler umfunktioniert, wie in Abbildung 18 und Abbildung 19 dargestellt.

Der Schüttelvorgang begann am 18.09.2013 um 16:15 und wurde am nächsten Tag um 10:15 beendet.



Abbildung 18: Kiste als Aufsatz für Schüttler



Abbildung 19: Ansicht innerhalb der Kiste mit Kolben und Bechern

Versuch 8 (18.10.2013):

Dieser Versuch mit DCF (Versuch 8) fand mit Ablauf aus der Hauptkläranlage Wien von 16.10.2013 und Trinkwasser statt.

Der Schüttler wurde am 17.10.2013 um 12:40 gestartet und am nächsten Tag um 10:45 ausgeschaltet. Der Ablauf dieses Versuches gleicht dem des Versuches 7. Während der Entnahme eines Kolbens aus dem Aufsatz des Schüttlers kam es zu einem Bruch des Kolbens.

Versuch 9 (17.10.2013):

Mit dem Arzneimittel SMX wurden auch zwei Versuche durchgeführt. Für beide Versuche wurden wieder Proben ohne Zugabe von Arzneimittel analysiert.

Der erste Versuch mit SMX (Versuch 9) fand mit Ablauf aus der Hauptkläranlage Wien vom 16.10.2013 und Trinkwasser statt.

Der Schüttler wurde am 16.10.2013 um 13:20 gestartet und am nächsten Tag um 11:00 ausgeschaltet.

Versuch 10 (23.10.2013):

Auch dieser Versuch fand mit SMX statt. Es kam der Ablauf aus der HKA Wien von 21.10.2013 und Trinkwasser zum Einsatz.

Der Schüttler wurde am 22.10.2013 um 12:50 gestartet und am nächsten Tag um 10:00 ausgeschaltet.

Versuch 11 (24.10.2013):

Bei den letzten beiden Versuchen wurde eine Mischung aus allen vier Arzneimitteln CBZ, IBP, DCF und SMX hergestellt. Es wurden wieder jeweils 0,2 mL der einzelnen Medikamenten-Stammlösungen zu den 200 mL Trinkwasser bzw. Ablauf nacheinander hinzugefügt.

Versuch 11 fand mit Trinkwasser und Ablauf aus der Hauptkläranlage Wien vom 21.10.2013 statt. Der Schüttelvorgang begann am 23.10.2013 um 16:00 und wurde am nächsten Tag um 10:25 beendet.

Versuch 12 (04.02.2014):

Dieser letzter Versuch fand wieder mit einer Mischung (Mix) aus allen 4 Arzneimitteln mit Kläranlagenablauf und Trinkwasser statt. Der verwendete Ablauf stammte aus der Hauptkläranlage Wien vom 03.02.2013.

Gestartet wurde der Schüttler am 03.02.2014 um 11:25 und am nächsten Tag um 10:00 wurde der Schüttelvorgang wieder beendet. Das Schütteln fand wieder bei 150 Umdrehungen pro Minute statt.

6 Ergebnisse

6.1 Einleitung

Im folgenden Kapitel werden die Ergebnisse der Vorversuche und Hauptversuche mithilfe von Diagrammen dargestellt. Die Tabellen zu den Vorversuchen sind im Anhang II zu finden (Tabelle 20 bis Tabelle 36) und für die Hauptversuche im Anhang III (Tabelle 37 bis Tabelle 54). Diskussion und Vergleiche zu den Ergebnissen werden im Kapitel 7 erläutert.

6.2 Vorversuche

Die Ergebniswerte der einzelnen Versuche ist im Anhang II Vorversuche-Tabellen). In diesem Kapitel werden die einzelnen Vorversuche genauer erklärt und es wird erläutert, wie und warum die Versuchsanordnungen von Versuch zu Versuch verändert wurden (siehe Tabelle 12).

Tabelle 12: Übersicht über die durchgeführten Vorversuche („kursiv“... Unterschiede der Versuchsanordnung im Vergleich zum vorhergehenden Versuch)

Versuch	Schüttelzeit [min]	Umdrehungen [rpm]	Filter	Einsatz von PAK [g]	Entnahme	Volumen
1	30	130	Nr.1, Nr.4	0,25; 0,4; 0,8;	Schüttler gestoppt und entnommen	50 ml
2	<i>30 und 60</i>	130	<i>Nr. 1</i>	<i>0,05; 0,1; 0,2; 0,3;</i>	Nach der ersten Entnahme gestoppt, danach wieder eingeschaltet und wieder gestoppt	50 ml
3	<i>15, 30 und 60</i>	130	Nr. 1	<i>0,1; 0,15; 0,2; 0,25;</i>	Für jede Entnahme gestoppt und wieder eingeschaltet	50 ml
4	15, 30 und 60	130	Nr. 1	<i>0,17; 0,2; 0,22; 0,25; 0,27</i>	Für jede Entnahme gestoppt und wieder eingeschaltet	50 ml

5	15, 30 und 60	130	Nr. 1	0,17; 0,2; 0,22; 0,25; 0,28;	<i>Schüttler wurde während der Entnahme nicht ausgeschaltet</i>	50 ml
6	15 und 30	130	Nr. 1	0,22; 0,25; 0,28;	<i>Schüttler bei der Entnahme gestoppt, eine Minute gewartet bis PAK herabgesetzt hat</i>	50 ml
7	15 und 30	130	Nr. 1	0,22; 0,25; 0,28;	gleich wie Versuch 6	50 ml
8	15 und 30	150	Nr. 2	0,44; 0,5; 0,56;	<i>Schüttler wurde während der Entnahme nicht ausgeschaltet</i>	100 ml
9	30	150	Nr. 2	0,4; 0,5; 0,56;	Schüttler wurde während der Entnahme nicht ausgeschaltet	100 ml
10	30	150	Nr. 2	0,25; 0,3; 0,4;	Schüttler wurde während der Entnahme nicht ausgeschaltet	100 ml

Versuch 1 (13. August 2013):

Beim ersten Versuch wurden zwei verschiedene Filter (Nr. 1 und Nr. 4) mit unterschiedlich großen durchschnittlichen Porengrößen verwendet. Filter Nr. 1 hat die kleinste durchschnittliche Porengröße und Filter Nr. 4 die größte.

Für diesen Versuch wurde eine Stammlösung verwendet, welche schon zwei Monate lang gekühlt gelagert worden war.

Geschüttelt wurde 30 Minuten lang mit 130 Umdrehungen pro Minute.

Es wurde auch eine Eichgerade (siehe Tabelle 21) ermittelt.

Entnommen wurde mit Hilfe eines Pipettiergerätes.

Es hat sich herausgestellt, dass der Filter Nr. 4 nicht geeignet ist, da die Werte mit Filter Nr. 4, verglichen mit den Werten mit Filter Nr. 1, zu hoch sind (siehe Tabelle 20). Da die Ergebnisse im ersten Versuch zu klein waren, wurde beim nächsten Versuch die zugegebene Aktivkohlenmenge verringert. Weiters wurde entschieden, die Proben nach 30 Minuten Schüttelzeit nochmals weitere 30 Minuten schütteln zu lassen.

Versuch 2 (13. August 2013):

Bei dem Versuch wurden zwei unterschiedlich lange Schüttelzeiten verglichen. Es wurden Proben nach 30 Minuten und nach 60 Minuten genommen. Es ist aber zu

erwähnen, dass für die erste Entnahme der Schüttler gestoppt wurde und nachdem alle Proben entnommen worden waren, wurde er wieder eingeschaltet.

Hierfür wurde eine neue Stammlösung hergestellt und bis zur Verwendung gekühlt gelagert.

Die Werte aus der Tabelle 22 zeigen, dass die Werte nach 30 Minuten und die Werte nach 60 Minuten nahezu identisch sind.

Die Ergebnisse aus diesem Versuch haben gezeigt, dass die Anfangsmenge an PAK von 0,05 g zu gering und 0,3 g zu hoch ist. Deswegen wurde für den nächsten Versuch eine Aktivkohlenmenge zwischen 0,1 und 0,25 g verwendet. Weiters erfolgte beim nachfolgenden Versuch auch eine Entnahme nach 15 Minuten.

Versuch 3 (14. August 2013):

Diesesmal wurden Proben mit drei verschiedenen Schüttelzeiten analysiert. Entnommen wurde nicht nur wie beim Versuch 2 nach 30 Minuten und nach 60 Minuten, sondern auch schon nach 15 Minuten. Dabei wurde für jede Entnahme der Schüttler gestoppt und wieder eingeschaltet, nachdem alle Proben entnommen worden waren.

Es wurde auch eine Eichgerade (siehe Tabelle 24) ermittelt.

Da die Anfangsmenge an PAK von 0,05 g bei Versuch 2 zu wenig war wurde bei diesem Versuch mit eine Anfangsmenge von 0,1 g PAK begonnen (siehe Tabelle 23). Auch die Endmenge von 0,3 g wurde herabgesetzt auf 0,25 g.

Für den nachfolgenden Versuch wurde die Anfangsmenge an PAK wieder auf 0,17 g und die Endmenge auf 0,27 g erhöht.

Versuch 4 (14. August 2013):

Beim dritten Versuch war zu erkennen, dass eine Aktivkohlemenge von 0,1 g und 0,15 g zu gering ist. Daher wurden beim vierten Versuch 0,17 g als geringste Aktivkohlemenge genommen (siehe Tabelle 25).

Auch bei diesem Versuch wurden wieder Proben mit drei unterschiedlichen Schüttelzeiten analysiert. Es wurde auch mit 130 Umdrehungen pro Minute geschüttelt und die Entnahme nach 15 bzw. 30 Minuten erfolgte durch Stoppen des Schüttlers.

Nach dem Versuch tauchte die Frage auf, ob es eventuell Unterschiede zwischen den Messergebnissen bei einer Probenentnahme im Ruhezustand und einer Entnahme während dem Schütteln geben könnte. Daher wurden die Proben beim nachfolgenden Versuch während dem Schütteln (Schüttler wurde nicht ausgeschaltet) entnommen.

Versuch 5 (19. August 2013):

Der fünfte Versuch ist eine Wiederholung des vierten Versuches, nur mit dem Unterschied, dass der Schüttler während der Entnahme nicht ausgeschaltet wurde.

Ab diesem Versuch wurden die Proben nur noch mit dem Photometer CADAS 100 ausgewertet.

Es wurde auch eine Eichgerade (siehe Tabelle 27) ermittelt.

Die Werte aus Tabelle 26 zeigen wieder, dass die Entnahme nach 60 Minuten überflüssig ist, da diese Werte nur leicht von den Werten der Entnahme nach 30 Minuten abweichen. Daher wurde ab diesem Versuch nur noch nach 15 bzw. 30 Minuten ausgewertet. Des Weiteren ist nach einem Vergleich der Messergebnisse aus Versuch 5 mit denen aus Versuch 4 zu erkennen, dass es nur minimale Unterschiede zwischen einer Entnahme während dem Schütteln (Versuch 5) und einer Entnahme im Ruhezustand (Versuch 4) gibt.

Versuch 6 (19. August 2013):

Bei Beobachtungen während dem zuletzt ausgeführten Versuch tauchte folgende Frage auf: Wurde eventuell zuviel Aktivkohle während der Entnahme mit dem Pipetiergerät aufgenommen? Daher wurde bei diesem Versuch der Schüttler gestoppt und eine Minute gewartet bis sich die Aktivkohle abgesetzt hatte und danach wurden die Proben aus dem oberen Drittel der Suspension entnommen. Dadurch konnte sicher gestellt werden, dass möglichst wenig Aktivkohle mitaufgenommen wurde.

Bei diesem Versuch wurden das erste Mal für eine Aktivkohlemenge drei Wiederholungen gemacht.

Versuch 7 (20. August 2013):

Dieser Versuch ist eine Wiederholung von Versuch 6 und erfolgte unter den gleichen Bedingungen.

Es wurde auch eine Eichgerade (siehe Tabelle 32) ermittelt.

Die Temperatur vor Beginn des Schüttelvorganges betrug $24,78^{\circ}\text{C}$ und nachher $25,68^{\circ}\text{C}$.

Für den nächsten Versuch wurde überlegt, das Probevolumen zu vergrößern. Daher wurde die doppelte Menge an Stammlösung verwendet. Das entnommene Probevolumen wurde auch verdoppelt.

Versuch 8 (20. August 2013):

Beim achten Versuch wurden statt 50 ml Stammlösung, 100 ml verwendet und daher auch die doppelte Menge an Aktivkohle und es wurden 10 ml Probe entnommen, statt 5 ml. Aufgrund der größeren Menge wurde der Schüttler auf 150 U/min eingestellt, statt 130 U/min. Bei diesem Versuch wurde der Filter Nr. 2 verwendet. Die Entnahme erfolgte während dem Schütteln nach 15 bzw. 30 Minuten.

Da die Ergebnisse aus diesem Versuch klein waren (nicht im Bereich der analytischen Nachweisgrenze), musste der Versuch wiederholt werden, um zu sehen, ob wieder ein ähnliches Ergebnis zustande kommt.

Versuch 9 (21. August 2013):

Bei diesem Versuch handelt es sich um eine Wiederholung von Versuch 8, dabei wurde die Entnahme nach 15 Minuten nicht ausgeführt.

Die Temperatur vor Beginn des Schüttelvorganges betrug 22,29°C und nachher 22,86°C.

Auch in diesem Versuch waren die Ergebnisse zu klein, um vertrauenswürdig zu sein und daher wurde für den nächsten Versuch die Menge der zugegebenen PAK verringert.

Versuch 10 (22. August 2013):

Da die Ergebnisse von Versuch 9 zu klein waren, wurden kleinere Mengen an Pulveraktivkohle verwendet.

Die Temperatur vor Beginn des Schüttelvorganges betrug 23,78°C und nachher 23,82°C.

6.3 Hauptversuche

Für die Hauptversuche werden teilweise auch Proben ohne Zugabe von Arzneimitteln (Nullproben) untersucht. Die Ergebnisse dieser Proben sind in den Tabellen (im Anhang III) ersichtlich, aber nicht in den Grafen. In diesem Kapitel sind die Ergebnisse der einzelnen Hauptversuche grafisch dargestellt. Im Kapitel 6.3.1 ist die Adsorption der Arzneimittel dargestellt: die x-Achse entspricht der Konzentration an PAK in mg/L und die y-Achse entspricht der Konzentration an Arzneimitteln in µg/L. Im Kapitel 6.3.2 sind die Ergebnisse der Isothermenberechnungen der einzelnen Versuche grafisch dargestellt.

Die Tabelle 13 gibt einen Überblick über die Rahmenbedingungen zu den Hauptversuchen. Informationen bezüglich der eingesetzten Aktivkohlenkonzentrationen, Versuchsvolumen und Versuchsmedien sind in der Tabelle 11 aufgelistet.

Tabelle 13: Übersicht über die Rahmenbedingungen zu den Hauptversuchen

Schüttelzeit	Umdrehungen	Filter
> 18 h	150 rpm	Glasmikrofaserfilter (1µm Porengröße)

6.3.1 Entfernung der Arzneimittel

Versuch 1:

Beim ersten Versuch wurden die Proben ohne Aktivkohle einmal filtriert und einmal nicht (die filtrierten haben im Probennamen die Endung „mf“, siehe Tabelle 37 im Anhang).

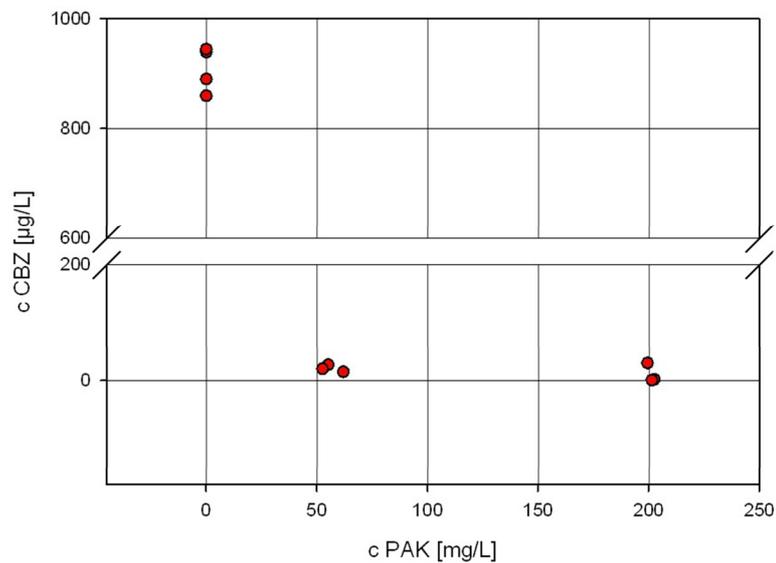


Abbildung 20: Entfernung von CBZ in DW

Die Tabelle 37 und die Abbildung 20 geben einen Überblick über die Adsorption von Carbamazepin in deionisiertem Wasser. Es ist zu erkennen, dass CBZ schon bei einer AktivkohleKonzentration von ca. 50 mg/L nahezu vollständig entfernt wird. Eine höhere Konzentration an PAK führt nicht zu einer verbesserten Entfernung. Die Ergebniswerte bei einer PAK-Konzentration von 50 mg/L und die Werte bei 200 mg/L sind fast identisch. Genau aus diesem Grund wird für den nächsten Versuch die hohe Konzentration von 200 mg/L weggelassen und stattdessen werden mehrere Konzentrationen zwischen 0 mg/L und 100 mg/L analysiert.

Versuch 2:

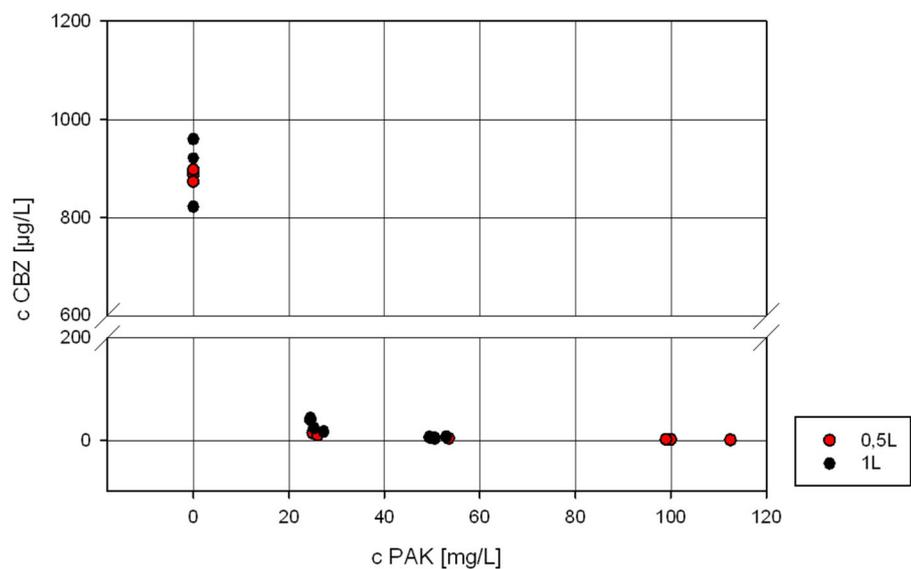


Abbildung 21: Entfernung von CBZ in Ablauf aus HKA

Aus der Tabelle 38 und aus der Abbildung 21 ist zu erkennen, dass auch eine PAK-Konzentration von 50 bzw. 100 mg/L zu hoch ist, da schon bei einer Konzentration von ca. 25 mg/L ein nahezu vollständige Entfernung stattgefunden hat. Daher wird für den Versuch 3 die eingesetzte Aktivkohlenmenge nochmals verringert.

Die Werte aus den Versuchen in 0,5 L Kolben unterscheiden sich von jenen aus den 1 L Kolben nur minimal.

Versuch 3:

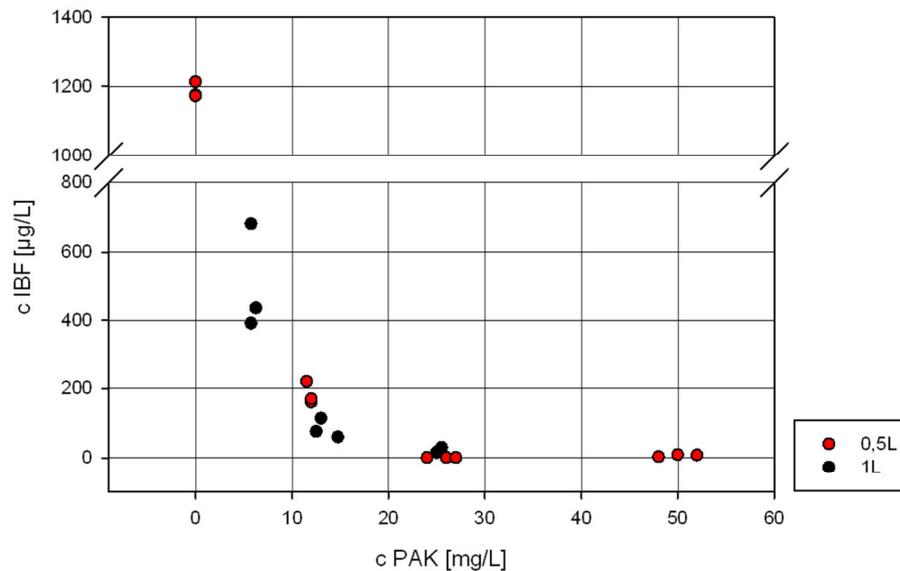


Abbildung 22: Entfernung von IBF in TW

In der Abbildung 22 ist zu erkennen, dass auch IBF schon bei einer PAK-Konzentration von ca. 25 mg/L nahezu vollständig abgebaut wurde. Der Verlauf der Entfernung des Arzneimittels ähnelt einem exponentiellen Verlauf. Sowohl in der Abbildung als auch in der Tabelle 39 wird beobachtet, dass die Werte der Versuche in 0,5 L Kolben und jene in 1 L Kolben sich minimal unterscheiden.

Versuch 4:

Dieser Versuch ist nicht auswertbar im Hinblick auf die Fragestellung, da keine Ergebnisse zu den Proben ohne Zugabe von Aktivkohle vorhanden sind und der Versuch wurde mit Versuch 5 wiederholt.

Versuch 5:

Die Abbildung 23 zeigt die Entfernung von Ibuprofen in Abwasser (Ablauf) aus der Kläranlage in Mistelbach. In diesem Versuch ist der Entferungsverlauf linear und bei 25 mg/L PAK-Konzentration ist noch eine Konzentration von rund 200 µg/L IBF vorhanden, wobei die Ergebnisse der Versuche in den 1 L Kolben leicht unter 200 µg/L liegen und die Versuche in den 0,5 L Kolben leicht drüber. Die genauen Ergebniswerte sind in der Tabelle 41 zu finden.

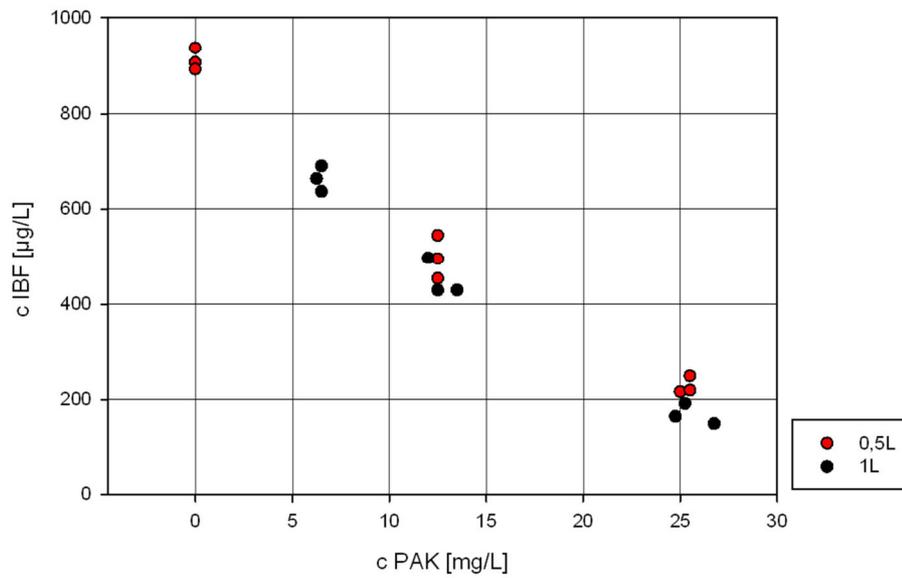


Abbildung 23: Entfernung von IBF in AW

Versuch 6:

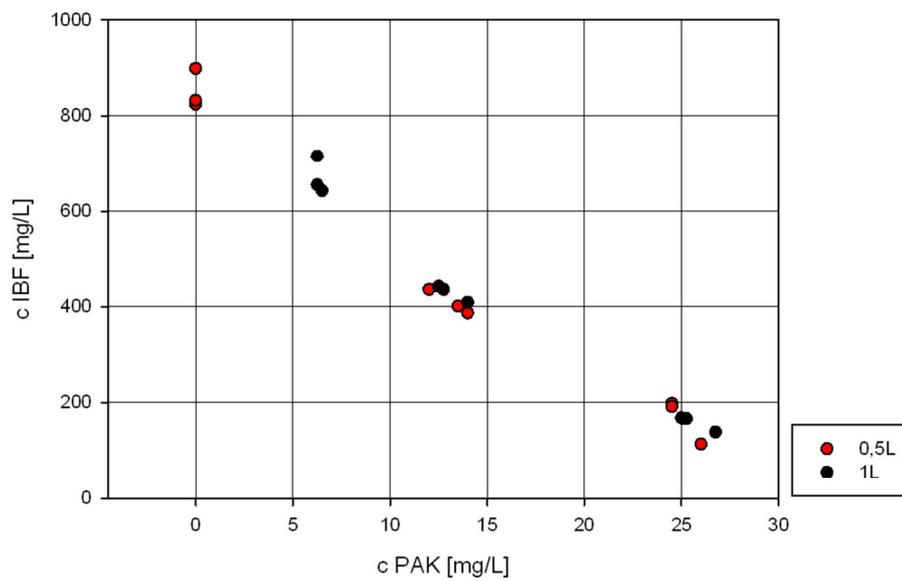


Abbildung 24: Entfernung von IBF in AW

Auch beim zweiten Versuch von IBF mit Ablauf (hier aus der Hauptkläranlage Wien) ist der Verlauf der Entfernung linear (siehe Abbildung 24) und ist dem ersten Versuch von IBF in AW sehr ähnlich (siehe Abbildung 23).

Versuch 7:

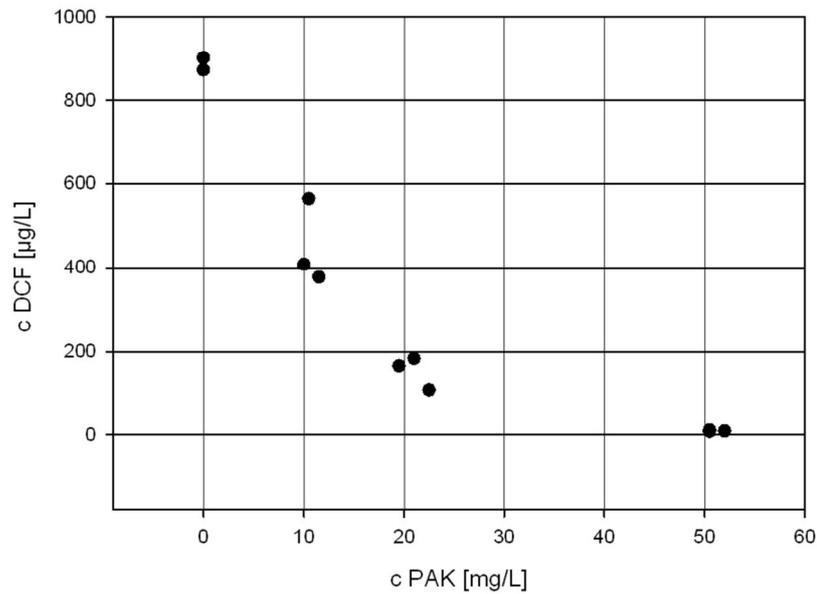


Abbildung 25: Entfernung von DCF in AW

Die Abbildung 25 zeigt die Entfernung von Diclofenac in Abwasser (Ablauf aus der Hauptkläranlage Wien). Zu erkennen ist, dass bei einer PAK-Konzentration von rund 50 mg/L fast eine vollständige Entfernung dieses Arzneimittels stattgefunden hat. Der Verlauf der Entfernung von DCF in AW ist einem exponentiellen Verlauf ähnlich.

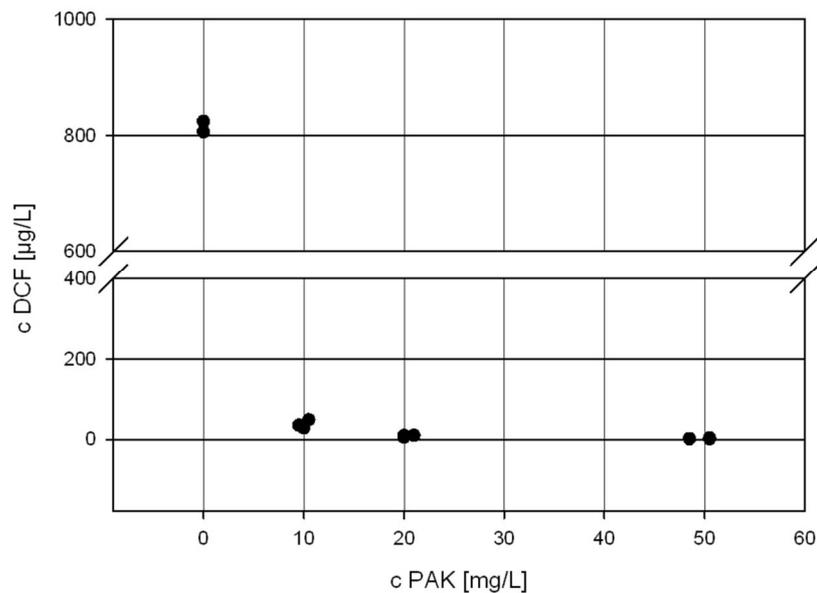


Abbildung 26: Entfernung von DCF in TW

Aus der Abbildung 26 bzw. aus der Tabelle 44 ist zu erkennen, dass schon bei einer PAK-Konzentration von rund 10 mg/L nur noch 4...6 % des Arzneimittels vorhanden ist und eine fast vollständige Entfernung schon bei einer PAK-Konzentration von 20 mg/L stattgefunden hat. Die Entfernung von DCF in Trinkwasser hat einen exponentiellen Verlauf.

Versuch 8:

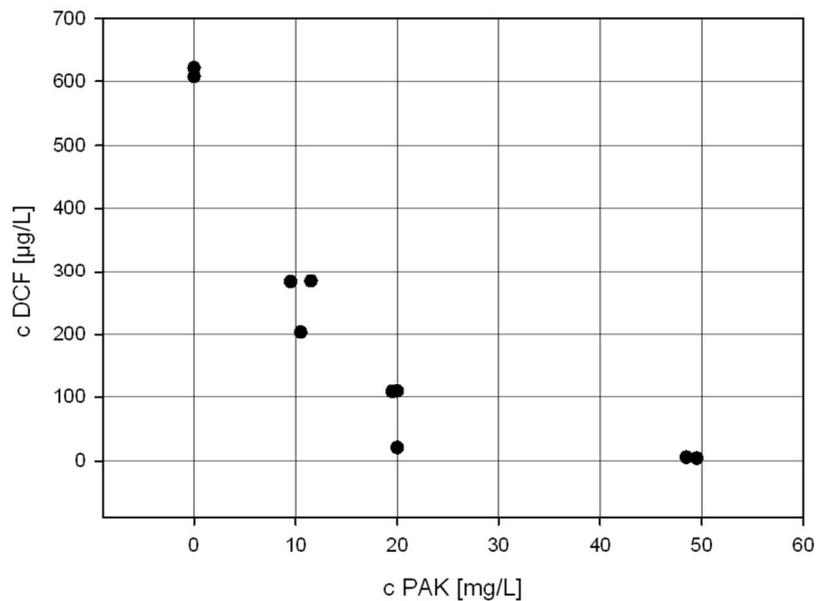


Abbildung 27: Entfernung von DCF in AW

Die Tabelle 45 und die Abbildung 27 geben einen Überblick über die Entfernung von Diclofenac und Ablauf aus der Hauptkläranlage Wien. Es ist zu erkennen, dass bei AktivkohleKonzentrationen von 10 mg/L und 20 mg/L jeweils ein Wert von den anderen beiden Ergebniswerten abweicht. Auch bei diesem Versuch findet eine nahezu vollständige Entfernung von DCF bei einer PAK-Konzentration von rund 50 mg/L statt.

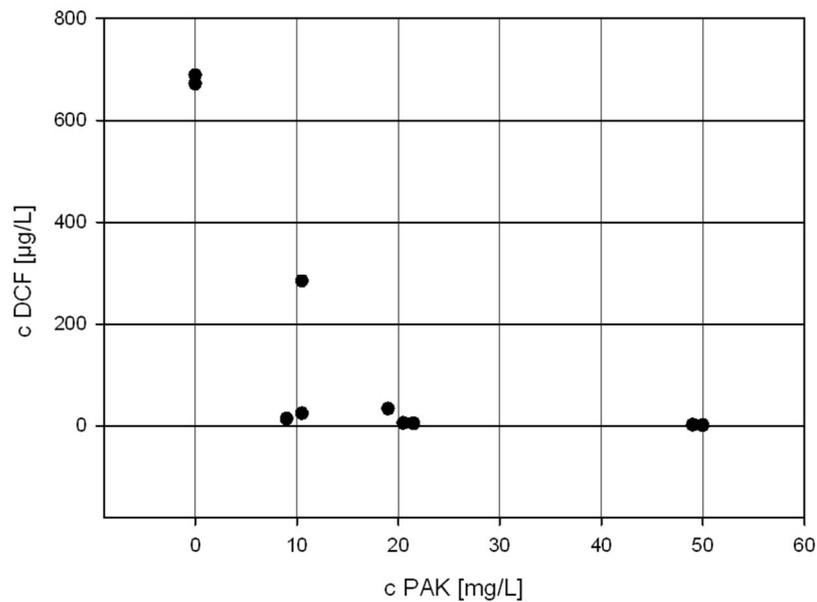


Abbildung 28: Entfernung von DCF in TW

In der Abbildung 28 ist zu erkennen, dass bei rund 10 mg/L Aktivkohle das Arzneimittel DCF in Kombination mit Trinkwasser nur noch in einer geringen Konzentration vorhanden (mit Ausnahme eines Wertes) ist und bei einer PAK-Konzentration von rund 20 mg/L fast vollständig entfernt wurde. Auch hier ist der Entfernungsverlauf exponentiell.

Versuch 9:

In der Abbildung 29 ist zu sehen, dass schon bei den Proben ohne Aktivkohle (0 mg/L PAK-Konzentration) wenig SMX-Konzentration vorhanden ist. Es wird davon ausgegangen, dass es sich dabei um einen Messfehler bei der Zugabe von der SMX-Stammlösung handelt. Die Entfernung von SMX in Ablauf aus der Hauptkläranlage Wien verläuft linear.

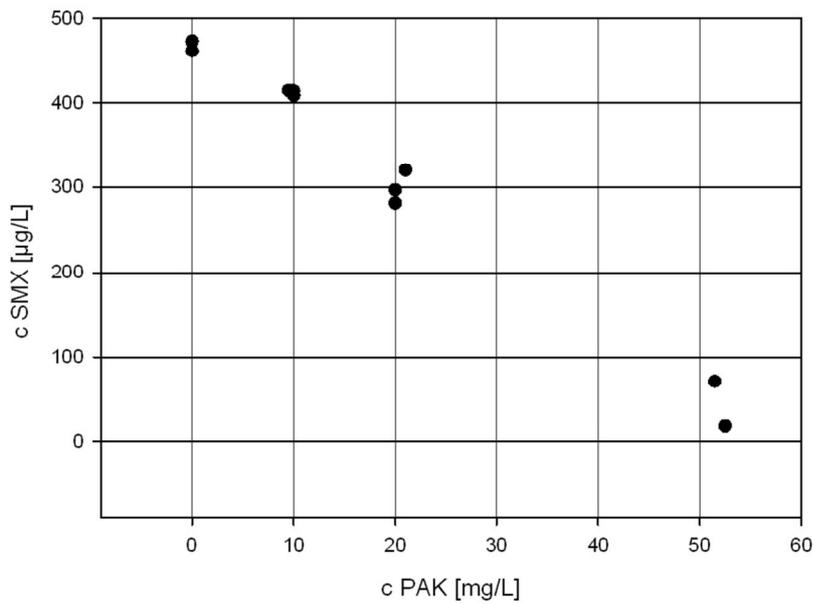


Abbildung 29: Entfernung von SMX in AW

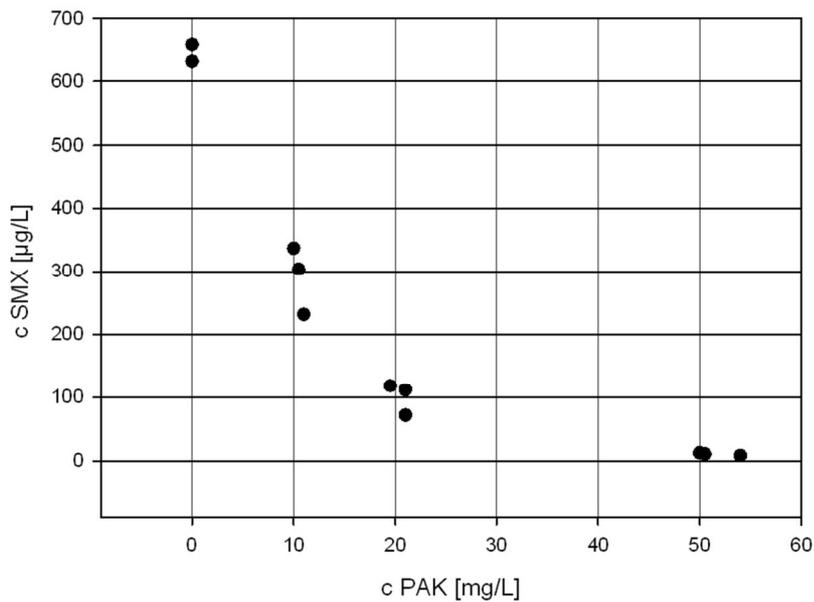


Abbildung 30: Entfernung von SMX in TW

Die Abbildung 30 zeigt die Entfernung von Sulfamethoxazol in Trinkwasser. Zu erkennen ist, dass bei einer PAK-Konzentration von rund 50 mg/L fast eine vollständige Entfernung dieses Arzneimittels stattgefunden hat. Der Verlauf der Entfernung von DCF ist exponential.

Versuch 10:

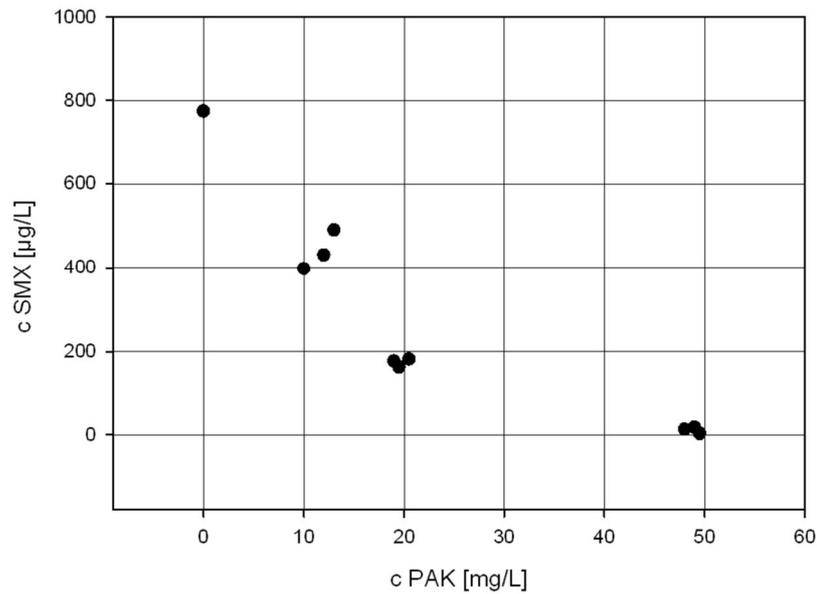


Abbildung 31: Entfernung von SMX in AW

Die Abbildung 31 und die Tabelle 49 geben einen Überblick über die Entfernung von SMX in Ablauf aus der Hauptkläranlage Wien. Auch hier ist zu erkennen, dass bei einer Aktivkohlekonzentration von rund 50 mg/L eine vollständige Entfernung des Arzneimittels stattgefunden hat. Im Gegensatz zum Versuch 9 (siehe Abbildung 29) ist hier der Entfernungsverlauf exponential.

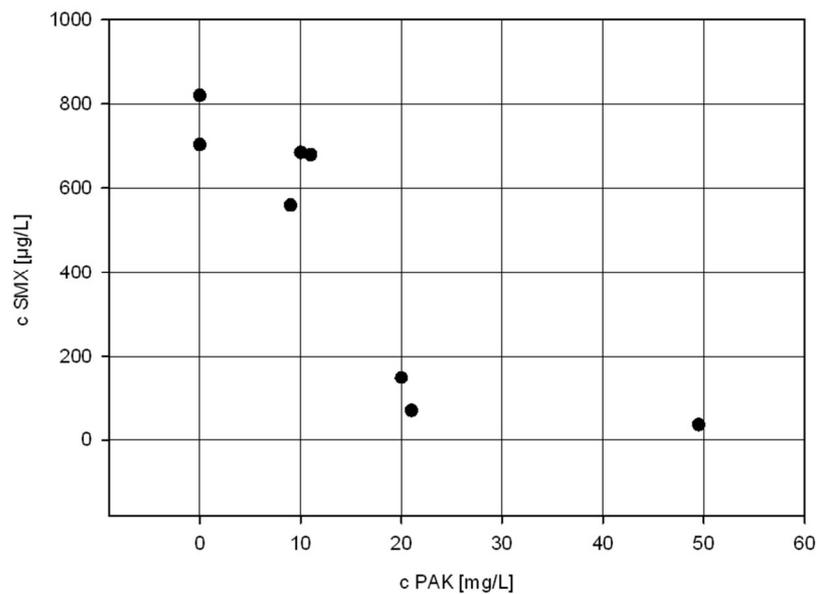


Abbildung 32: Entfernung von SMX in TW

In der Abbildung 32 ist die Entfernung von SMX in Trinkwasser dargestellt. Interessant ist, dass bei diesem Versuch zwischen einer PAK-Konzentration von rund 10 mg/L und 20 mg/L eine Entfernung von rund 85% stattgefunden hat. Dieses Verhalten wurde bisher bei den anderen Versuchen nicht erkannt. Auch hier hat eine fast vollständige Entfernung bei einer Aktivkohlekonzentration von rund 50 mg/L stattgefunden.

Versuch 11:

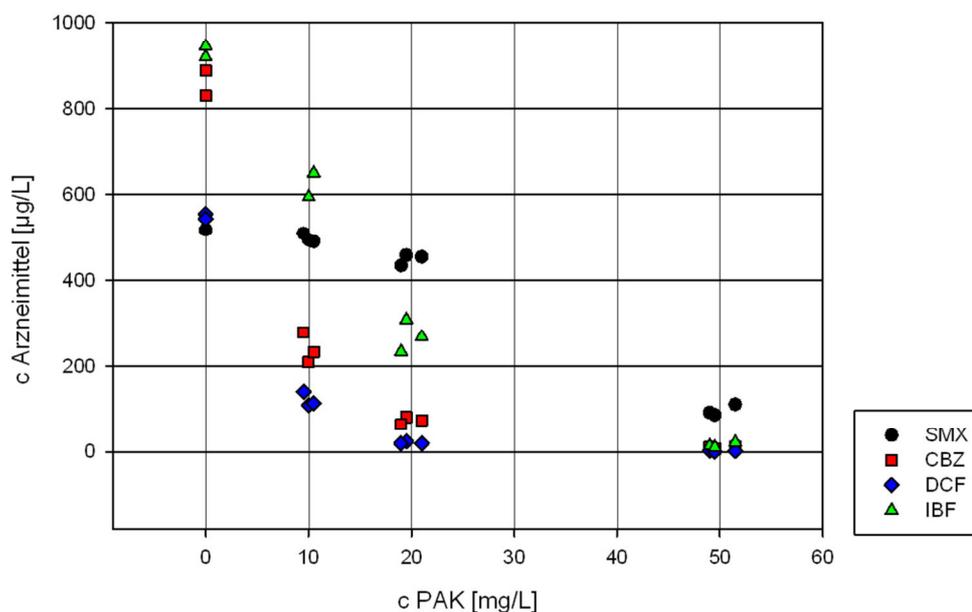


Abbildung 33: Entfernung von SMX, CBZ, DCF und IBF in AW

Die Tabelle 51 und die Abbildung 33 geben einen Überblick über die Entfernung aller vier Arzneimittel (SMX, CBZ, DCF und IBF) in Ablauf aus der Hauptkläranlage Wien. Die unterschiedlichen Adsorptionsverhalten der einzelnen Arzneimittel sind hier sehr gut zu erkennen. Mit Ausnahme von SMX ist der Verlauf aller Arzneimittel exponential. Und auch wieder mit Ausnahme von SMX sind alle Arzneimitteln bei einer PAK-Konzentration von rund 50 mg/L fast vollständig entfernt.

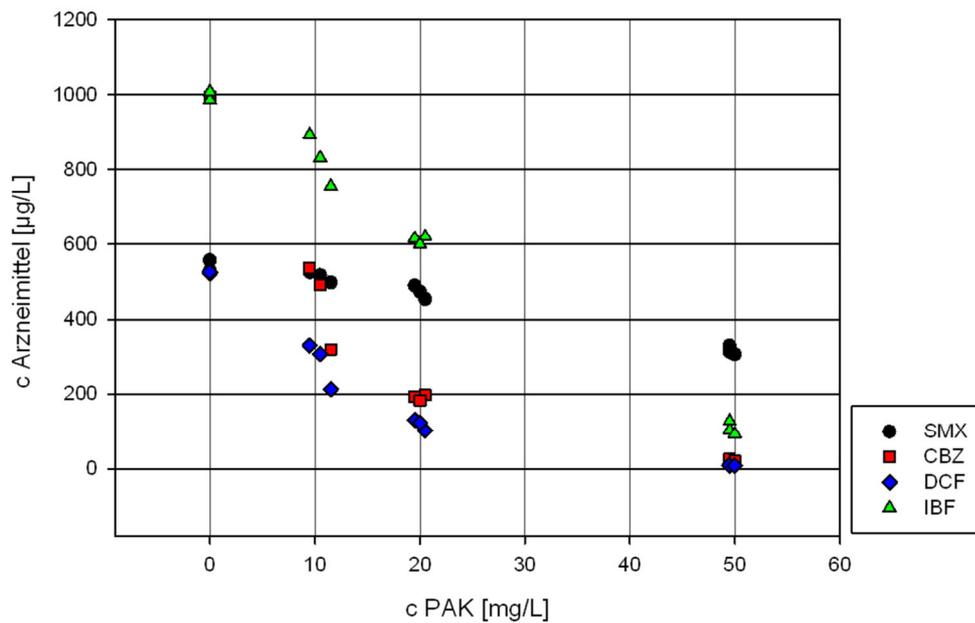


Abbildung 34: Entfernung von SMX, CBZ, DCF und IBF in TW

In der Abbildung 34 ist die Entfernung von SMX, CBZ, DCF und IBF in Form von einer Mischung aus den vier Arzneimitteln in Trinkwasser dargestellt. Die genauen Werte zur Abbildung findet man in der Tabelle 52. Bei einer PAK-Konzentration von ca. 50 mg/L kommt es zu einer fast vollständigen Entfernung von DCF und CBZ. Bei den anderen beiden Arzneimitteln, IBF und SMX, kommt es aufgrund des Konkurrenzverhaltens nicht zu einer vollständigen Entfernung. Zu erkennen ist auch, dass der Verlauf der Entfernung von IBF und SMX linear ist, wobei die anderen beiden Arzneimitteln einen exponentiellen Verlauf haben.

Versuch 12:

Die Abbildung 35 gibt einen Überblick über die Entfernung von SMX, CBZ, DCF und IBF in Ablauf aus der Hauptkläranlage Wien. Alle Arzneimitteln, außer SMX, sind bei einer PAK-Konzentration von ca. 50 mg/L nahezu vollständig entfernt. Und auch in dieser Abbildung ist zu erkennen, dass CBZ, DCF und IBF einen exponentiellen Verlauf der Entfernung vorweisen und SMX einen linearen.

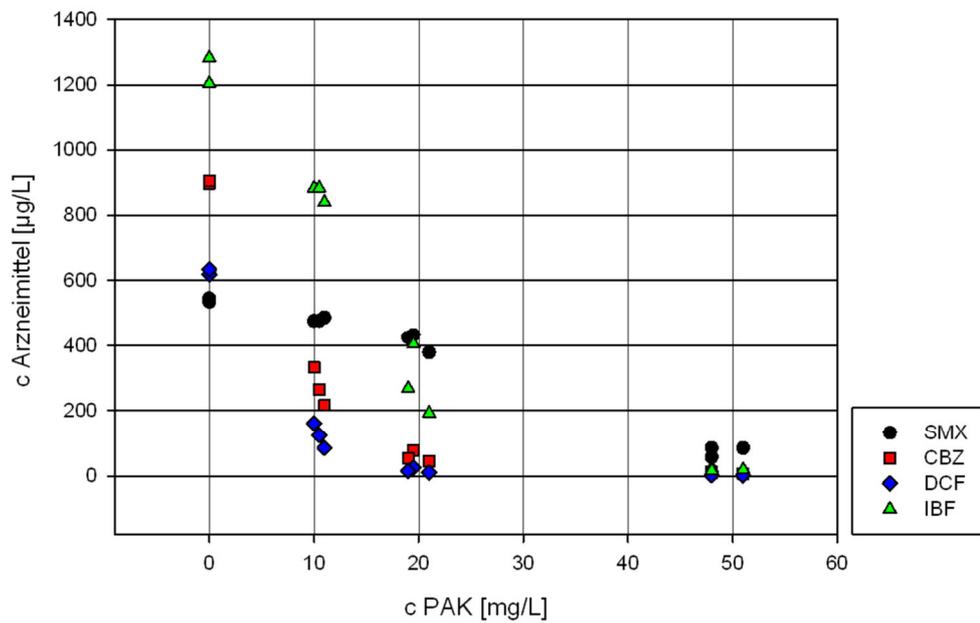


Abbildung 35: Entfernung von SMX, CBZ, DCF und IBF in AW

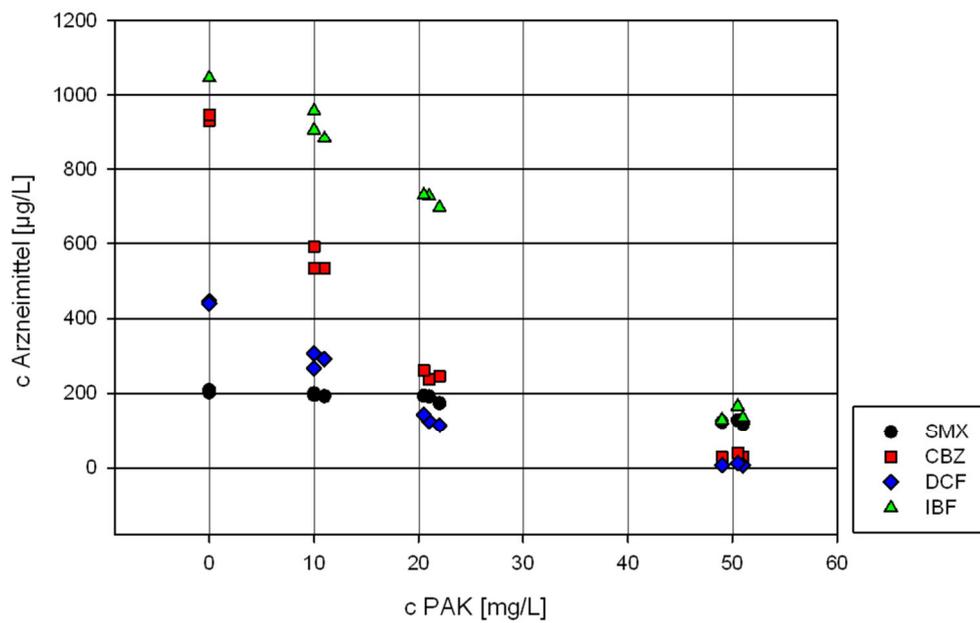


Abbildung 36: Entfernung von SMX, CBZ, DCF und IBF in TW

In der Abbildung 36 ist die Entfernung von SMX, CBZ, DCF und IBF in einer Mischung aus den vier Arzneimitteln mit Trinkwasser dargestellt. Sulfamethoxazol und Ibuprofen zeigen einen linearen Entfernungsverlauf, hingegen Diclofenac und

Carbamazepin einen exponentiellen. Bei einer AktivkohleKonzentration von rund 50 mg/L sind Diclofenac und Carbamazepin fast vollständig entfernt, hingegen Sulfamethoxazol und Ibuprofen nicht.

6.3.2 Isothermenberechnung

Die jeweiligen Tabellen zu den nachfolgenden Grafen sind im „Anhang IV Isothermenberechnung: Tabellen“ und die Methodik zur Berechnung der Isothermen in Kapitel 4.6.

Carbamazepin:

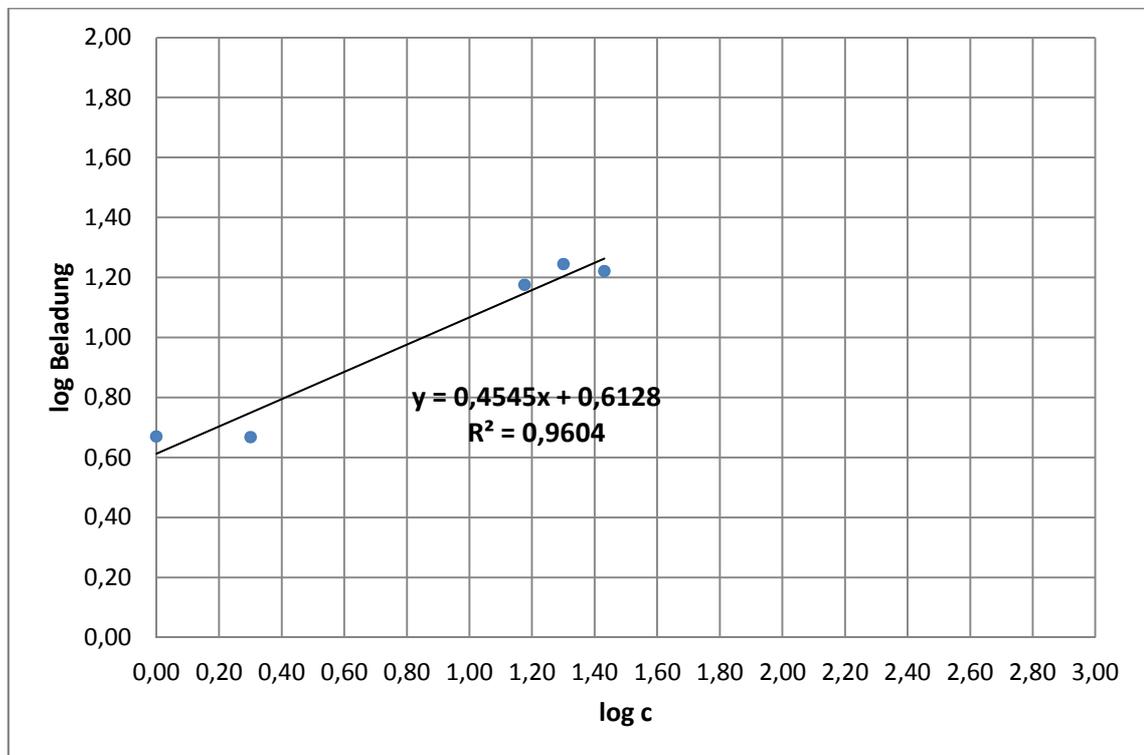


Abbildung 37: Isotherme für Versuch 1, CBZ in DW

Die Berechnungen der Isotherme (siehe Tabelle 55) haben ergeben, dass die Regressionsgerade im Versuch CBZ in DW einen k-Wert von 0,4545 und einen d-Wert von 0,6128 hat. Die Abbildung 37 zeigt diese Regressionsgerade.

Für den Versuch von CBZ in Ablauf wird ein k-Wert von 0,4585 und ein d-Wert von 0,9016 errechnet. Nach den Berechnungen sind in Abbildung 38 keine Ausreißer zu erkennen.

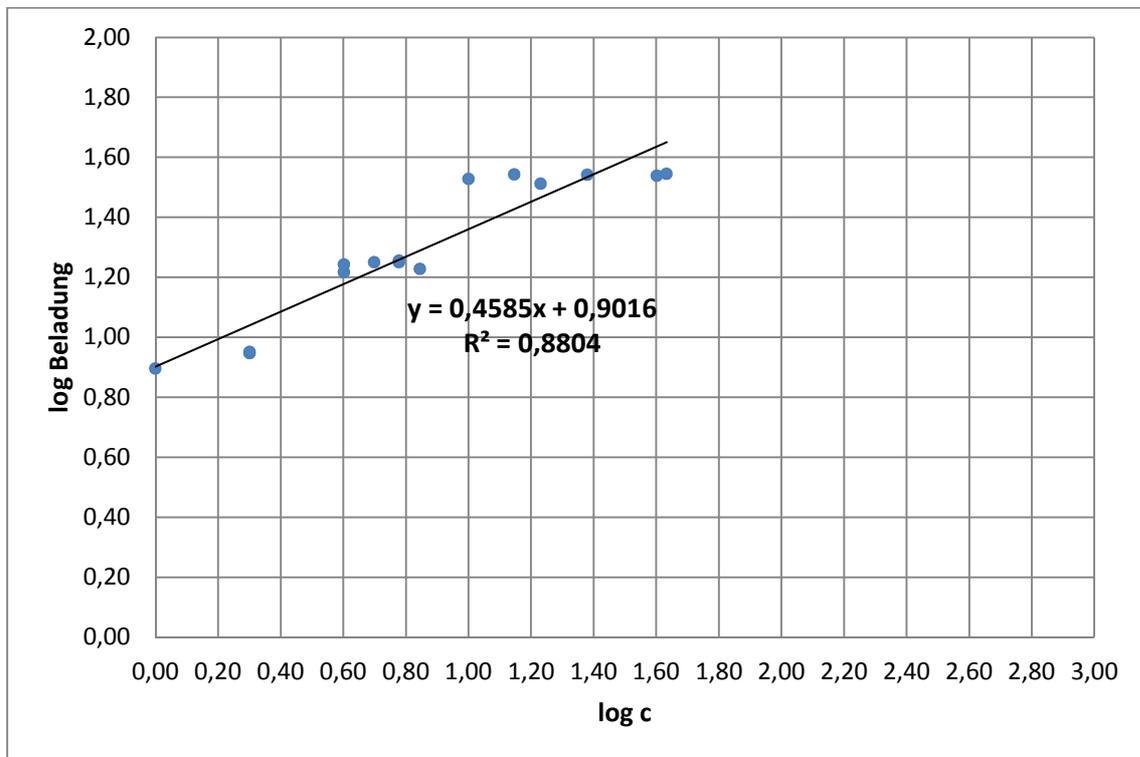


Abbildung 38: Isotherme für Versuch 2, CBZ in AW

Ibuprofen:

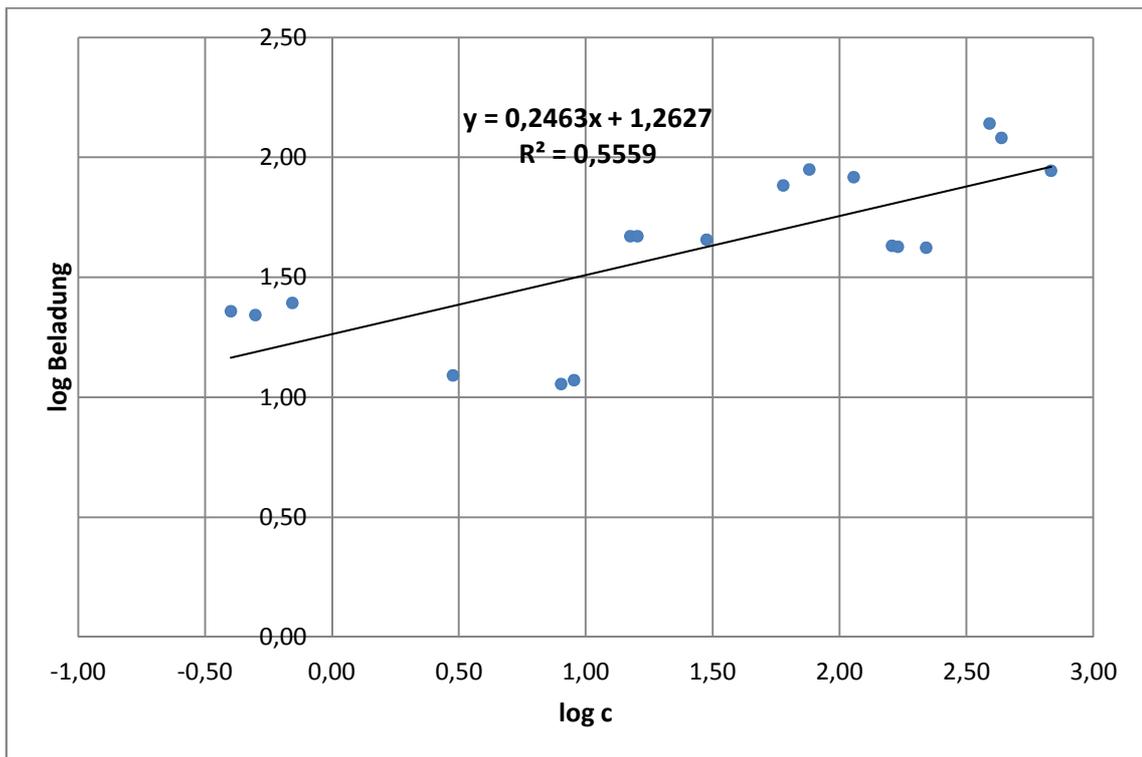


Abbildung 39: Isotherme für Versuch 3, IBF in TW

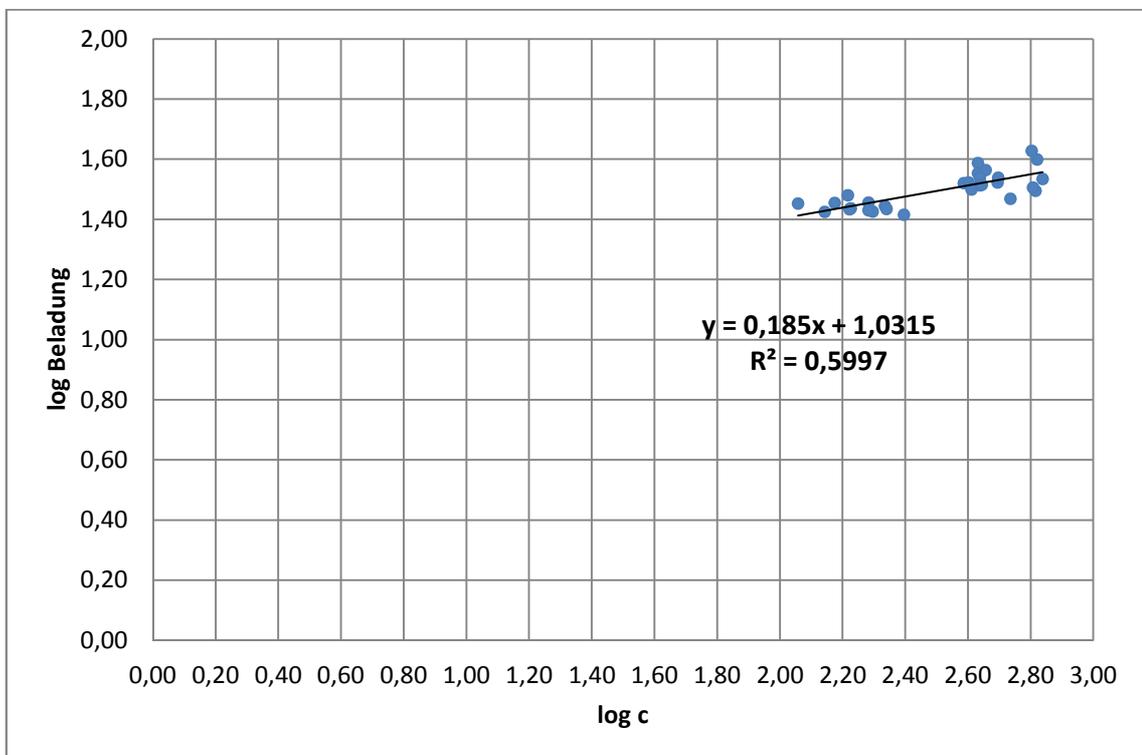


Abbildung 40: Isotherme für Versuch 5 und Versuch 6, IBF in AW

Die Tabelle 57 und die Tabelle 58 zeigen die Isothermenberechnungen von Ibuprofen in Trinkwasser und Abwasser. Die dazu passenden Abbildung 39 und Abbildung 40 zeigen die Regressionsgeraden zu den Isothermenberechnungen. Die Gerade von IBF in Trinkwasser hat eine Steigung (k-Wert) von 0,2463 und einen d-Wert von 1,2627. Die Steigung der Regressionsgerade von IBF in Ablauf beträgt 0,185 und der d-Wert 1,0315. Da sich die Werte aus den zwei Versuchen von IBF in AW gedeckt haben sind ihre Isothermen gemeinsam berechnet worden und auch zusammen in der Abbildung 40 dargestellt.

Diclofenac:

Die nachfolgenden Abbildung 41 und Abbildung 42 zeigen die Regressionsgeraden aus den Isothermenberechnungen von Diclofenac in Ablauf und in Trinkwasser.

Die Steigung der Gerade aus den Versuchen in Ablauf beträgt 0,2252 und der d-Wert 1,0099. Hingegen der k-Wert aus den Versuchen in Trinkwasser beträgt 0,4782 und der d-Wert beläuft sich auf 1,118.

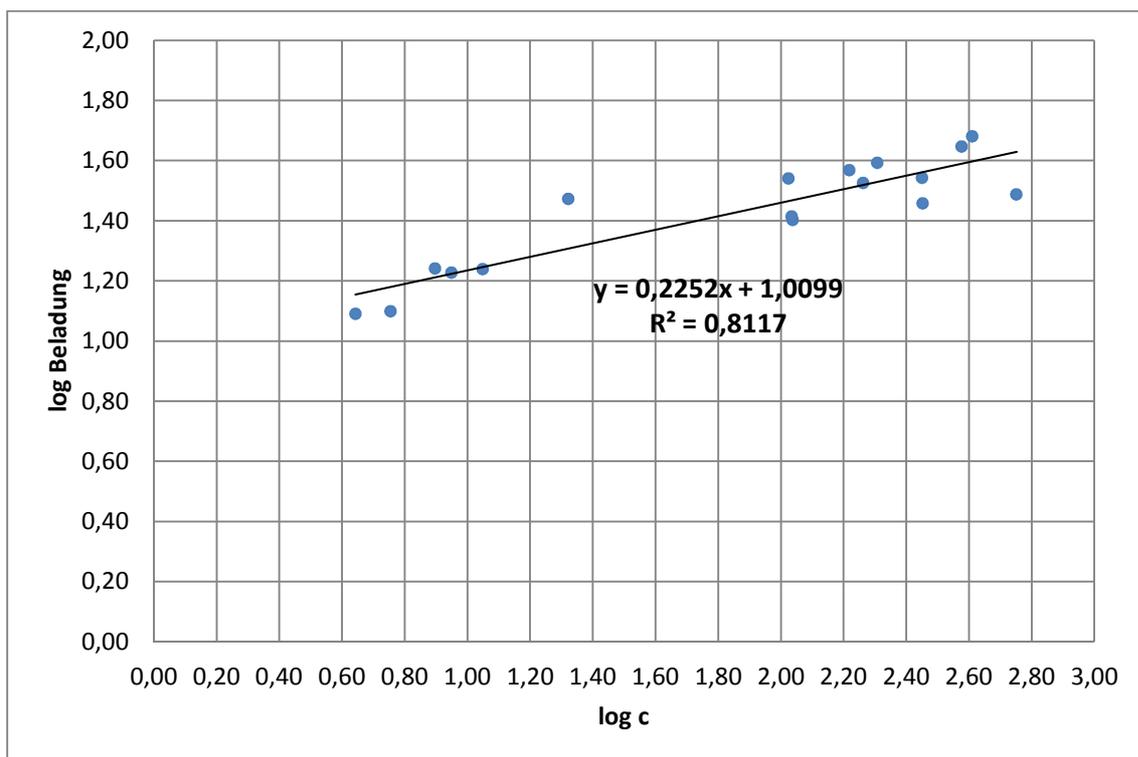


Abbildung 41: Isotherme für Versuch 7 und Versuch 8, DCF in AW

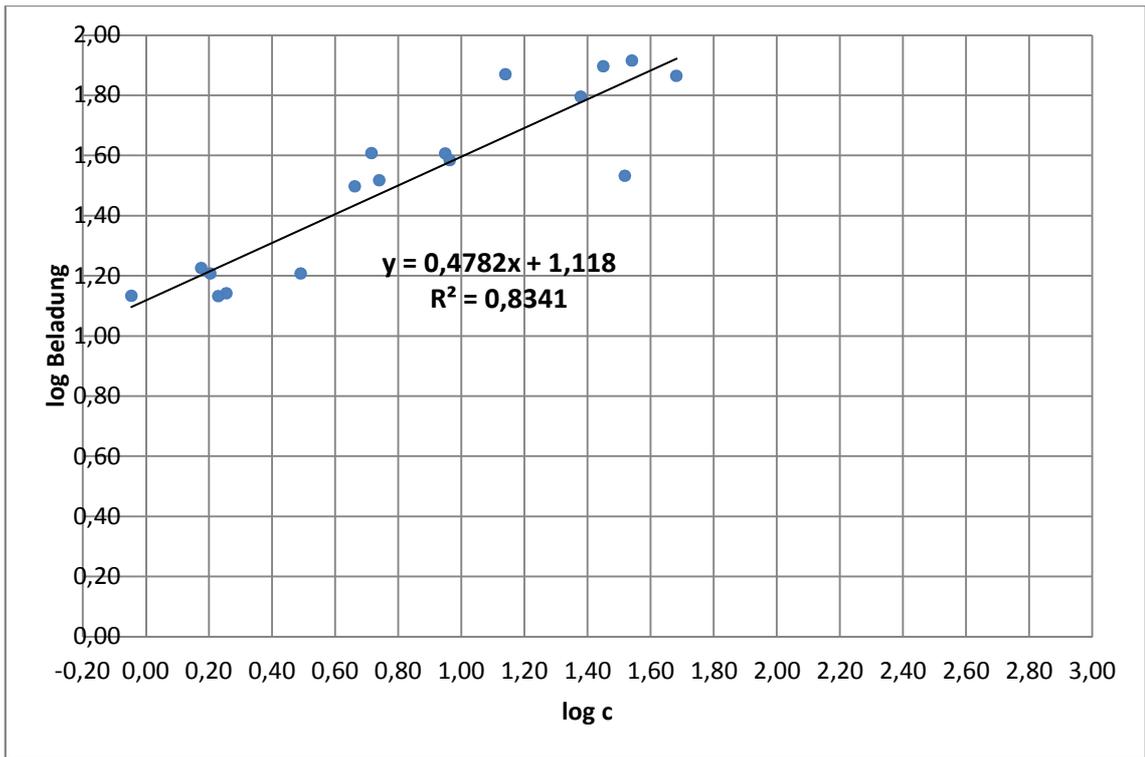


Abbildung 42: Isotherme für Versuch 7 und Versuch 8, DCF in TW

Sulfamethoxazol:

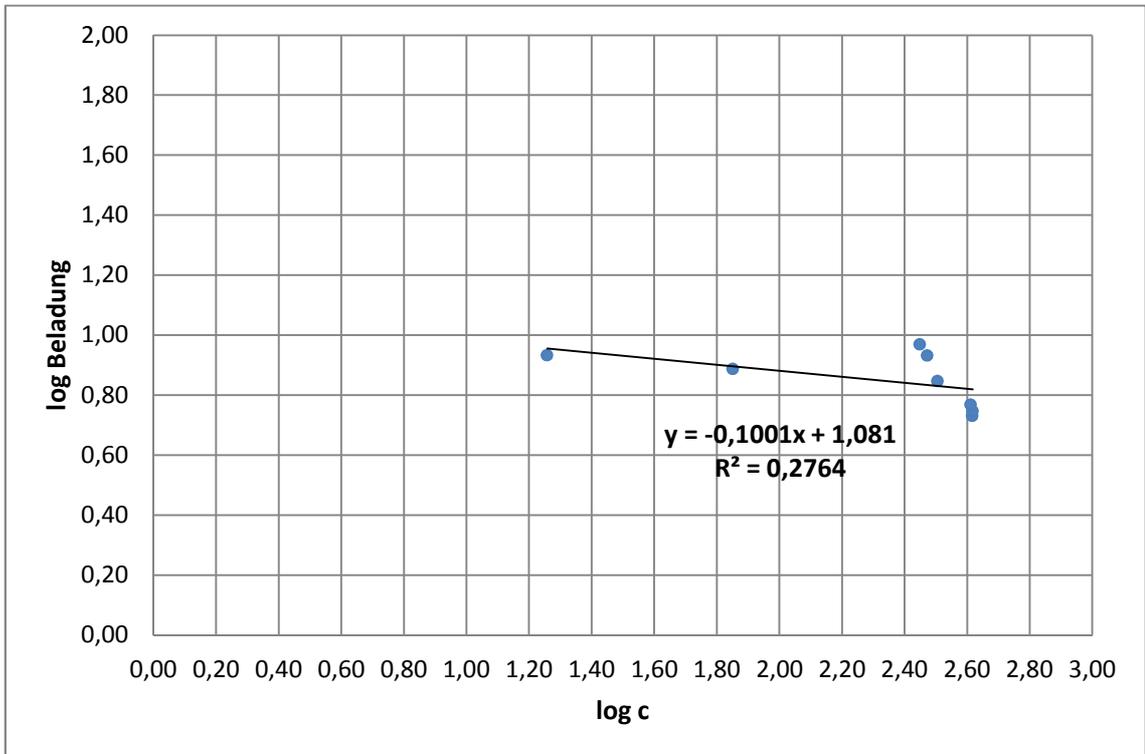


Abbildung 43: Isotherme für Versuch 9, SMX in AW

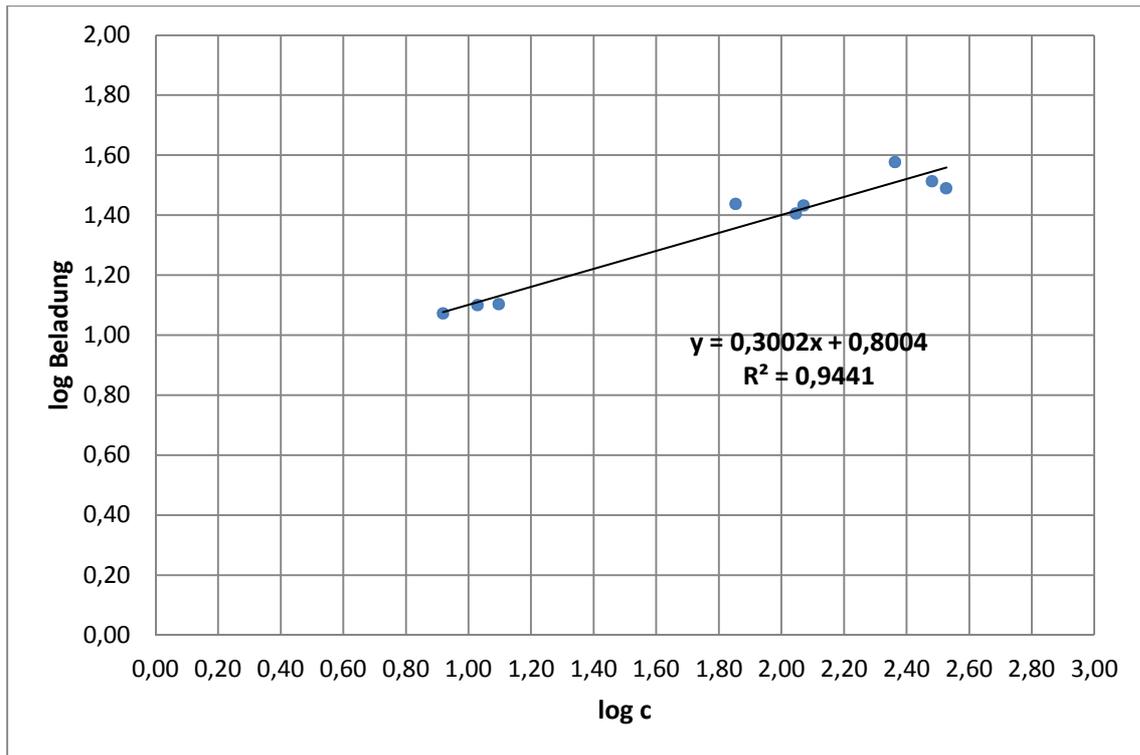


Abbildung 44: Isotherme für Versuch 9, SMX in TW

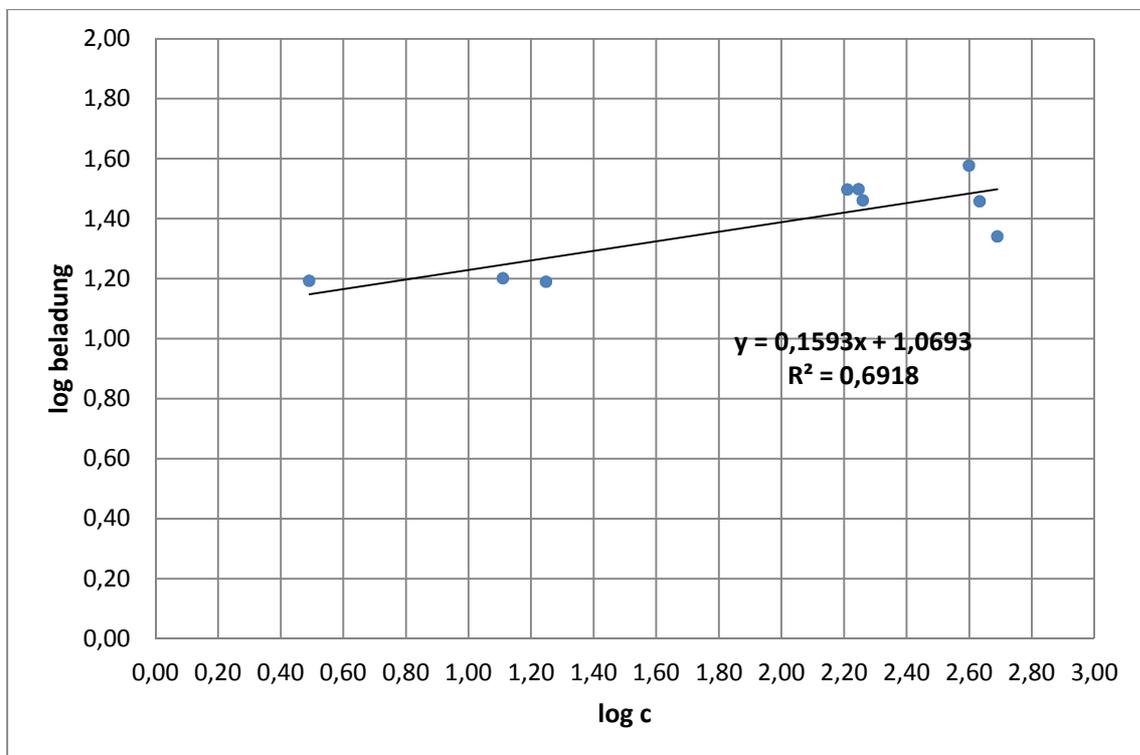


Abbildung 45: Isotherme für Versuch 10, SMX in AW

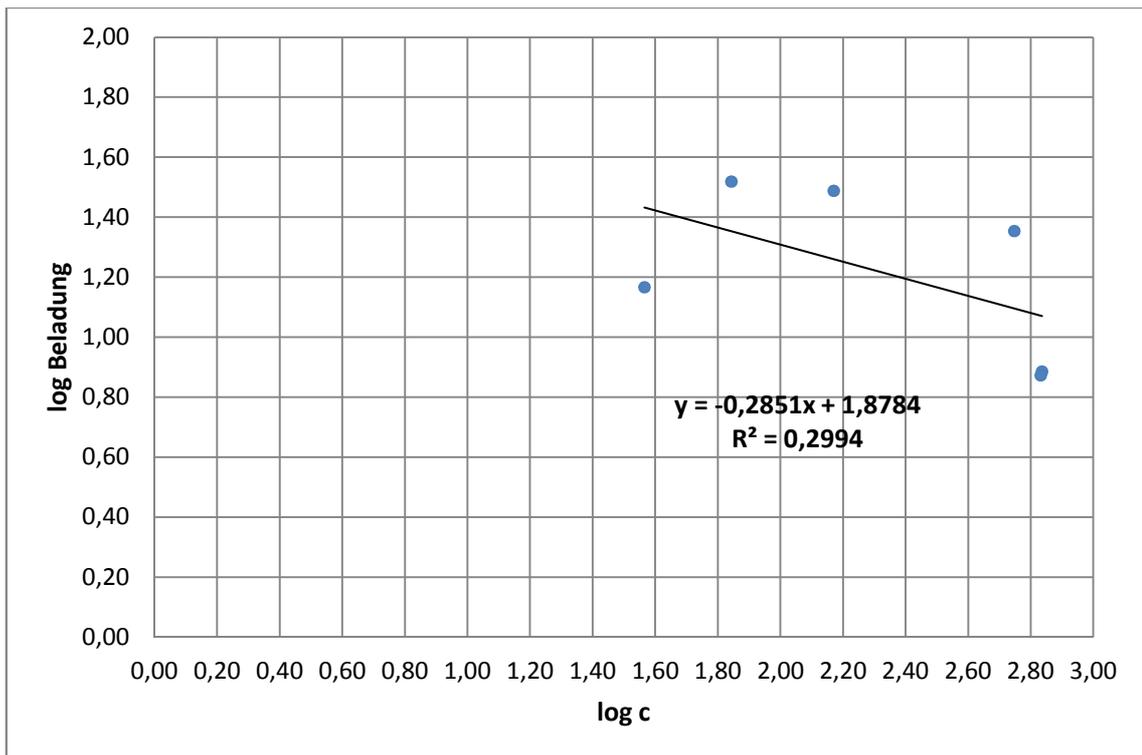


Abbildung 46: Isotherme für Versuch 10, SMX in TW

Die Isothermenberechnung von SMX hat ergeben, dass sich die Ergebnisse der Versuche voneinander sehr unterscheiden. Daher musste die Berechnung und die Darstellung von jedem Versuch jeweils einzeln durchgeführt werden.

Die nachfolgende Tabelle 14 gibt einen Überblick über die Isothermen der einzelnen Arzneimitteln aus den Einzelversuchen in Trinkwasser und Ablauf.

Tabelle 14: Isothermen aus den Einzelversuchen in TW und AW

	Arzneimittel	k-Wert	d-Wert
TW	Carbamazepin ^{*)}	0,4545	0,6128
	Ibuprofen	0,2463	1,2627
	Sulfamethoxazol	0,3002 / -0,2851	0,8004 / 1,8754
	Diclofenac	0,4782	1,1180

AW	Carbamazepin	0,4585	0,9016
	Ibuprofen	0,1820	1,0315
	Sulfamethoxazol	-0,1001 / 0,1593	1,081 / 1,0693
	Diclofenac	0,2252	1,0099

*) Versuch wurde in DW durchgeführt

Mix:

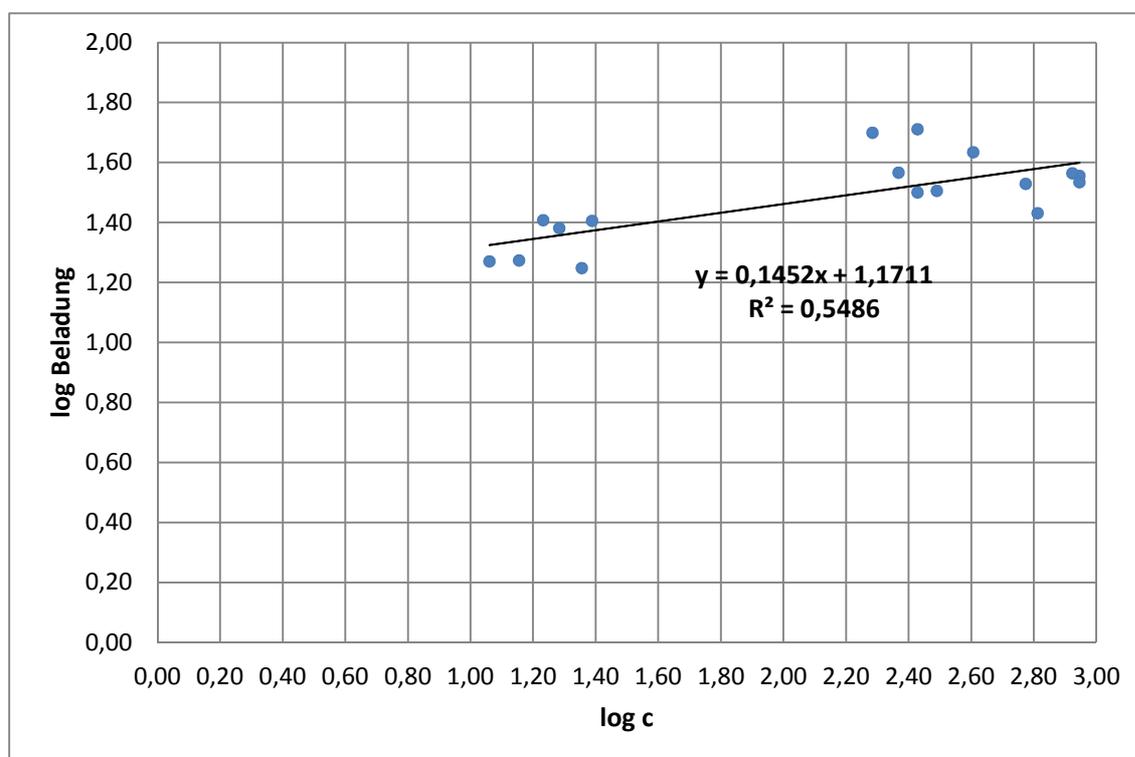


Abbildung 47: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), Ibuprofen in TW

Für die Isothermenberechnung der Mixtur wird jedes Arzneimittel einzeln abhängig vom verwendeten Medium betrachtet. Wobei die Ergebnisse der Versuche 11 und 12 sich decken und daher werden ihre Isothermen gemeinsam berechnet und abgebildet (mit Ausnahme von SMX in AW). Ein Überblick über die jeweiligen Isothermen ist in der Tabelle 15 dargestellt.

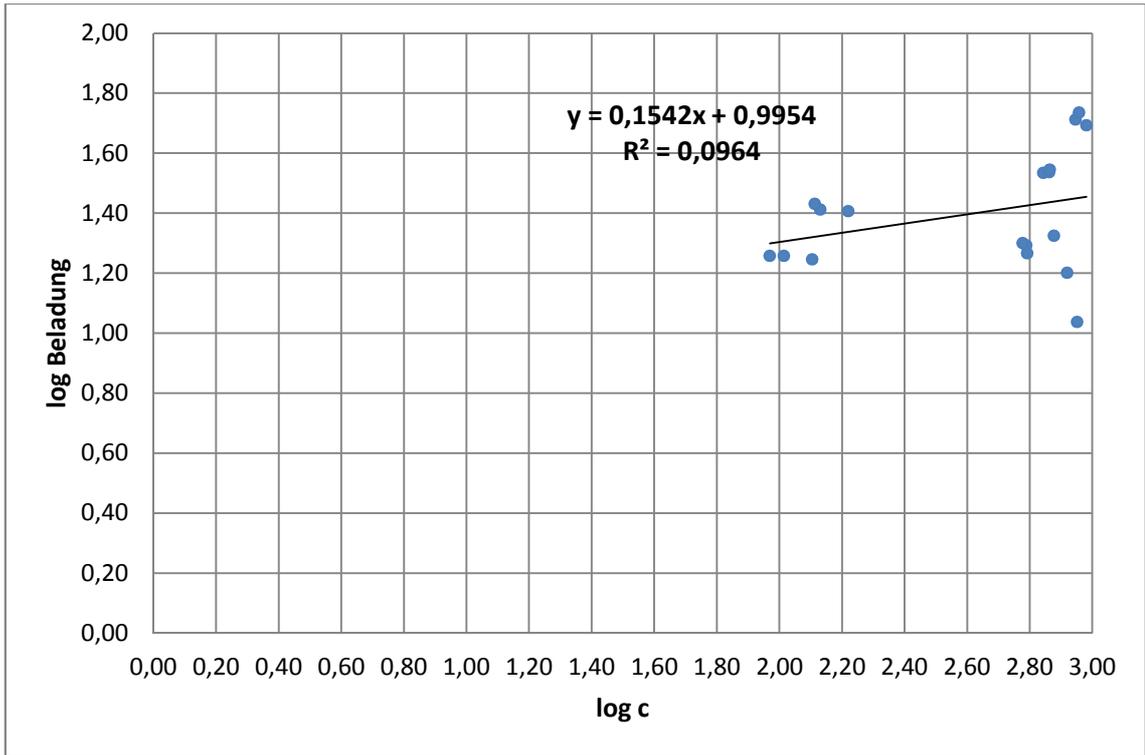


Abbildung 48: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), Ibuprofen in AW

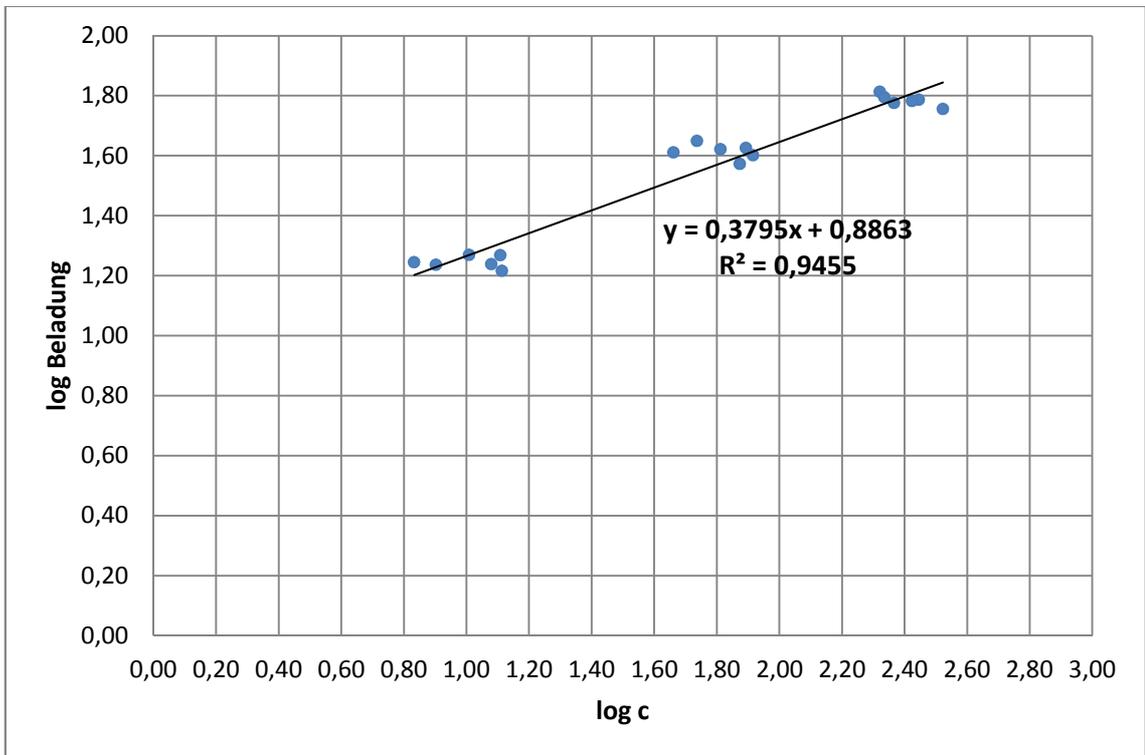


Abbildung 49: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), Carbamazepin in TW

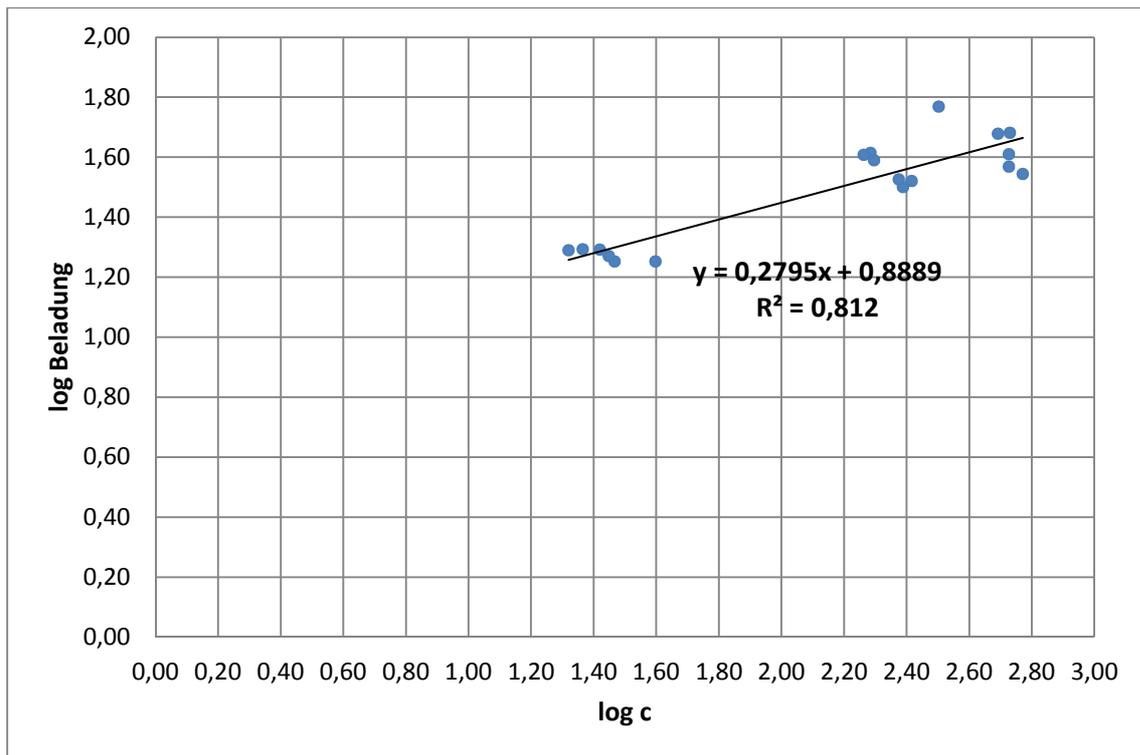


Abbildung 50: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), Carbamazepin in AW

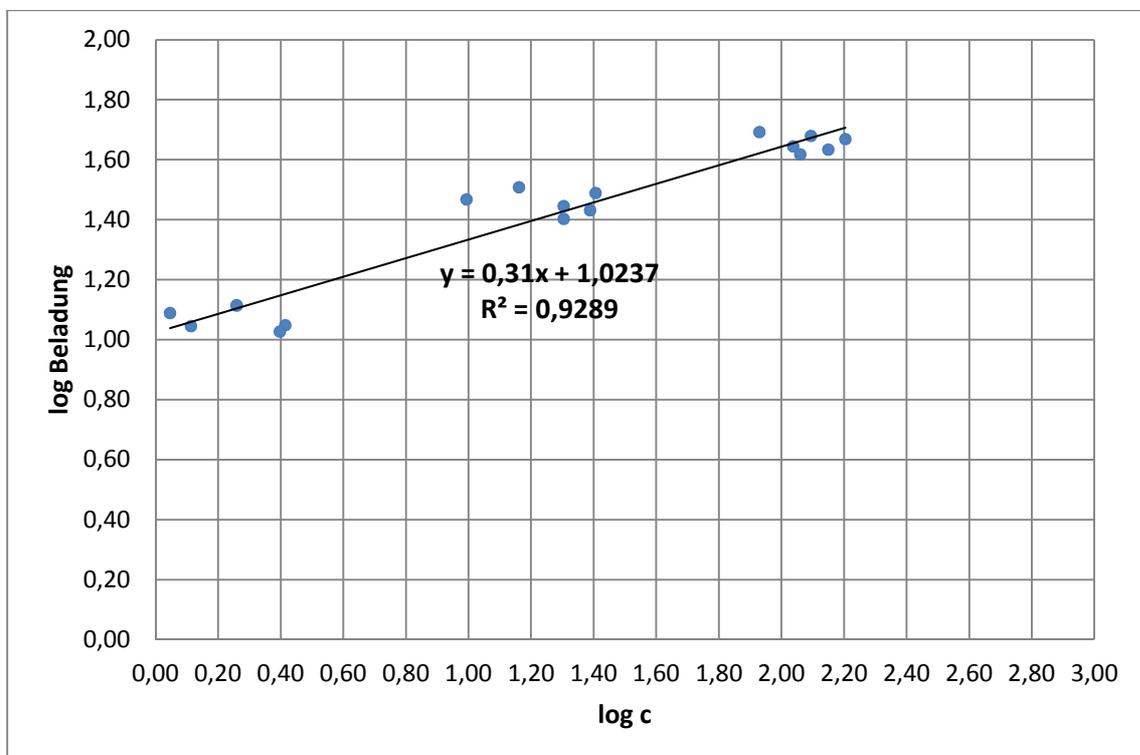


Abbildung 51: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), Diclofenac in TW

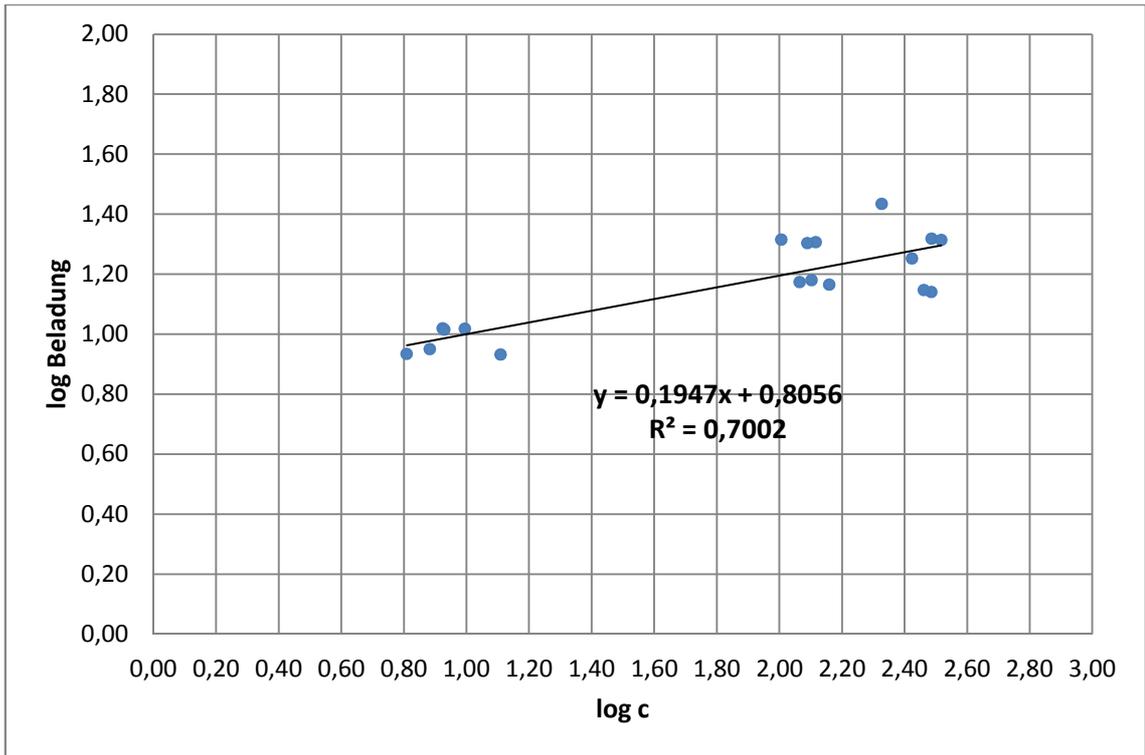


Abbildung 52: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), Diclofenac in AW

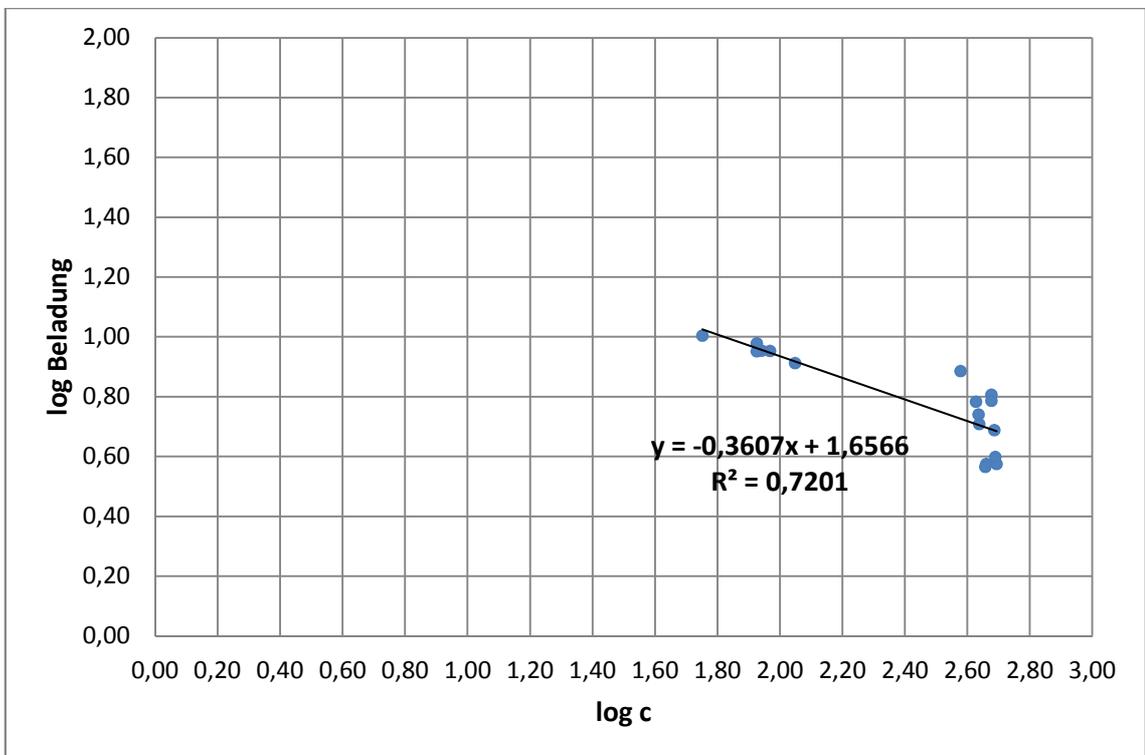


Abbildung 53: Isotherme für Versuch 11 und Versuch 12 (Mix), SMX in TW

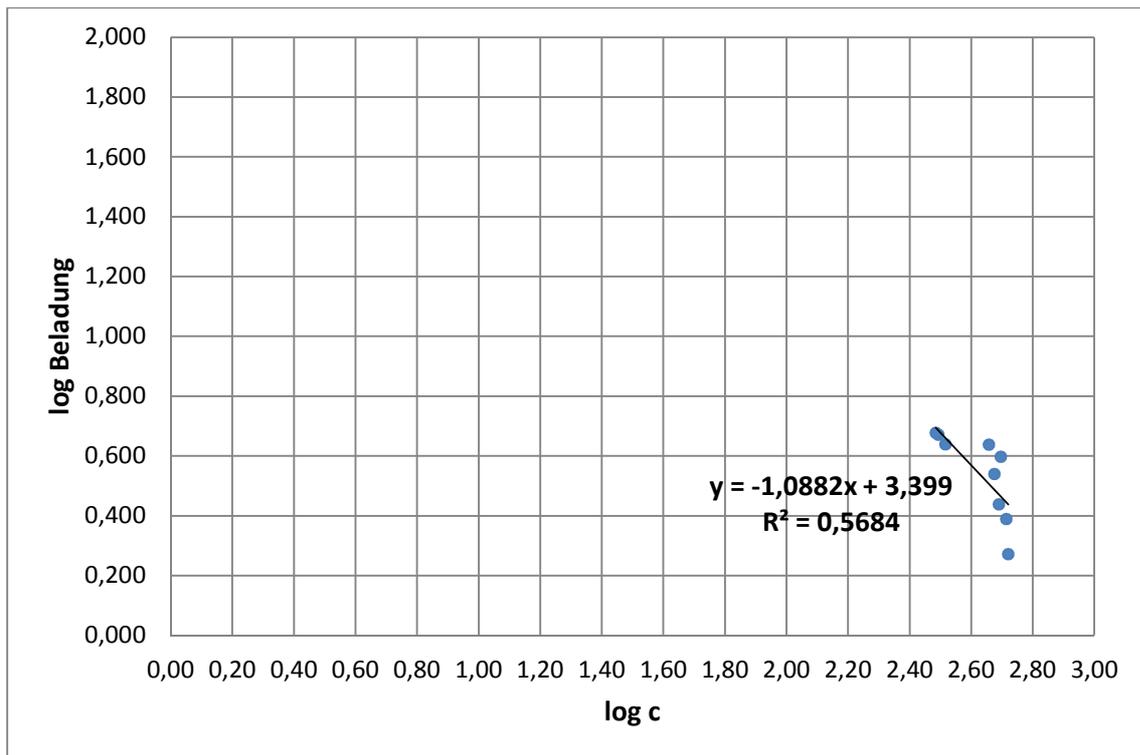


Abbildung 54: Isotherme für Versuch 11 (Mix), SMX in AW

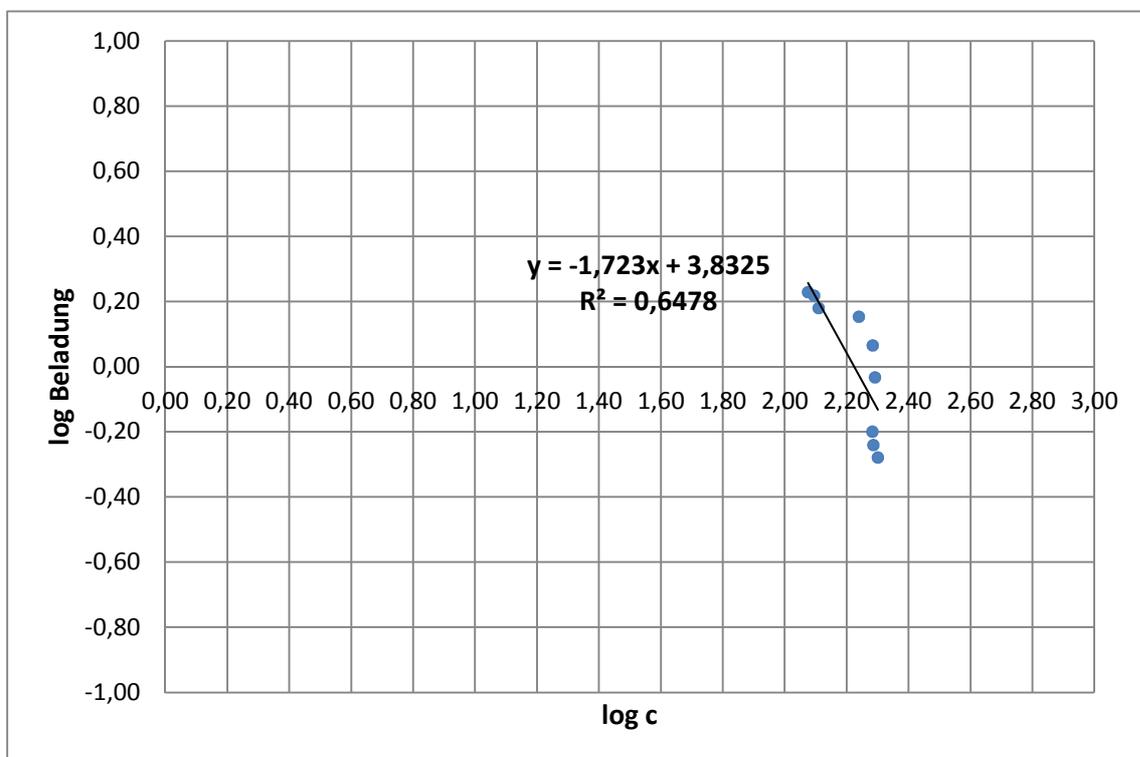


Abbildung 55: Isotherme für Versuch 12 (Mix), SMX in AW

7 Diskussion

7.1 Carbamazepin

Wie schon im Kapitel 6.3.1 erwähnt, findet bei einer AktivkohleKonzentration von ca. 50 mg/L eine nahezu vollständige Entfernung von Carbamazepin in DW statt. Ähnlich sieht es in Kombination mit Ablauf aus, wobei schon bei einer PAK-Konzentration von 25 mg/L nur eine sehr geringe Konzentration an CBZ im Bereich der analytischen Nachweisgrenze übrig ist. Diese PAK-Konzentration fehlt beim Versuch mit DW. Und auch die Werte aus den Versuchen in 0,5 L Kolben in Ablauf unterscheiden sich von jenen aus den 1 L Kolben nur minimal.

Beim Vergleich der Isothermen in DW und in AW (Abbildung 56) ist zu sehen, dass die Steigung (k-Wert) nahezu gleich ist. Nur der d-Wert unterscheiden sich: im DW ist der d-Wert kleiner, als im Ablauf.

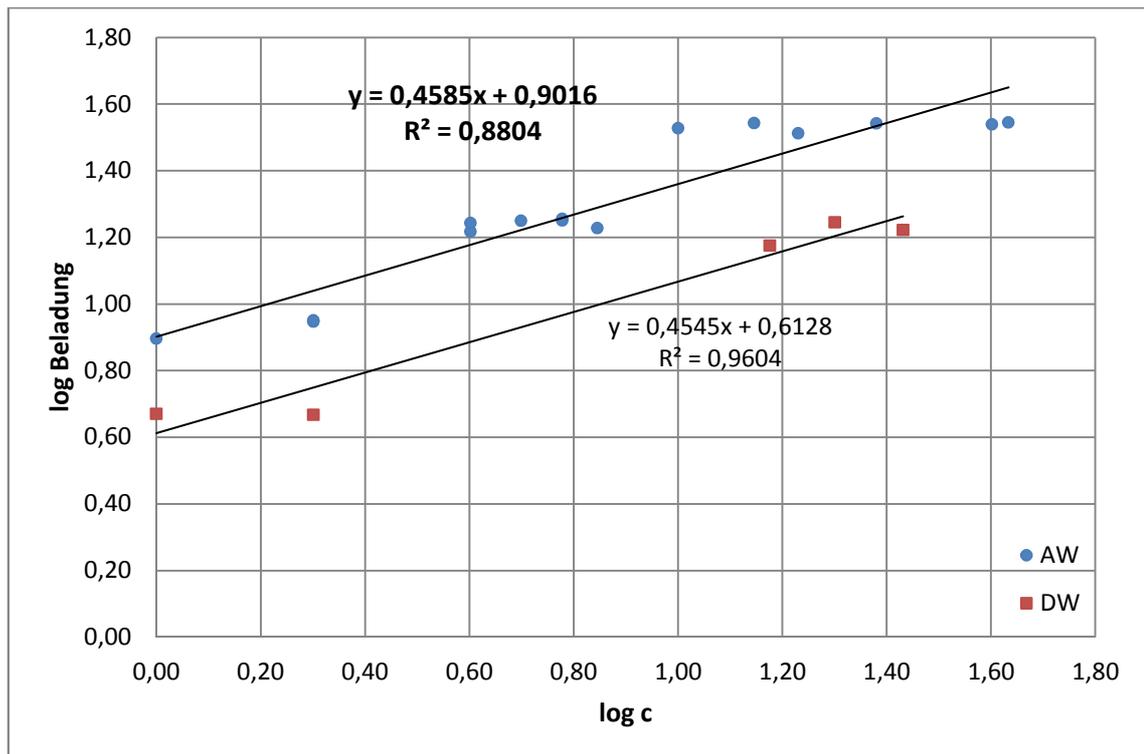


Abbildung 56: Vergleich der Isothermen für Carbamazepin in AW und TW

7.3 Diclofenac

In der Abbildung 25 (Versuch 7) und in der Abbildung 27 (Versuch 8) ist es ersichtlich, dass die DCF-Konzentration bei 0 mg/L PAK-Konzentration unterschiedlich hoch ist. Der Adsorptionsverlauf ist jedoch bei beiden Versuchen sehr ähnlich. Sowohl in Versuch 6 als auch in Versuch 8 findet eine fast vollständige Adsorption bei einer PAK-Konzentration von ca. 50 mg/L. Bei einer AktivkohleKonzentration von rund 20 mg/L sind bei beiden Versuchen rund 85 % der Diclofenacmenge entfernt. Der Adsorptionsverlauf von DCF in Trinkwasser ist bei den Versuchen 7 und 8 auch sehr ähnlich. Bei beiden Versuchen kommt es schon bei einer PAK-Konzentration von rund 10 mg/L zu einer fast vollständigen Entfernung.

Wie in der Abbildung 58 zu erkennen ist, ist bei der Isothermenberechnung die Steigung (k-Wert) der Regressionsgeraden aus den Versuchen in TW mehr als doppelt so groß als die aus den Versuchen in AW. Der d-Wert unterscheidet sich dabei nur minimal.

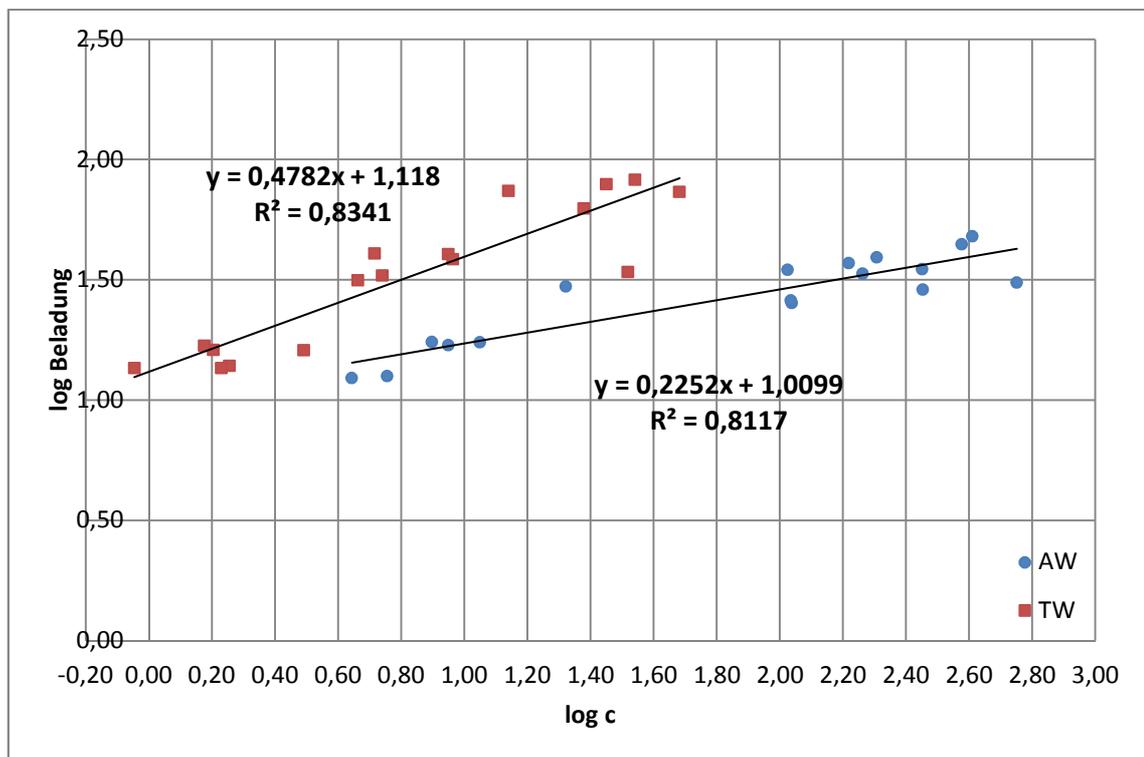


Abbildung 58: Vergleich der Isothermen für Diclofenac in AW und TW

7.4 Sulfamethoxazol

Beim Arzneimittel SMX sieht man einen unterschiedlichen Adsorptionsverlauf bei den beiden Versuchen mit Ablauf (Versuch 9 und 10), wie in der Abbildung 29 und Abbildung 31 zu erkennen ist. In Versuch 9 werden bei einer Aktivkohlekonzentration von 10 mg/L nur rund 15 % adsorbiert, während in Versuch 10 rund 40 % entfernt werden. Da die Ergebnisse der beiden Versuche unterschiedlich sind, werden die Isotherme auch getrennt berechnet. In Versuch 9 mit AW ist der k-Wert negativ, in Versuch 10 mit AW ist der k-Wert positiv. Bei den Versuchen mit Trinkwasser sieht es ähnlich aus. Versuch 9 mit Trinkwasser hat einen positiven k-Wert, während es in Versuch 10 ein negativer Wert ist. Und auch die Adsorptionsverläufe in den beiden Versuchen mit SMX in Trinkwasser unterscheiden sich.

7.5 Mix

In beiden Versuchen mit Ablauf (Abbildung 33 und Abbildung 35) hat Ibuprofen die höchste Konzentration (mit 0 mg/L PAK-Konzentration) und dann absteigend Carbamazepin, Diclofenac und Sulfamethoxazol. Ähnlich sieht es auch bei den Versuchen mit Trinkwasser aus. SMX hat in allen vier Versuchen einen eher linearen Adsorptionsverlauf. Ibuprofen hat in Ablauf einen exponentialen Verlauf, aber in Trinkwasser einen eher linearen. Diclofenac und Carbamazepin zeigen bei allen Versuchen in der Mixtur einen exponentialen Adsorptionsverlauf. Interessant ist auch, dass in Trinkwasser bei einer Aktivkohlekonzentration von rund 50 mg/L die Arzneimitteln Carbamazepin und Diclofenac fast vollständig entfernt werden, aber bei den Arzneimitteln SMX und IBP kommt es nicht zu einer vollständigen Entfernung. In Ablauf sind alle Arzneimittel mit Ausnahme von SMX bei einer PAK-Konzentration von 50 mg/L fast vollständig entfernt. Diclofenac und Carbamazepin haben sogar schon bei einer Aktivkohlekonzentration von 20 mg/L eine Konzentration unter 100 µg/L. Wie schon erwähnt, hat IBF in AW bei den Proben ohne Zugabe von PAK die höchste Konzentration und dann absteigend CBZ, DCF und SMX. Die Reihenfolge ändert sich aber schon bei der Zugabe einer PAK-Konzentration von 10 mg/L. IBF hat weiterhin die höchste Konzentration, aber danach folgen die Arzneimittel SMX, CBZ und DCF. Die Reihenfolge der Konzentrationen ändert sich dann wieder auch bei den Proben mit 20 mg/L PAK-Konzentration: SMX, IBF, CBZ und DCF. Solch Konkurrenzverhalten ist aber nicht bei den Versuchen mit Trinkwasser zu erkennen.

Die nachfolgende Tabelle 15 zeigt eine Übersicht über die berechneten Isothermen der einzelnen Arzneimittel in der Mixtur mit Abwasser und Trinkwasser.

Tabelle 15: Isothermen aus Mixtur in TW und AW

	Arzneimittel	k-Wert	d-Wert
TW	Carbamazepin	<i>0,3795</i>	0,8863
	Ibuprofen	<i>0,1608</i>	<i>1,1345</i>
	Sulfamethoxazol	<i>-0,3607</i>	<i>1,6566</i>
	Diclofenac	<i>0,31</i>	<i>1,0237</i>
AW	Carbamazepin	<i>0,2795</i>	<i>0,8889</i>
	Ibuprofen	<i>0,1542</i>	<i>0,9954</i>
	Sulfamethoxazol	<i>-1,0882 / -1,723</i>	<i>3,399 / 3,8325</i>
	Diclofenac	<i>0,1947</i>	<i>0,8056</i>

8 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden die Grundlage für die Entfernung ausgewählter Arzneimittel aus Trinkwasser und gereinigtem Kläranlagenablauf mit Hilfe von pulverisierter Aktivkohle und die Grundlage für die Dimensionierungsansätze für einen großtechnischen Einsatz von pulverisierter Aktivkohle untersucht. Bei den ausgewählten Arzneimitteln handelt es sich um Diclofenac, Carbamazepin, Ibuprofen und Sulfamethoxazol. Die Wahl fiel auf diese vier Arzneimittel, da sie ein großes Spektrum von gering bis gut adsorbierbar abdecken. Die Ergebnisse aus den Versuchen mit den vier Arzneimitteln bestätigen, dass die ausgewählten Substanzen einen breiten Adsorptionsbereich, von sehr gut bis sehr schlecht adsorbierbar, charakterisieren.

Die Adsorption von Arzneimitteln durch pulverisierte Aktivkohle ist eine effektive Methode zur Entfernung von Pharmaka. So wurde in den durchgeführten Untersuchungen festgestellt, dass die Arzneimittel Diclofenac, Ibuprofen, Carbamazepin und Sulfamethoxazol in den Versuchen als Einzelsubstanzen in Trinkwasser und Kläranlagenablauf bei einer PAK-Konzentration von weniger als 50 mg/L nahezu vollständig entfernt wurden. Die Ergebnisse aus den Versuchen in der Mischung sind anders: Die Untersuchungen mit gereinigtem Abwasser zeigen, dass Diclofenac, Ibuprofen und Carbamazepin bei einer Aktivkohlenkonzentration von rund 50 mg/L fast vollständig adsorbiert wurden, jedoch das Arzneimittel Sulfamethoxazol nicht. Die Versuche mit Trinkwasser haben ergeben, dass nur Diclofenac und Carbamazepin bei einer PAK-Konzentration von 50 mg/L nahezu vollständig entfernt wurden. Sulfamethoxazol und Ibuprofen haben bei dieser Aktivkohlenkonzentration noch eine Restkonzentration zwischen 100 und 300 µg/L.

Im Rahmen der Diplomarbeit wurde festgestellt, dass die angewendete Methodik für alle untersuchten Arzneimittel, mit Ausnahme von Sulfamethoxazol, geeignet ist, um in verschiedenen Abwassermatrizen das Adsorptionsverhalten zu charakterisieren, sowohl als Einzelsubstanzen, als auch in einer Mischung aus den vier Substanzen. Die Methodik liefert auch über das Adsorptionsverhalten reproduzierbare Ergebnisse. In den Grafen zur Isothermenberechnung (Abbildung 38, Abbildung 40 und Abbildung 41) ist zu erkennen, dass die Ergebniswerte eine geringe Streuung vorweisen. Die angewendete Methodik liefert nicht nur für die Untersuchungen mit Kläranlagenablauf reproduzierbare Ergebnisse, sondern auch für die Untersuchungen mit Trinkwasser, wobei das Arzneimittel Sulfamethoxazol wieder eine Ausnahme darstellt. In der Mischung sind die Ergebnisse aus den Versuchen mit SMX und Trinkwasser vergleichbar, jedoch nicht in den Versuchen als Einzelsubstanz.

Die Isothermenberechnungen haben gezeigt, dass die angewendete Methodik auch bei unterschiedlichen Anfangskonzentrationen von Arzneimitteln für IBP, DCF und SMX vergleichbare Versuchsergebnisse liefert, sowohl mit Trinkwasser, als auch mit gereinigtem Abwasser.

Die Antwort auf die Frage, ob die Abwassermatrix das Adsorptionsverhalten beeinflusst, lautet: ja es kommt zu einer Beeinflussung durch die Abwassermatrix. Beim Arzneimittel Ibuprofen mit Trinkwasser kommt es zu einer vollständigen Entfernung bei einer PAK-Konzentration von 25 mg/L, wobei im Kläranlagenablauf bei dieser Konzentration noch rund 12 – 25 % der ursprünglichen Arzneimittelkonzentration vorhanden sind. Die Isothermenberechnung von Ibuprofen zeigt, dass die Regressionsgerade der Versuche mit Trinkwasser eine höhere Steigung (um ca. $3,3^\circ$) vorweist, als die Steigung der Regressionsgerade der Versuche mit gereinigtem Abwasser. Der d-Wert unterscheidet sich nur minimal. Die d-Werte der Regressionsgerade aus den Versuchen mit Diclofenac und Ablauf bzw. Trinkwasser unterscheiden sich auch minimal. Der k-Wert aus den Versuchen mit TW ist jedoch fast doppelt so groß wie der k-Wert aus den Versuchen mit Kläranlagenablauf. Für Carbamazepin ist ein direkter Vergleich der Entfernung in AW und DW nicht möglich, da im Versuch mit DW keine Ergebnisse zwischen 0 und 50 mg/L PAK-Konzentration vorhanden sind. Aus der Isothermenberechnung ist jedoch zu erkennen, dass die k-Werte aus den Versuchen mit DW und AW fast identisch sind und der d-Wert aus dem Versuch mit AW größer ist. Und auch in der Mixtur zeigen die Arzneimittel in Trinkwasser und in Kläranlagenablauf ein unterschiedliches Adsorptionsverhalten.

Es ist ein deutlicher Unterschied zwischen den Versuchen mit Einzelsubstanzen und jenen mit der Mixtur im hohen Konzentrationsbereich von Arzneimitteln zu erkennen. Aufgrund des Konkurrenzverhaltens der Arzneimittel in der Mixtur findet die Adsorption der Arzneimittel schleppend statt. Dieses Adsorptionsverhalten ist sowohl in den Versuchen mit Trinkwasser als auch in den Versuchen mit Kläranlagenablauf zu erkennen.

Literaturverzeichnis

- [1] <http://www.pharmazeutische-zeitung.de>, Ausgabe 47/2006 Ökologie: Arzneimittelbelastung in der Umwelt [letzter Zugriff: 01.11.2014]
- [2] Achim Ried (2001): Ozon/UV-Kombination zum Abbau von endokrinen Substanzen, LENZING GERBER Patentanwälte, 40470 Düsseldorf
- [3] <http://www.donau-carbon.com/Products---Solutions/Aktivkohle/Anwendungen/Wasser-und-Abwasserreinigung/Abwasserbehandlung.aspx> [letzter Zugriff: 03.11.2014]
- [4] W. Püttmann, F. Keil, J. Oehlmann und U. Schulte-Oehlmann; Zeitschrift: „Umweltwissenschaften und Schadstoff-Forschung; Artikel: Wassertechnische Strategien zur Reduzierung der Trinkwasserbelastung durch Arzneimittelwirkstoffe“, Springer Berlin
- [5] Sontheimer, H.; Frick, B.; Fettig, J.; Hörner, G.; Hubele, C.; Zimmer, G. (1985): Adsorptionsverfahren zur Wasserreinigung, DVGW-Forschungsstelle am Engler-Bunte-Institut der Universität Karlsruhe (TH)
- [6] <http://medikamente.netdoktor.de/wirkstoffe/carbamazepin/> [letzter Zugriff: 01.11.2014]
- [7] <http://www.umweltbundesamt.at/fileadmin/site/publikationen/REP0258.pdf> [letzter Zugriff: 20.09.2014]
- [8] <http://www.chemie.de/lexikon/Sulfamethoxazol.html> [letzter Zugriff: 20.09.2014]
- [9] Kann C. A., Petz M. (2000): Residues of Veterinary Drugs in Eggs and their Distribution between Yolk and White, Journal of Agricultural and Food Chemistry
- [10] <http://www.donau-carbon.com/Downloads/Abwasser.aspx> [letzter Zugriff: 03.11.2014]
- [11] http://www.chemgapedia.de/vsengine/vlu/vsc/de/ch/10/adsorption/grundlagen/grundlagen_der_adsorption.vlu.html [letzter Zugriff: 29.12.2013]
- [12] <http://www.donau-carbon.com/Products---Solutions/Aktivkohle.aspx> [letzter Zugriff 02.02.2014]
- [13] <http://www.chemvironcarbon.com/de/aktivkohle/wasistaktivkohle> [letzter Zugriff 03.02.2014]
- [14] <http://www.umweltbundesamt.at/fileadmin/site/publikationen/REP0061.pdf> [letzter Zugriff 02.03.2014]
- [15] Clara, Manfred (2004): „Das Verhalten ausgewählter organischer Spurenstoffe bei der biologischen Abwasserreinigung.“ Wiener Mitteilung 191

- [16] <http://flexikon.doccheck.com/> [letzter Zugriff 05.03.2013]
- [17] <http://www.pharmawiki.ch/wiki/index.php?wiki=Diclofenac> [letzter Zugriff 10.03.2014]
- [18] Fent K., Weston A.A., Caminada D. (2006): Ecotoxicology of human pharmaceuticals, *Aquatic Toxicology*
- [19] Gröning J., Held C., Garten C., Claußnitzer U., Kaschabek S. R., Schlömann M. (2007): Transformation of diclofenac by the indigenous microflora of river sediments and identification of a major intermediate, *Chemosphere*
- [20] Ternes T. A. (1998): Occurrence of drugs in German sewage treatment plants and rivers, *Wat. Res.*, S. 3245-3260
- [21] Heberer T. (2002): Occurrence, fate, and removal of pharmaceutical residues in the aquatic environment: a review of recent research data, *Toxicology Letters*, S. 5-17
- [22] <http://www.donau-carbon.com/Products---Solutions/Aktivkohle/Produktubersicht/Epibon%C2%AE.aspx?navback=/Products--Solutions/Aktivkohle/Produktubersicht.aspx> [letzter Zugriff: 10.03.2014]
- [23] <http://www.umweltlabor.de/Labor/hplc.htm> [letzter Zugriff: 13.04.2014]
- [24] Van Claker-Kleinhanß, „Physikalisches Kurzpraktikum für Mediziner Und Naturwissenschaftler“, Verlag Akademische Buchhandlung GmbH, München, (1971): S. 225-247
- [25] <http://www.uni-trier.de/index.php?id=7794> [letzter Zugriff: 11.05.2014]
- [26] CD Römpp Chemie Lexikon – Version 1.0, Stuttgart/New York, Georg Thiemes Verlag 1995
- [27] IWAG TU Wien: NAUPLIUS – Datenbericht zur internen Information, Wien 01/2003
- [28] <http://www.srcinc.com/what-we-do/environmental/> [letzter Zugriff: 13.04.2014]
- [29] Burger A., Wachter H. (1998): Hunnius, Pharmazeutisches Wörterbuch, 8.Auflage, Walter de Gruyter
- [30] Sattelberger R. (1999): Arzneimittelrückstände in der Umwelt – Bestandsaufnahme und Problemdarstellung, Umweltbundesamt GmbH,
- [31] Program EPI-Suite v3.10, U.S. Environmental Protection Agency, (2000)
- [32] Steger-Hartmann T., Länge R., Schweinfurth H. (1999): Environmental risk assessment for the widely used iodinated X-Ray contrast agent Iopromide, *Ecotoxicology and Environmental Safety*,

- [33]Hartmann A., Chou Y.-J., Brich Z. (2002): Assessing pharmaceuticals in the environment: an example for the EU, Assessment and Management of PPCPs in the Canadian Environment, Niagara-on-the-Lake, Ontario,
- [34]<https://www.sigmaaldrich.com/> [letzter Zugriff: 21.09.2014]
- [35]Kümmerer K. (2004): Pharmaceuticals in the Environment: Sources, Fate, Effects and Risks, Springer Verlag, Berlin Heidelberg New York
- [36]http://www.vetpharm.uzh.ch/reloader.htm?wir/00000072/3466_01.htm?wir/00000072/3466_00.htm [letzter Zugriff: 20.09.2014]
- [37]<http://www.guidechem.com/dictionary/de/723-46-6.html> [letzter Zugriff: 20.09.2014]
- [38]http://www.eawag.ch/publications/eawagnews/www_en57/en57d_screen/en57d_siegrist_s.pdf [letzter Zugriff: 10.11.2014]

Anhang I

Übersicht über die Eigenschaften der untersuchten Medikamente

Tabelle 16: Diclofenac

<i>Eigenschaften</i>	<i>Einheit</i>	
Molekülmasse	[g/mol]	295,15 ^[26]
EEC-Nummer (EINECS)	[-]	239-348-5
Stoffgruppe	[-]	Antiphlogistika ^[27]
Chemischer Name	[-]	[2-(2,6-Dichloranilino)- phenyl]essigsäure ^[26]
Physikalischer Zustand (bei 20°C)	[-]	-
Dichte ρ	[-]	-
pH	[-]	-
Wasserlöslichkeit S	[g/L]	0,00237 (25°C) ^[28]
Löslichkeit in Ethanol	[g/L]	-
Dissoziationskonstante pKa	[-]	4,15 ^[28]
Adsorptionskoeffizient KOC	[L/kg]	23056
Schmelzpunkt Tm	[°C]	175 (calc.) ^[28] ; ca. 285 ^[29]
Siedepunkt Tb	[°C]	-
Dampfdruck P (bei 25°C)	[Pa]	0,00000819 (calc.) ^[28]
Henry-Konstante	[-]	0,000000217 (calc.) ^[28]
biologische Abbaupotential	[-]	-
AWbehandlung (calc.): Gesamtabbau	[%]	56,55
AWbehandlung (calc.): Bioabbaubarkeit	[%]	0,53
AWbehandlung (calc.): im Klärschlamm	[%]	56,03
AWbehandlung (calc.): über Entlüftung	[%]	0
menschliche Stoffwechselprodukte und Ausscheidungen	[-]	-
Stabilität bei korrekter Lagerung	[-]	-
Konsumation (Österreich 1997)	[kg/a]	6143 ^[30]

Tabelle 17: Carbamazepin

<i>Eigenschaften</i>	<i>Einheit</i>	
Molekülmasse	[g/mol]	236,26 ^[26]
EEC-Nummer (EINECS)	[-]	206-062-7
Stoffgruppe	[-]	Antiepileptikum ^[27]
Chemischer Name	[-]	5H-Dibenz[b,f]azepin-5-carbonsäureamid ^[26]
Physikalischer Zustand (bei 20°C)	[-]	kristalliner Feststoff
Dichte ρ	[-]	-
pH	[-]	neutral
Wasserlöslichkeit S	[g/L]	0,01766 (25°C, calc.) ^[28] ; praktisch unlöslich ^[29]
Löslichkeit in Ethanol	[g/L]	01:10 ^[29]
Dissoziationskonstante pKa	[-]	13,9 (est.)
Adsorptionskoeffizient KOC	[L/kg]	640...7000
Schmelzpunkt Tm	[°C]	190,2 ^[28]
Siedepunkt Tb	[°C]	-
Dampfdruck P (bei 25°C)	[Pa]	0,000017 (calc.) ^[31]
Henry-Konstante	[-]	0,00000000442 (calc.) ^[32]
biologische Abbaupotential	[-]	kein signifikanter Abbau ^[33]
AWbehandlung (calc.): Gesamtabbau	[%]	2,96
AWbehandlung (calc.): Bioabbaubarkeit	[%]	0,1
AWbehandlung (calc.): im Klärschlamm	[%]	2,86
AWbehandlung (calc.): über Entlüftung	[%]	0
menschliche Stoffwechselprodukte und Ausscheidungen	[-]	Ausscheidungen: unverändert (1%), aktive Metabolite (2%), inaktive Metabolite (30%) und Glucurone ^[33]
Stabilität bei korrekter Lagerung	[-]	Stabil ^[34]
Konsumation (Österreich 1997)	[kg/a]	6334 ^[30]

Tabelle 18: Ibuprofen

<i>Eigenschaften</i>	<i>Einheit</i>	
Molekülmasse	[g/mol]	206,27 ^[26]
EEC-Nummer (EINECS)	[-]	239-748-6
Stoffgruppe	[-]	Analgetikum ^[27]
Chemischer Name	[-]	2-(4-Isobutylphenyl)-propionsäure ^[26]
Physikalischer Zustand (bei 20°C)	[-]	Feststoff
Dichte ρ	[-]	-
pH	[-]	-
Wasserlöslichkeit S	[g/L]	0,021 (25°C) ^[28] , sehr schwer löslich ^[26]
Löslichkeit in Ethanol	[g/L]	01:01,5
Dissoziationskonstante pKa	[-]	4,91 ^[28]
Adsorptionskoeffizient KOC	[L/kg]	12720
Schmelzpunkt Tm	[°C]	94 (calc.) ^[31] ; 76 ^[28]
Siedepunkt Tb	[°C]	-
Dampfdruck P (bei 25°C)	[Pa]	0,0248 (calc.) ^[28]
Henry-Konstante	[-]	0,0000983 (calc.) ^[32]
biologische Abbaupotential	[-]	-
AWbehandlung (calc.): Gesamtabbau	[%]	28,72
AWbehandlung (calc.): Bioabbaubarkeit	[%]	0,31
AWbehandlung (calc.): im Klärschlamm	[%]	28,4
AWbehandlung (calc.): über Entlüftung	[%]	0,01
menschliche Stoffwechselprodukte und Ausscheidungen	[-]	-
Stabilität bei korrekter Lagerung	[-]	Stabil ^[34]
Konsumation (Österreich 1997)	[kg/a]	6696 ^[30]

Tabelle 19: Sulfamethoxazol

<i>Eigenschaften</i>	<i>Einheit</i>	
Molekülmasse	[g/mol]	253,3 ^[35]
EEC-Nummer (EINECS)	[-]	211-963-3
Stoffgruppe	[-]	Sulfonamide ^[36]
Chemischer Name	[-]	4-Amino-N-(5-methyl-3-isoxazolyl)benzolsulfonamid ^[35]
Physikalischer Zustand (bei 20°C)	[-]	kristalliner Feststoff ^[36]
Dichte ρ	[g/m ³]	1,462 ^[37]
pH	[-]	-
Wasserlöslichkeit S	[g/L]	0,61 (37°C) ^[9] ; 0,29 (25°C) ^[9]
Löslichkeit in Ethanol	[g/L]	23 (25°C)
Dissoziationskonstante pKa	[-]	5,61
Adsorptionskoeffizient KOC	[L/kg]	-
Schmelzpunkt Tm	[°C]	167 ^[35]
Siedepunkt Tb	[°C]	414 ^[35]
Dampfdruck P (bei 25°C)	[Pa]	0,000009237 ^[8]
Henry-Konstante	[-]	-
biologische Abbaupotential	[-]	-
AWbehandlung (calc.): Gesamtabbau	[%]	-
AWbehandlung (calc.): Bioabbaubarkeit	[%]	-
AWbehandlung (calc.): im Klärschlamm	[%]	-
AWbehandlung (calc.): über Entlüftung	[%]	-
menschliche Stoffwechselprodukte und Ausscheidungen	[-]	-
Stabilität bei korrekter Lagerung	[-]	-
Konsumation (Österreich)	[kg/a]	2500 ^[7]

Anhang II

Vorversuche-Tabellen

Tabelle 20: Ergebnisse von Versuch 1 mit Anwendung von zwei verschiedenen Filtern und Auswertung mit zwei verschiedenen Photometern

Filter	PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100	DR 2800
Nr. 1	0,25	0,249	0,029	0,033
Nr. 4	0,25	0,249	0,042	0,048
Nr. 1	0,4	0,395	0,0100	0,007
Nr. 4	0,4	0,395	0,029	0,035
Nr. 1	0,8	0,805	-0,002	0,002
Nr. 4	0,8	0,805	0,017	0,022

Tabelle 21: Ergebnisse für die erste Eichgerade

Methylenblau [mg/L]	CADAS 100	DR 2800
0	-0,003	0,003
0,5	0,086	0,085
2	0,393	0,388
10	1,733	1,835

Tabelle 22: Ergebnisse von Versuch 2 mit zwei unterschiedlichen Entnahmezeiten

Zeit	PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100	DR 2800
30 min	0,05	0,049	3,409	> 3,5
60 min	0,05	0,049	3,458	> 3,5

30 min	0,1	0,102	3,135	> 3,5
60 min	0,1	0,102	3,128	> 3,5
30 min	0,2	0,198	0,086	0,091
60 min	0,2	0,198	0,061	0,069
30 min	0,3	0,302	0,003	0,010
60 min	0,3	0,302	0	0,008

Tabelle 23: Ergebnisse von Versuch 3 mit drei unterschiedlichen Entnahmezeiten

Zeit	PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100	DR 2800
15 min	0,1	0,105	3,196	> 3,5
30 min	0,1	0,105	3,162	> 3,5
60 min	0,1	0,105	3,152	> 3,5
15 min	0,15	0,15	1,233	1,253
30 min	0,15	0,15	0,460	0,459
60 min	0,15	0,15	0,244	0,248
15 min	0,2	0,201	0,173	0,176
30 min	0,2	0,201	0,095	-
60 min	0,2	0,201	0,059	0,059
15 min	0,25	0,252	0,054	0,057
30 min	0,25	0,252	0,044	0,042
60 min	0,25	0,302	0,012	0,018

Tabelle 24: Ergebnisse für die Eichgerade

Methylenblau [mg/L]	CADAS 100	DR 2800
0	-0,002	0,000
0,5	0,176	0,174
2	0,775	0,769
10	2,136	2,926

Tabelle 25: Ergebnisse von Versuch 4 mit drei unterschiedlichen Entnahmezeiten

Zeit	PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100	DR 2800
15 min	0,17	0,17	0,585	0,59
30 min	0,17	0,17	0,171	0,179
60 min	0,17	0,17	0,091	0,100
15 min	0,2	0,199	0,167	0,176
30 min	0,2	0,199	0,066	0,073
60 min	0,2	0,199	0,028	0,036
15 min	0,22	0,222	0,092	0,101
30 min	0,22	0,222	0,033	0,041
60 min	0,22	0,222	0,021	0,026
15 min	0,25	0,25	0,056	0,058
30 min	0,25	0,25	0,026	0,031
60 min	0,25	0,25	0,003	0,012
15 min	0,27	0,271	0,042	0,051
30 min	0,27	0,271	0,010	0,018
60 min	0,27	0,271	0,010	0,018

Tabelle 26: Ergebnisse von Versuch 5 mit drei unterschiedlichen Entnahmezeiten

Zeit	PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100
15 min	0,17	0,172	0,268
30 min	0,17	0,172	0,196
60 min	0,17	0,172	0,095
15 min	0,2	0,201	0,105
30 min	0,2	0,201	0,075
60 min	0,2	0,201	0,068
15 min	0,22	0,221	0,114
30 min	0,22	0,221	0,075
60 min	0,22	0,221	0,050
15 min	0,25	0,252	0,054
30 min	0,25	0,252	0,026
60 min	0,25	0,252	0,022
15 min	0,28	0,28	0,028

30 min	0,28	0,28	0,012
60 min	0,28	0,28	0,009

Tabelle 27: Ergebnisse für die Eichgerade

Methylenblau [mg/L]	CADAS 100	DR 2800
0	0,002	0,001
0,5	0,08	0,077
2	0,297	0,291
10	1,732	1,867

Tabelle 28: Ergebnisse von Versuch 6 von der Entnahme nach 15 Minuten

PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100
0,220	0,222	0,107
0,220	0,220	0,105
0,220	0,222	0,100
0,250	0,255	0,064
0,250	0,251	kein Wert
0,250	0,252	0,106
0,280	0,285	0,049
0,280	0,282	0,062
0,280	0,278	0,053

Tabelle 29: Ergebnisse von Versuch 6 von der Entnahme nach 30 Minuten

PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100
0,22	0,222	0,06
0,22	0,22	0,072
0,22	0,222	0,066
0,25	0,255	0,068
0,25	0,251	0,033

0,25	0,252	0,054
0,28	0,285	0,027
0,28	0,282	0,038
0,28	0,278	0,042

Tabelle 30: Ergebnisse von Versuch 7 von der Entnahme nach 15 Minuten

PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100
0,22	0,219	0,082
0,22	0,221	0,1
0,22	0,225	0,169
0,25	0,251	0,365
0,25	0,25	0,264
0,25	0,25	0,091
0,28	0,285	0,096
0,28	0,281	0,186
0,28	0,283	0,132

Tabelle 31: Ergebnisse von Versuch 7 von der Entnahme nach 30 Minuten

PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100
0,22	0,219	0,102
0,22	0,221	0,189
0,22	0,225	0,083
0,25	0,251	0,06
0,25	0,25	0,137
0,25	0,25	0,062
0,28	0,285	0,037
0,28	0,281	0,074
0,28	0,283	0,047

Tabelle 32: Ergebnisse für die Eichgerade

Methylenblau [mg/L]	CADAS 100	DR 2800
0	0,001	0
0,5	0,075	0,072
2	0,31	0,308
10	1,752	1,847

Tabelle 33: Ergebnisse von Versuch 8 von der Entnahme nach 15 Minuten

PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100
0,44	0,439	0,041
0,44	0,445	0,023
0,44	0,442	0,03
0,5	0,502	0,048
0,5	0,501	0,061
0,5	0,5	0,055
0,56	0,561	0,011
0,56	0,56	0,019
0,56	0,563	0,021

Tabelle 34: Ergebnisse von Versuch 8 von der Entnahme nach 30 Minuten

PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100
0,44	0,439	0,076
0,44	0,445	0,026
0,44	0,442	0,02
0,5	0,502	0,028
0,5	0,501	0,025
0,5	0,5	0,054
0,56	0,561	0,011
0,56	0,56	0,013
0,56	0,563	0,011

Tabelle 35: Ergebnisse von Versuch 9 mit einer Schüttelzeit von 30 Minuten

PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100
0,4	0,404	0,029
0,4	0,4	0,063
0,4	0,399	0,031
0,5	0,5	0,014
0,5	0,501	0,031
0,5	0,505	0,036
0,56	0,564	0,015
0,56	0,562	0,01
0,56	0,561	0,02

Tabelle 36: Ergebnisse von Versuch 10 mit einer Schüttelzeit von 30 Minuten

PAK Soll [g]	PAK Ist [g]	CADAS 100
0,25	0,252	3,096
0,25	0,25	3,24
0,25	0,251	3,25
0,3	0,301	0,578
0,3	0,302	0,534
0,3	0,309	0,287
0,4	0,402	0,038
0,4	0,401	0,032
0,4	0,4	0,042

Anhang III

Entfernung der Einzelsubstanzen: Hauptversuche-Tabellen

Tabelle 37: Ergebnisse vom Versuch 1 mit CBZ und DW

Probenname	c PAK [mg/L]	c CBZ [μg/L]
CBZdw0Amf	0	861,0
CBZdw0Bmf	0	891,0
CBZdw1A	62,00	15,0
CBZdw1B	55,00	27,0
CBZdw1C	52,50	20,0
CBZdw2A	199,50	30,0
CBZdw2B	202,50	2,0
CBZdw2C	201,50	1,0
CBZdw0A	0	940,0
CBZdw0B	0	945,0

Tabelle 38: Ergebnisse vom Versuch 2 mit CBZ und Ablauf aus HKA

Probenname	c PAK [mg/L]	c CBZ [μg/L]
CBZaw0,5L0A	0	887,0
CBZaw0,5L0B	0	873,0
CBZaw0,5L0C	0	897,0
CBZaw0,5L1A	24,50	40,0
CBZaw0,5L1B	25,00	14,0
CBZaw0,5L1C	26,00	10,0
CBZaw0,5L2A	49,50	6,0

CBZaw0,5L2B	53,50	4,0
CBZaw0,5L2C	50,50	4,0
CBZaw0,5L3A	100,00	2,0
CBZaw0,5L3B	112,50	1,0
CBZaw0,5L3C	99,00	2,0
CBZaw1L0A	0	922,0
CBZaw1L0B	0	822,0
CBZaw1L0C	0	961,0
CBZaw1L1A	24,50	43,0
CBZaw1L1B	25,25	24,0
CBZaw1L1C	27,25	17,0
CBZaw1L2A	49,75	6,0
CBZaw1L2B	50,50	5,0
CBZaw1L2C	53,00	7,0

Tabelle 39: Ergebnisse vom Versuch 3 mit IBF und TW

Probenname	c PAK [mg/L]	c IBP [µg/L]
IBFlw0,5L0A	0	1176,0
IBFlw0,5L0B	0	1213,0
IBFlw0,5L0C	0	1173,0
IBFlw0,5L1A	12,00	161,0
IBFlw0,5L1B	12,00	170,0
IBFlw0,5L1C	11,50	220,0
IBFlw0,5L2A	26,00	0,4
IBFlw0,5L2B	24,00	0,7
IBFlw0,5L2C	27,00	0,5
IBFlw0,5L3A	50,00	9,0
IBFlw0,5L3B	52,00	8,0
IBFlw0,5L3C	48,00	3,0
IBFlw1L1A	5,75	681,3
IBFlw1L1B	6,25	435,0

IBFlw1L1C	5,75	391,0
IBFlw1L2A	12,50	76,0
IBFlw1L2B	13,00	114,0
IBFlw1L2C	14,75	60,0
IBFlw1L3A	25,50	30,0
IBFlw1L3B	25,00	15,0
IBFlw1L3C	25,00	16,0

Tabelle 40: Ergebnisse vom ersten Versuch 4 mit IBF und AW aus Mistelbach

Probenname	c PAK [mg/L]	c IBP [µg/L]
IBFaw1L1A	6,50	736,0
IBFaw1L1B	6,25	792,0
IBFaw1L1C	6,25	735,0
IBFaw1L2A	12,50	449,0
IBFaw1L2B	14,00	450,0
IBFaw1L2C	13,25	467,0
IBFaw1L3A	25,00	142,0
IBFaw1L3B	25,75	172,0
IBFaw1L3C	25,00	83,0
IBFaw1L1A	6,50	736,0

Tabelle 41: Ergebnisse vom zweiten Versuch 5 mit IBF und AW aus Mistelbach

Probenname	c PAK [mg/L]	c IBP [µg/L]
IBFaw0,5L0A	0	906,0
IBFaw0,5L0B	0	937,3
IBFaw0,5L0C	0	892,4
IBFaw0,5L1A	12,50	544,5
IBFaw0,5L1B	12,50	453,7
IBFaw0,5L1C	12,50	495,9

IBFaw0,5L3A	25,00	216,6
IBFaw0,5L3B	25,50	219,4
IBFaw0,5L3C	25,50	249,3
IBFaw1L1A	6,50	689,4
IBFaw1L1B	6,25	663,5
IBFaw1L1C	6,50	636,2
IBFaw1L2A	12,00	497,3
IBFaw1L2B	12,50	429,2
IBFaw1L2C	13,50	429,1
IBFaw1L3A	24,75	164,9
IBFaw1L3B	26,75	149,9
IBFaw1L3C	25,25	192,1
ohneIBFaw0,5L2A	17,50	33,7
ohneIBFaw0,5L2B	18,50	11,7
ohneIBFaw0,5L2C	17,00	6,9

Tabelle 42: Ergebnisse vom Versuch 6 mit IBF und AW aus HKA

Probenname	c PAK [mg/L]	c IBP [µg/L]
IBFaw0,5L0A	0	897,0
IBFaw0,5L0B	0	823,7
IBFaw0,5L0C	0	831,5
IBFaw0,5L1A	14,00	386,9
IBFaw0,5L1B	13,50	400,9
IBFaw0,5L1C	12,00	435,3
IBFaw0,5L3A	24,50	198,1
IBFaw0,5L3B	24,50	191,9
IBFaw0,5L3C	26,00	114,4
IBFaw1L1A	6,25	655,2
IBFaw1L1B	6,50	642,7
IBFaw1L1C	6,25	716,1
IBFaw1L2A	12,75	435,3

IBFaw1L2B	14,00	408,7
IBFaw1L2C	12,50	441,5
IBFaw1L3A	26,75	139,2
IBFaw1L3B	25,00	168,5
IBFaw1L3C	25,25	166,9
ohneIBFaw0,5L2A	18,50	3,2
ohneIBFaw0,5L2B	19,00	0,0
ohneIBFaw0,5L2C	17,50	0,0

Tabelle 43: Ergebnisse vom Versuch 7 mit DCF und AW aus HKA

Probename	c PAK [mg/L]	c DCF [μg/L]
DCFaw0A	0	901,5
DCFaw0B	0	872,5
DCFaw1A	10,50	564,4
DCFaw1B	10,00	407,8
DCFaw1C	11,50	377,5
DCFaw2A	21,00	183,1
DCFaw2B	22,50	105,9
DCFaw2C	19,50	165,4
DCFaw3A	50,50	11,2
DCFaw3B	52,00	8,9
DCFaw3C	50,50	7,9
ohneDCFaw4A	19,50	1,3
ohneDCFaw4B	22,00	0,7
ohneDCFaw4C	22,00	0,6

Tabelle 44: Ergebnisse vom Versuch 7 mit DCF und TW

Probename	c PAK [mg/L]	c DCF [μg/L]
DCFlw0A	0	806,8
DCFlw0B	0	824,5
DCFlw1A	10,00	28,2

DCFlw1B	9,50	34,8
DCFlw1C	10,50	48,1
DCFlw2A	20,00	8,9
DCFlw2B	21,00	9,2
DCFlw2C	20,00	5,2
DCFlw3A	50,50	1,6
DCFlw3B	48,50	1,5
DCFlw3C	50,50	3,1
ohneDCFlw4A	20,00	1,8
ohneDCFlw4B	21,50	0,4
ohneDCFlw4C	21,00	0,3

Tabelle 45: Ergebnisse vom Versuch 8 mit DCF und AW aus HKA

Probenname	c PAK [mg/L]	c DCF [µg/L]
DCFaw0A	0	607,4
DCFaw0B	0	620,8
DCFaw1A	11,50	283,9
DCFaw1B	10,50	203,0
DCFaw1C	9,50	282,6
DCFaw2A	20,00	109,1
DCFaw2B	19,50	108,4
DCFaw2C	20,00	21,0
DCFaw3A	49,50	4,4
DCFaw3B	48,50	5,7
ohneDCFaw4A	10,00	1,0
ohneDCFaw4B	12,00	1,4
ohneDCFaw4C	10,00	0,7

Tabelle 46: Ergebnisse vom Versuch 8 mit DCF und TW

Probename	c PAK [mg/L]	c DCF [μg/L]
DCFlw0A	0	687,9
DCFlw0B	0	671,1
DCFlw1A	10,50	23,9
DCFlw1B	9,00	13,8
DCFlw1C	10,50	284,2
DCFlw2A	20,50	5,5
DCFlw2B	19,00	33,0
DCFlw2C	21,50	4,6
DCFlw3A	50,00	0,9
DCFlw3B	49,00	1,8
DCFlw3C	50,00	1,7
ohneDCFlw4A	10,00	0,9
ohneDCFlw4B	10,00	0,2
ohneDCFlw4C	10,00	0,5

Tabelle 47: Ergebnisse vom Versuch 9 mit SMX und AW aus HKA

Probename	c PAK [mg/L]	c SMX [μg/L]
SMXaw0A	0	473,2
SMXaw0B	0	461,8
SMXaw1A	10,00	413,8
SMXaw1B	9,50	414,6
SMXaw1C	10,00	408,9
SMXaw2A	20,00	281,3
SMXaw2B	21,00	320,3
SMXaw2C	20,00	296,8
SMXaw3A	51,50	70,9
SMXaw3B	52,50	18,1
ohneSMXaw4A	19,00	3,5

ohneSMXaw4B	19,00	0,3
ohneSMXaw4C	19,50	0,2

Tabelle 48: Ergebnisse vom Versuch 9 mit SMX und TW

Probenname	c PAK [mg/L]	c SMX [μg/L]
SMXlw0A	0	659,4
SMXlw0B	0	630,9
SMXlw1A	11,00	230,9
SMXlw1B	10,50	303,3
SMXlw1C	10,00	336,6
SMXlw2A	21,00	71,5
SMXlw2B	19,50	117,9
SMXlw2C	21,00	111,4
SMXlw3A	50,50	10,7
SMXlw3B	54,00	8,3
SMXlw3C	50,00	12,5
ohneSMXlw4A	23,00	0,3
ohneSMXlw4B	19,0	0,2
ohneSMXlw4C	20,50	0,5

Tabelle 49: Ergebnisse vom Versuch 10 mit SMX und AW aus HKA

Probenname	c PAK [mg/L]	c SMX [μg/L]
SMXaw0A	0	346,6 [*]
SMXaw0B	0	774,4
SMXaw1A	13,00	490,2
SMXaw1B	12,00	430,8
SMXaw1C	10,00	397,7
SMXaw2A	19,50	162,4
SMXaw2B	20,50	182,0
SMXaw2C	19,00	176,7

SMXaw3A	49,50	3,1
SMXaw3B	49,00	17,7
SMXaw3C	48,00	12,9
ohneSMXaw4A	19,00	0,6
ohneSMXaw4B	19,50	0,2
ohneSMXaw4C	19,50	0,1

*) Wert erscheint nicht im Graph

Tabelle 50: Ergebnisse vom Versuch 10 mit SMX und TW

Probenname	c PAK [mg/L]	c SMX [μ g/L]
SMXlw0A	0	704,5
SMXlw0B	0	820,0
SMXlw1A	10	685,7
SMXlw1B	11	680,5
SMXlw1C	9	559,4
SMXlw2A	20	148,1
SMXlw2B	21	69,8
SMXlw2C	20	483,5 ^{*)}
SMXlw3A	50,5	229,3 ^{*)}
SMXlw3B	49,5	36,8
SMXlw3C	50	178,2 ^{*)}
ohneSMXlw4A	8,5	0,2
ohneSMXlw4B	10,5	1,0
ohneSMXlw4C	10	1,2

*) Wert erscheint nicht im Graph

Tabelle 51: Ergebnisse vom Versuch 11 mit SMX, CBZ, DCF und IBP mit AW aus HKA

Probenname	c PAK [mg/L]	c SMX [μ g/L]	c CBZ [μ g/L]	c DCF [μ g/L]	c IBP [μ g/L]
MIXlwT0A	0	517,8	830,2	554,6	919,8
MIXlwT0B	0	545,5	888,4	544,2	945,1
MIXlwT1A	10	494,1	209,5	109,2	594,9

MIXlwT1B	10,5	490,1	232,6	115,1	649,8
MIXlwT1C	9,5	509,9	279,1	141,3	987,8
MIXlwT2A	19,5	458,5	82,3	24,5	309,3
MIXlwT2B	19	434,8	64,9	20,2	233,8
MIXlwT2C	21	454,6	74,7	20,2	268,4
MIXlwT3A	49	93,0	12,0	2,6	14,3
MIXlwT3B	49,5	87,4	8,0	1,3	11,5
MIXlwT3C	51,5	111,9	13,0	2,5	22,7
ohneMIXlwT4A	11,5	0,7	0,1	0,1	0,0
ohneMIXlwT4B	9,5	0,3	0,1	0,3	0,1
ohneMIXlwT4C	11,5	0,4	0,1	0,2	0,1

Tabelle 52: Ergebnisse vom Versuch 11 mit SMX, CBZ, DCF und IBP mit TW

Probenname	c PAK [mg/L]	c SMX [µg/L]	c CBZ [µg/L]	c DCF [µg/L]	c IBP [µg/L]
MIXawA0A	0	529,6	995,3	523,0	987,3
MIXawA0B	0	557,3	990,7	526,5	1008,4
MIXawA1A	10,5	517,8	493,0	306,7	831,2
MIXawA1B	11,5	498,0	318,6	212,7	755,2
MIXawA1C	9,5	525,7	537,2	329,3	894,5
MIXawA2A	19,5	490,1	192,6	130,7	616,0
MIXawA2B	20,5	454,6	197,7	101,4	620,3
MIXawA2C	20	474,3	183,3	123,0	599,2
MIXawA3A	49,5	311,9	23,2	8,4	103,4
MIXawA3B	49,5	328,5	26,3	9,9	127,4
MIXawA3C	50	305,9	20,9	8,5	93,2
ohneMIXawA4A	9,5	0,6	2,0	0,6	0,9
ohneMIXawA4B	10	0,4	2,8	0,0	0,0
ohneMIXawA4C	10	0,3	2,4	0,0	0,0

Tabelle 53: Ergebnisse vom Versuch 12 mit SMX, CBZ, DCF und IBP mit TW

Probenname	c PAK [mg/L]	c SMX [μ g/L]	c CBZ [μ g/L]	c DCF [μ g/L]	c IBP [μ g/L]
MIXlwT0A	0	202,5	933,0	447,0	1855,8 ^{*)}
MIXlwT0B	0	208,0	948,0	441,0	1046,0
MIXlwT1A	10	196,0	591,0	306,0	958,3
MIXlwT1B	11	192,5	534,0	290,1	884,0
MIXlwT1C	10	200,0	534,0	265,5	907,6
MIXlwT2A	22	174,0	244,8	116,1	698,4
MIXlwT2B	21	192,0	237,3	126,9	728,8
MIXlwT2C	20,5	193,5	261,3	144,6	732,2
MIXlwT3A	51	119,0	29,4	6,5	135,3
MIXlwT3B	49	124,5	28,1	7,7	129,9
MIXlwT3C	50,5	129,0	39,6	12,9	166,0
ohneMIXlwT4A	9	0,0	0,8	0,6	0,5
ohneMIXlwT4B	11	0,0	1,2	0,7	0,3
ohneMIXlwT4C	10,5	0,0	0,9	0,6	0,3

^{*)} Wert erscheint nicht im Graph

Tabelle 54: Ergebnisse vom Versuch 12 mit SMX, CBZ, DCF und IBP mit AW aus HKA

Probenname	c PAK [mg/L]	c SMX [μ g/L]	c CBZ [μ g/L]	c DCF [μ g/L]	c IBP [μ g/L]
MIXawA0A	0	535,0	897,0	618,0	1204,6
MIXawA0B	0	545,0	906,0	633,0	1282,2
MIXawA1A	10	476,0	333,0	160,2	884,0
MIXawA1B	11	486,5	216,6	85,2	840,2
MIXawA1C	10,5	476,0	265,5	124,5	884,0
MIXawA2A	21	379,0	45,9	9,9	192,7
MIXawA2B	19,5	433,0	78,3	25,5	404,9
MIXawA2C	19	425,0	54,6	14,5	268,9
MIXawA3A	51	84,5	6,8	1,1	19,3
MIXawA3B	48	84,5	12,8	1,8	24,5

MIXawA3C	48	56,5	10,2	1,8	17,1
ohneMIXawA4A	9,5	2,1	7,2	1,4	11,0
ohneMIXawA4B	9,5	0,5	3,5	0,7	4,8
ohneMIXawA4C	8,5	0,2	2,3	0,4	3,8

Anhang IV

Isothermenberechnung: Tabellen

Tabelle 55: Isothermenberechnung für Versuch 1, CBZ in DW

AK [mg]	c_0 [$\mu\text{g/l}$]	$c_0 - c$ [$\mu\text{g/l}$]	Menge ads [μg]	AK [$\mu\text{g/mg}$]	AK [$\mu\text{g/g}$]	Beladung [%]	Log c $\mu\text{g/l}$	log belad $\mu\text{g/mg}$
0	942,5	2,5	0,50					
0	942,5	-2,5	-0,50					
12,4	942,5	927,5	185,50	14,960	0,0150	1,50	1,18	1,17
11	942,5	915,5	183,10	16,645	0,0166	1,66	1,43	1,22
10,5	942,5	922,5	184,50	17,571	0,0176	1,76	1,30	1,24
39,9	942,5	912,5	182,50	4,574	0,0046	0,46	1,48	0,66 ^{*)}
40,5	942,5	940,5	188,10	4,644	0,0046	0,46	0,30	0,67
40,3	942,5	941,5	188,30	4,672	0,0047	0,47	0,00	0,67
							Steigung	Schnittpunkt
							0,29	0,66

*) Ist in der Abbildung nicht dargestellt, da der Wert von den anderen abweicht

Tabelle 56: Isothermenberechnung für Versuch 2, CBZ in AW

AK [mg]	c_0 [$\mu\text{g/l}$]	$c_0 - c$ [$\mu\text{g/l}$]	Menge ads [μg]	AK [$\mu\text{g/mg}$]	AK [$\mu\text{g/g}$]	Beladung [%]	Log c $\mu\text{g/l}$	log belad $\mu\text{g/mg}$
0	885,7	-1,3	-0,27					
0	885,7	12,7	2,53					
0	885,7	-11,3	-2,27					
4,9	885,7	845,7	169,13	34,517	0,0345	3,45	1,60	1,54
5	885,7	871,7	174,33	34,867	0,0349	3,49	1,15	1,54
5,2	885,7	875,7	175,13	33,679	0,0337	3,37	1,00	1,53
9,9	885,7	879,7	175,93	17,771	0,0178	1,78	0,78	1,25
10,7	885,7	881,7	176,33	16,480	0,0165	1,65	0,60	1,22
10,1	885,7	881,7	176,33	17,459	0,0175	1,75	0,60	1,24
20	885,7	883,7	176,73	8,837	0,0088	0,88	0,30	0,95
22,5	885,7	884,7	176,93	7,864	0,0079	0,79	0,00	0,90
19,8	885,7	883,7	176,73	8,926	0,0089	0,89	0,30	0,95
0	901,7	-20,3	-8,13					
0	901,7	79,7	31,87					
0	901,7	-59,3	-23,73					
9,8	901,7	858,7	343,47	35,048	0,0350	3,50	1,63	1,54
10,1	901,7	877,7	351,07	34,759	0,0348	3,48	1,38	1,54

10,9	901,7	884,7	353,87	32,465	0,0325	3,25	1,23	1,51
19,9	901,7	895,7	358,27	18,003	0,0180	1,80	0,78	1,26
20,2	901,7	896,7	358,67	17,756	0,0178	1,78	0,70	1,25
21,2	901,7	894,7	357,87	16,881	0,0169	1,69	0,85	1,23
							Steigung	Schnittpunkt
							0,46	0,90

Tabelle 57: Isothermenberechnung für Versuch 3, IBF in TW

AK [mg]	c_0 [µg/l]	$c_0 - c$ [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	1187,3	11,3	2,27					
0	1187,3	-25,7	-5,14					
0	1187,3	14,3	2,86					
4,8	1187,3	1026,3	205,26	42,763	0,0428	4,28	2,21	1,63
4,8	1187,3	1017,3	203,46	42,388	0,0424	4,24	2,23	1,63
4,6	1187,3	967,3	193,46	42,057	0,0421	4,21	2,34	1,62
10,4	1187,3	1186,9	237,38	22,825	0,0228	2,28	-0,40	1,36
9,6	1187,3	1186,6	237,32	24,721	0,0247	2,47	-0,15	1,39
10,8	1187,3	1186,8	237,36	21,978	0,0220	2,20	-0,30	1,34
20	1187,3	1178,3	235,66	11,783	0,0118	1,18	0,95	1,07
20,8	1187,3	1179,3	235,86	11,339	0,0113	1,13	0,90	1,05
19,2	1187,3	1184,3	236,86	12,336	0,0123	1,23	0,48	1,09
2,3	1187,3	506,0	202,40	88,000	0,0880	8,80	2,83	1,94
2,5	1187,3	752,3	300,92	120,360	0,1204	12,04	2,64	2,08
2,3	1187,3	796,3	318,52	138,487	0,1385	13,85	2,59	2,14
5	1187,3	1111,3	444,52	88,904	0,0889	8,89	1,88	1,95
5,2	1187,3	1073,3	429,32	82,562	0,0826	8,26	2,06	1,92
5,9	1187,3	1127,3	450,92	76,427	0,0764	7,64	1,78	1,88
10,2	1187,3	1157,3	462,92	45,384	0,0454	4,54	1,48	1,66
10	1187,3	1172,3	468,92	46,892	0,0469	4,69	1,18	1,67
10	1187,3	1171,3	468,52	46,852	0,0469	4,69	1,20	1,67
							Steigung	Schnittpunkt
							0,25	1,26

Tabelle 58: Isothermenberechnung für Versuch 5 und Versuch 6, IBF in AW

AK [mg]	c_0 [$\mu\text{g/l}$]	$c_0 - c$ [$\mu\text{g/l}$]	Menge ads [μg]	AK [$\mu\text{g/mg}$]	AK [$\mu\text{g/g}$]	Beladung [%]	Log c $\mu\text{g/l}$	log belad $\mu\text{g/mg}$
0	911,9	5,9	1,18					
0	911,9	-25,4	-5,08					
0	911,9	19,5	3,90					
2,5	911,9	367,4	73,48	29,392	0,0294	2,94	2,74	1,47
2,5	911,9	458,2	91,64	36,656	0,0367	3,67	2,66	1,56
2,5	911,9	416,0	83,20	33,280	0,0333	3,33	2,70	1,52
5	911,9	695,3	139,06	27,812	0,0278	2,78	2,34	1,44
5,1	911,9	692,5	138,50	27,157	0,0272	2,72	2,34	1,43
5,1	911,9	662,6	132,52	25,984	0,0260	2,60	2,40	1,41
2,6	911,9	222,5	89,00	34,231	0,0342	3,42	2,84	1,53
2,5	911,9	248,4	99,36	39,744	0,0397	3,97	2,82	1,60
2,6	911,9	275,7	110,28	42,415	0,0424	4,24	2,80	1,63
4,8	911,9	414,6	165,84	34,550	0,0346	3,46	2,70	1,54
5	911,9	482,7	193,08	38,616	0,0386	3,86	2,63	1,59
5,4	911,9	482,8	193,12	35,763	0,0358	3,58	2,63	1,55
9,9	911,9	747,0	298,80	30,182	0,0302	3,02	2,22	1,48
10,7	911,9	762,0	304,80	28,486	0,0285	2,85	2,18	1,45
10,1	911,9	719,8	287,92	28,507	0,0285	2,85	2,28	1,45
0	850,7	-46,3	-9,25					
0	850,7	27,0	5,40					
0	850,7	19,2	3,84					
2,8	850,7	463,8	92,76	33,129	0,0331	3,31	2,59	1,52
2,7	850,7	449,8	89,96	33,319	0,0333	3,33	2,60	1,52
2,4	850,7	415,4	83,08	34,617	0,0346	3,46	2,64	1,54
4,9	850,7	652,6	130,52	26,637	0,0266	2,66	2,30	1,43
4,9	850,7	658,8	131,76	26,890	0,0269	2,69	2,28	1,43
5,2	850,7	736,3	147,26	28,319	0,0283	2,83	2,06	1,45
2,5	850,7	195,5	78,20	31,280	0,0313	3,13	2,82	1,50
2,6	850,7	208,0	83,20	32,000	0,0320	3,20	2,81	1,51
5,1	850,7	415,4	166,16	32,580	0,0326	3,26	2,64	1,51
5,6	850,7	442,0	176,80	31,571	0,0316	3,16	2,61	1,50
5	850,7	409,2	163,68	32,736	0,0327	3,27	2,64	1,52
10,7	850,7	711,5	284,60	26,598	0,0266	2,66	2,14	1,42
10	850,7	682,2	272,88	27,288	0,0273	2,73	2,23	1,44
10,1	850,7	683,8	273,52	27,081	0,0271	2,71	2,22	1,43
							Steigung	Schnittpunkt
							0,18	1,03

Tabelle 59: Isothermenberechnung für Versuch 7 und Versuch 8, DCF in AW

AK [mg]	c_0 [µg/l]	$c_0 - c$ [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	887,0	-14,5	-2,90					
0	887	14,5	2,90					
2,1	887	322,6	64,52	30,724	0,0307	3,07	2,75	1,49
2	887	479,2	95,84	47,920	0,0479	4,79	2,61	1,68
2,3	887	509,5	101,90	44,304	0,0443	4,43	2,58	1,65
4,2	887	703,9	140,78	33,519	0,0335	3,35	2,26	1,53
4,5	887	781,1	156,23	34,717	0,0347	3,47	2,02	1,54
3,9	887	721,6	144,32	37,005	0,0370	3,70	2,22	1,57
10,1	887	875,8	175,16	17,343	0,0173	1,73	1,05	1,24
10,4	887	878,1	175,62	16,887	0,0169	1,69	0,95	1,23
10,1	887	879,1	175,82	17,408	0,0174	1,74	0,90	1,24
0	614,1	6,7	1,34					
0	614,1	-6,7	-1,34					
2,3	614,1	330,2	66,04	28,713	0,0287	2,87	2,45	1,46
2,1	614,1	411,1	82,22	39,152	0,0392	3,92	2,31	1,59
1,9	614,1	331,5	66,30	34,895	0,0349	3,49	2,45	1,54
4	614,1	505,0	101,00	25,250	0,0253	2,53	2,04	1,40
3,9	614,1	505,7	101,14	25,933	0,0259	2,59	2,04	1,41
4	614,1	593,1	118,62	29,655	0,0297	2,97	1,32	1,47
9,9	614,1	609,7	121,94	12,317	0,0123	1,23	0,64	1,09
9,7	614,1	608,4	121,68	12,544	0,0125	1,25	0,76	1,10
							Steigung	Schnittpunkt
							0,23	1,01

Tabelle 60: Isothermenberechnung für Versuch 7 und Versuch 8, DCF in TW

AK [mg]	c_0 [µg/l]	$c_0 - c$ [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	815,7	8,9	1,77					
0	815,7	-8,8	-1,76					
2	815,7	787,5	157,50	78,750	0,0788	7,88	1,45	1,90
1,9	815,7	780,9	156,18	82,200	0,0822	8,22	1,54	1,91
2,1	815,7	767,6	153,52	73,105	0,0731	7,31	1,68	1,86
4	815,7	806,8	161,36	40,340	0,0403	4,03	0,95	1,61
4,2	815,7	806,5	161,30	38,405	0,0384	3,84	0,96	1,58
4	815,7	810,5	162,10	40,525	0,0405	4,05	0,72	1,61
10,1	815,7	814,1	162,82	16,121	0,0161	1,61	0,20	1,21
9,7	815,7	814,2	162,84	16,788	0,0168	1,68	0,18	1,22

10,1	815,7	812,6	162,52	16,091	0,0161	1,61	0,49	1,21
0	679,5	-8,4	-1,68					
0	679,5	8,4	1,68					
2,1	679,5	655,6	131,12	62,438	0,0624	6,24	1,38	1,80
1,8	679,5	665,7	133,14	73,967	0,0740	7,40	1,14	1,87
4,1	679,5	674,0	134,80	32,878	0,0329	3,29	0,74	1,52
3,8	679,5	646,5	129,30	34,026	0,0340	3,40	1,52	1,53
4,3	679,5	674,9	134,98	31,391	0,0314	3,14	0,66	1,50
10	679,5	678,6	135,72	13,572	0,0136	1,36	-0,05	1,13
9,8	679,5	677,7	135,54	13,831	0,0138	1,38	0,26	1,14
10	679,5	677,8	135,56	13,556	0,0136	1,36	0,23	1,13
							Steigung	Schnittpunkt
							0,48	1,12

Tabelle 61: Isothermenberechnung für Versuch 9, SMX in AW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	467,5	-5,7	-1,14					
0	467,5	5,7	1,14					
2	467,5	53,7	10,74	5,370	0,01	0,54	2,62	0,73
1,9	467,5	52,9	10,58	5,568	0,01	0,56	2,62	0,75
2	467,5	58,6	11,72	5,860	0,01	0,59	2,61	0,77
4	467,5	186,2	37,24	9,310	0,01	0,93	2,45	0,97
4,2	467,5	147,2	29,44	7,010	0,01	0,70	2,51	0,85
4	467,5	170,7	34,14	8,535	0,01	0,85	2,47	0,93
10,3	467,5	396,6	79,32	7,701	0,01	0,77	1,85	0,89
10,5	467,5	449,4	89,88	8,560	0,01	0,86	1,26	0,93
							Steigung	Schnittpunkt
							-0,10	1,08

Tabelle 62: Isothermenberechnung für Versuch 9, SMX in TW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	645,2	-14,3	-2,85					
0	645,2	14,3	2,86					
2,2	645,2	414,3	82,86	37,664	0,04	3,77	2,36	1,58
2,1	645,2	341,9	68,38	32,562	0,03	3,26	2,48	1,51
2	645,2	308,6	61,72	30,860	0,03	3,09	2,53	1,49
4,2	645,2	573,7	114,74	27,319	0,03	2,73	1,85	1,44
3,9	645,2	527,3	105,46	27,041	0,03	2,70	2,07	1,43
4,2	645,2	533,8	106,76	25,419	0,03	2,54	2,05	1,41

10,1	645,2	634,5	126,90	12,564	0,01	1,26	1,03	1,10
10,8	645,2	636,9	127,38	11,794	0,01	1,18	0,92	1,07
10	645,2	632,7	126,54	12,654	0,01	1,27	1,10	1,10
							Steigung	Schnittpunkt
							0,30	0,80

Tabelle 63: Isothermenberechnung für Versuch 10, SMX in AW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	774,4	427,8	85,56					
0	774,4	0,0	0,00					
2,6	774,4	284,2	56,84	21,862	0,02	2,19	2,69	1,34
2,4	774,4	343,6	68,72	28,633	0,03	2,86	2,63	1,46
2	774,4	376,7	75,34	37,670	0,04	3,77	2,60	1,58
3,9	774,4	612,0	122,40	31,385	0,03	3,14	2,21	1,50
4,1	774,4	592,4	118,48	28,898	0,03	2,89	2,26	1,46
3,8	774,4	597,7	119,54	31,458	0,03	3,15	2,25	1,50
9,9	774,4	771,3	154,26	15,582	0,02	1,56	0,49	1,19
9,8	774,4	756,7	151,34	15,443	0,02	1,54	1,25	1,19
9,6	774,4	761,5	152,30	15,865	0,02	1,59	1,11	1,20
							Steigung	Schnittpunkt
							0,16	1,07

Tabelle 64: Isothermenberechnung für Versuch 10, SMX in TW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	762,25	57,8	11,55					
0	762,3	-57,7	-11,54					
2	762,3	76,6	15,32	7,660	0,01	0,77	2,84	0,88
2,2	762,3	81,8	16,36	7,436	0,01	0,74	2,83	0,87
1,8	762,3	202,9	40,58	22,544	0,02	2,25	2,75	1,35
4	762,3	614,2	122,84	30,710	0,03	3,07	2,17	1,49
4,2	762,3	692,5	138,50	32,976	0,03	3,30	1,84	1,52
9,9	762,3	725,5	145,10	14,657	0,01	1,47	1,57	1,17
							Steigung	Schnittpunkt
							-0,29	1,88

Tabelle 65: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, IBF in TW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	932,45	12,7	2,53					
0	932,45	-12,7	-2,53					
2	932,45	337,6	67,51	33,755	0,03	3,38	2,77	1,53
2,1	932,45	282,7	56,53	26,919	0,03	2,69	2,81	1,43
3,9	932,45	623,2	124,63	31,956	0,03	3,20	2,49	1,50
3,8	932,45	698,7	139,73	36,771	0,04	3,68	2,37	1,57
4,2	932,45	664,1	132,81	31,621	0,03	3,16	2,43	1,50
9,8	932,45	918,2	183,63	18,738	0,02	1,87	1,16	1,27
9,9	932,45	921,0	184,19	18,605	0,02	1,86	1,06	1,27
10,3	932,45	909,8	181,95	17,665	0,02	1,77	1,36	1,25
0	1243,37	38,8	7,76					
0	1243,37	-38,8	-7,76					
2	1243,37	359,3	71,87	35,935	0,04	3,59	2,95	1,56
2,2	1243,37	403,2	80,64	36,655	0,04	3,67	2,92	1,56
2,1	1243,37	359,3	71,87	34,223	0,03	3,42	2,95	1,53
4,2	1243,37	1050,7	210,14	50,034	0,05	5,00	2,28	1,70
3,9	1243,37	838,5	167,69	42,999	0,04	4,30	2,61	1,63
3,8	1243,37	974,5	194,89	51,287	0,05	5,13	2,43	1,71
10,2	1243,37	1224,1	244,82	24,002	0,02	2,40	1,28	1,38
9,6	1243,37	1218,8	243,77	25,392	0,03	2,54	1,39	1,40
9,6	1243,37	1226,3	245,25	25,547	0,03	2,55	1,23	1,41
							Steigung	Schnittpunkt
							0,15	1,17

Tabelle 66: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, IBF in AW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	997,85	10,6	2,11					
0	997,85	-10,6	-2,11					
2,1	997,85	166,7	33,33	15,871	0,02	1,59	2,92	1,20
2,3	997,85	242,7	48,53	21,100	0,02	2,11	2,88	1,32
1,9	997,85	103,4	20,67	10,879	0,01	1,09	2,95	1,04
3,9	997,85	381,9	76,37	19,582	0,02	1,96	2,79	1,29
4,1	997,85	377,6	75,51	18,417	0,02	1,84	2,79	1,27
4	997,85	398,7	79,73	19,933	0,02	1,99	2,78	1,30
9,9	997,85	894,5	178,89	18,070	0,02	1,81	2,01	1,26
9,9	997,85	870,5	174,09	17,585	0,02	1,76	2,11	1,25
10	997,85	904,7	180,93	18,093	0,02	1,81	1,97	1,26

0	1450,88	-404,9	-80,98					
0	1450,88	404,9	80,98					
2	1450,88	492,6	98,52	49,262	0,05	4,93	2,98	1,69
2,2	1450,88	566,9	113,37	51,532	0,05	5,15	2,95	1,71
2	1450,88	543,2	108,65	54,324	0,05	5,43	2,96	1,73
4,4	1450,88	752,4	150,49	34,201	0,03	3,42	2,84	1,53
4,2	1450,88	722,1	144,41	34,384	0,03	3,44	2,86	1,54
4,1	1450,88	718,7	143,74	35,058	0,04	3,51	2,86	1,54
10,2	1450,88	1315,6	263,12	25,796	0,03	2,58	2,13	1,41
9,8	1450,88	1321,0	264,19	26,959	0,03	2,70	2,11	1,43
10,1	1450,88	1284,9	256,97	25,443	0,03	2,54	2,22	1,41
							Steigung	Schnittpunkt
							0,15	1,00

Tabelle 67: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, CBZ in TW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	859,3	29,1	5,82					
0	859,3	-29,1	-5,82					
2	859,3	649,8	129,96	64,980	0,06	6,50	2,32	1,81
2,1	859,3	626,7	125,34	59,686	0,06	5,97	2,37	1,78
1,9	859,3	580,2	116,04	61,074	0,06	6,11	2,45	1,79
3,9	859,3	777,0	155,40	39,846	0,04	3,98	1,92	1,60
3,8	859,3	794,4	158,88	41,811	0,04	4,18	1,81	1,62
4,2	859,3	784,6	156,92	37,362	0,04	3,74	1,87	1,57
9,8	859,3	847,3	169,46	17,292	0,02	1,73	1,08	1,24
9,9	859,3	851,3	170,26	17,198	0,02	1,72	0,90	1,24
10,3	859,3	846,3	169,26	16,433	0,02	1,64	1,11	1,22
0	901,5	4,5	0,90					
0	901,5	-4,5	-0,90					
2	901,5	568,5	113,70	56,850	0,06	5,69	2,52	1,75
2,2	901,5	684,9	136,98	62,264	0,06	6,23	2,34	1,79
2,1	901,5	636,0	127,20	60,571	0,06	6,06	2,42	1,78
4,2	901,5	855,6	171,12	40,743	0,04	4,07	1,66	1,61
3,9	901,5	823,2	164,64	42,215	0,04	4,22	1,89	1,63
3,8	901,5	846,9	169,38	44,574	0,04	4,46	1,74	1,65
10,2	901,5	894,7	178,94	17,543	0,02	1,75	0,83	1,24
9,6	901,5	888,7	177,73	18,514	0,02	1,85	1,11	1,27
9,6	901,5	891,3	178,26	18,569	0,02	1,86	1,01	1,27
							Steigung	Schnittpunkt
							0,38	0,89

Tabelle 68: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, CBZ in AW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	993	-2,3	-0,46					
0	993	2,3	0,46					
2,1	993	500,0	100,00	47,619	0,05	4,76	2,69	1,68
2,3	993	674,4	134,88	58,643	0,06	5,86	2,50	1,77
1,9	993	455,8	91,16	47,979	0,05	4,80	2,73	1,68
3,9	993	800,4	160,08	41,046	0,04	4,10	2,28	1,61
4,1	993	795,3	159,06	38,795	0,04	3,88	2,30	1,59
4	993	809,7	161,94	40,485	0,04	4,05	2,26	1,61
9,9	993	969,8	193,96	19,592	0,02	1,96	1,37	1,29
9,9	993	966,7	193,34	19,529	0,02	1,95	1,42	1,29
10	993	972,1	194,42	19,442	0,02	1,94	1,32	1,29
0	940,5	7,5	1,50					
0	940,5	-7,5	-1,50					
2	940,5	349,5	69,90	34,950	0,03	3,50	2,77	1,54
2,2	940,5	406,5	81,30	36,955	0,04	3,70	2,73	1,57
2	940,5	406,5	81,30	40,650	0,04	4,07	2,73	1,61
4,4	940,5	695,7	139,14	31,623	0,03	3,16	2,39	1,50
4,2	940,5	703,2	140,64	33,486	0,03	3,35	2,38	1,52
4,1	940,5	679,2	135,84	33,132	0,03	3,31	2,42	1,52
10,2	940,5	911,1	182,23	17,865	0,02	1,79	1,47	1,25
9,8	940,5	912,4	182,47	18,620	0,02	1,86	1,45	1,27
10,1	940,5	900,9	180,18	17,840	0,02	1,78	1,60	1,25
							Steigung	Schnittpunkt
							0,28	0,89

Tabelle 69: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, DCF in TW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	549,4	-5,2	-1,04					
0	549,4	5,2	1,04					
2	549,4	440,2	88,04	44,020	0,04	4,40	2,04	1,64
2,1	549,4	434,3	86,86	41,362	0,04	4,14	2,06	1,62
1,9	549,4	408,1	81,62	42,958	0,04	4,30	2,15	1,63
3,9	549,4	524,9	104,98	26,918	0,03	2,69	1,39	1,43
3,8	549,4	529,2	105,84	27,853	0,03	2,79	1,31	1,44
4,2	549,4	529,2	105,84	25,200	0,03	2,52	1,31	1,40
9,8	549,4	546,8	109,36	11,159	0,01	1,12	0,41	1,05
9,9	549,4	548,1	109,62	11,073	0,01	1,11	0,11	1,04

10,3	549,4	546,9	109,38	10,619	0,01	1,06	0,40	1,03
0	625,5	7,5	1,50					
0	625,5	-7,5	-1,50					
2	625,5	465,3	93,06	46,530	0,05	4,65	2,20	1,67
2,2	625,5	540,3	108,06	49,118	0,05	4,91	1,93	1,69
2,1	625,5	501,0	100,20	47,714	0,05	4,77	2,10	1,68
4,2	625,5	615,6	123,13	29,316	0,03	2,93	0,99	1,47
3,9	625,5	600,0	119,99	30,768	0,03	3,08	1,41	1,49
3,8	625,5	611,0	122,20	32,157	0,03	3,22	1,16	1,51
10,2	625,5	624,4	124,88	12,243	0,01	1,22	0,05	1,09
9,6	625,5	623,7	124,74	12,993	0,01	1,30	0,26	1,11
9,6	625,5	623,7	124,74	12,993	0,01	1,30	0,26	1,11
							Steigung	Schnittpunkt
							0,31	1,02

Tabelle 70: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, DCF in AW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	524,75	1,8	0,35					
0	524,75	-1,8	-0,35					
2,1	524,75	218,1	43,61	20,767	0,02	2,08	2,49	1,32
2,3	524,75	312,1	62,41	27,135	0,03	2,71	2,33	1,43
1,9	524,75	195,5	39,09	20,574	0,02	2,06	2,52	1,31
3,9	524,75	394,1	78,81	20,208	0,02	2,02	2,12	1,31
4,1	524,75	423,4	84,67	20,651	0,02	2,07	2,01	1,31
4	524,75	401,8	80,35	20,088	0,02	2,01	2,09	1,30
9,9	524,75	516,4	103,27	10,431	0,01	1,04	0,92	1,02
9,9	524,75	514,9	102,97	10,401	0,01	1,04	1,00	1,02
10	524,75	516,3	103,25	10,325	0,01	1,03	0,93	1,01
0	444	-3,0	-0,60					
0	444	3,0	0,60					
2	444	138,0	27,60	13,800	0,01	1,38	2,49	1,14
2,2	444	153,9	30,78	13,991	0,01	1,40	2,46	1,15
2	444	178,5	35,70	17,850	0,02	1,79	2,42	1,25
4,4	444	327,9	65,58	14,905	0,01	1,49	2,06	1,17
4,2	444	317,1	63,42	15,100	0,02	1,51	2,10	1,18
4,1	444	299,4	59,88	14,605	0,01	1,46	2,16	1,16
10,2	444	437,6	87,51	8,579	0,01	0,86	0,81	0,93
9,8	444	436,4	87,27	8,905	0,01	0,89	0,88	0,95
10,1	444	431,1	86,23	8,537	0,01	0,85	1,11	0,93
							Steigung	Schnittpunkt
							0,19	0,81

Tabelle 71: Isothermenberechnung für Versuch 11 und 12, SMX in TW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	531,65	13,9	2,77					
0	531,7	-13,9	-2,77					
2	531,65	37,6	7,51	3,755	0,00	0,38	2,69	0,57460994
2,1	531,65	41,6	8,31	3,957	0,00	0,40	2,69	0,60
3,9	531,65	73,2	14,63	3,751	0,00	0,38	2,66	0,57
3,8	531,65	96,9	19,37	5,097	0,01	0,51	2,64	0,71
4,2	531,65	77,1	15,41	3,669	0,00	0,37	2,66	0,56
9,8	531,65	438,7	87,73	8,952	0,01	0,90	1,97	0,95
9,9	531,65	444,3	88,85	8,975	0,01	0,90	1,94	0,95
10,3	531,65	419,8	83,95	8,150	0,01	0,82	2,05	0,91
0	540	5,0	1,00					
0	540	-5,0	-1,00					
2	540	64,0	12,80	6,400	0,01	0,64	2,68	0,81
2,2	540	53,5	10,70	4,864	0,00	0,49	2,69	0,69
2,1	540	64,0	12,80	6,095	0,01	0,61	2,68	0,78
4,2	540	161,0	32,20	7,667	0,01	0,77	2,58	0,88
3,9	540	107,0	21,40	5,487	0,01	0,55	2,64	0,74
3,8	540	115,0	23,00	6,053	0,01	0,61	2,63	0,78
10,2	540	455,5	91,10	8,931	0,01	0,89	1,93	0,95
9,6	540	455,5	91,10	9,490	0,01	0,95	1,93	0,98
9,6	540	483,5	96,70	10,073	0,01	1,01	1,75	1,00
							Steigung	Schnittpunkt
							-0,36	1,66

Tabelle 72: Isothermenberechnung für Versuch 11, SMX in AW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	543,45	13,9	2,77					
0	543,45	-13,8	-2,77					
2,1	543,45	25,7	5,13	2,443	0,00	0,24	2,71	0,39
2,3	543,45	45,5	9,09	3,952	0,00	0,40	2,70	0,60
1,9	543,45	17,8	3,55	1,868	0,00	0,19	2,72	0,27
3,9	543,45	53,4	10,67	2,736	0,00	0,27	2,69	0,44
4,1	543,45	88,9	17,77	4,334	0,00	0,43	2,66	0,64
4	543,45	69,2	13,83	3,458	0,00	0,35	2,68	0,54
9,9	543,45	231,6	46,31	4,678	0,00	0,47	2,49	0,67
9,9	543,45	215,0	42,99	4,342	0,00	0,43	2,52	0,64

10	543,45	237,6	47,51	4,751	0,00	0,48	2,49	0,68
							Steigung	Schnittpunkt
							-1,09	3,40

Tabelle 73: Isothermenberechnung für Versuch 12, SMX in AW

AK [mg]	c0 [µg/l]	c0 - c [µg/l]	Menge ads [µg]	AK [µg/mg]	AK [µg/g]	Beladung [%]	Log c µg/l	log belad µg/mg
0	205,25	2,8	0,55					
0	205,25	-2,8	-0,55					
2	205,25	9,3	1,85	0,925	0,00	0,09	2,29	-0,03
2,2	205,25	12,8	2,55	1,159	0,00	0,12	2,28	0,06
2	205,25	5,3	1,05	0,525	0,00	0,05	2,30	-0,28
4,4	205,25	31,3	6,25	1,420	0,00	0,14	2,24	0,15
4,2	205,25	13,3	2,65	0,631	0,00	0,06	2,28	-0,20
4,1	205,25	11,8	2,35	0,573	0,00	0,06	2,29	-0,24
10,2	205,25	86,3	17,25	1,691	0,00	0,17	2,08	0,23
9,8	205,25	80,8	16,15	1,648	0,00	0,16	2,10	0,22
10,1	205,25	76,3	15,25	1,510	0,00	0,15	2,11	0,18
							Steigung	Schnittpunkt
							-1,72	3,83