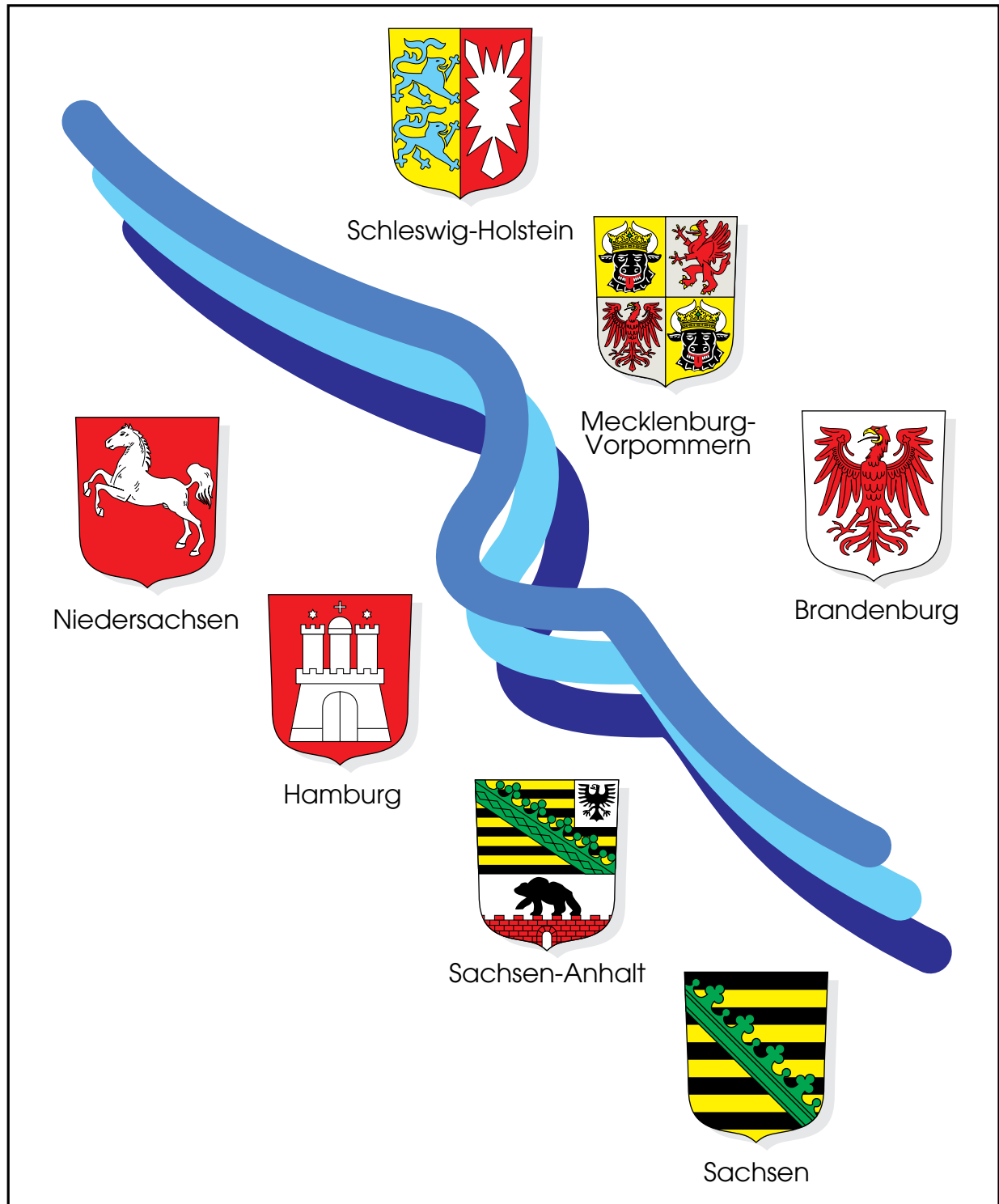


# Arbeitsgemeinschaft für die Reinhaltung der Elbe



Verteilung von organischen Kontaminanten  
zwischen wäßriger und partikulärer Phase  
in der Elbe und der Deutschen Bucht

# ARBEITSGEMEINSCHAFT FÜR DIE REINHALTUNG DER ELBE

## Verteilung von organischen Kontaminanten zwischen wäßriger und partikulärer Phase in der Elbe und der Deutschen Bucht

Ministerium für Umwelt, Naturschutz  
und Raumordnung  
des Landes Brandenburg  
Albert-Einstein-Straße 42 - 46

1 4 4 7 3 P o t s d a m

Umweltbehörde Hamburg  
Billstraße 84

2 0 5 3 9 H a m b u r g

Ministerium für Bau, Landesentwicklung und Umwelt  
des Landes Mecklenburg-Vorpommern  
Schloßstraße 6 - 8

1 9 0 5 3 S c h w e r i n

Niedersächsisches Umweltministerium  
Archivstraße 2

3 0 1 6 9 H a n n o v e r

Sächsisches Staatsministerium für Umwelt  
und Landwirtschaft  
Wilhelm-Buck-Straße 2

0 1 0 9 7 D r e s d e n

Ministerium für Raumordnung  
Landwirtschaft und Umwelt  
des Landes Sachsen-Anhalt  
Olvenstedter Straße 4

3 9 1 0 8 M a g d e b u r g

Ministerium für Umwelt, Natur und Forsten  
des Landes Schleswig-Holstein  
Grenzstraße 1 - 5

2 4 1 4 9 6 K i e l

Bearbeitet von :

**Dr. O. P. Heemken**  
**Dr. N. Theobald**

Bundesamt für Seeschifffahrt  
und Hydrographie  
- Labor Sülldorf -  
Wüstland 2  
2 2 5 8 9 H a m b u r g

**Dr. B. Stachel**

Wassergütestelle Elbe  
Neßdeich 120-121  
2 1 1 2 9 H a m b u r g

Juli 1998

## INHALTSVERZEICHNIS:

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Zielsetzung</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Experimentelles</b>	<b>3</b>
3.1	Untersuchtes Stoffspektrum	3
3.2	Probenahme	4
3.3	Schwebstoffabtrennung	5
3.4	Extraktion von Wasserproben	6
3.5	Extraktion von Schwebstoffproben	7
3.6	Vorreinigung von Extrakten	7
3.7	Quantifizierung	8
3.8	Standards und Chemikalien	9
3.9	Organozinnverbindungen	10
3.10	N/P-Pestizide	10
<b>4</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>11</b>
4.1	Variabilität der Analytkonzentrationen während der jeweiligen Be- probungen	11
4.2	Konzentrationen im Gesamtwasserkörper und prozentuale Vertei- lung	12
4.2.1	Alkane	12
4.2.2	Polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe	15
4.2.3	Chlorierte Kohlenwasserstoffe	17
4.2.4	Organozinnverbindungen und N/P-Pestizide	19
4.3	Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten	21
4.4	Korrelation von log $K_{oc}$ -Werten mit log $K_{ow}$ - und log S-Werten	25
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>29</b>
<b>6</b>	<b>Anhang</b>	<b>31</b>
<b>7</b>	<b>Literatur</b>	<b>52</b>

## **TABELLEN- UND ABBILDUNGSVERZEICHNIS:**

Tabelle 3.1: Bestimmungsgrenzen für die Quantifizierung der Zielanalyten.

Tabelle 4.0: Mittlere, prozentuale Standardabweichungen zur Ermittlung von Variabilitäten der Analytkonzentrationen innerhalb des Zentrifugats bei den einzelnen Beprobungen.

Tabelle 4.1: Mittlere, prozentuale Standardabweichungen zur Ermittlung des Analysefehlers bei Dreifachbestimmungen von Schwebstoffproben.

Tabelle 4.2: Relative prozentuale Standardabweichung von log  $K_{OC}$ -Werten (Mittelwerte der verschiedenen Stoffgruppen) bei unterschiedlichen Probenzusammenstellungen.

Tabelle 4.3: Korrelationskoeffizienten der Geradengleichung  $Y=A_0 X + A_1$  für Gegenüberstellungen von log  $K_{OC}$ -Werten der PAK mit log  $K_{OW}$ -Werten und log S-Werten ( $r$  = Korrelationskoeffizient,  $p$  = Irrtumswahrscheinlichkeit).

Tabelle 4.4: Korrelationskoeffizienten der Geradengleichung  $Y=A_0 X + A_1$  für Gegenüberstellungen von log  $K_{OC}$ -Werten der CKW mit log  $K_{OW}$ -Werten und log S-Werten ( $r$  = Korrelationskoeffizient,  $p$  = Irrtumswahrscheinlichkeit).

Tabelle 6.1: Chemisch/physikalische Eigenschaften der untersuchten Verbindungen (Quelle: a [21, 22, 23, 24]; b [25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 24]; c [35, 36, 29, 37, 23, 38, 39, 40, 33, 24]).

Tabelle 6.2: Kenngrößen zur Probenahme an der Meßstation Geesthacht und während der Forschungsfahrt G 299 (FS Gauss) in der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.3: Konzentrationen von Alkanen [ng/L] in Zentrifugat- bzw. Filtrat-Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.4: Konzentrationen von PAK [ng/L] in Zentrifugat- bzw. Filtrat-Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.5: Konzentrationen von CKW [ng/L] in Zentrifugat- bzw. Filtrat-Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.6: Konzentrationen von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden [ng/L] in Zentrifugat-Proben der Elbe bei Geesthacht (n.n. = nicht nachweisbar). Eine Untersuchung von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden erfolgte lediglich in den Proben Gee 2 bis Gee 7.

Tabelle 6.7: Konzentrationen von Alkanen [ng/g TM] in Schwebstoff-Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.8: Konzentrationen von PAK [ng/g TM] in Schwebstoff-Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.9: Konzentrationen von CKW [ng/g TM] in Schwebstoff-Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.10: Konzentrationen von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden [ng/g TM] in Schwebstoff-Proben der Elbe bei Geesthacht (n.n. = nicht nachweisbar). Eine Untersuchung von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden erfolgte lediglich in den Proben Gee 2 bis Gee 7.

Tabelle 6.11: Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_P$ -Werte) von Alkanen in Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.12: Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_P$ -Werte) von PAK in Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.13: Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_P$ -Werte) von CKW in Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.14: Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_P$ -Werte) von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden in Proben der Elbe bei Geesthacht (k.A. = keine Angabe). Eine Untersuchung von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden erfolgte lediglich in den Proben Gee 2 bis Gee 7.

Tabelle 6.15: Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_{OC}$ -Werte) von Alkanen in Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.16: Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_{OC}$ -Werte) von PAK in Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.17: Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_{OC}$ -Werte) von CKW in Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Tabelle 6.18: Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_{OC}$ -Werte) von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden in Proben der Elbe bei Geesthacht (k.A. = keine Angabe). Eine Untersuchung von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden erfolgte lediglich in den Proben Gee 2 bis Gee 7.

Tabelle 6.19: Variationsbreite von Verteilungskoeffizienten bei einer mittleren Standardabweichung (RSD) von 7,3 % sowie Rechenbeispiele für die Konzentrationsbestimmung in der flüssigen und der festen Phase auf der Grundlage von log  $K_{OC}$ -Werten.

Abbildung 4.1: Alkan-Summengehalte in Proben der Elbe und der Deutschen Bucht.

Abbildung 4.2: Prozentuale Verteilung von Alkanen (Summengehalte) in Proben der Elbe und der Deutschen Bucht.

Abbildung 4.3: Prozentuale Verteilung von Alkanen in Proben der Meßstelle Geesthacht.

Abbildung 4.4: PAK-Summengehalte in Proben der Elbe und der Deutschen Bucht.

Abbildung 4.5: Prozentuale Verteilung von PAK (Summengehalte) in Proben der Elbe und der Deutschen Bucht.

Abbildung 4.6: Prozentuale Verteilung von PAK in Proben der Meßstelle Geesthacht.

Abbildung 4.7: CKW-Summengehalte in Proben der Elbe und der Deutschen Bucht.

Abbildung 4.8: Prozentuale Verteilung von CKW (Summengehalte) in Proben der Elbe und der Deutschen Bucht.

Abbildung 4.9: Prozentuale Verteilung von CKW in Proben der Meßstation Geesthacht.

Abbildung 4.10: Prozentuale Anreicherung am Schwebstoff von in beiden Kompartimenten einer Probe nachgewiesenen Organozinnverbindungen

Abbildung 4.11: Experimentell ermittelte Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten ( $\log K_{OC}$ -Werte) von Alkanen, PAK, CKW und Organozinnverbindungen in Wasserproben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Abbildung 6.1: Probenahmestationen der Unterelbe und der Deutschen Bucht während der Forschungsfahrt G 299 (FS Gauss).

# 1 EINLEITUNG

Als einer der wichtigsten Prozesse, der über Ausbreitung, Verbleib und Bioverfügbarkeit von organischen Stoffen in aquatischen Systemen entscheidet, gilt der Austausch zwischen wäßriger und partikulärer Phase. Um Aussagen über die Größenordnungen von Anreicherungen innerhalb eines dieser beiden Kompartimente treffen zu können, kommt der Bestimmung von Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten und deren Abhängigkeiten von chemisch-physikalischen Parametern erhebliche Bedeutung zu.

Bisherige Untersuchungen zu Verteilungskoeffizienten verschiedener Verbindungsgruppen zeigen, daß Verteilungskoeffizienten große Varianzen aufweisen, die sich mitunter um mehr als drei Zehnerpotenzen unterscheiden können. In Laborstudien erstellte Beziehungen zwischen Koeffizienten, die auf den organischen Kohlenstoffgehalt normiert wurden ( $\log K_{OC}$ -Werte) mit den n-Octanol/Wasserverteilungskoeffizienten ( $\log K_{OW}$ -Werte) konnten der Realität häufig nicht in vollem Umfang Rechnung tragen [1]. Erst Arbeiten jüngerer Datums zeigten Beziehungen zwischen Verteilungskoeffizienten und verschiedenen Faktoren auf. Zu diesen ursächlich wirkenden Parametern zählen Temperatur, Analytkonzentration, Schwebstoffgehalt und -zusammensetzung, Salinität und pH-Wert des Wasserkörpers. Ihr Einfluß auf die Stoffverteilung wird im folgenden kurz erläutert.

## Salinität

Ein Aussalz-Effekt, wie er von ionischen Verbindungen bekannt ist, wird auch für nicht ionische, organische Verbindungen beobachtet [2, 3, 4]. Für polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK) konnte gezeigt werden, daß ein hoher Salzgehalt im Wasser eine verminderte Wasserlöslichkeit bewirkt, die wiederum zu erhöhten Anreicherungsraten in der partikulären Phase führt [5, 6]. Eine ähnliche Beziehung der Verteilungskoeffizienten von der Salinität wurde von Tyler *et al.* für polychlorierte Biphenyle (PCB) und polychlorierte Dibenzodioxine festgestellt [7].

## Temperatur

Verteilungskoeffizienten stellen isotherme Gleichgewichtskonstanten dar. Es besteht somit Grund zu der Annahme, daß Temperaturänderungen sich auf Verteilungsprozesse auswirken. In Laborstudien ließ sich dieser Effekt für die Verbindungsgruppe der PAK nachweisen [8]. In Realproben konnten Bergen *et al.* für PCB eine Abnahme der Verteilungskoeffizienten mit steigender Temperatur nachweisen [9].



### Analytkonzentration

Über eine negative Abhängigkeit des Verteilungskoeffizienten von der Analytkonzentration wurde bislang lediglich von Langstone *et al.* für Organozinnverbindungen berichtet [10].

### pH-Wert

Der Einfluß des pH-Wertes auf Verteilungsprozesse konnte für die Verbindungsgruppen der PAK [11], für Tributylzinn [10] und Organophosphorpestizide [12] nachgewiesen werden. Der pH-Wert dieser Untersuchung umfaßte den Bereich von 5 bis 9.

### Schwebstoffgehalt und -zusammensetzung

Untersuchungen zur Abhängigkeit der Verteilungskoeffizienten von der Schwebstoffkonzentration ergaben für Pestizide [13], PCB [14, 15, 16] und Tributylzinn [10] negative Beziehungen. Als Erklärung für diesen Effekt wird eine steigende Konzentration des gelösten organischen Materials (DOC) bei steigendem Schwebstoffgehalt im Wasser genannt. Dieses gelöste Material bindet die Analyten in Form von Kolloiden [3]. Der Einfluß der Feststoffzusammensetzung geht maßgeblich auf den TOC-Gehalt zurück [17, 18].

Mit Ausnahme von Temperatur und pH-Wert waren die hier vorgestellten Effekte für die Verbindungsgruppen der Alkane und PAK in Realproben unterschiedlicher Hydrographie (fluvial bis marin geprägte Wasserkörper) nachweisbar. Unter Berücksichtigung der verschiedenen Parameter konnte ein empirischer Ansatz entwickelt werden, mit dem sich Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten von PAK in guter Näherung (Fehler ca. 5%) berechnen ließen [19]. Mit diesem Ansatz ließen sich 71 % der Variabilitäten (einer multiplen Regression) der experimentell ermittelten Verteilungskoeffizienten einbeziehen. Dennoch kann bislang nicht ausgeschlossen werden, daß es weitere Faktoren gibt, die einen Einfluß auf Verteilungsprozesse von organischen Stoffen zwischen wäßriger und partikulärer Phase nehmen.

Sollen auf der Basis von Schwebstoffuntersuchungen Rückschlüsse auf die Belastung des Gesamtwasserkörpers (z. B. für die Abschätzung von Frachten oder die Beurteilung der Gewässergüte) gezogen werden, so ergibt sich insgesamt die Notwendigkeit, Verteilungskoeffizienten unter Berücksichtigung der vorherrschenden hydrographischen Bedingungen zu bestimmen und bei auftretenden Varianzen detailliert die Abhängigkeiten zu ermitteln.

## **2 ZIELSETZUNG**

Im Rahmen eines Sonderuntersuchungsprogramms der ARGE ELBE sollen in Zusammenarbeit mit dem Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie (BSH) zu der in der Einleitung genannten Themenstellung die folgenden Punkte bearbeitet werden:

- Bestimmung von Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten für die im Meßprogramm der ARGE ELBE enthaltene organische Stoffe (s. [Kap. 3.1](#)).
- Ermittlung der zeitlichen Variabilität von Verteilungskoeffizienten innerhalb einer monatlichen Meßkampagne (wöchentliche Beprobungen im März und April 1997).
- Ermittlung der saisonalen Variabilität von Verteilungskoeffizienten in einem Jahreszyklus (Probenahme im März/April, Juni, Oktober 1997 und Januar 1998).
- Bestimmung von Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten im tidebeeinflussten Bereich der Unterelbe und der Deutschen Bucht (Probenahme im Juni 1997).

Auf der Basis dieser Untersuchungsergebnisse soll beurteilt werden, ob Verteilungskoeffizienten als geeignete Größen betrachtet werden können, um die Anreicherung der Analyte innerhalb der entsprechenden Kompartimente verlässlich beschreiben zu können.

## **3 EXPERIMENTELLES**

### **3.1 Stoffspektrum und Laboratorien**

Das untersuchte Stoffspektrum umfaßt die folgenden Stoffgruppen, die Einzelstoffe und die verwendeten Abkürzungen sind in [Tab. 6.1](#) (Anhang) benannt.

- Alkane, PAK und CKW, analysiert durch das BSH.
- Organozinnverbindungen, analysiert durch das Geesthachter Analysenlabor GbR (GALAB).
- Phosphor- und stickstofforganische Verbindungen, analysiert durch die Chemischen Laboratorien Dr. Specht & Partner GmbH.

### **3.2 Probenahme und Meßstellen**

Die Probenahme- und Schwebstoffabscheidetechniken sind unterschiedlich, ihre Wahl ist abhängig von den lokalen Gegebenheiten und der jeweiligen Probenahmesituation. So kann beispielsweise an Bord eines Schiffes bei schlechtem Wetter nicht oder nur unter großen Schwierigkeiten eine Labor-Durchlaufzentrifuge betrieben werden. Gemeinsam ist den unterschiedlichen Techniken die sofortige Abtrennung der Schwebstoffe nach der Probenahme, oder die Probenahme und Schwebstoffabtrennung werden simultan durchgeführt (Durchlaufzentrifuge).

Angewandt werden die Durchlaufzentrifugation an der Meßstelle Wehr Geesthacht und auf dem Forschungsschiff "Gauss". Auf der "Gauss" wird alternativ die Probenahme mit 100 L Glaskugelschöpfern (Untereibe) und anschließender Filtration an Bord mit einem Glasfaserwickelfilter durchgeführt. Bei diesen Probenahmetechniken wird eine Probenveränderung durch mikrobiologische und chemische Prozesse minimiert, lange Transportwege und oftmals unvermeidbare Standzeiten im Labor entfallen. Im folgenden werden die Anwendung unterschiedlicher Probenahme- und aufarbeitungstechniken dargestellt.

#### Wehr Geesthacht

Die Probenahme am Wehr Geesthacht (Strom km 585,5) erfolgte in der Zeit von März 1997 bis Januar 1998 am Meßcontainer der GKSS. Vier der Beprobungen fanden im Zeitraum von März bis April 1997 mit einem Abstand von jeweils einer Woche statt; anschließend wurden im Abstand von etwa drei Monaten drei weitere Beprobungen durchgeführt (Juni 1997, Oktober 1997 und Januar 1998).

Der Meßcontainer wurde über eine Edelstahl-Kreiselpumpe (Fa. Grundfoss) bei einer Förderrate von etwa 1000 L/h mit Elbewasser gespeist. Die Ansaugöffnung dieser Pumpe war zum Schutz vor groben Partikeln mit einem Netz von 1 mm Maschenweite versehen. Aus diesem Zufluß wurde ein Teilstrom für eine Durchlaufzentrifuge entnommen. Die Aufnahme begleitender Meßgrößen (pH-Wert, Temperatur, Chlorophyll-a, Oberwasserabfluß, Leitfähigkeit) erfolgte durch In-situ-Messungen der GKSS.

#### Untereibe und Deutsche Bucht

Eine Beprobung der Untereibe wurde während der Forschungsfahrt G 299 (FS Gauss) durch das BSH bei Seemannshöft (Strom km 629), Stade (Strom km 654) und Cuxhaven durchgeführt (Strom km 727). Proben in der Deutschen Bucht wurden im

weiteren Verlauf der Elbefahne (Bezeichnungen #30 und #9), vor Borkum (#36) und in der zentralen Deutschen Bucht genommen (#1, #4 und #10). Die Beprobungspunkte sind in der Abb. 6.1 (Anhang) eingezeichnet. An den Probenahmestationen Seemannshöft, Stade, Cuxhaven und #30 erfolgte die Probenahme mit 100 L Glaskugelschöpfern [53] und anschließender Filtration, an den übrigen Stationen der Deutschen Bucht mittels einer Durchlaufzentrifuge (siehe Tab. 6.2, Anhang).

Die hydrographischen Meßgrößen Salinität, Temperatur und Leitfähigkeit wurden mit einem an Bord der "Gauss" befindlichen Thermosalinographen bestimmt.

### **3.3 Schwebstoffabtrennung**

#### Zentrifugation - Wehr Geesthacht

Während der Probenahme am Wehr Geesthacht wurde zur Schwebstoffabtrennung eine Durchlaufzentrifuge (Heraeus, Contifuge 17 RS) mit entsprechendem Titan-Durchflußrotor (Heraeus 8575) verwendet (15000 U/min). Gespeist wurde die Zentrifuge durch eine Peristaltikpumpe (Watson-Marlow 503 U/RL) bei einem Zulauf von 1 L/min. Die Zu- und Ableitungen bestanden aus Teflon-Schläuchen (ID 4 mm), im Getriebe der Peristaltikpumpe aus Silikon-Schlauch.

Die Zentrifuge wurde für die Dauer von 3 bis 7 h betrieben. Bei Schwebstoffgehalten von etwa 20 mg/L ergaben sich Gesamtmengen von 3,6 bis 8,4 g TM. Nach der Zentrifugation wurde der Schwebstoff mit einem Metallspatel aus dem Zentrifugenrotor zu gleichen Anteilen in drei Glasbehältnisse überführt, verschlossen und an die beteiligten Laboratorien ausgeliefert. Bis zur weiteren Aufarbeitung sind die Schwebstoffproben bei -20 °C aufbewahrt worden.

#### Zentrifugation - Deutsche Bucht

Die Schwebstoffabtrennung in Proben der Deutschen Bucht erfolgte mit einer an Bord der FS Gauss befindlichen Durchlaufzentrifuge der Firma Plettberg GmbH, Modell Z 41, die über eine Pumpe mit Wasser aus 3 m Tiefe versorgt wurde. Die Zentrifuge wurde bei 17000 1/min und einer Durchflußrate von 1000 L/h für 3 bis 6 h betrieben. Nach der Entnahme wurden die Schwebstoffproben mit einem Metallspatel in Glasflaschen überführt und bis zur Analyse bei - 20 °C gelagert.

#### Filtration - Unterelbe

Wasserproben, die der Filtration zugeführt wurden, sind mit 100 L Glaskugelschöp-

fern aus einer Tiefe von 3 m an den jeweiligen Beprobungsstellen entnommen worden. Für die Filtration wurden Glasfaserwickelfilter mit Edelstahlstützkern der Abmessungen 28 x 76 mm und einer nominalen Porengröße von 0,45 µm verwendet (AMA Filter GmbH, Düsseldorf). Als Pumpe diente eine Peristaltikpumpe (Watson-Marlow 503 U/RL) mit einer Förderrate von ca. 1,8 L/min.

### Schwebstoffgehalte und Rückhalteraten

Zur Ermittlung von Schwebstoffgehalten und Rückhalteraten bei der Zentrifugation bzw. Filtration wurden während jeder Schwebstoffabtrennung (Beginn, Mitte und Ende) drei Teilproben von 200 bis 500 mL des Zulaufs und des Zentrifugats bzw. Filtrats entnommen und über Membranfilter (Polycarbonat 0,45 µm, Costar) filtriert.

Mit der Durchlaufzentrifugation wurden in Teilproben von der Meßstation am Wehr Geesthacht und der Hohen See unterschiedliche Rückhalteraten erhalten, sie liegen in den meisten Proben zwischen 80 und 94 %. Wegen der z. T. niedrigen Schwebstoffgehalte in der Hohen See und im Küstenbereich und dem damit verbundenen höheren Wägefehler schwanken die Rückhalteraten erheblich und spiegeln nicht immer den realen Abscheidegrad wider. Untersuchungen des BSH der Bordzentrifuge zeigen, daß die Abscheideraten zumeist bei über 90 % liegen [54]. Bei der Filtration mit den Glasfaserwickelfiltern liegen die Rückhalteraten zwischen 91 und 98 % (s. [Tab. 6.2](#), Anhang).

## **3.4 Extraktion von Wasserproben**

Die Isolierung und Anreicherung der Analyte im Zentrifugat bzw. im Filtrat erfolgte durch Flüssig/Flüssig-Extraktion [53]. An der Meßstelle Geesthacht wurden jeweils 10 L Zentrifugat in Glaskugelschöpfern gesammelt. Die Entnahme des Zentrifugats erfolgte zumeist 1 h nach Beginn, in der Mitte und 1 h vor Beendigung der Zentrifugation. Proben für die Laboratorien GALAB (zwei 1 L Proben) und Dr. Specht & Partner (2 L Proben) wurden zeitgleich mit der zweiten 10 L Probe entnommen.

Zentrifugatproben der Deutschen Bucht wurden kontinuierlich über die gesamte Dauer der Zentrifugation mittels einer Pumpe in 100 L Glaskugelschöpfern gesammelt. Die Flußrate der Pumpe richtete sich nach der Zentrifugationsdauer.

Zur Extraktion wurde den Wasserproben 200 mL n-Hexan (bei 10 L Probevolumen) bzw. 1000 mL n-Pentan (bei 100 L Probevolumen) und 5 bis 15 mL der internen Standardlösung zugesetzt (s. [Kap. 3.8](#)). Mit einem elektrischen Getrieberührer wur-

den die Proben unter vollständiger Phasendurchmischung für die Dauer von 20 min gerührt (1000 1/min). Nach der Phasentrennung innerhalb von 1,5 bis 2 h wurde der Extrakt abgetrennt (Aufsatz einer Abtrennvorrichtung auf den Kugelschöpfer mit einem Einlaßrohr in den unteren Bereich der Wasserphase und einem Auslaß am höchsten Punkt der Abtrennvorrichtung). Zuvor extrahiertes Wasser wurde durch den Einlaß gefüllt, um die überstehende organische Phase aus dem Kugelschöpfer in eine Steilbrustflasche zu überführen. Vor dem Einengen wurden die Extrakte über wasserfreiem Natriumsulfat getrocknet.

### **3.5 Extraktion von Schwebstoffproben**

Schwebstoffproben wurden nach einer Trocknung bei Raumtemperatur (4 d) durch Mörsern homogenisiert. Eine Teilprobe wurde zur Ermittlung des Restwassergehaltes gemäß DIN 38 414 Teil 2 verwendet und diente anschließend der TOC-Bestimmung.

Die Extraktion der Schwebstoffproben erfolgte mit der "Beschleunigten Lösemittel-Extraktion" (ASE) auf einer modifizierten SUPREX SFE 50-Extraktionseinheit mit einem Lösemittelgemisch aus Aceton/n-Hexan (1:1, v/v) [20]. In Dreifachbestimmungen wurden Probemengen von ca. 0,5 g Schwebstoff mit 200 mg aktiviertem Kupferpulver versetzt und in 10 mL Extraktionszellen bei einer Temperatur von 100 °C unter einem Druck von 150 atm für die Dauer von 15 min statisch extrahiert. Nach der statischen Extraktion wurde das Extraktionsgut mit ca. 20 mL Lösemittel gespült, anschließend das restliche Lösemittel mit Stickstoff (5 atm) aus der Extraktionszelle abgeblasen. Das Auffangbehältnis für den Extrakt wurde vor Beginn der dynamischen Extraktion mit 5 mL des internen Standards befüllt.

Schwebstoffbeladene Wickelfilter wurden ohne vorherige Trocknung mittels Ultraschall extrahiert. Dazu wurden die Filter in 250 mL Bechergläsern mit 15 mL interner Standardlösung versetzt und viermal mit einem Gemisch aus n-Hexan/Isopropanol (75:25, v/v) für 45 min im Ultraschallbad bei Raumtemperatur behandelt. Zur Abtrennung des Isopropanols wurden die vereinigten Extrakte dreimal mit 100 mL Wasser ausgeschüttelt und die n-Hexan-Phase über Natriumsulfat getrocknet.

### **3.6 Vorreinigung der Extrakte**

Nach Einengen auf 100 µL wurden die Schwebstoff- und Wasserextrakte mittels HPLC vorgereinigt. Die HPLC-Einheit bestand aus einer Pumpe (L 6200,

Merck/Hitachi, Darmstadt), einem Autosampler (HP Series 1050, Hewlett Packard), einem Fraktionssammler (L 5200, Merck/Hitachi, Darmstadt), einem Dioden-Array Detektor (HP 1040 M Series II, Hewlett Packard) und einem Säulenofen (Techlab). Als Säule wurde eine Nucleosil 100-5 (Macherey/Nagel, Dülmen) verwendet, wobei die Temperatur 20 °C betrug. Die HPLC-Parameter waren: 2 min n-Hexan/ Dichlormethan (60:40, v/v; 1 mL/min); in 6 min auf 100 % Dichlormethan (1 mL/min); 4 min 100 % Dichlormethan (1 mL/min); 5 min 100 % Aceton (1,5 mL/min) zum Regenerieren, 10 min n-Hexan/Dichlormethan (60:40, v/v; 1,5 mL/min) zum Equilibrieren der Säule. Die Fraktion, in der sich die Analyten befanden, wurde von 1 bis 3,5 min entnommen und zur Quantifizierung auf 100 µL (Zentrifugat-Extrakt) bzw. 500 µL (Schwebstoff-Extrakt) eingeeengt.

### 3.7 Quantifizierung

Die Quantifizierung in den Extrakten erfolgte auf einem GC (Hewlett Packard 5890 Series II) mit massenselektivem Detektor (MSD 5971 A) und Kaltaufgabesystem KAS 3 (Gerstel GmbH, Mühlheim). Es wurde eine 5 % Phenylmethyl-Silikon-Kapillarsäule mit 0,25 µm ID, 0,5 µm Filmdicke und 25 m Länge (SE 52, Macherey/Nagel, Dülmen) verwendet, wobei Helium als Trägergas benutzt wurde. Das GC-Temperaturprogramm war: 40 °C Anfangstemperatur, 5 °C/min auf 310 °C, 310 °C für 20 min. Parameter für das Kaltaufgabesystem waren: 40 °C Anfangstemperatur; 1 °C/s auf 70 °C; 70 °C für 20 s; 12 °C/s auf 320 °C; 320 °C für 600 s; Splitloszeit 120 s; Injektionsvolumen 2 µL (Schwebstoffextrakte) bzw. 5 µL (Zentrifugatextrakte). Der massenselektive Detektor wurde im SIM-Modus (Selected Ion Monitoring) betrieben, wobei die folgenden Massen detektiert worden sind (zu Abkürzungen s. [Tab. 6.1](#) im Anhang): m/z = 66 (d-Alkane), 85 (Alkane), 128 (Naph), 136 (d-Naph), 142 (M1N, M2N), 152 (Acy), 154 (Ace), 156 (DMN), 164 (d-Ace), 166 (Flu), 178 (Phen, Ant), 180 und 182 (TCB), 181 und 183 (α-, γ-, ε-HCH), 184 (DBT), 188 (d-Phen, d-Ant), 192 (M1P), 202 (Fluor, Pyr), 212 (d-Fluor), 228 (BaA, Chr/Tri), 235 und 237 (DDT, DDD), 240 (d-BaA), 246 und 248 (DDE), 252 (BbF, BeP, BaP, Per), 256 und 258 (PCB 28), 264 (d-BeP, d-Per), 266 (Tetrachlornaphthalin), 276 (I123P, BghiP), 278 (DBacA), 284 (HCB), 288 (d-BghiP), 290 und 292 (PCB 52), 300 (Cor), 312 (d-Cor), 326 und 328 (PCB 101, PCB 118, PCB 105), 358 und 360 (PCB 153, PCB 138, PCB 156), 394 und 396 (PCB 185, PCB 180).

Vier Kalibrierstandards wurden benutzt, um in Vierpunktkalibrierungen Response-Faktoren für jeden Analyten, relativ zu den internen Standardverbindungen, zu generieren. Die Identifizierung erfolgte durch Vergleich der Retentionszeiten jeder Verbindung mit denen der Kalibrierstandards. Für die Quantifizierung wurden die

Wiederfindungsraten der internen Standards berücksichtigt.

Neben dem GC-MSD wurde zur Quantifizierung ein GC-MS, Modell MD 800, der Firma Fison verwendet. Das Injektionsvolumen betrug 10 µL. Es wurde eine 5 % Phenylmethyl-Silikon-Kapillarsäule mit 0,25 µm ID, 0,5 µm Filmdicke und 25 m Länge (SE 52, Macherey/Nagel, Dülmen) eingesetzt, ausgestattet mit einer unbelegten Vorsäule von 10 m Länge. Trägergas war Helium. Das GC-Temperaturprogramm begann bei 50 °C, wurde mit 5 °C/min auf 310 °C gebracht und für 15 min bei 310 °C belassen. Die Detektion der Analyte erfolgte auf den zuvor genannten Massen.

Die Bestimmungsgrenzen für die verschiedenen Stoffgruppen sind in Tab. 3.1 zusammengestellt. Die Festlegung der Bestimmungsgrenzen erfolgte als 10-facher Wert des Geräterauschens.

**Tab. 3.1:** Bestimmungsgrenzen für die Quantifizierung mittels GC-MD 800 (k.A. keine Angabe).

	<b>Standards</b> pg/µL	<b>in 10 L Proben</b> pg/L	<b>in 100 L Proben</b> pg/L	<b>bei 0,5 g SPM</b> pg/g TM
<b>Alkane</b>	0,7	35	3,5	700
<b>PAK</b>	0,4	18	1,8	360
<b>TCB/HCB</b>	0,2	12	1,2	230
<b>DDT-Gruppe</b>	0,6	28	2,8	560
<b>HCH</b>	0,8	40	4,0	800
<b>PCB</b>	0,2	12	1,2	245
<b>N/P-Pestizide</b>	k.A.	10 - 20 ng/L	(in 1 L Proben)	5 - 25 ng/g
<b>Sn-Verb.</b>	k.A.	1 ng Sn/L	(in 2 L Proben)	1 ng Sn/g

### 3.8 Standards und Chemikalien

#### Interner Standard

Der interne Standard enthielt ε-HCH, Tetrachlornaphthalin, PCB 185 (Lab. Dr. Ehrenstorfer, Augsburg) und die perdeutierten Verbindungen C<sub>12</sub>, C<sub>16</sub>, C<sub>20</sub>, C<sub>30</sub>, Naph, Ace, Phen, Ant, Fluor, BaA, BeP, Per, BghiP, Cor (MSD Isotops, Montreal, Canada). Die Konzentrationen lagen bei 80 ng/mL für n-Alkane, 20 ng/mL für PAK und 10 ng/mL für CKW. Für die Bestimmung von Organozinverbindungen wurde Tetrapropylzinn als interner Standard verwendet.



### Kalibrierstandards

Es wurden vier Kalibrierstandards, bestehend aus den n-Alkanen C<sub>12</sub> bis C<sub>30</sub>, Pri, Phy (Alltech Associates Inc., Unterhachingen), den PAK und CKW gemäß Tab. 6.1 im Anhang (Aldrich Chemie GmbH und EGA Chemie, beide Steinheim) sowie den Verbindungen des internen Standards verwendet. Die Konzentrationen lagen im Bereich von 2 bis 20 ng/μL für Alkane, von 0,2 bis 6 ng/μL für PAK und 0,01 bis 0,5 ng/μL für CKW. Sämtliche Standards wurden in n-Hexan gelöst.

### Chemikalien

Bezugsquellen: Aceton, Toluol, n-Hexan, n-Pentan (Nanograde, Promochem, Wesel, Deutschland); Dichlormethan, Methanol, Isopropanol (Lichrosolv, Merck, Darmstadt, Deutschland). Sämtliche Lösemittel wurden vor Gebrauch destilliert. Das Kupferpulver (Baker) wurde mit verdünnter Salpetersäure aktiviert und anschließend mit Wasser, Aceton und n-Hexan gespült. Die Qualität des Natriumsulfat (Merck, p.a.) wurde durch die Fluoreszenz von n-Hexan-Extrakten überprüft.

## **3.9 Organozinnverbindungen**

Zu 1 bis 5 g SPM werden 20 mL Wasser zugesetzt, mit einem Puffer wird der pH-Wert auf 4 eingestellt. Es folgt die Extraktion der Organozinnverbindungen mit 10 mL n-Hexan. Natriumtetraethylborat (4 x 1 mL, 2-%ig, w/w) wird zugegeben, Abtrennung der organischen Phase und Quantifizierung mittels GC-AAS.

Für die Analyse von Wasserproben werden 0,5 bis 1 L eingesetzt. Die Probenaufarbeitung folgt analog der SPM-Analyse.

## **3.10 N/P-Pestizide**

Die Aufarbeitung von SPM-Proben erfolgte gemäß DFG-Methode S19 (modifiziert), die eingesetzte Probenmenge betrug ca. 4 g. Die Extraktion von 1 L Wasserproben wurde mit Dichlormethan vorgenommen. Die Quantifizierung erfolgte mittels GC/MSD, als Trennsäule wurde eine HP-5 MS Kapillare verwendet.

## 4 ERGEBNISSE

### 4.1 Variabilität der Analytkonzentrationen

Für die beim Wehr Geesthacht entnommenen Proben stellte sich die Frage, ob für die Dauer der Probennahme ein weitgehend konstanter Wasserkörper hinsichtlich der Analytkonzentrationen gegeben war. Aus diesem Grund wurde anhand von drei Zentrifugatproben, die während jeder Zentrifugation in regelmäßigen Abständen entnommen worden waren, die Variabilität der Analytkonzentrationen im Wasserkörper ermittelt. Berechnet wurden die relativen (prozentualen) Standardabweichungen von mittleren Konzentrationen in drei Zentrifugatproben innerhalb einer Meßkampagne. Über die Standardabweichungen der Einzelkomponenten der verschiedenen Stoffgruppen gebildete Mittelwerte sind in Tab. 4.0 (Spalte Zentrifugat) enthalten.

Die relativen Standardabweichungen (Alkane 6,7 bis 12,5 %, PAK 5,3 bis 7,4 % und CKW 7,8 bis 17,7 %) zeigen, daß während der jeweiligen Beprobungen der Wasserkörper als weitgehend konstant hinsichtlich der Analytkonzentrationen zu betrachten ist. Für die weiteren Berechnungen von Verteilungskoeffizienten wurden daher die Mittelwerte der Analytkonzentrationen des Zentrifugats verwendet. Eine Ausnahme bildeten lediglich die Alkane in der zweiten Beprobung (relative Standardabweichung 77,5 %, siehe Tab. 4.0, Gee 2). Hier fand sich im dritten Zentrifugat für die Summe der Alkane eine um etwa den Faktor 10 höhere Konzentration als in den beiden anderen Proben. Da das PAK-Muster dieser Probe keine auf Ölkontamination des Wasserkörpers hindeutende Auffälligkeiten enthielt (keine hohe Konzentrationen von Naphthalin und Methylnaphthalinen sowie Phenanthren und Methylphenantrenen), wurde davon ausgegangen, daß es sich um eine Kontamination des Extraktes handelte. Die Alkankonzentrationen dieser Probe wurden von der Mittelwertbildung ausgenommen.

**Tab. 4.0:** Mittlere, prozentuale Standardabweichungen zur Ermittlung von Variabilitäten der Analytkonzentrationen innerhalb des Zentrifugats bei den einzelnen Beprobungen.

	Alkane	PAK	CKW
<b>Gee 1</b>	10,9	5,3	10,2
<b>Gee 2</b>	77,5	6,8	17,6
<b>Gee 3</b>	12,5	7,4	7,8
<b>Gee 4</b>	6,9	5,8	11,0
<b>Gee 5</b>	9,5	5,5	6,5
<b>Gee 6</b>	12,0	8,8	7,0
<b>Gee 7</b>	7,3	5,7	6,3

**Tab. 4.1:** Mittlere, prozentuale Standardabweichungen zur Ermittlung des Analysefehlers bei Dreifachbestimmungen von Schwebstoffproben.

	Alkane	PAK	CKW
Gee 1	8,7	5,8	9,6
Gee 2	6,7	11,3	14,2
Gee 3	6,3	5,6	12,7
Gee 4	4,2	5,4	18,6
Gee 5	14,9	6,5	14,2
Gee 7	6,6	2,4	10,8
#9	6,0	4,7	16,0
#4-1	4,6	11,5	14,0
#10	6,5	12,3	12,3

Aus den Dreifachbestimmungen der Schwebstoffproben läßt sich die Fehlerbreite der analytischen Extraktions- und Aufarbeitungsschritte ableiten. Die mittleren, relativen Standardabweichungen lagen für die Alkane bei 4,2 bis 14,9 %, für die PAK bei 2,4 bis 12,3 % und für die CKW bei 9,6 bis 18,6 % (s. Tab. 4.1). Auch hier wurden für weitere Berechnungen die jeweiligen Mittelwerte verwendet.

## 4.2 Konzentrationen im Gesamtwasserkörper und prozentuale Verteilung

In diesem Kapitel werden für die analysierten Proben die Konzentrationen der verschiedenen Stoffgruppen als Summe der Einzelstoffkonzentrationen im Gesamtwasserkörper von sämtlichen Beprobungspunkten dargestellt. Unter Berücksichtigung der Schwebstoffgehalte ergibt sich die jeweilige Summenkonzentration in der wäßrigen und der partikulären Phase in der Einheit ng/L.

Darüber hinaus werden die prozentuale Verteilung von stoffbezogenen Summenkonzentrationen zwischen wäßriger und partikulärer Phase als Histogramme dargestellt, ebenfalls für sämtliche Beprobungspunkte. Die am Schwebstoff gebundenen Einzelstoffe und deren zeitliche Variabilität am Beprobungspunkt Wehr Geesthacht werden in Form von Box & Whisker-Plots abgebildet und zeigen die Stoffverteilung in der partikulären Phase.

### 4.2.1 Alkane

#### Summengehalte

Aus Abb. 4.1 ist ersichtlich, daß sich die Alkankonzentrationen über einen Bereich von 121 bis 3743 ng/L erstreckten. Für Proben vom Wehr Geesthacht fanden sich in

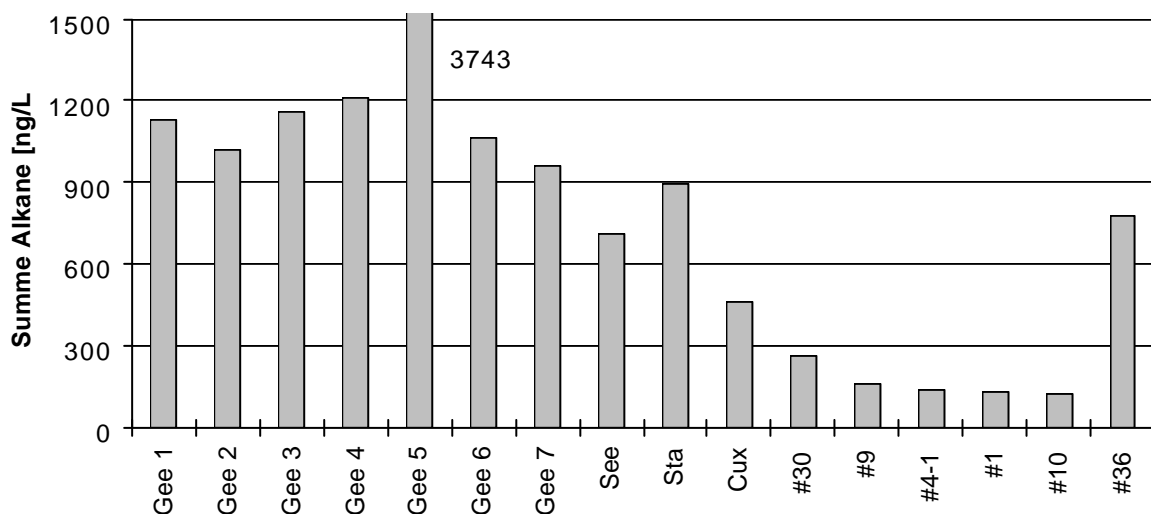
der Zeit von März bis April 1997 Konzentrationen von 1000 bis 1200 ng/L (Proben Gee 1 bis Gee 4), im Juni (Probe Gee 5) kam es zu einem Anstieg der Alkansummenkonzentration auf 3740 ng/L, der im wesentlichen durch eine Algenblüte verursacht wurde und auf die Verbindungen C<sub>15</sub> und C<sub>17</sub> zurückging. Dies wird durch die Chlorophyll-a- und Schwebstoffgehalte dieser Probe bestätigt (s. Tab. 6.2, Anhang). In den Proben vom Oktober (Gee 6) bis zum Januar (Gee 7) kam es zu einer Konzentrationsabnahme auf etwa 960 ng/L.

Zeitgleich zur Juni-Beprobung in Geesthacht (Gee 5) erfolgte die Beprobung der Unterelbe und der Deutschen Bucht. Es zeigte sich (mit Ausnahme der Probe Meßstelle Stade) eine Abnahme der Alkansummenkonzentrationen von Seemannshöft (See) über Cuxhaven (Cux) bis in den weiteren Verlauf der Elbefahne (#30 und #9). In der zentralen Deutschen Bucht fanden sich Konzentrationen von etwa 120 bis 160 ng/L, wobei die Probe #4 Anzeichen einer Ölkontamination in der wäßrigen Phase aufwies. Bei der Station #36 handelte es sich wiederum um eine küstennahe Station, deren Alkansummenkonzentration durch die Algenstoffwechselprodukte C<sub>17</sub> und C<sub>19</sub> geprägt war.

Die Salzgehalte der Stationen #30, #9 und #36 (< 34 PSU) belegen, daß die Wasserkörper dieser Stationen während der Probenahme durch fluviale Einströme beeinflusst wurden (s. Tab. 6.2, Anhang).

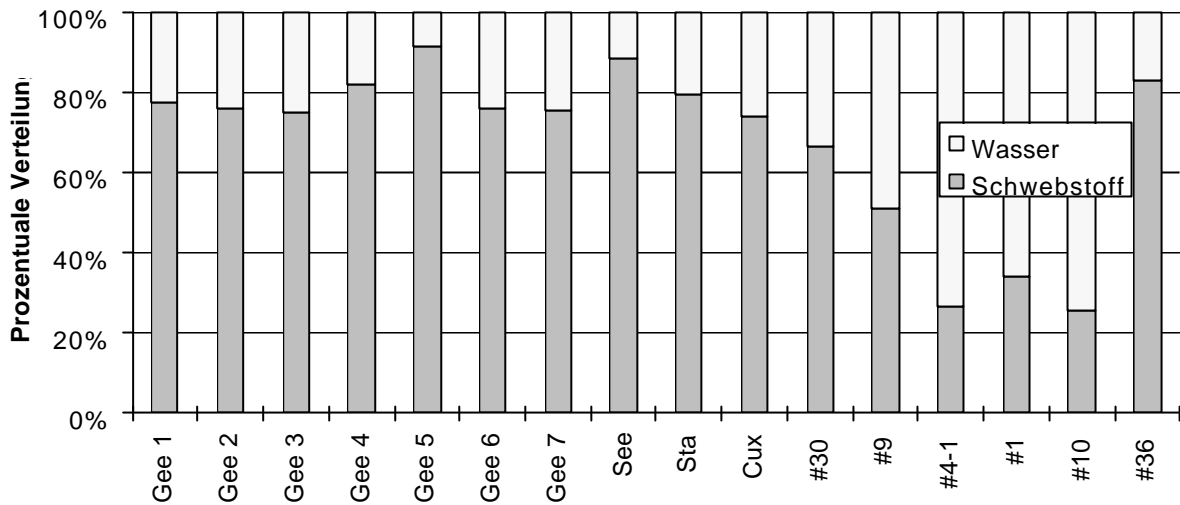
#### Prozentuale Verteilung - Summengehalte

Die prozentuale Verteilung der Alkane zwischen Schwebstoff und Wasser ist in Abb. 4.2 für sämtliche Proben dargestellt. Die Verteilungsraten am Schwebstoff reichten



**Abbildung 4.1:** Alkansummengehalte in Proben der Elbe und der Deutschen Bucht.

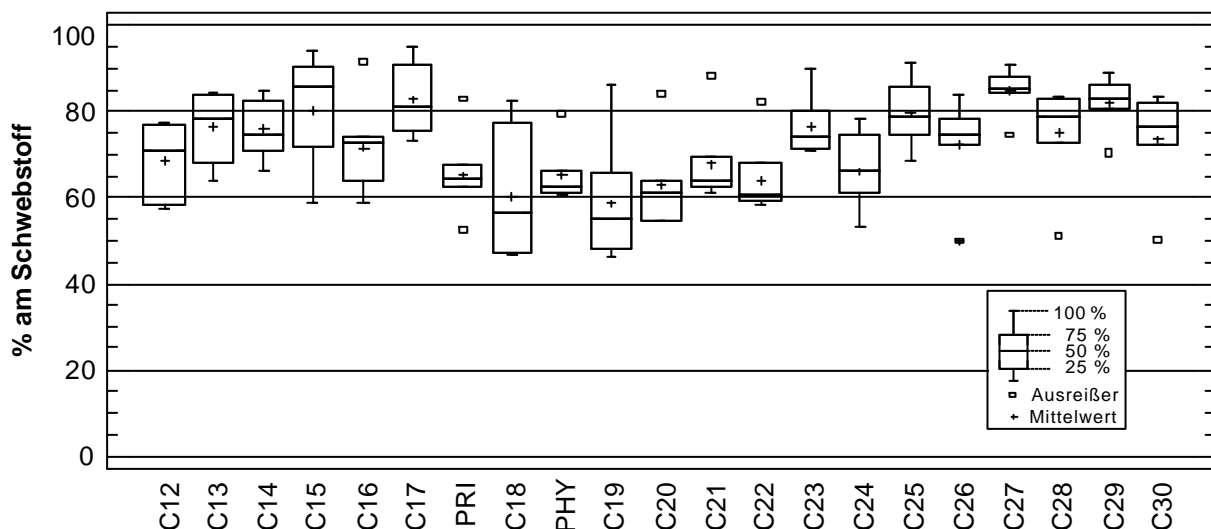
über einen Bereich von ca. 10 bis 90 %. Proben der zentralen Deutschen Bucht wiesen dabei die geringsten schwebstoffgebundenen Anteile auf, während in Proben der Meßstelle Geesthacht der größte Anteil schwebstoffgebunden vorlag.



**Abbildung 4.2:** Prozentuale Verteilung von Alkanen (Summengehalte) in Proben der Elbe und der Deutschen Bucht.

### Prozentuale Verteilung - Einzelstoffe

Die prozentuale Verteilung der Einzelstoffe und die zeitliche Variabilität der Stoffkonzentrationen ist in Abb. 4.3 für die sieben Proben von der Meßstelle Geesthacht dargestellt. Abb. 4.2 deutet bereits darauf hin, daß die Verteilungsraten zwischen den unterschiedlichen Proben erheblichen Schwankungen ausgesetzt waren. In den Proben von dieser Meßstelle war während des Beprobungszyklus jedoch eine vergleichsweise geringe Varianz vorhanden (Abb. 4.3).



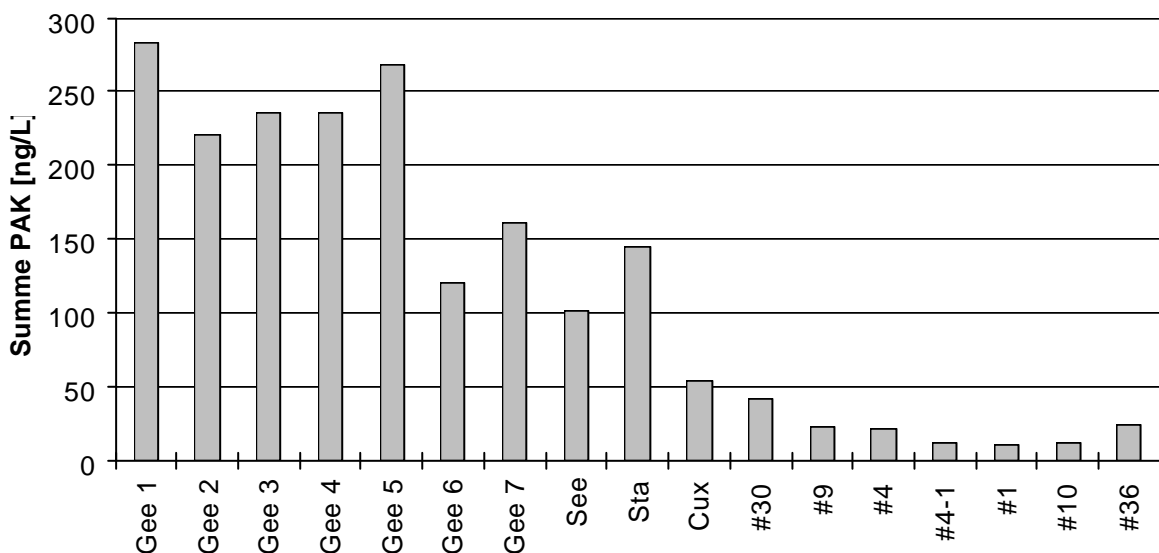
**Abbildung 4.3:** Prozentualer Anteil von schwebstoffgebundenen Alkanen in Proben der Meßstelle Geesthacht.

Die höchsten partikulär gebundenen Anteile wurden für die biogenen Alkane ( $C_{15}$ ,  $C_{17}$ ,  $C_{21}$ ,  $C_{23}$ ,  $C_{25}$ ,  $C_{27}$ ,  $C_{29}$ ) festgestellt (Abb. 4.3). Bei diesen Verbindungen ist zu berücksichtigen, daß sie native Bestandteile der pflanzlichen Matrix von Schwebstoffen darstellen und es sich nicht ausschließlich um Adsorptionsprozesse handelt, die für die erhöhten Assoziationsraten verantwortlich sind [19].

#### 4.2.2 Polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe

##### Summengenhalte

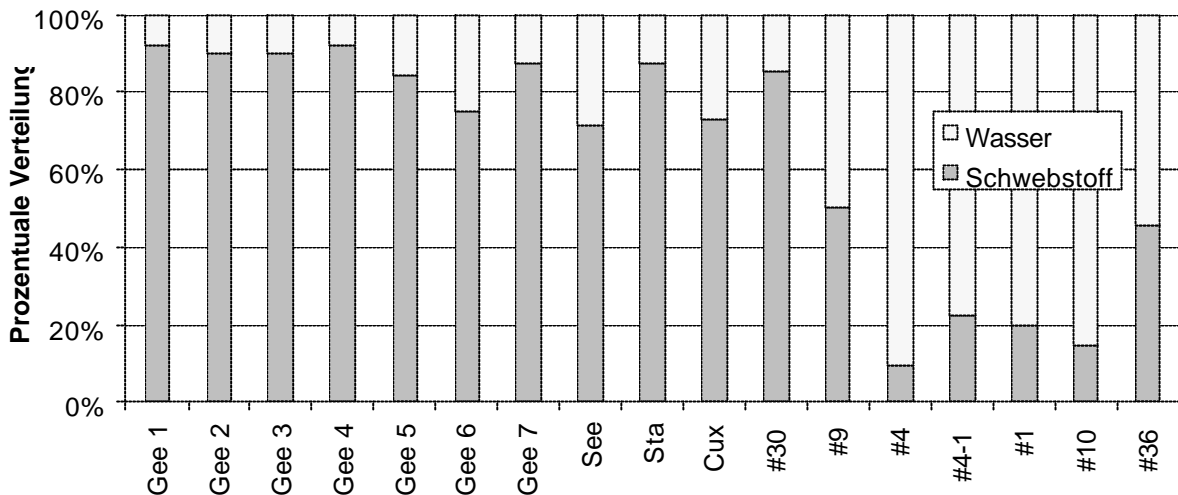
Die PAK-Summengenhalte reichten in den analysierten Proben von 11 bis 284 ng/L (Abb. 4.4). Erwartungsgemäß zeigten die Proben von der küstenfernen Nordsee die geringsten Konzentrationen (Proben #4, #4-1, #1 und #10), während Proben von der Meßstelle Geesthacht die höchsten Gehalte aufwiesen (Gee 1-7). Im Bereich der Unterelbe und der äußeren Elbefahne (beginnend bei Seemannshöft bis zur Station #9) fanden sich infolge von Verdünnungseffekten kontinuierlich abnehmende PAK-Summenkonzentrationen. Geringfügig höhere Konzentrationen fanden sich infolge der Küstennähe in der Probe #36.



**Abbildung 4.4:** PAK-Summengenhalte in Proben der Elbe und der Deutschen Bucht.

##### Prozentuale Verteilung - Summengenhalte

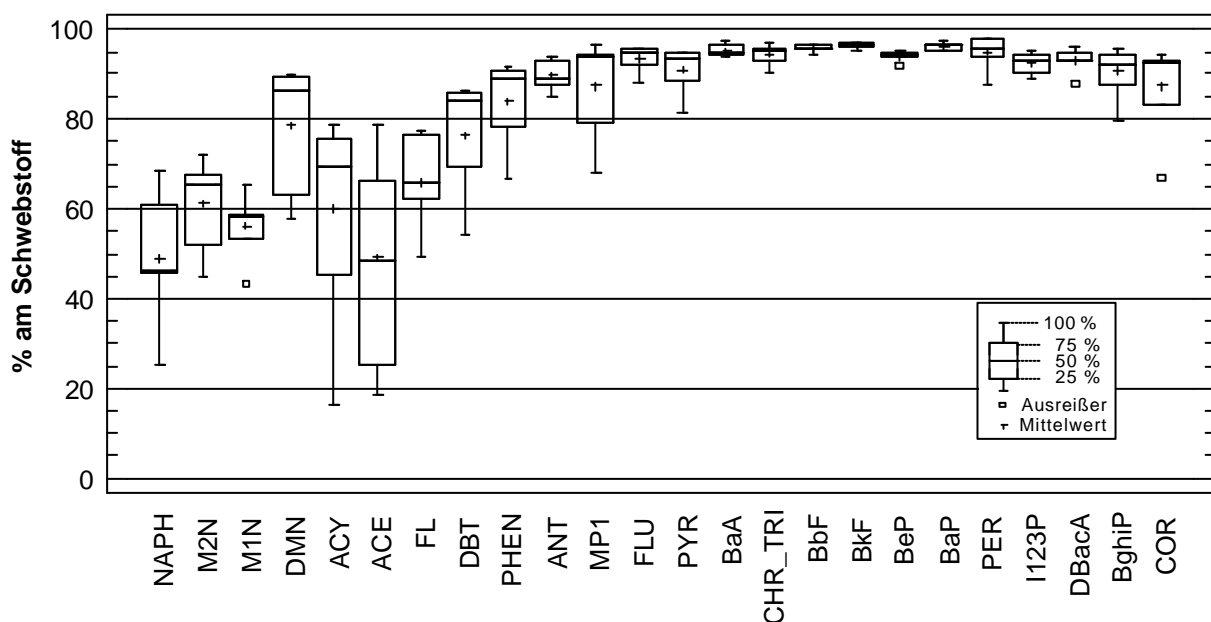
Die Verteilung der PAK-Summengenhalte zwischen Schwebstoff und Wasser ist für sämtliche Proben in Abb. 4.5 dargestellt. Die Assoziation am Schwebstoff liegt im Bereich von etwa 10 bis 90 %. Wie bereits bei den Alkanen wiesen Proben der zentralen Deutschen Bucht die geringsten schwebstoffgebundenen Anteile auf, während in



**Abbildung 4.5:** Prozentuale Verteilung von PAK-Summengehalten in Proben der Elbe und der Deutschen Bucht.

Proben der Meßstelle Geesthacht der größte Anteil schwebstoffgebunden vorlag. Auch hier zeigte die Probe #36 ein den anderen küstennahen Stationen (#30, #9) ähnliches Verhalten.

Bei hohen Konzentrationen relativ gut wasserlöslicher Verbindungen wie beispielsweise Naphthalin in der PAK-Summe kann es zu Fehlinterpretationen führen, wenn die Verteilungsrate für den feststoffgebundenen Anteil des PAK-Summengehalts zu bewerten ist. Durch den hohen Anteil gut wasserlöslicher Verbindungen kann eine zu geringe Assoziation am Schwebstoff vorgetäuscht werden.



**Abbildung 4.6:** Prozentualer PAK-Anteil im Schwebstoff in Proben der Meßstelle Geesthacht.

### Prozentuale Verteilung - Einzelstoffe

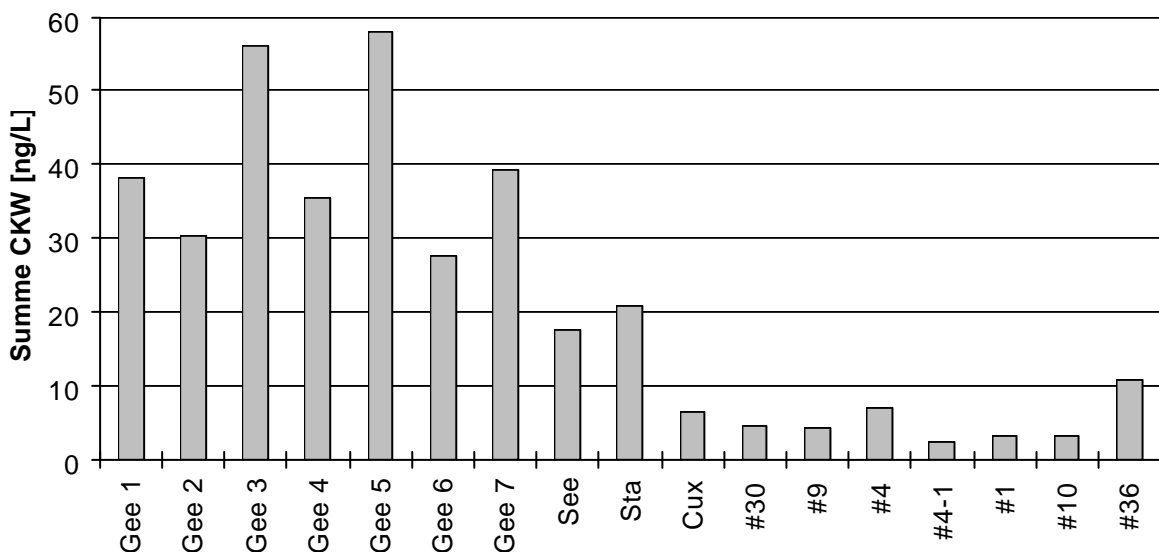
In Abb. 4.6 sind für die sieben Proben von der Meßstelle Geesthacht die Verteilungsraten der Einzelstoffe dargestellt. Insbesondere für die höher kondensierten PAK (ab Fluoranthen) zeigte sich in diesem Probenkollektiv eine vergleichsweise geringe Varianz in bezug auf die Adsorption an der partikulären Phase. Die höheren Schwankungen bei Acenaphthen und Acenaphthylen gingen wahrscheinlich auf matrixbedingte Störungen bei der Quantifizierung zurück.

Das Muster der Verteilungsraten wurde geprägt durch einen Anstieg von Naphthalin mit einem partikulär gebundenem Anteil von ca. 50 % bis zu Fluoranthen, das zu 90 % schwebstoffgebunden vorlag. Von Fluoranthen bis zum Coronen waren die Anreicherungsraten stets höher als 80 %.

### **4.2.3 Chlorierte Kohlenwasserstoffe**

#### Summengehalte

Die Konzentrationsspanne für die CKW betrug 2,5 bis 58 ng/L. Wiederum fanden sich die geringsten Konzentrationen im Bereich der Deutschen Bucht, in den Proben vom Wehr Geesthacht waren sie am höchsten. Auffällig erscheinen die Proben Gee 3 vom März 1997 und Gee 5 vom Juni 1997. Die hohe Konzentration der ersten Probe wurde maßgeblich durch partikulär gebundenes HCB bestimmt, in der zweiten Probe dominierte das ebenfalls partikulär gebundene DDT und seine Metaboliten (s. [Tab. 6.9](#), Anhang).

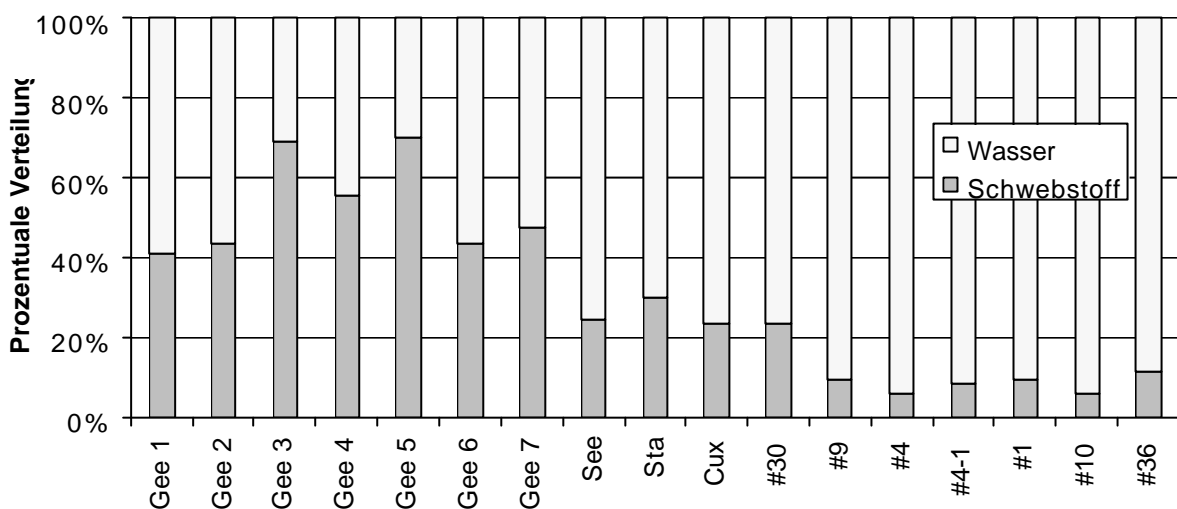


**Abbildung 4.7:** CKW-Summengehalte in Proben von der Elbe und der Deutschen Bucht.



### Prozentuale Verteilung - Summehalte

Ebenso wie bei den Alkanen und PAK war die Varianz der Verteilungsraten in den unterschiedlichen Proben relativ hoch. Wie Abb. 4.8 zeigt, lag die Spanne der Anreicherungsraten am Schwebstoff im Bereich von etwa 8 bis 70 %. Ähnlich wie bei den PAK ist anzumerken, daß die Zusammensetzung der CKW einen Einfluß auf die Verteilungsraten ausüben kann. Sind beispielsweise in Proben hohe Konzentrationen gut wasserlöslicher HCH-Isomere enthalten, so ergibt sich bei der Summendarstellung eine scheinbar geringere Anreicherungsrate am Feststoff (zu Einzelstoffgehalten s. Tab. 6.5 und Tab. 6.9, Anhang).



**Abbildung 4.8:** Prozentuale Verteilung von CKW (Summehalte) in Proben der Elbe und der Deutschen Bucht.

### Prozentuale Verteilung - Einzelstoffe

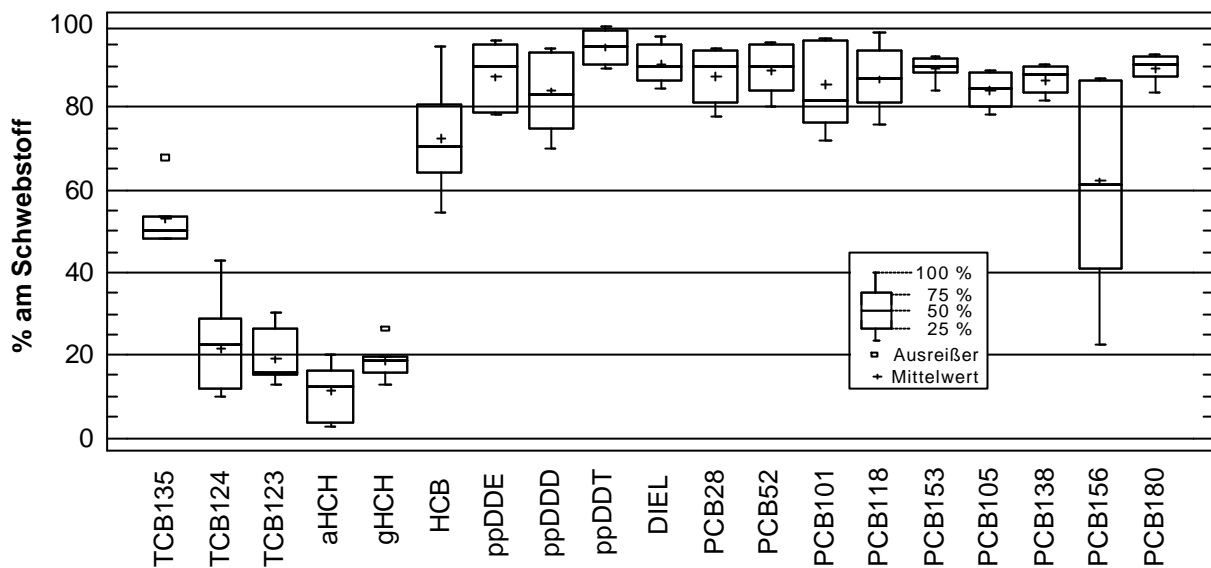
In Abb. 4.9 ist das Verteilungsmuster der Einzelstoffe für die sieben Proben von der Meßstation Geesthacht dargestellt.

Bei Betrachtung der Mittelwerte werden hohe Anreicherungsraten am Schwebstoff von über 80 % erhalten für die PCB, Dieldrin sowie DDT und Metaboliten. Unter den PCB zeigte das Kongener 156 die höchste Schwankungsbreite, was infolge der niedrigen Konzentrationen wahrscheinlich auf einen höheren analytischen Fehler zurückzuführen ist.

Die Chlorbenzole wiesen eine erhebliche Spannweite bei den Anreicherungsraten im Feststoff auf. Hexachlorbenzol zeigte mit durchschnittlich 70 % die größte Tendenz, sich in der partikulären Phase anzureichern. Von den Trichlorbenzolen liegt das 1,3,5-Isomeren zu etwa gleichen Anteilen in Wasser und Schwebstoff vor. Die 1,2,3-

und 1,2,4-Isomere dagegen sind zu etwa 80 und 85 % in Wasser gelöst. Als mögliche Ursachen kommen bei den Trichlorbenzolen die Stellung der Substituenten und daraus resultierende Unterschiede der Polarität in Frage.

Auch die HCH-Isomere lagen größtenteils in gelöster Form vor. Von den beiden untersuchten Isomeren zeigte  $\alpha$ -HCH mit ca. 85 % eine geringfügig höhere Anreicherung in der wässrigen Phase als  $\gamma$ -HCH mit etwa 80 %.



**Abbildung 4.9:** Prozentuale Verteilung von CKW in Proben der Meßstation Geesthacht.

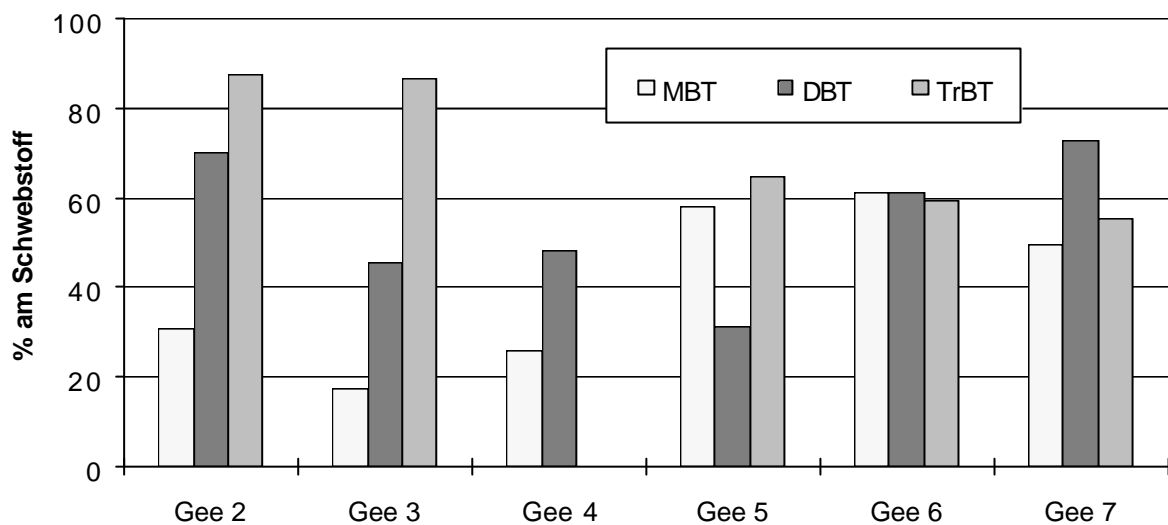
#### 4.2.4 Organozinnverbindungen und N/P-Pestizide

Organozinnverbindungen und N/P-Pestizide wurden im Rahmen dieses Untersuchungsprogrammes ausschließlich in Proben vom Wehr Geesthacht in der Zeit vom März 1997 bis Januar 1998 (Proben Gee 2 bis Gee 7) bestimmt.

##### Organozinnverbindungen

Eine Auflistung von Verteilungsraten der Organozinnverbindungen erfolgt für Mono-, Di- und Tributylzinn, da sich diese Verbindungen sowohl in der wässrigen als auch in der korrespondierenden partikulären Phase nachweisen ließen. Unter den übrigen Verbindungen wurden Tetrabutyl-, Monooktyl- Dioktylzinn im Schwebstoff bestimmt, Trihexyl- und Triphenylzinn konnten weder im Zentrifugat noch im Schwebstoff nachgewiesen werden. Die nachfolgende Abb. 4.10 zeigt daher ausschließlich Verbindungen, die in beiden Kompartimenten enthalten waren.

Ein erwartungsgemäßes Bild hinsichtlich der Verteilungsraten fand sich für die Proben Gee 2 bis Gee 4, wonach sich mit steigendem Alkylierungsgrad vom Mono- bis zum Tributylzinn höhere Anreicherungen in der partikulären Phase finden. In den übrigen Proben Gee 4 bis Gee 6 bestätigte sich dieser Befund jedoch nicht. Eine mögliche Erklärung wäre die erhöhte analytische Unsicherheit bei der Bestimmung dieser Analyte im Zentrifugat mittels GC/AAS. Die Quantifizierung mit einem GC/AED-System läßt deutlich niedrigere Nachweisgrenzen erwarten, verbunden mit einer höheren analytischen Sicherheit bei diesen geringen Konzentrationen.



**Abbildung 4.10:** Prozentuale Anreicherung von Organozinnverbindungen am Schwebstoff

### N/P-Pestizide

Eine Betrachtung von Verteilungsraten der N/P-Pestizide entfällt, da von den untersuchten Verbindungen lediglich Atrazin in den Zentrifugat-Proben analysiert werden konnte, nicht jedoch in der korrespondierenden partikulären Phase. Auch Simazin konnte nur in zwei Zentrifugat-Proben nachgewiesen werden, alle übrigen Verbindungen befanden sich unterhalb der Nachweisgrenzen.

### 4.3 Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten

Unter der Annahme, daß es sich bei der Verteilung von organischen Stoffen zwischen wäßriger und partikulärer Phase um einen Gleichgewichtszustand handelt, läßt sich dieser Prozeß durch einen Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten  $K_P$  beschreiben:

$$K_P = C_S / C_W \quad (1)$$

$C_S$  = Konzentration einer Verbindung im Schwebstoff

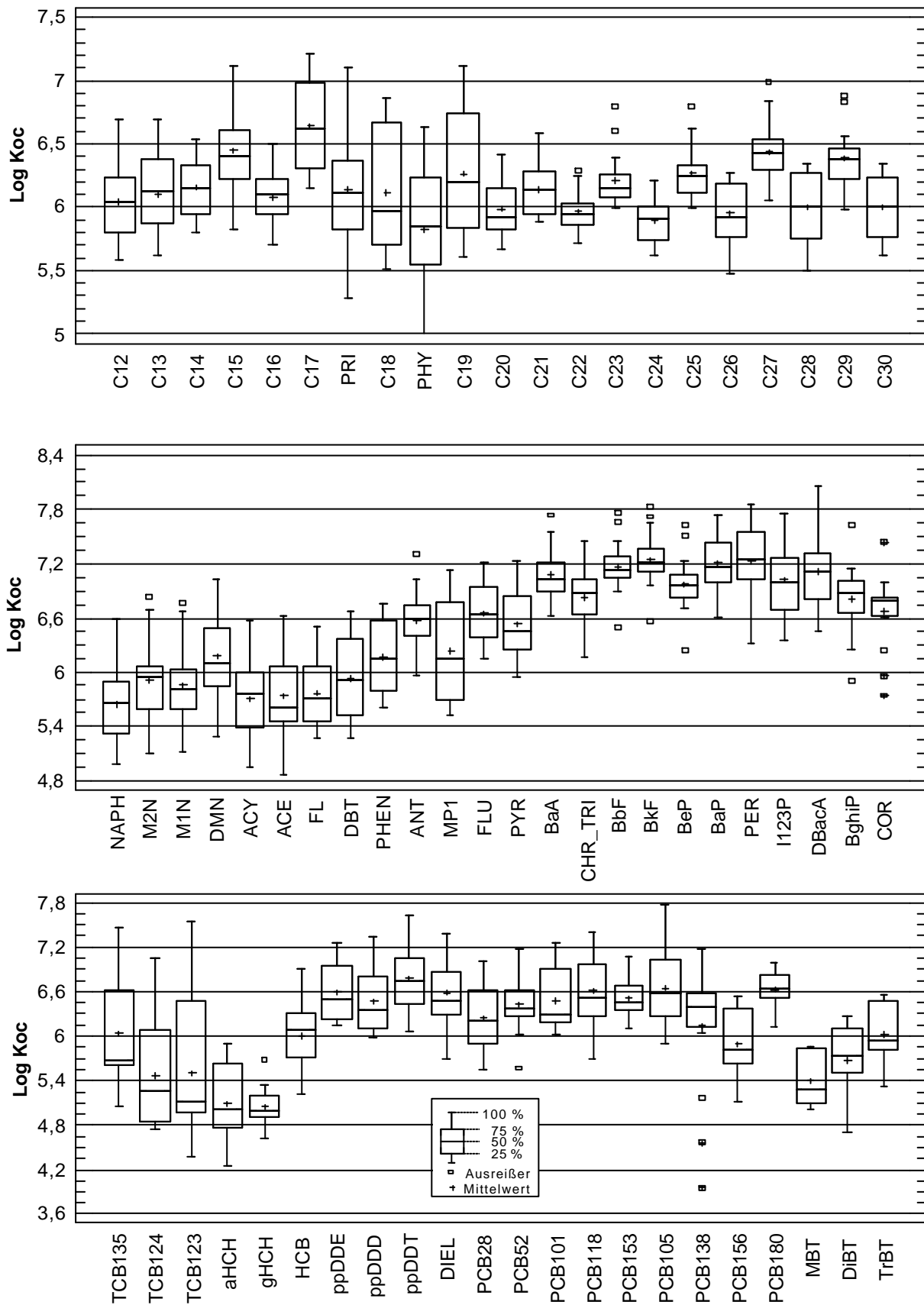
$C_W$  = Konzentration einer Verbindung im Wasser

Bei lipophilen Verbindungen werden die Wechselwirkungsprozesse im wesentlichen durch den Gehalt des organischen Kohlenstoffs (TOC) in der partikulären Phase bestimmt [41, 42]. In verschiedenen Untersuchungen konnte gezeigt werden, daß die Adsorption nicht ionischer Verbindungen direkt proportional zum TOC verlief [43, 44, 45, 46]. Der Einfluß des TOC ist dabei für Verbindungen mit großen  $K_{OW}$ -Werten höher, da diese Verbindungen vornehmlich an den organischen Bestandteilen des Sedimentes adsorbieren [47], Wechselwirkungen mit anorganischen Bestandteilen können dagegen vernachlässigt werden [48]. Die Verteilungskoeffizienten  $K_P$  werden daher häufig auf den TOC (Gew.-%) normiert:

$$K_{OC} = K_P \cdot 100 \% / \text{TOC} \quad (2)$$

Gewöhnlich wird die Einheit der Verteilungskoeffizienten  $K_P$  und  $K_{OC}$  in [L/kg] angegeben. Anders als bei der prozentualen Verteilung (Konzentrationen von ng/L für Wasser und Schwebstoff), liegen den Verteilungskoeffizienten somit auf einen bestimmten Feststoffgehalt (pro TM oder TOC) bezogene Konzentrationen zugrunde.

Für jeden analysierten Stoff wurden die log  $K_P$ - und log  $K_{OC}$ -Werte für die verschiedenen Proben berechnet (s. Gleichungen 1 und 2). Für diese Berechnungen zugrundeliegende Konzentrationen der einzelnen Verbindungen in Zentrifugat und Schwebstoff sind in den [Tab. 6.3 bis 6.10](#) (Anhang) enthalten, daraus berechnete log  $K_P$ -Werte finden sich in den [Tab. 6.11 bis 6.14](#) (Anhang). Die log  $K_{OC}$ -Werte sind in den [Tab. 6.15 bis 6.18](#) (Anhang) dargestellt. Eine Übersicht der log  $K_{OC}$ -Werte von Alkanen, PAK und CKW ist in Abb. 4.11 in Form von Box & Whisker-Plots dargestellt (ohne Probe #4).



**Abbildung 4.11:** Experimentell ermittelte Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten ( $\log K_{oc}$ -Werte) von Alkanen, PAK, CKW und Organozinnverbindungen in Wasserproben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

## Alkane

Die mittleren log  $K_{OC}$ -Werte der Alkane erstreckten sich über einen Bereich von 5,8 bis 6,7 (Abb. 4.11, obere Grafik). Es zeigte sich ein alternierendes Muster, wobei die ungeradzahigen, biogen entstandenen Alkane ( $C_{15}$ ,  $C_{17}$ ,  $C_{19}$ ,  $C_{21}$ ,  $C_{23}$ ,  $C_{25}$ ,  $C_{27}$ ,  $C_{29}$ ) höhere Werte annahmen als die geradzahigen Verbindungen. Es handelt sich um Verbindungen, die native Bestandteile der Matrix sind und daher nicht ausschließlich auf Adsorptionsprozesse zurückgehen.

Die Variabilität der Verteilungskoeffizienten erstreckte sich bei den analysierten Proben über einen Bereich von ca. 1,2 bis 2,8 Zehnerpotenzen (Abb. 4.11, obere Graphik). Wenn die Variabilität der ermittelten log  $K_{OC}$ -Werte über die relativen Standardabweichungen ausgedrückt wird, gelangt man für die Alkane zu einer Wertespanne von 4,9 bis 12,1 %, im Durchschnitt zu 6,8 % (Tab. 4.2). Anhand dieser mittleren Standardabweichungen sollte überprüft werden, ob es Probenzusammenstellungen gibt, die untereinander geringere Varianzen bei den Verteilungskoeffizienten aufweisen.

Tab. 4.2 zeigt, daß die relative Standardabweichung sämtlicher Proben durch einen Ausschluß von Probe #4 auf 4,7 % herabgesetzt wird. Zur Probe #4 ist anzumerken, daß die wäßrige Phase Anzeichen einer Ölkontamination ungeklärter Herkunft aufwies (s. Tab. 6.3, Anhang) und somit deutlich niedrigere Verteilungskoeffizienten implizierte (s. Tab. 6.15, Anhang). Die niedrigste Streuung der Verteilungskoeffizienten von 1,4 % fand sich für die Proben vom Wehr Geesthacht während des Beprobungszeitraums von März bis April 1997 (s. Gee 1 bis Gee 4 in Tab. 4.2). Dies erscheint plausibel, da in diesem Zeitraum vergleichbare Stoffkonzentrationen und ähnliche hydrographische Bedingungen für diese vier Proben gemessen wurden (s. Tab. 6.2, 6.3 und 6.7 im Anhang). Auch für die Zusammenstellungen der Untereibe, sämtlicher Proben vom Wehr Geesthacht und Proben aus der Deutschen Bucht fanden sich mit 2,4, 2,7 und 3,0 % relativer Standardabweichung geringere Va-

**Tabelle 4.2:** Relative Standardabweichungen von log  $K_{OC}$ -Werten (Mittelwerte der verschiedenen Stoffgruppen) bei unterschiedlichen Probenzusammenstellungen.

<b>Probenzusammenstellung:</b>	<b>Alkane</b>	<b>PAK</b>	<b>CKW</b>
<b>sämtliche Proben</b>	6,8	6,7	8,4
<b>sämtliche Proben ohne #4</b>	4,7	5,8	7,9
<b>Gee 1 bis Gee 4</b>	1,4	1,6	2,1
<b>Gee 1 bis Gee 7</b>	2,7	5,0	4,9
<b>Untereibe (See, Cux, Sta)</b>	2,4	3,0	5,3
<b>Deutsche Bucht (#1, #4-1, #10)</b>	3,0	3,6	5,2
<b>Küste (#9, #30, #36)</b>	5,2	5,8	6,5

rianzen als bei einer Mittelung über sämtliche Proben. Lediglich die Proben der küstennahen Nordseestationen #9, 30 und 36 zeigten mit 5,2 % eine höhere Streubreite.

Zusammenfassend zeigen die Werte in Tab. 4.2, daß bei homogenen Probenzusammenstellungen geringere Varianzen der Verteilungskoeffizienten auftreten, als dies bei Wasserkörpern unterschiedlicher Hydrographie der Fall ist.

### PAK

Die mittleren log  $K_{OC}$ -Werte der PAK lagen im Bereich von etwa 5,6 bis 7,3, wobei ein Anstieg von den zweifach kondensierten zu den vier- bis siebenfach kondensierten PAK deutlich wird (s. Abb. 4.11, mittlere Grafik). Den höchsten Wert unter den PAK wies Perylen mit 7,3 auf, wobei für diese Verbindung u.a. eine natürliche Entstehung angenommen wird [49, 50]. Der hohe log  $K_{OC}$ -Wert kann als weiteres Indiz gewertet werden, daß diese Verbindung - ähnlich den biogen entstandenen Alkanen - in der Matrix enthalten ist.

Die Varianzen der Verteilungskoeffizienten innerhalb der untersuchten Proben erstreckten sich über einen Bereich von 1,3 bis 2,2 Zehnerpotenzen. Wie zuvor bei den Alkanen zeigte sich auch für die PAK, daß innerhalb vergleichbarer Wasserkörper die Streubreite der Verteilungskoeffizienten deutlich abnimmt (s. Tab. 4.2). Während die über sämtliche Proben gemittelte relative Standardabweichung bei 6,7 % liegt, fand sich für die Probenzusammenstellung von Gee 1 bis Gee 4 eine Standardabweichung von 1,6 %, in der Unterelbe von 3,0 % und in der Deutschen Bucht von 3,6 %. Die relative Standardabweichung in den Proben Gee 1 bis Gee 7 beträgt 5 %.

### CKW und Organozinnverbindungen

Die mittleren log  $K_{OC}$ -Werte der analysierten CKW umfaßte den Bereich von 5,1 bis 6,8 (s. Abb. 4.11, untere Grafik). Die niedrigsten Werte wurden für  $\alpha$ - und  $\gamma$ -HCH und die 1,2,4- und 1,2,3-Isomere des Trichlorbenzols bestimmt. Die Verteilungskoeffizienten der DDT-Gruppe lagen zusammen mit Dieldrin und den PCB um ein bis zwei Dekaden höher, bei etwa 6,5. Unter den Butylzinnverbindungen ließ sich ein Anstieg der mittleren Verteilungskoeffizienten von 5,2 bis 6 in Abhängigkeit vom Alkylierungsgrad feststellen.

Bei der Streubreite der ermittelten log  $K_{OC}$ -Werte zeigte sich erneut, daß die Varianz zwischen Proben vergleichbarer Wasserkörper erheblich geringer ist als bei einer Betrachtung sämtlicher Proben (Tab. 4.2).

Abschließend soll an einem Rechenbeispiel verdeutlicht werden, in welchem Maße sich Unsicherheiten, die durch die mittleren Standardabweichungen ausgedrückt werden, auf log  $K_{OC}$ -Werte im Bereich von 4 bis 8 auswirken. Die Schwankungsbreite (log  $K_{OC}$ -Wert  $\pm$  eine Standardabweichung von 7,3 %) logarithmierter Verteilungskoeffizienten führt durchgehend zu einem gleichbleibenden Unterschied um den Faktor 1,2 zwischen Maximal- und Minimalwert. Betrachtet man dagegen die nicht logarithmierten Verteilungskoeffizienten  $\pm$  eine Standardabweichung, gelangt man zu erheblichen Unterschieden, abhängig von der Höhe der log  $K_{OC}$ -Werte. So beträgt der Unterschied des Verteilungskoeffizienten zwischen Maximal- und Minimalwert bei einem log  $K_{OC}$ -Wert 4 den Faktor 3,8, während dieser bei einem log  $K_{OC}$ -Wert von 8 bereits bei 14,7 liegt (s. [Tab. 6.19](#), Anhang).

Daneben soll veranschaulicht werden, mit welcher Fehlerhöhe zu rechnen ist, wenn aus Feststoff- bzw. Filtratuntersuchungen mittels der log  $K_{OC}$ -Werte die Konzentrationen innerhalb des korrespondierenden Kompartiments bestimmt wird. Geht man von einer Feststoffuntersuchung aus und berechnet daraus die Konzentration des Gesamtwasserkörpers, so zeigt sich, daß der Fehler für Verbindungen mit großem log  $K_{OC}$ -Wert am geringsten ist. Bei Untersuchungen von Filtrat- bzw. Zentrifugatproben dagegen ergibt sich für die Berechnung der Konzentration im Feststoff für gut wasserlösliche Verbindungen (log  $K_{OC}$ -Werte von ca. 4) ein geringerer Fehler als für Verbindungen mit hohem log  $K_{OC}$ -Wert (s. [Tab. 6.19](#), Anhang).

#### 4.4 Korrelation von log $K_{OC}$ -Werten mit log $K_{OW}$ - und log S-Werten

Für verschiedene Stoffklassen konnten Beziehungen zwischen Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten  $K_{OC}$  und den n-Octanol/Wasser-Verteilungskoeffizienten  $K_{OW}$  bzw. der Wasserlöslichkeit S durch folgende Gleichungen erstellt werden:

$$\log K_{OC} = A_0 \cdot \log K_{OW} + A_1 \quad (3)$$

$$\log K_{OC} = A_0 \cdot \log S + A_1 \quad (4)$$

So fanden z. B. Karikhoff *et al.* bei der Untersuchung von PAK und Pestiziden Regressionskoeffizienten von  $A_0 = 0,63$  und  $A_1 = 0$  [43]. In Untersuchungen anderer Autoren wurden Regressionskoeffizienten ermittelt, die für reale Systeme z. T. hohe Variabilitäten aufwiesen [51, 52]. Erklärt wurden die beobachteten Effekte durch die



in Kap. 1 beschriebenen Abhängigkeiten der Verteilungsprozesse von verschiedenen Einflußgrößen (Salinität, Schwebstoffgehalt, u.s.w.).

Für die in dieser Studie untersuchten Proben wurden Regressions- und Korrelationsanalysen der experimentell ermittelten  $\log K_{OC}$ -Werte mit den  $\log K_{OW}$ -Werten und der Wasserlöslichkeit  $\log S$  durchgeführt. Die Berechnungen erfolgten für die PAK und CKW, für Alkane standen keine  $\log K_{OW}$ -Werte zur Verfügung (s. Tab. 4.3).

### PAK

Die Korrelationsanalysen ergaben für die  $\log K_{OC}$ -Werte der PAK in sämtlichen Proben positive, lineare Beziehungen mit den  $\log K_{OW}$ -Werten (s. Tab. 4.3). Es handelte sich um signifikante Korrelationen ( $r > 0,5$ ;  $p < 0,05$  auf dem 95 % Signifikanzlevel bzw.  $p < 0,01$  auf dem 99 % Signifikanzlevel). Die Regressionskoeffizienten  $A_0$  der Proben vom Wehr Geesthacht umfaßten mit einer Spanne von 0,344 bis 0,395 einen vergleichsweise engen Bereich. Dies ist auf die im vorangegangenen Kapitel bereits dargestellten geringen Variabilitäten der Verteilungskoeffizienten zwischen diesen Proben zurückzuführen. Höhere Regressionskoeffizienten  $A_0$  und somit größere Anreicherungsraten der höher kondensierten PAK in der partikulären Phase fanden

**Tab. 4.3:** Korrelationskoeffizienten der Geradengleichung  $Y=A_0 X + A_1$  für Gegenüberstellungen von  $\log K_{OC}$ -Werten der PAK mit  $\log K_{OW}$ -Werten und  $\log S$ -Werten ( $r$  = Korrelationskoeffizient,  $p$  = Irrtumswahrscheinlichkeit)

	<b>log <math>K_{OC}</math> vs log <math>K_{OW}</math></b>				<b>log <math>K_{OC}</math> vs log <math>S</math></b>			
	<b><math>A_0</math></b>	<b><math>A_1</math></b>	<b><math>r</math></b>	<b><math>p</math></b>	<b><math>A_0</math></b>	<b><math>A_1</math></b>	<b><math>r</math></b>	<b><math>p</math></b>
<b>Gee 1</b>	0,344	4,942	0,78	<0,01	-0,227	7,156	-0,81	<0,01
<b>Gee 2</b>	0,360	4,731	0,76	<0,01	-0,242	7,047	-0,79	<0,01
<b>Gee 3</b>	0,344	4,756	0,70	<0,01	-0,227	6,965	-0,71	<0,01
<b>Gee 4</b>	0,336	4,775	0,79	<0,01	-0,222	6,945	-0,83	<0,01
<b>Gee 5</b>	0,395	3,797	0,83	<0,01	-0,238	6,314	-0,80	<0,01
<b>Gee 6</b>	0,386	4,197	0,81	<0,01	-0,248	6,651	-0,75	<0,01
<b>Gee7</b>	0,373	4,735	0,86	<0,01	-0,239	7,119	-0,83	<0,01
<b>See</b>	0,645	2,887	0,92	<0,01	-0,409	7,018	-0,90	<0,01
<b>Sta</b>	0,415	4,441	0,90	<0,01	-0,265	7,109	-0,90	<0,01
<b>Cux</b>	0,392	4,637	0,82	<0,01	-0,241	7,136	-0,78	<0,01
<b>#30</b>	0,372	5,276	0,92	<0,01	-0,230	7,650	-0,89	<0,01
<b>#9</b>	0,641	3,144	0,90	<0,01	-0,376	7,218	-0,84	<0,01
<b>#4</b>	0,435	3,273	0,83	<0,01	-0,268	6,067	-0,83	<0,01
<b>#4-1</b>	0,723	2,871	0,89	<0,01	-0,421	7,467	-0,85	<0,01
<b>#1</b>	0,485	3,865	0,84	<0,01	-0,310	6,972	-0,82	<0,01
<b>#10</b>	0,521	3,514	0,86	<0,01	-0,314	6,831	-0,82	<0,01
<b>#36</b>	0,529	3,625	0,85	<0,01	-0,323	7,010	-0,83	<0,01

sich in Proben der Deutschen Bucht und z. T. der Unterelbe. Mögliche Ursachen für diese höheren Anreicherungsraten sind in einer linearen Abhängigkeit der Verteilungskoeffizienten von der Salinität und einer gegensinnigen Relation mit dem Schwebstoffgehalt einer Probe zu sehen, wie sie in [19] nachgewiesen werden konnten. (Weitere mögliche Ursachen für höhere Regressionskoeffizienten in Proben der Deutschen Bucht können auf Einträge von 2- und 3-Ring PAK aus Mineralölen zurückgehen, die vornehmlich in der Wasserphase gelöst vorliegen oder auf größere Adsorptionsraten der höher kondensierten PAK infolge einer längeren Verweildauer innerhalb des Wasserkörpers zurückzuführen sind).

Korrelationen der Verteilungskoeffizienten mit der Wasserlöslichkeit führten zu negativen linearen Abhängigkeiten, die mit Korrelationskoeffizienten von  $r = -0,71$  bis  $-0,90$  geringfügig schwächer ausfielen als bei Korrelationen mit den  $\log K_{OW}$ -Werten. Auch hier waren die Unterschiede zwischen den Regressionskoeffizienten  $A_0$  für Proben von der Meßstation Geesthacht sehr gering (s. Tab. 4.3)

### CKW

Die Korrelationsanalyse von  $\log K_{OC}$ -Werten der CKW mit  $\log K_{OW}$ -Werten führte für Proben der Meßstation Geesthacht zu positiven Korrelationen, die mit Werten

**Tab. 4.4:** Korrelationskoeffizienten der Geradengleichung  $Y=A_0 X + A_1$  für Gegenüberstellungen von  $\log K_{OC}$ -Werten der CKW mit  $\log K_{OW}$ -Werten und  $\log S$ -Werten ( $r =$  Korrelationskoeffizient,  $p =$  Irrtumswahrscheinlichkeit).

	<b>log K<sub>OC</sub> vs log K<sub>OW</sub></b>				<b>log K<sub>OC</sub> vs log S</b>			
	<b>A<sub>0</sub></b>	<b>A<sub>1</sub></b>	<b>r</b>	<b>p</b>	<b>A<sub>0</sub></b>	<b>A<sub>1</sub></b>	<b>r</b>	<b>p</b>
<b>Gee 1</b>	0,443	3,509	0,83	<0,01	-0,343	6,613	-0,84	<0,01
<b>Gee 2</b>	0,390	3,738	0,83	<0,01	-0,299	6,475	-0,83	<0,01
<b>Gee 3</b>	0,486	3,346	0,84	<0,01	-0,365	6,729	-0,83	<0,01
<b>Gee 4</b>	0,414	3,587	0,88	<0,01	-0,324	6,520	-0,88	<0,01
<b>Gee 5</b>	0,484	3,039	0,73	<0,01	-0,319	6,315	-0,65	<0,01
<b>Gee 6</b>	0,512	3,197	0,68	<0,01	-0,332	6,667	-0,59	0,01
<b>Gee 7</b>	0,528	3,411	0,70	<0,01	-0,361	7,010	-0,64	<0,01
<b>See</b>	0,428	3,289	0,86	<0,01	-0,333	6,308	-0,86	<0,01
<b>Sta</b>	0,337	3,999	0,82	<0,01	-0,246	6,352	-0,76	<0,01
<b>Cux</b>	0,111	5,853	0,22	0,39	-0,056	6,621	-0,15	0,56
<b>#30</b>	0,231	5,516	0,54	0,03	-0,121	7,029	-0,37	0,14
<b>#9</b>	0,104	5,577	0,19	0,48	-0,055	6,277	-0,13	0,63
<b>#4</b>	0,262	3,945	0,38	0,14	-0,142	5,623	-0,30	0,26
<b>#4-1</b>	0,371	4,473	0,69	<0,01	-0,222	6,915	-0,58	0,02
<b>#1</b>	0,244	4,546	0,41	0,11	-0,185	6,241	-0,40	0,14
<b>#10</b>	0,425	3,847	0,76	<0,01	-0,330	6,768	-0,65	0,04
<b>#36</b>	0,274	4,553	0,32	0,25	-0,139	6,315	-0,20	0,50

von  $r = 0,70$  bis  $0,88$  (Tab. 4.4) als signifikant zu bezeichnen sind. Die Regressionskoeffizienten  $A_0$  dieser Proben lagen zwischen  $0,390$  und  $0,528$ . Unter den übrigen Proben fanden sich ebenfalls durchgehend positive Abhängigkeiten zwischen  $\log K_{OC}$ -Werten und  $\log K_{OW}$ -Werten, die in einigen Fällen jedoch nicht statistisch signifikant waren (Cux, #9, #4, #1 und # 36).

Eine Gegenüberstellung der  $\log K_{OC}$ -Werte mit der Wasserlöslichkeit ergab negative Korrelationen, deren Strenge mit Korrelationen der  $\log K_{OW}$ -Werte vergleichbar ist (s. Tab. 4.4).

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß sowohl die  $\log K_{OW}$ -Werte als auch die Wasserlöslichkeit geeignete Größen darstellen, um für die PAK die Verteilung zwischen wäßriger und partikulärer Phase zu beschreiben. Für die CKW dagegen lassen sich in einigen Fällen keine signifikanten Korrelationen feststellen. Hierbei wäre zu prüfen, ob die gemeinsame Betrachtung eines derart heterogenen Stoffspektrums (PCB, Chlorbenzole, DDT-Gruppe, HCH-Isomere) sinnvoll ist oder eine detaillierte Betrachtung der verschiedenen Untergruppen zu anderen Resultaten führt.

## ANMERKUNGEN

1. Korrelationsanalysen der  $\log K_{OC}$ -Werte mit  $\log K_{OW}$ -Werten konnte nicht in vollem Umfang durchgeführt werden, da zu einigen Stoffen keine  $\log K_{OW}$ -Werte in der Literatur ermittelt werden konnten.
2. Auf eine nähere Diskussion der  $\log K_P$ -Werte wurde verzichtet, da sich keine prinzipiellen Unterschiede zu den  $\log K_{OC}$ -Werten ergaben. Die  $\log K_{OC}$ -Werte zeigten infolge der Normierung auf den TOC-Gehalt geringere Variabilitäten zwischen den untersuchten Proben.
3. Zu den  $\log K_{OW}$ -Werten in Tab. 6.1 (Anhang) ist festzustellen, daß sich in der Literatur Angaben finden, die sich für einen bestimmten Stoff u. U. um eine Zehnerpotenz unterscheiden können (z. B. p,p'-DDT mit  $\log K_{OW}$ -Werten von  $5,7$  bis  $6,9$ ).

## 5 ZUSAMMENFASSUNG

Die vorliegende Untersuchung diente zur Bestimmung der Verteilung von Alkanen, polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen, chlororganischen und zinnorganischen Verbindungen sowie N/P-Pestiziden zwischen wäßriger und partikulärer Phase in Proben der Elbe und der Deutschen Bucht.

Die Ergebnisse dieser Untersuchung zeigen, daß Alkane in fluvialen Systemen im hohen Maß partikulär gebunden vorliegen. Die Anreicherungsraten im Schwebstoff lagen im Bereich von etwa 50 bis 90 % der im Gesamtwasserkörper enthaltenen Konzentration. Für Proben der Deutschen Bucht betragen die Anreicherungsraten mitunter nur 10 %. In sämtlichen Proben waren die schwebstoffgebundenen Anteile der biogen gebildeten Alkane höher als die der anthropogenen Alkane.

Für die PAK war ein Anstieg der Anreicherungsraten am Schwebstoff von den 2- bis 4-Ring-PAK feststellbar, der sich für Proben der Elbe von etwa 50 bis 90 % erstreckte. Die 4- bis 7-Ring-PAK waren durchgehend zu Anteilen von über 85 % im Schwebstoff enthalten. In Proben der Deutschen Bucht wurden wie bei den Alkanen infolge geringer Schwebstoffgehalte Anreicherungsraten von z. T. wenigen Prozenten festgestellt.

In Elbe-Proben besaßen unter den CKW die PCB, die DDT-Gruppe, Dieldrin und HCB die größten Anreicherungsraten. Der partikulär gebundene Anteil erstreckte sich von etwa 75 bis 95 %. Lediglich die HCH-Isomere und Trichlorbenzole lagen hauptsächlich im Wasser gelöst vor. Die Anreicherungsraten am Feststoff lagen für die HCH-Isomere bei ca. 12 bis 25 %, für 1,3,5-Trichlorbenzol bei 50 %.

Aus den Stoffkonzentrationen beider Kompartimente wurden Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten berechnet. Die mittleren  $\log K_{oc}$ -Werte der Alkane reichten in den untersuchten Proben von 5,8 bis 6,7, die der PAK lagen im Bereich von 5,6 bis 7,3, die der CKW zwischen 5,1 und 6,8. Bei den  $\log K_{oc}$ -Werten zeigte sich, daß zwischen Proben ähnlicher Hydrographie deutlich geringere Varianzen der Verteilungskoeffizienten vorkommen, als dies bei Wasserkörpern unterschiedlicher Hydrographie der Fall ist. So lagen die mittleren relativen Standardabweichungen der  $\log K_{oc}$ -Werte in Proben der Meßstelle Geesthacht für Alkane bei 2,7 %, für PAK bei 5,0 % und für CKW bei 4,9 %. Für die Stoffgruppen der PAK und der CKW zeigten sich lineare Korrelationen der  $\log K_{oc}$ -Werte mit  $\log K_{ow}$ -Werten und der Wasserlöslichkeit, die im Fall der PAK immer, bei den CKW in den meisten Fällen statistisch signifikant waren.

Infolge der geringen Varianz der Verteilungskoeffizienten lassen sich für Wasserkörper mit weitgehend konstanten hydrographischen Bedingungen (z. B. tidefreie Elbe oder zentrale Deutsche Bucht) auf der Basis von Schwebstoffuntersuchungen mit guter Näherung Abschätzungen der Belastungshöhe in der korrespondierenden wäßrigen Phase treffen. Dies erhöht die Sicherheit bei der Abschätzung von Schadstofffrachten des Gesamtwasserkörpers (als Summe von Wasser und Schwebstoff).

### **Danksagung**

Die Autoren bedanken sich beim GKSS Forschungszentrum für die Bereitstellung des Meßcontainers. Besonderer Dank gilt dabei Herrn Dipl. Chem. Gerd Blöcker für die tatkräftige und freundliche Unterstützung vor Ort. Allen beteiligten Instituten, die diese Untersuchung ermöglicht haben, gilt ebenfalls unser Dank.

## 6 ANHANG

**Tabelle 6.1:** Chemisch/physikalische Eigenschaften der untersuchten Verbindungen (Quelle: a [21, 22, 23, 24]; b [25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 24]; c [35, 36, 29, 37, 23, 38, 39, 40, 33, 24]. K.A. = Keine Angaben.

Verbindung	Abk.	Formel	Masse [g/mol]	Smp <sup>a</sup> [°C]	Sdp <sup>a</sup> [°C]	log K <sub>ow</sub> <sup>b</sup>	Lösl. S <sup>c</sup> [µg/L]
Dodecan	C 12	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	170,3	-10	216	6,8	5,1
Tridecan	C 13	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	184,4	-6	235	k.A.	k.A.
Tetradecan	C 14	C <sub>14</sub> H <sub>30</sub>	196,4	-12	232	8	k.A.
Pentadecan	C 15	C <sub>15</sub> H <sub>32</sub>	212,4	10	271	k.A.	k.A.
Hexadecan	C 16	C <sub>16</sub> H <sub>34</sub>	226,5	18	287	k.A.	3,6
Heptadecan	C 17	C <sub>17</sub> H <sub>36</sub>	240,5	22	302	k.A.	k.A.
Pristan	PRI	C <sub>19</sub> H <sub>40</sub>	268,5	-100	296	k.A.	k.A.
Octadecan	C 18	C <sub>18</sub> H <sub>38</sub>	254,5	28	316	k.A.	2,1
Phytan	PHY	C <sub>20</sub> H <sub>42</sub>	282,6	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Nonadecan	C 19	C <sub>19</sub> H <sub>40</sub>	268,5	32	330	k.A.	k.A.
Eicosan	C 20	C <sub>20</sub> H <sub>42</sub>	282,6	37	343	k.A.	k.A.
Uneicosan	C 21	C <sub>21</sub> H <sub>44</sub>	296,6	41	357	k.A.	k.A.
Docosan	C 22	C <sub>22</sub> H <sub>46</sub>	310,6	44	369	k.A.	k.A.
Tricosan	C 23	C <sub>23</sub> H <sub>48</sub>	324,6	48	380	k.A.	k.A.
Tetracosan	C 24	C <sub>24</sub> H <sub>50</sub>	338,7	54	391	k.A.	k.A.
Pentacosan	C 25	C <sub>25</sub> H <sub>52</sub>	352,7	53	402	k.A.	k.A.
Hexacosan	C 26	C <sub>26</sub> H <sub>54</sub>	366,7	56	412	k.A.	k.A.
Heptacosan	C 27	C <sub>27</sub> H <sub>56</sub>	380,7	60	442	k.A.	k.A.
Octacosan	C 28	C <sub>28</sub> H <sub>58</sub>	394,8	65	432	k.A.	k.A.
Nonacosan	C 29	C <sub>29</sub> H <sub>60</sub>	408,8	64	441	k.A.	k.A.
Triacontan	C 30	C <sub>30</sub> H <sub>62</sub>	422,8	66	450	k.A.	k.A.
Naphthalin	NAPH	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	128,2	81	219	3,35	31700
2-Methylnaphthalin	M2N	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub>	142,2	35	241	4,00	25400
1-Methylnaphthalin	M1N	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub>	142,2	-22	245	3,87	28500
2,6-Dimethylnaphthalin	DMN	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>	156,2	110	262	4,31	2000
Acenaphthylen	ACY	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub>	152,2	92	267	k.A.	3930
Acenaphthen	ACE	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub>	154,2	96	279	3,92	3420
Fluoren	FL	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub>	166,2	117	295	4,18	1980
Dibenzothiophen	DBT	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> S	184,3	100	333	4,38	k.A.
Phenanthren	PHEN	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>	178,2	101	340	4,52	1290
1-Methylphenanthren	M1P	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub>	192,3	123	359	5,08	269
Anthracen	ANT	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>	178,2	218	340	4,50	73
Fluoranthen	FLU	C <sub>16</sub> H <sub>10</sub>	202,3	110	375	5,22	260
Pyren	PYR	C <sub>16</sub> H <sub>10</sub>	202,3	156	393	5,18	135
Benz[a]anthracen	BaA	C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>	228,3	162	435	5,91	14
Chrysen	Chr	C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>	228,3	256	448	5,86	2,0
Triphenylen	Tri	C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>	228,3	199	440	5,49	43
Benz[b]fluoranthen	BbF	C <sub>20</sub> H <sub>12</sub>	252,3	168	481	5,78	1,5
Benz[k]fluoranthen	BkF	C <sub>20</sub> H <sub>12</sub>	252,3	k.A.	k.A.	6,40	0,8
Benz[e]pyren	BeP	C <sub>20</sub> H <sub>12</sub>	252,3	179	493	6,21	4,8
Benz[a]pyren	BaP	C <sub>20</sub> H <sub>12</sub>	252,3	179	493	6,35	3,8
Perylen	Per	C <sub>20</sub> H <sub>12</sub>	252,3	274	497	6,25	0,4
Indeno[1,2,3-c,d]pyren	I123P	C <sub>22</sub> H <sub>12</sub>	276,3	164	536	k.A.	k.A.
Dibenz[a,c]anthracen	DBacA	C <sub>22</sub> H <sub>14</sub>	278,4	205	k.A.	7,19	0,5
Benz[g,h,i]perylen	BghiP	C <sub>22</sub> H <sub>12</sub>	276,3	278	k.A.	6,90	0,3
Coronen	Cor	C <sub>24</sub> H <sub>12</sub>	300,4	440	525	6,50	0,1

**Table 6.1: Fortsetzung.**

Verbindung	Abk.	Formel	Masse [g/mol]	Smp <sup>a</sup> [°C]	Sdp <sup>a</sup> [°C]	log K <sub>OW</sub> <sup>b</sup>	Lösl. S <sup>c</sup> [µg/L]
α-Hexachlorcyclohexan	α-HCH	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>6</sub>	290,8	159	288	3,81	2012
γ-Hexachlorcyclohexan	γ-HCH	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>6</sub>	290,8	112	323	3,72	10083
1,1-Bis (4-chlorphenyl) 2,2-dichlorethylen	p,p'-DDE	C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>4</sub>	318,0	k.A.	k.A.	6,96	50
1,1-Bis (4-chlorphenyl) 2,2-dichlorethan	p,p'-DDD	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> Cl <sub>4</sub>	320,0	k.A.	k.A.	6,22	k.A.
1,1-Bis(4-chlorphenyl) 2,2,2-trichlorethan	p,p'-DDT	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> Cl <sub>5</sub>	354,5	109	k.A.	6,38	16967
Dieldrin	Dieldrin	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>6</sub> O	380,9	176	k.A.	5,40	22.
1,3,5-Trichlorbenzol	135-TCB	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub>	181,5	63	208	4,02	7566
1,2,4-Trichlorbenzol	124-TCB	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub>	181,5	17	213	3,98	31541
1,2,3-Trichlorbenzol	123-TCB	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub>	181,5	53	219	4,04	23382
Hexachlorbenzol	HCB	C <sub>6</sub> Cl <sub>6</sub>	284,8	230	322	5,73	5682
2,4,4'-Trichlorbiphenyl	PCB 28	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>3</sub>	257,5	k.A.	k.A.	5,78	66
2,2',5,5'-Tetrachlorbiphenyl	PCB 52	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>4</sub>	292,0	87	k.A.	5,84	29
2,2',4,5,5'-Pentachlorbiphenyl	PCB 101	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326,4	77	k.A.	6,38	10
2,3,3',4,4'-Pentachlorbiphenyl	PCB 105	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326,4	125	k.A.	6,65	2,1
2,3',4,4',5-Pentachlorbiphenyl	PCB 118	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>5</sub>	326,4	105	k.A.	6,74	2,1
2,2',3,4,4',5-Hexachlorbiphenyl	PCB 138	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360,9	79	k.A.	6,83	1,8
2,2',4,4',5,5'-Hexachlorbiphenyl	PCB 153	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360,9	103	k.A.	6,90	0,9
2,3,3',4,4',5-Hexachlorbiphenyl	PCB 156	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>6</sub>	360,9	141	k.A.	7,36	0,4
2,2',3,4,4',5,5'-Heptachlorbiphenyl	PCB 180	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>7</sub>	395,3	99	k.A.	7,36	0,6
Monobutylzinn	MBT	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Dibutylzinn	DiBT	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Tributylzinn	TriBT	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Tetrabutylzinn	TeBT	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Monooctylzinn	MOT	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Diocetylzinn	DOT	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Trihexylzinn	THT	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Triphenylzinn	TPT	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Dimethoat	DIM	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Parathion-methyl	PAR	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Desethylatrazin	DEA	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Atrazin	ATR	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Simazin	SIM	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Propazin	PROP	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Prometryn	PROM	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Ametryn	AME	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Desmetryn	DES	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Terbutylazin	TER	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Hexazinon	HEX	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
Lenacil	LEN	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.

**Table 6.2:** Kenngrößen zur Probenahme an der Meßstation Geesthacht und während der Forschungsfahrt G 299 (FS Gauss) in der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

Probe	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7
Datum	12.03.97	19.03.97	26.03.97	02.04.97	11.06.97	29.10.97	07.01.98
Zeit	12:00-15:00	10:00-17:00	10:00-16:30	11:30-16:00	10:00-16:00	11:00-17:00	10:30-16:45
Methode	Zentrif.	Zentrif.	Zentrif.	Zentrif.	Zentrif.	Zentrif.	Zentrif.
Flußrate [ml/min]	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
Probevolumen [l]	180	420	390	270	360	360	375
Extr. Volumen [l]	3x10	3x10	3x10	3x10	3x10	3x10	3x10
Rückhalterate [%]	90,2	90,0	88,9	93,6	92,3	88,8	86,4
SPM [mg/l]	23,4	20,1	22,0	23,8	47,9	13,3	14,9
TOC <sub>SPM</sub> [Gew. %]	8,2	9,6	9,7	12,1	18,3	16,7	9,6
pH-Wert	7,54	7,66	7,67	8,39	9,15	8,28	7,95
Temperatur [°C]	7,4	6,7	6,6	9,1	23,0	6,0	4,4
Chlorophylla [µg/l]	24	27	34	65	218	62	15
Abfluß [m³/s]	1570	996	1160	1075	395	322	604

Probe	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
Datum	24.06.97	24.06.97	24.06.97	24.06.97	28.06.97	29.06.97	25.06.97	29.06.97	26.06.97	27.06.97
Zeit	10:45	12:30	18:50	23:00	4:00-7:00	4:00-8:00	17:00-23:00	16:00-20:00	13:00-17:00	04:5-3:45
Methode	Filtrat.	Filtrat.	Filtrat.	Filtrat.	Zentrif.	Zentrif.	Zentrif.	Zentrif.	Zentrif.	Zentrif.
Flußrate [l/min]	1,8	1,8	1,8	1,8	16,7	16,7	16,7	16,7	16,7	16,7
Probevolumen [l]	100	95	110	110	3000	4000	6000	4000	4000	3000
Extr. Volumen [l]	100	95	110	110	110	70	110	110	110	110
Rückhalterate [%]	97,8	94,4	90,5	95,1	80,0	31,7	91,2	89,5	44,2	90,0
SPM [mg/l]	82,0	58,8	13,2	19,5	4,8	2,1	1,5	1,0	0,9	5,8
TOC <sub>SPM</sub> [Gew. %]	1,8	2,5	4,6	2,0	12,5	24,8	10,5	21,8	24,4	13,1
Temperatur [°C]	20,4	20,1	16,5	15,2	15,0	13,8	13,3	14,2	13,2	15,0
Salinität [PSU]	k.A.	k.A.	k.A.	29,93	30,57	34,36	34,62	34,63	34,27	32,60



**Table 6.3:** Konzentrationen von Alkanen [ng/L] in Zentrifugat- bzw. Filtrat-Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
C 12	1,7	1,3	2,2	2,6	3,5	1,7	1,3	0,9	0,9	0,4	0,5	0,6	2,2	1,0	0,4	0,9	0,4
C 13	1,7	1,7	2,6	2,5	2,0	1,1	0,5	0,7	1,1	0,4	0,3	0,5	2,3	0,7	0,5	0,7	0,4
C 14	3,1	2,4	3,2	3,1	3,0	1,7	1,1	1,5	2,6	1,1	0,9	1,5	4,3	1,7	1,0	1,2	0,7
C 15	3,7	5,9	17,6	5,7	20,4	7,4	5,6	3,8	10,5	2,9	1,7	3,9	20,9	5,2	8,3	3,2	2,5
C 16	3,6	4,1	5,2	4,1	4,9	3,4	4,7	1,2	1,9	0,9	1,0	1,1	7,5	2,0	1,0	1,7	0,9
C 17	13,5	15,2	16,7	13,7	80,6	31,7	14,6	13,4	15,3	28,4	8,9	18,9	95,4	6,7	3,4	19,3	59,2
PRI	5,1	5,6	9,4	6,4	3,2	3,4	4,5	1,3	1,2	0,5	0,5	2,0	23,1	6,1	2,9	6,4	1,8
C 18	8,0	9,8	10,5	8,1	4,9	7,7	8,5	1,3	2,7	1,8	1,4	4,7	46,4	6,9	3,6	10,6	7,2
PHY	6,5	6,8	7,7	6,1	3,2	3,7	4,9	0,9	1,1	0,4	0,4	2,9	34,0	5,3	2,7	7,8	2,2
C 19	7,5	8,7	9,0	6,7	5,1	5,5	7,3	1,5	3,2	4,4	2,1	4,7	42,1	3,9	2,7	8,0	12,4
C 20	5,7	6,9	7,8	5,5	3,5	3,9	6,6	1,4	3,1	1,5	1,4	1,3	16,6	2,0	1,4	1,7	1,2
C 21	9,7	10,9	12,3	9,0	8,3	6,5	8,2	3,4	6,6	2,9	2,4	1,4	20,0	2,0	1,8	1,1	1,4
C 22	7,8	8,9	9,3	6,3	6,0	5,5	7,4	2,6	6,7	4,2	3,9	2,0	29,4	2,9	3,4	1,7	2,0
C 23	11,2	12,1	14,2	9,5	17,1	10,7	11,1	5,8	14,4	6,6	6,1	3,0	37,5	4,2	5,2	2,2	2,9
C 24	10,2	11,2	12,2	7,9	10,0	10,0	10,6	4,4	13,0	8,2	7,4	3,4	45,2	5,5	6,9	2,9	4,1
C 25	20,8	20,0	26,5	15,8	23,6	24,1	23,7	7,6	21,6	11,8	10,2	5,1	50,1	7,4	8,4	3,9	5,7
C 26	14,5	15,4	16,7	13,7	14,1	20,1	15,1	6,2	16,4	9,8	8,9	4,2	44,7	7,3	7,7	3,6	4,9
C 27	29,1	23,8	27,5	24,3	32,9	29,5	28,9	7,4	19,0	9,2	8,7	4,5	42,6	7,1	7,1	3,5	5,5
C 28	15,0	14,5	14,9	11,8	14,7	19,8	14,6	5,5	13,3	8,0	7,3	3,6	39,5	7,0	6,5	3,1	4,8
C 29	53,7	42,1	44,7	40,7	37,6	35,5	41,6	6,9	17,7	8,8	8,3	5,6	39,8	7,5	6,2	3,3	6,3
C 30	16,7	14,0	15,6	12,0	14,6	19,1	13,1	3,9	11,2	6,8	6,1	3,2	34,9	6,9	5,7	3,0	4,9

**Table 6.4:** Konzentrationen von PAK [ng/L] in Zentrifugat- bzw. Filtrat-Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
<b>NAPH</b>	4,51	3,91	4,66	3,36	6,94	7,01	4,37	1,19	1,28	1,29	0,75	1,80	2,58	1,18	1,68	1,49	2,07
<b>M2N</b>	1,33	1,12	1,18	1,36	5,81	3,10	1,29	2,96	1,86	1,58	0,59	1,46	2,48	1,18	1,23	1,41	1,69
<b>M1N</b>	1,02	0,88	0,93	1,02	3,44	2,12	1,02	2,83	1,60	1,45	0,50	1,17	1,87	0,90	0,97	1,07	1,39
<b>DMN</b>	0,41	0,40	0,38	0,42	2,85	1,42	0,33	1,58	0,81	0,84	0,27	0,93	1,37	0,82	0,66	0,85	0,89
<b>ACY</b>	0,31	0,39	0,31	0,20	0,20	1,02	0,34	0,40	0,13	0,08	0,03	0,04	0,04	0,03	0,02	0,02	0,05
<b>ACE</b>	1,36	2,09	3,28	0,80	0,65	0,48	0,38	2,20	0,43	0,41	0,13	0,30	0,51	0,27	0,29	0,26	0,32
<b>FL</b>	0,85	0,90	1,01	0,63	1,82	1,41	0,95	2,19	0,65	1,00	0,41	0,74	1,27	0,81	0,81	0,89	1,02
<b>DBT</b>	0,22	0,17	0,17	0,19	0,65	0,48	0,35	0,73	0,39	0,39	0,15	0,38	0,63	0,49	0,31	0,36	0,79
<b>PHEN</b>	1,81	1,74	1,65	1,95	4,68	3,34	2,37	4,50	2,41	2,28	1,02	2,02	3,41	1,63	1,53	1,81	2,22
<b>ANT</b>	0,26	0,20	0,12	0,16	0,45	0,35	0,21	0,55	0,20	0,20	0,07	0,09	0,10	0,05	0,05	0,05	0,07
<b>MP1</b>	0,22	0,23	0,25	0,25	0,76	0,46	0,19	0,44	0,25	0,21	0,10	0,43	0,73	0,55	0,34	0,47	0,43
<b>FLU</b>	1,82	1,59	1,53	1,54	2,34	1,56	1,65	3,07	1,60	1,56	0,51	0,65	0,74	0,30	0,40	0,43	0,69
<b>PYR</b>	2,18	1,91	1,66	1,63	3,64	2,51	2,07	3,17	2,23	1,27	0,39	0,81	1,09	0,52	0,56	0,68	0,66
<b>BaA</b>	0,76	0,72	0,91	0,69	0,33	0,29	0,31	0,30	0,34	0,14	0,06	0,03	0,24	0,01	0,01	0,02	0,03
<b>CHR/T</b>	0,88	0,97	0,97	0,85	1,43	0,78	0,69	0,85	1,05	0,52	0,23	0,17	0,33	0,11	0,10	0,15	0,18
<b>BbF</b>	0,54	0,54	0,66	0,53	0,51	0,34	0,46	0,24	0,41	0,24	0,14	0,05	0,06	0,02	0,01	0,03	0,05
<b>BkF</b>	0,43	0,44	0,42	0,42	0,39	0,26	0,35	0,18	0,31	0,18	0,11	0,04	0,05	0,01	0,01	0,02	0,04
<b>BeP</b>	0,67	0,64	0,72	0,62	0,83	0,47	0,48	0,39	0,57	0,25	0,14	0,06	0,10	0,02	0,02	0,05	0,06
<b>BaP</b>	0,57	0,68	0,62	0,52	0,36	0,28	0,37	0,18	0,34	0,16	0,08	0,02	0,31	0,01	0,01	0,02	0,02
<b>PER</b>	0,15	0,13	0,20	0,09	0,21	0,23	0,23	0,20	0,26	0,12	0,08	0,03	0,02	0,01	0,01	0,01	0,02
<b>I123P</b>	0,70	0,79	1,07	0,71	0,49	0,38	0,40	0,15	0,28	0,14	0,11	0,04	0,08	0,01	0,02	0,03	0,05
<b>DbacA</b>	0,19	0,21	0,32	0,20	0,13	0,09	0,12	0,05	0,10	0,04	0,03	0,01	0,02	0,00	0,01	0,00	0,01
<b>BghiP</b>	0,64	0,79	0,91	0,59	1,75	1,15	0,54	0,30	0,55	0,22	0,14	0,11	0,89	0,07	0,09	0,18	0,13
<b>COR</b>	0,26	0,24	0,27	0,24	1,20	0,85	0,31	0,16	0,31	0,14	0,10	0,08	0,28	0,06	0,07	0,13	0,10

**Tabelle 6.5:** Konzentrationen von CKW [ng/L] in Zentrifugat- bzw. Filtrat-Proben der Elbe bei Geesthacht, der Untereibe und der Deutschen Bucht (n.n. = nicht nachweisbar).

	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
135TCB	0,267	0,174	0,171	0,157	0,368	0,215	0,108	0,446	0,217	0,016	0,003	0,001	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	0,002
124TCB	9,629	4,525	4,593	2,450	1,260	0,983	2,167	1,962	0,774	0,051	0,025	0,047	0,059	0,034	0,054	0,034	0,048
123TCB	0,603	0,395	0,416	0,251	0,174	0,194	0,360	0,292	0,124	0,007	0,004	0,009	0,011	0,006	0,007	0,006	0,009
a-HCH	3,565	3,330	3,264	3,300	6,151	8,619	12,06	4,082	3,584	0,875	0,505	0,691	0,857	0,463	0,453	0,521	0,533
g-HCH	5,357	5,560	6,067	6,400	6,037	4,176	3,656	4,251	4,540	3,720	2,848	2,938	3,781	1,725	1,456	2,441	4,090
HCB	1,631	1,420	1,558	1,416	2,043	0,784	1,357	1,495	4,568	0,167	0,042	0,015	0,018	0,007	0,008	0,013	0,016
ppDDE	0,177	0,169	0,069	0,187	0,129	0,051	0,087	0,072	0,058	0,013	0,003	0,005	0,012	0,004	0,017	0,005	0,004
ppDDD	0,379	0,452	0,220	0,503	0,452	0,203	0,204	0,230	0,207	0,049	0,005	0,004	0,007	0,003	0,007	0,004	0,003
ppDDT	0,169	0,190	0,112	0,221	0,084	0,040	0,069	0,085	0,104	0,031	0,003	0,010	0,019	0,012	0,018	0,011	0,011
DIEL	0,037	0,045	0,041	0,103	0,061	0,052	0,032	0,038	0,028	0,023	0,009	0,020	0,123	0,019	0,128	0,028	0,023
PCB28	0,058	0,064	0,023	0,064	0,041	0,015	0,023	0,039	0,022	0,007	0,004	0,008	0,016	0,005	0,043	0,008	0,008
PCB52	0,082	0,097	0,041	0,092	0,079	0,039	0,044	0,048	0,041	0,008	0,002	0,005	0,025	0,010	0,059	0,006	0,005
PCB101	0,076	0,079	0,055	0,061	0,038	0,015	0,016	0,036	0,037	0,010	0,003	0,003	0,009	0,003	0,014	0,003	0,004
PCB118	0,051	0,091	0,061	0,045	0,054	0,032	0,059	0,031	0,050	0,022	0,008	0,012	n.a	0,003	n.a	0,010	0,018
PCB153	0,153	0,129	0,207	0,167	0,101	0,038	0,044	0,099	0,083	0,005	0,013	0,007	0,012	0,008	0,004	0,005	0,011
PCB105	0,038	0,022	0,023	0,037	0,015	0,009	0,011	0,009	0,007	0,002	0,002	0,002	0,014	0,001	0,004	n.n.	0,013
PCB138	0,203	0,203	0,214	0,206	0,132	0,064	0,060	0,083	0,091	0,023	0,008	0,191	n.a	0,005	n.a	0,008	n.a
PCB156	0,028	0,053	0,023	0,038	0,044	0,091	0,039	0,035	0,040	0,003	n.n.	n.n.	0,004	n.n.	n.n.	n.n.	0,001
PCB180	0,084	0,093	0,094	0,074	0,054	0,025	0,030	0,027	0,031	0,006	0,003	0,001	0,003	0,002	n.n.	0,001	0,002

**Table 6.6:** Konzentrationen von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden [ng/L] in Zentrifugat-Proben der Elbe bei Geesthacht (n.n. = nicht nachweisbar). Eine Untersuchung von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden erfolgte lediglich in den Proben Gee 2 bis Gee 7.

	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7
<b>MBT</b>	5,8	14,0	8,8	1,9	0,8	1,5
<b>DIBT</b>	0,7	2,2	1,1	1,8	0,2	0,2
<b>TrBT</b>	0,2	0,2	n.n.	0,8	0,3	0,4
<b>TeBT</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>MOT</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>DOT</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>THT</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>TPT</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>DIM</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>PAR</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>DEA</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>ATR</b>	0,03	0,03	0,03	0,06	0,04	0,03
<b>SIM</b>	n.n.	n.n.	n.n.	0,02	0,01	n.n.
<b>PROP</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>PROM</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>AME</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>DES</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>TER</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>HEX</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>LEN</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.

**Table 6.7:** Konzentrationen von Alkanen [ng/g TM] in Schwebstoff-Proben der Elbe bei Geesthacht, der Untereibe und der Deutschen Bucht.

	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
<b>C 12</b>	247	162	136	153	244	254	206	13	36	31	36	33	118	76	185	130	266
<b>C 13</b>	388	253	214	222	187	299	177	25	66	n.a.	28	28	95	62	106	84	77
<b>C 14</b>	351	357	287	322	360	594	309	27	144	174	59	116	243	179	327	253	193
<b>C 15</b>	993	892	1147	1418	7124	5180	951	276	1007	401	459	430	1278	854	16020	8437	560
<b>C 16</b>	415	426	413	466	1096	713	458	58	70	78	63	70	163	117	337	227	202
<b>C 17</b>	2238	2058	2328	3397	31951	23472	4210	2247	2476	16486	2449	9467	13359	11413	4995	8204	78801
<b>PRI</b>	459	499	474	449	321	419	539	56	70	31	66	48	1671	860	7898	4379	513
<b>C 18</b>	444	431	419	360	486	1971	894	135	273	579	152	366	1732	1049	645	847	6444
<b>PHY</b>	537	562	553	506	256	424	518	44	74	60	38	49	63	56	167	111	139
<b>C 19</b>	396	371	380	331	684	797	596	87	169	2649	410	1530	6191	3860	1174	2517	17429
<b>C 20</b>	388	475	430	412	393	480	535	62	115	74	73	74	249	161	542	352	222
<b>C 21</b>	733	854	931	852	1285	1062	932	179	317	246	189	218	433	325	605	465	374
<b>C 22</b>	511	637	662	561	574	607	706	84	175	180	152	166	326	246	758	502	283
<b>C 23</b>	1310	1464	1612	1603	3116	2729	2124	657	884	504	489	496	381	439	1256	847	467
<b>C 24</b>	849	1013	1079	968	753	863	1114	130	269	264	242	253	241	247	749	498	421
<b>C 25</b>	3747	3696	4029	3948	4964	4023	4723	873	1365	866	874	870	925	897	2854	1876	938
<b>C 26</b>	1829	2183	2251	2076	1550	1515	2639	214	419	309	292	301	163	232	933	582	443
<b>C 27</b>	7203	7144	6949	7770	6846	6534	10484	1297	1829	1112	1212	1162	1704	1433	3269	2351	1267
<b>C 28</b>	2251	2688	2720	2500	1482	1551	2634	223	457	264	262	263	207	235	790	513	480
<b>C 29</b>	10280	10436	10122	10803	6577	6356	11717	856	1594	1177	1276	1227	1336	1282	3259	2270	1246
<b>C 30</b>	1985	2251	2417	2595	1407	1445	2244	160	336	240	212	226	376	301	960	630	395

**Tabelle 6.8:** Konzentrationen von PAK [ng/g TM] in Schwebstoff-Proben der Elbe bei Geesthacht, der Untereibe und der Deutschen Bucht.

	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
NAPH	300	195	182	309	122	181	246	14	35	57	60	58	28	43	63	53	90
M2N	149	114	107	109	132	189	133	14	37	354	82	218	69	143	142	143	74
M1N	81	62	59	61	82	121	88	9,7	26	311	60	186	38	112	84	98	91
DMN	152	122	111	149	102	146	83	9,7	25	243	59	151	60	106	133	120	90
ACY	42	33	32	31	9	15	19	1,0	2,8	2,0	2,1	2,1	1,2	1,6	1,2	1,4	1,5
ACE	44	35	34	32	50	62	50	2,9	11	7,7	10	9,0	11	10	106	58	178
FL	123	91	88	86	63	103	110	8,9	23	27	27	27	26	26	66	46	38
DBT	58	50	48	42	30	43	54	4,8	12	17	14	16	11	13,0	47	30	19
PHEN	839	738	744	661	351	505	677	50	125	147	117	132	90	111	456	284	165
ANT	84	73	71	66	74	146	210	13	39	36	28	32	14	23	25	24	36
MP1	241	182	174	155	60	74	85	3,6	12	28	21	25	45	35	42	38	31
FLU	1646	1440	1442	1369	598	864	1269	99	224	218	166	192	85	138	391	265	159
PYR	1490	1360	1365	1288	591	830	1115	91	210	199	136	167	103	135	293	214	165
BaA	697	611	597	533	257	388	585	56	104	64	67	66	24	45	24	34	40
CHR_	1089	968	971	842	384	549	802	69	151	182	130	156	61	109	79	94	117
BbF	632	695	633	518	290	443	658	58	143	166	129	148	40	94	75	85	86
BkF	577	568	527	523	256	392	582	51	127	147	114	131	35	83	88	85	76
BeP	557	535	501	474	272	392	564	56	134	139	116	127	42	85	47	66	76
BaP	702	667	624	561	268	421	672	52	118	138	94	116	32	74	24	49	91
PER	286	218	206	199	80	117	224	93	259	179	106	142	15	78	16	47	30
I123P	524	401	393	378	199	264	454	48	120	128	110	119	49	84	51	67	56
DBac	153	134	103	108	67	90	123	15	36	38	30	34	16	25	12	18	17
BghiP	570	451	442	418	260	336	491	50	124	143	123	133	58	95	84	90	111
COR	144	147	161	178	122	128	158	18	49	64	56	60	39	50	60	55	59

**Tabelle 6.9:** Konzentrationen von CKW [ng/g TM] in Schwebstoff-Proben der Elbe bei Geesthacht, der Untereibe und der Deutschen Bucht.

	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
135-TCB	13,3	8,0	7,7	7,7	7,7	15,1	15,1	1,31	2,31	8,63	1,68	5,2	0,13	2,6	0,29	n.n.	n.n.
124-TCB	44	31	30	32	20	30	42	2,98	6,44	11,1	5,63	8,4	0,46	4,4	0,83	n.n.	2,81
123-TCB	4,6	3,7	3,9	4,6	1,3	2,1	4,6	0,13	0,39	10,4	0,22	5,3	0,18	2,7	0,57	n.n.	n.n.
a-HCH	19,3	32	20,7	22	32	26	21	4,62	8,78	16,0	4,75	10,4	34,69	22,5	77,47	50,0	43,40
g-HCH	53	67	57	63	45	46	46	6,98	11,3	32,4	27,4	29,9	47,74	38,8	66,59	52,7	29,74
HCB	169	155	1270	249	76	71	257	14,6	41,9	3,68	1,95	2,8	0,55	1,7	4,09	2,9	0,34
pp-DDE	28	30	27	31	70	73	72	1,90	2,56	0,97	0,73	0,9	15,77	8,3	12,04	10,2	8,32
pp-DDD	64	52	49	63	157	180	182	4,09	6,38	2,88	0,73	1,8	10,10	6,0	3,37	4,7	3,15
pp-DDT	67	79	91	100	224	225	285	4,09	6,54	4,02	1,15	2,6	12,27	7,4	27,54	17,5	1,68
DIEL	19,0	12,3	11,9	32	25	34	69	0,92	1,13	1,49	0,89	1,2	65,51	33,4	83,97	58,7	74,05
PCB 28	10,6	11,3	9,1	12,2	11,6	18,6	22,3	0,42	0,68	0,59	0,57	0,6	0,70	0,6	3,32	n.n.	0,82
PCB 52	18,3	19,1	16,2	20,1	38	43	58	0,89	1,87	1,64	0,69	1,2	1,94	1,6	4,69	3,1	2,66
PCB 101	10,4	10,0	9,9	11,2	23	29	28	0,81	1,55	0,84	0,48	0,7	1,58	1,1	3,29	n.n.	6,99
PCB 118	11,2	14,3	12,1	13,3	55	16	60	0,88	1,89	6,84	3,45	5,1	11,42	8,3	30,64	19,5	30,55
PCB 153	59	51	49	52	23	32	29	3,03	4,65	2,86	1,58	2,2	1,62	1,9	2,71	2,3	4,44
PCB 105	5,7	6,0	8,1	6,3	2,2	3,2	5,8	0,34	0,74	6,20	0,35	3,3	0,55	1,9	8,62	5,3	2,48
PCB 138	48	44	49	63	26	36	36	3,36	5,82	4,53	2,38	3,5	2,77	3,1	3,68	3,4	5,68
PCB 156	4,1	3,8	6,7	10,4	1,4	2,0	1,8	0,27	0,56	0,43	0,12	n.n.	n.n.	n.n.	0,13	n.n.	n.n.
PCB 180	24	23	30	40	13,2	21,7	19,0	1,52	2,66	1,71	0,55	1,1	0,76	0,9	0,91	n.n.	n.n.

**Tabelle 6.10:** Konzentrationen von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden [ng/g TM] in Schwebstoff-Proben der Elbe bei Geesthacht (n.n. = nicht nachweisbar). Eine Untersuchung von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden erfolgte lediglich in den Proben Gee 2 bis Gee 7.

	<b>Gee 2</b>	<b>Gee 3</b>	<b>Gee 4</b>	<b>Gee 5</b>	<b>Gee 6</b>	<b>Gee 7</b>
<b>MBT</b>	129	136	130	55	96	99
<b>DIBT</b>	77	83	43	17	24	36
<b>TrBT</b>	69	59	30	31	33	33
<b>TeBT</b>	38	39	26	27	31	25
<b>MOT</b>	36	36	44	14	8	26
<b>DOT</b>	31	31	18	10	4	16
<b>THT</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>TPT</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>DIM</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>PAR</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>DEA</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>ATR</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>SIM</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>PROP</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>PROM</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>AME</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>DES</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>TER</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>HEX</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.
<b>LEN</b>	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.



**Table 6.11:** Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als  $\log K_p$ -Werte) von Alkanen in Proben der Elbe bei Geesthacht, der Untereibe und der Deutschen Bucht.

	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
<b>C 12</b>	5,16	5,11	4,79	4,77	4,85	5,17	5,21	4,15	4,58	4,86	4,88	4,76	4,73	4,87	5,65	5,18	5,81
<b>C 13</b>	5,35	5,18	4,91	4,95	4,97	5,44	5,56	4,54	4,78	k.A.	5,00	4,72	4,62	4,93	5,31	5,05	5,24
<b>C 14</b>	5,05	5,17	4,95	5,01	5,08	5,54	5,47	4,26	4,75	5,19	4,81	4,90	4,75	5,03	5,50	5,31	5,43
<b>C 15</b>	5,43	5,18	4,81	5,40	5,54	5,85	5,23	4,85	4,98	5,14	5,42	5,04	4,79	5,21	6,29	6,43	5,35
<b>C 16</b>	5,06	5,02	4,90	5,05	5,35	5,33	4,99	4,70	4,57	4,91	4,81	4,81	4,33	4,76	5,53	5,13	5,36
<b>C 17</b>	5,22	5,13	5,14	5,39	5,60	5,87	5,46	5,22	5,21	5,76	5,44	5,70	5,15	6,23	6,16	5,63	6,12
<b>PRI</b>	4,95	4,95	4,70	4,85	5,01	5,10	5,08	4,63	4,78	4,81	5,14	4,38	4,86	5,15	6,44	5,84	5,46
<b>C 18</b>	4,74	4,65	4,60	4,65	5,00	5,41	5,02	5,00	5,01	5,52	5,04	4,89	4,57	5,18	5,25	4,90	5,95
<b>PHY</b>	4,92	4,92	4,86	4,92	4,91	5,06	5,02	4,68	4,82	5,22	4,95	4,22	3,27	4,02	4,78	4,15	4,80
<b>C 19</b>	4,72	4,63	4,62	4,69	5,12	5,16	4,91	4,77	4,72	5,78	5,28	5,51	5,17	6,00	5,64	5,50	6,15
<b>C 20</b>	4,83	4,84	4,74	4,87	5,05	5,10	4,91	4,66	4,56	4,71	4,72	4,77	4,18	4,91	5,58	5,32	5,26
<b>C 21</b>	4,88	4,89	4,88	4,97	5,19	5,21	5,05	4,72	4,68	4,93	4,89	5,18	4,34	5,22	5,52	5,61	5,42
<b>C 22</b>	4,82	4,86	4,85	4,95	4,98	5,04	4,98	4,51	4,42	4,63	4,59	4,92	4,04	4,93	5,35	5,47	5,16
<b>C 23</b>	5,07	5,08	5,06	5,23	5,26	5,41	5,28	5,06	4,79	4,88	4,91	5,22	4,01	5,02	5,38	5,58	5,20
<b>C 24</b>	4,92	4,96	4,95	5,09	4,88	4,94	5,02	4,47	4,32	4,51	4,52	4,87	3,73	4,65	5,04	5,24	5,01
<b>C 25</b>	5,26	5,27	5,18	5,40	5,32	5,22	5,30	5,06	4,80	4,87	4,93	5,23	4,27	5,08	5,53	5,69	5,22
<b>C 26</b>	5,10	5,15	5,13	5,18	5,04	4,88	5,24	4,54	4,41	4,50	4,52	4,86	3,56	4,50	5,08	5,21	4,95
<b>C 27</b>	5,39	5,48	5,40	5,50	5,32	5,35	5,56	5,24	4,98	5,08	5,15	5,41	4,60	5,30	5,66	5,83	5,36
<b>C 28</b>	5,18	5,27	5,26	5,33	5,00	4,89	5,26	4,61	4,54	4,52	4,56	4,87	3,72	4,52	5,09	5,22	5,00
<b>C 29</b>	5,28	5,39	5,35	5,42	5,24	5,25	5,45	5,10	4,96	5,13	5,19	5,34	4,53	5,23	5,72	5,84	5,30
<b>C 30</b>	5,07	5,21	5,19	5,34	4,99	4,88	5,24	4,61	4,48	4,54	4,54	4,85	4,03	4,64	5,22	5,32	4,91

**Table 6.12:** Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_p$ -Werte) von PAK in Proben der Elbe bei Geesthacht, der Unterelbe und der Deutschen Bucht.

	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
<b>NAPH</b>	4,82	4,70	4,59	4,96	4,24	4,41	4,75	4,08	4,44	4,64	4,90	4,51	4,03	4,56	4,58	4,55	4,64
<b>M2N</b>	5,05	5,01	4,96	4,90	4,36	4,78	5,01	3,67	4,30	5,35	5,14	5,17	4,44	5,08	5,06	5,01	4,64
<b>M1N</b>	4,90	4,85	4,80	4,78	4,38	4,76	4,94	3,53	4,22	5,33	5,08	5,20	4,31	5,10	4,94	4,96	4,82
<b>DMN</b>	5,57	5,49	5,46	5,55	4,55	5,01	5,40	3,79	4,48	5,46	5,34	5,21	4,64	5,11	5,31	5,15	5,01
<b>ACY</b>	5,13	4,93	5,02	5,19	4,68	4,17	4,74	3,40	4,34	4,43	4,88	4,72	4,48	4,78	4,71	4,82	4,44
<b>ACE</b>	4,51	4,23	4,01	4,60	4,89	5,12	5,12	3,12	4,39	4,27	4,92	4,48	4,31	4,56	5,56	5,35	5,75
<b>FL</b>	5,16	5,00	4,94	5,14	4,54	4,87	5,06	3,61	4,54	4,44	4,81	4,56	4,31	4,51	4,91	4,71	4,57
<b>DBT</b>	5,41	5,46	5,46	5,34	4,67	4,95	5,19	3,81	4,50	4,63	4,98	4,62	4,22	4,43	5,18	4,92	4,38
<b>PHEN</b>	5,67	5,63	5,65	5,53	4,88	5,18	5,46	4,04	4,72	4,81	5,06	4,82	4,42	4,83	5,48	5,20	4,87
<b>ANT</b>	5,50	5,56	5,79	5,61	5,22	5,62	6,00	4,37	5,29	5,26	5,61	5,56	5,15	5,70	5,72	5,69	5,71
<b>MP1</b>	6,04	5,91	5,84	5,79	4,90	5,21	5,64	3,91	4,70	5,12	5,34	4,75	4,79	4,81	5,09	4,91	4,86
<b>FLU</b>	5,96	5,96	5,98	5,95	5,41	5,74	5,89	4,51	5,15	5,15	5,51	5,47	5,06	5,66	5,99	5,79	5,36
<b>PYR</b>	5,84	5,85	5,92	5,90	5,21	5,52	5,73	4,46	4,97	5,19	5,54	5,31	4,98	5,41	5,72	5,50	5,40
<b>BaA</b>	5,96	5,93	5,82	5,89	5,89	6,12	6,27	5,27	5,49	5,66	6,04	6,38	5,00	6,57	6,47	6,28	6,18
<b>CHR/T</b>	6,09	6,00	6,00	6,00	5,43	5,85	6,07	4,91	5,16	5,54	5,76	5,96	5,27	5,99	5,89	5,81	5,82
<b>BbF</b>	6,07	6,11	5,98	5,99	5,75	6,11	6,16	5,37	5,54	5,84	5,96	6,49	5,80	6,78	6,80	6,50	6,24
<b>BkF</b>	6,12	6,11	6,10	6,09	5,82	6,18	6,23	5,44	5,61	5,90	6,03	6,56	5,87	6,84	6,98	6,62	6,30
<b>BeP</b>	5,92	5,92	5,84	5,88	5,52	5,92	6,07	5,15	5,37	5,74	5,93	6,33	5,62	6,53	6,28	6,10	6,10
<b>BaP</b>	6,09	5,99	6,00	6,03	5,87	6,17	6,26	5,46	5,54	5,93	6,05	6,77	5,01	6,74	6,30	6,40	6,71
<b>PER</b>	6,27	6,24	6,02	6,32	5,57	5,71	5,98	5,67	5,99	6,16	6,12	6,70	5,84	6,87	6,20	6,61	6,17
<b>I123P</b>	5,87	5,71	5,57	5,73	5,61	5,84	6,06	5,51	5,64	5,96	6,01	6,46	5,77	6,78	6,35	6,30	6,07
<b>DBac</b>	5,90	5,80	5,51	5,73	5,71	6,01	6,03	5,47	5,56	5,98	6,04	6,68	5,93	7,07	6,30	6,71	6,35
<b>BghiP</b>	5,95	5,76	5,69	5,85	5,17	5,47	5,96	5,22	5,36	5,81	5,93	6,10	4,81	6,14	5,96	5,69	5,92
<b>COR</b>	5,75	5,79	5,78	5,86	5,01	5,18	5,71	5,06	5,21	5,65	5,75	5,87	5,15	5,92	5,94	5,64	5,78

**Table 6.13:** Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_p$ -Werte) von CKW in Proben der Elbe bei Geesthacht, der Untere Elbe und der Deutschen Bucht.

	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
135-TCB	4,70	4,66	4,65	4,69	4,32	4,85	5,14	3,47	4,03	5,73	5,75	6,55	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
124-TCB	3,66	3,83	3,81	4,11	4,19	4,49	4,29	3,18	3,92	5,34	5,36	5,25	3,89	5,11	4,18	k.A.	4,77
123-TCB	3,88	3,97	3,98	4,26	3,87	4,04	4,11	2,64	3,49	6,20	4,78	5,79	4,19	5,64	4,88	k.A.	k.A.
a-HCH	3,73	3,99	3,80	3,82	3,71	3,48	3,25	3,05	3,39	4,26	3,97	4,18	4,61	4,69	5,23	4,98	4,91
g-HCH	3,99	4,08	3,97	4,00	3,88	4,05	4,10	3,22	3,40	3,94	3,98	4,01	4,10	4,35	4,66	4,33	3,86
HCB	5,02	5,04	5,91	5,25	4,57	4,96	5,28	3,99	3,96	4,34	4,66	5,28	4,50	5,36	5,73	5,36	4,33
pp-DDE	5,19	5,26	5,60	5,22	5,73	6,15	5,92	4,42	4,65	4,87	5,41	5,25	6,12	6,29	5,86	6,35	6,28
pp-DDD	5,23	5,06	5,35	5,10	5,54	5,95	5,95	4,25	4,49	4,77	5,18	5,64	6,15	6,35	5,67	6,10	6,01
pp-DDT	5,60	5,62	5,91	5,65	6,42	6,75	6,62	4,68	4,80	5,11	5,63	5,40	5,81	5,80	6,18	6,22	5,17
DIEL	5,71	5,44	5,46	5,49	5,61	5,82	6,33	4,39	4,61	4,81	5,00	4,78	5,72	6,25	5,82	6,32	6,50
PCB 28	5,26	5,24	5,60	5,28	5,46	6,09	5,99	4,04	4,49	4,89	5,14	4,87	4,63	5,09	4,89	k.A.	5,02
PCB 52	5,35	5,30	5,60	5,34	5,68	6,05	6,13	4,27	4,66	5,32	5,49	5,39	4,90	5,19	4,90	5,69	5,71
PCB 101	5,13	5,10	5,25	5,26	5,78	6,28	6,24	4,36	4,63	4,94	5,22	5,40	5,26	5,65	5,36	k.A.	6,27
PCB 118	5,34	5,19	5,30	5,47	6,01	5,70	6,01	4,45	4,58	5,49	5,63	5,64	k.A.	6,43	k.A.	6,30	6,22
PCB 153	5,59	5,60	5,38	5,49	5,36	5,93	5,82	4,48	4,75	5,73	5,07	5,49	5,13	5,38	5,83	5,67	5,60
PCB 105	5,18	5,43	5,55	5,23	5,16	5,54	5,71	4,57	5,01	6,43	5,24	6,26	4,59	6,38	6,37	k.A.	5,28
PCB 138	5,37	5,34	5,36	5,48	5,29	5,75	5,78	4,61	4,81	5,29	5,49	4,26	k.A.	5,83	k.A.	5,61	k.A.
PCB 156	5,17	4,85	5,46	5,44	4,51	4,34	4,66	3,88	4,15	5,19	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
PCB 180	5,46	5,40	5,51	5,73	5,39	5,94	5,81	4,74	4,93	5,48	5,29	5,93	5,40	5,72	k.A.	k.A.	k.A.

**Tabelle 6.14:** Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als  $\log K_P$ -Werte) von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden in Proben der Elbe bei Geesthacht (k.A. = keine Angabe). Eine Untersuchung von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden erfolgte lediglich in den Proben Gee 2 bis Gee 7.

	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7
<b>MBT</b>	4,35	3,99	4,17	4,46	5,08	4,82
<b>DIBT</b>	5,07	4,58	4,59	3,98	5,08	5,26
<b>TrBT</b>	5,54	5,47	k.A.	4,59	5,04	4,92
<b>TeBT</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>MOT</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>DOT</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>THT</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>TPT</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>DIM</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>PAR</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>DEA</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>ATR</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>SIM</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>PROP</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>PROM</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>AME</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>DES</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>TER</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>HEX</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>LEN</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.

**Table 6.15:** Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_{OC}$ -Werte) von Alkanen in Proben der Elbe bei Geesthacht, der Untereibe und der Deutschen Bucht.

	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
<b>C 12</b>	6,25	6,13	5,80	5,69	5,59	5,95	6,23	5,89	6,18	6,20	6,57	5,66	5,33	5,85	6,32	5,79	6,69
<b>C 13</b>	6,43	6,20	5,92	5,87	5,70	6,21	6,58	6,27	6,38	k.A.	6,69	5,62	5,22	5,91	5,97	5,67	6,12
<b>C 14</b>	6,14	6,19	5,96	5,93	5,82	6,32	6,49	6,00	6,35	6,53	6,50	5,80	5,35	6,01	6,17	5,92	6,32
<b>C 15</b>	6,52	6,20	5,83	6,32	6,28	6,62	6,25	6,59	6,58	6,48	7,12	5,94	5,39	6,19	6,95	7,04	6,24
<b>C 16</b>	6,15	6,04	5,92	5,97	6,09	6,10	6,00	6,44	6,17	6,25	6,50	5,71	4,94	5,74	6,19	5,75	6,25
<b>C 17</b>	6,31	6,15	6,16	6,31	6,34	6,65	6,48	6,96	6,81	7,10	7,13	6,60	5,75	7,21	6,82	6,24	7,01
<b>PRI</b>	6,04	5,97	5,72	5,76	5,75	5,87	6,10	6,36	6,38	6,15	6,83	5,28	5,47	6,13	7,10	6,45	6,35
<b>C 18</b>	5,83	5,67	5,61	5,56	5,73	6,19	6,04	6,74	6,61	6,86	6,73	5,80	5,18	6,16	5,91	5,51	6,83
<b>PHY</b>	6,01	5,94	5,87	5,84	5,65	5,84	6,04	6,42	6,42	6,56	6,64	5,13	3,87	5,00	5,45	4,77	5,69
<b>C 19</b>	5,81	5,65	5,64	5,61	5,86	5,94	5,93	6,51	6,32	7,12	6,97	6,41	5,77	6,98	6,30	6,11	7,03
<b>C 20</b>	5,92	5,86	5,76	5,79	5,79	5,87	5,93	6,40	6,16	6,05	6,41	5,67	4,78	5,89	6,24	5,93	6,14
<b>C 21</b>	5,96	5,91	5,89	5,89	5,93	5,99	6,07	6,46	6,29	6,27	6,58	6,09	4,94	6,20	6,18	6,22	6,31
<b>C 22</b>	5,90	5,88	5,87	5,87	5,72	5,82	6,00	6,25	6,02	5,97	6,28	5,82	4,65	5,91	6,01	6,09	6,04
<b>C 23</b>	6,16	6,10	6,07	6,15	6,00	6,18	6,30	6,79	6,39	6,22	6,60	6,13	4,61	6,00	6,04	6,20	6,08
<b>C 24</b>	6,01	5,98	5,96	6,01	5,62	5,71	6,04	6,20	5,92	5,85	6,21	5,77	4,33	5,63	5,70	5,85	5,90
<b>C 25</b>	6,34	6,29	6,19	6,32	6,06	6,00	6,32	6,79	6,40	6,21	6,63	6,13	4,87	6,06	6,19	6,30	6,10
<b>C 26</b>	6,19	6,17	6,14	6,10	5,78	5,65	6,26	6,28	6,01	5,84	6,21	5,76	4,17	5,48	5,74	5,83	5,83
<b>C 27</b>	6,48	6,50	6,42	6,42	6,06	6,12	6,58	6,98	6,58	6,42	6,84	6,31	5,21	6,28	6,32	6,44	6,24
<b>C 28</b>	6,26	6,29	6,27	6,25	5,74	5,67	6,28	6,35	6,14	5,86	6,25	5,77	4,32	5,50	5,75	5,84	5,88
<b>C 29</b>	6,37	6,41	6,37	6,34	5,98	6,03	6,47	6,83	6,56	6,47	6,88	6,24	5,13	6,21	6,38	6,46	6,18
<b>C 30</b>	6,16	6,23	6,20	6,25	5,72	5,66	6,25	6,35	6,08	5,89	6,23	5,75	4,64	5,62	5,89	5,93	5,79

**Tabelle 6.16:** Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_{OC}$ -Werte) von PAK in Proben der Elbe bei Geesthacht, der Untereibe und der Deutschen Bucht.

	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
<b>NAPH</b>	5,91	5,72	5,61	5,88	4,98	5,19	5,77	5,82	6,04	5,98	6,59	5,41	4,64	5,54	5,24	5,17	5,52
<b>M2N</b>	6,13	6,03	5,97	5,82	5,09	5,56	6,03	5,40	5,90	6,69	6,83	6,08	5,05	6,06	5,72	5,62	5,52
<b>M1N</b>	5,99	5,87	5,82	5,69	5,12	5,53	5,96	5,27	5,82	6,67	6,77	6,10	4,92	6,07	5,60	5,57	5,70
<b>DMN</b>	6,66	6,51	6,47	6,47	5,29	5,79	6,42	5,53	6,08	6,80	7,03	6,11	5,25	6,09	5,97	5,76	5,89
<b>ACY</b>	6,21	5,95	6,04	6,11	5,42	4,94	5,76	5,13	5,95	5,77	6,57	5,62	5,09	5,76	5,38	5,43	5,32
<b>ACE</b>	5,59	5,25	5,03	5,52	5,63	5,90	6,14	4,86	5,99	5,61	6,61	5,39	4,92	5,53	6,22	5,96	6,63
<b>FL</b>	6,25	6,02	5,95	6,05	5,28	5,64	6,08	5,34	6,14	5,78	6,50	5,47	4,92	5,49	5,57	5,32	5,45
<b>DBT</b>	6,50	6,48	6,47	6,26	5,40	5,73	6,21	5,55	6,10	5,97	6,67	5,52	4,83	5,41	5,84	5,53	5,26
<b>PHEN</b>	6,75	6,65	6,67	6,45	5,61	5,96	6,48	5,78	6,32	6,15	6,75	5,72	5,03	5,81	6,14	5,81	5,75
<b>ANT</b>	6,59	6,58	6,80	6,52	5,95	6,40	7,02	6,11	6,89	6,60	7,30	6,46	5,75	6,68	6,39	6,31	6,60
<b>MP1</b>	7,13	6,93	6,86	6,71	5,64	5,98	6,66	5,65	6,30	6,46	7,03	5,66	5,40	5,78	5,75	5,52	5,74
<b>FLU</b>	7,04	6,98	6,99	6,87	6,15	6,52	6,91	6,24	6,75	6,49	7,21	6,38	5,66	6,64	6,65	6,40	6,24
<b>PYR</b>	6,92	6,87	6,93	6,82	5,95	6,30	6,75	6,20	6,57	6,54	7,24	6,22	5,58	6,39	6,38	6,11	6,28
<b>BaA</b>	7,05	6,95	6,83	6,81	6,62	6,90	7,29	7,01	7,09	7,00	7,73	7,28	5,60	7,55	7,13	6,90	7,06
<b>CHR/T</b>	7,18	7,02	7,01	6,92	6,17	6,63	7,09	6,64	6,76	6,88	7,45	6,86	5,88	6,97	6,55	6,42	6,71
<b>BbF</b>	7,16	7,13	6,99	6,91	6,49	6,89	7,18	7,11	7,14	7,18	7,65	7,40	6,41	7,76	7,46	7,11	7,12
<b>BkF</b>	7,21	7,13	7,11	7,01	6,56	6,96	7,24	7,18	7,21	7,25	7,72	7,46	6,48	7,82	7,64	7,24	7,19
<b>BeP</b>	7,01	6,94	6,85	6,80	6,25	6,70	7,09	6,89	6,97	7,08	7,62	7,23	6,22	7,51	6,94	6,71	6,98
<b>BaP</b>	7,18	7,01	7,02	6,95	6,60	6,95	7,28	7,20	7,14	7,27	7,74	7,67	5,62	7,72	6,97	7,02	7,59
<b>PER</b>	7,35	7,26	7,03	7,24	6,31	6,49	7,00	7,40	7,59	7,50	7,81	7,60	6,45	7,85	6,86	7,22	7,06
<b>I123P</b>	6,96	6,73	6,58	6,65	6,35	6,62	7,07	7,24	7,24	7,30	7,70	7,37	6,38	7,76	7,01	6,91	6,95
<b>DbacA</b>	6,98	6,82	6,53	6,65	6,44	6,79	7,05	7,21	7,16	7,32	7,73	7,58	6,53	8,05	6,96	7,32	7,23
<b>BghiP</b>	7,03	6,78	6,70	6,77	5,91	6,24	6,97	6,96	6,96	7,15	7,62	7,00	5,42	7,12	6,62	6,30	6,80
<b>COR</b>	6,83	6,81	6,79	6,78	5,74	5,96	6,72	6,80	6,81	6,99	7,44	6,77	5,75	6,90	6,60	6,25	6,66

**Table 6.17:** Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als log  $K_{OC}$ -Werte) von CKW in Proben der Elbe bei Geesthacht, der Untere Elbe und der Deutschen Bucht.

	Gee 1	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7	See	Sta	Cux	#30	#9	#4	#4-1	#1	#10	#36
135-TCB	5,78	5,68	5,67	5,61	5,06	5,62	6,16	5,20	5,63	7,07	7,44	7,45	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
124-TCB	4,75	4,85	4,83	5,03	4,93	5,26	5,31	4,92	5,52	6,68	7,05	6,15	4,49	6,09	4,84	k.A.	5,65
123-TCB	4,97	4,99	4,99	5,18	4,61	4,81	5,12	4,37	5,09	7,55	6,47	6,70	4,80	6,62	5,54	k.A.	k.A.
a-HCH	4,82	5,01	4,82	4,74	4,45	4,26	4,27	4,79	4,99	5,60	5,66	5,08	5,21	5,67	5,89	5,59	5,79
g-HCH	5,08	5,10	4,98	4,91	4,61	4,82	5,12	4,95	5,00	5,28	5,67	4,91	4,71	5,33	5,32	4,95	4,74
HCB	6,10	6,06	6,92	6,16	5,31	5,73	6,30	5,73	5,56	5,68	6,36	6,18	5,10	6,34	6,39	5,97	5,22
pp-DDE	6,28	6,28	6,61	6,14	6,47	6,93	6,94	6,16	6,25	6,21	7,11	6,15	6,73	7,27	6,52	6,97	7,16
pp-DDD	6,32	6,08	6,36	6,02	6,28	6,72	6,97	5,99	6,09	6,11	6,87	6,54	6,76	7,33	6,33	6,71	6,90
pp-DDT	6,68	6,64	6,93	6,57	7,16	7,53	7,63	6,42	6,40	6,45	7,32	6,30	6,42	6,78	6,84	6,83	6,05
DIEL	6,80	6,46	6,47	6,41	6,35	6,60	7,35	6,12	6,21	6,15	6,69	5,69	6,33	7,23	6,48	6,93	7,39
PCB 28	6,35	6,26	6,61	6,20	6,19	6,86	7,01	5,77	6,09	6,24	6,83	5,77	5,24	6,07	5,55	k.A.	5,90
PCB 52	6,43	6,32	6,61	6,26	6,41	6,82	7,14	6,01	6,26	6,66	7,18	6,30	5,50	6,16	5,56	6,30	6,59
PCB 101	6,22	6,12	6,26	6,18	6,52	7,06	7,26	6,09	6,23	6,28	6,91	6,30	5,87	6,62	6,03	k.A.	7,15
PCB 118	6,42	6,21	6,31	6,39	6,75	6,48	7,03	6,18	6,18	6,84	7,33	6,55	k.A.	7,41	k.A.	6,91	7,10
PCB 153	6,67	6,62	6,39	6,41	6,10	6,71	6,84	6,22	6,35	7,07	6,76	6,39	5,73	6,36	6,49	6,28	6,49
PCB 105	6,27	6,45	6,56	6,15	5,90	6,31	6,73	6,31	6,62	7,77	6,93	7,16	5,19	7,36	7,03	k.A.	6,16
PCB 138	6,46	6,36	6,37	6,40	6,03	6,53	6,79	6,34	6,41	6,63	7,18	5,16	k.A.	6,81	k.A.	6,22	k.A.
PCB 156	6,25	5,87	6,47	6,36	5,25	5,11	5,68	5,62	5,75	6,53	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
PCB 180	6,55	6,42	6,52	6,65	6,13	6,71	6,83	6,48	6,54	6,82	6,99	6,83	6,00	6,70	k.A.	k.A.	k.A.

**Tabelle 6.18:** Schwebstoff/Wasser-Verteilungskoeffizienten (als  $\log K_{OC}$ -Werte) von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden in Proben der Elbe bei Geesthacht (k.A. = keine Angabe). Eine Untersuchung von Organozinnverbindungen und N/P-Pestiziden erfolgte lediglich in den Proben Gee 2 bis Gee 7.

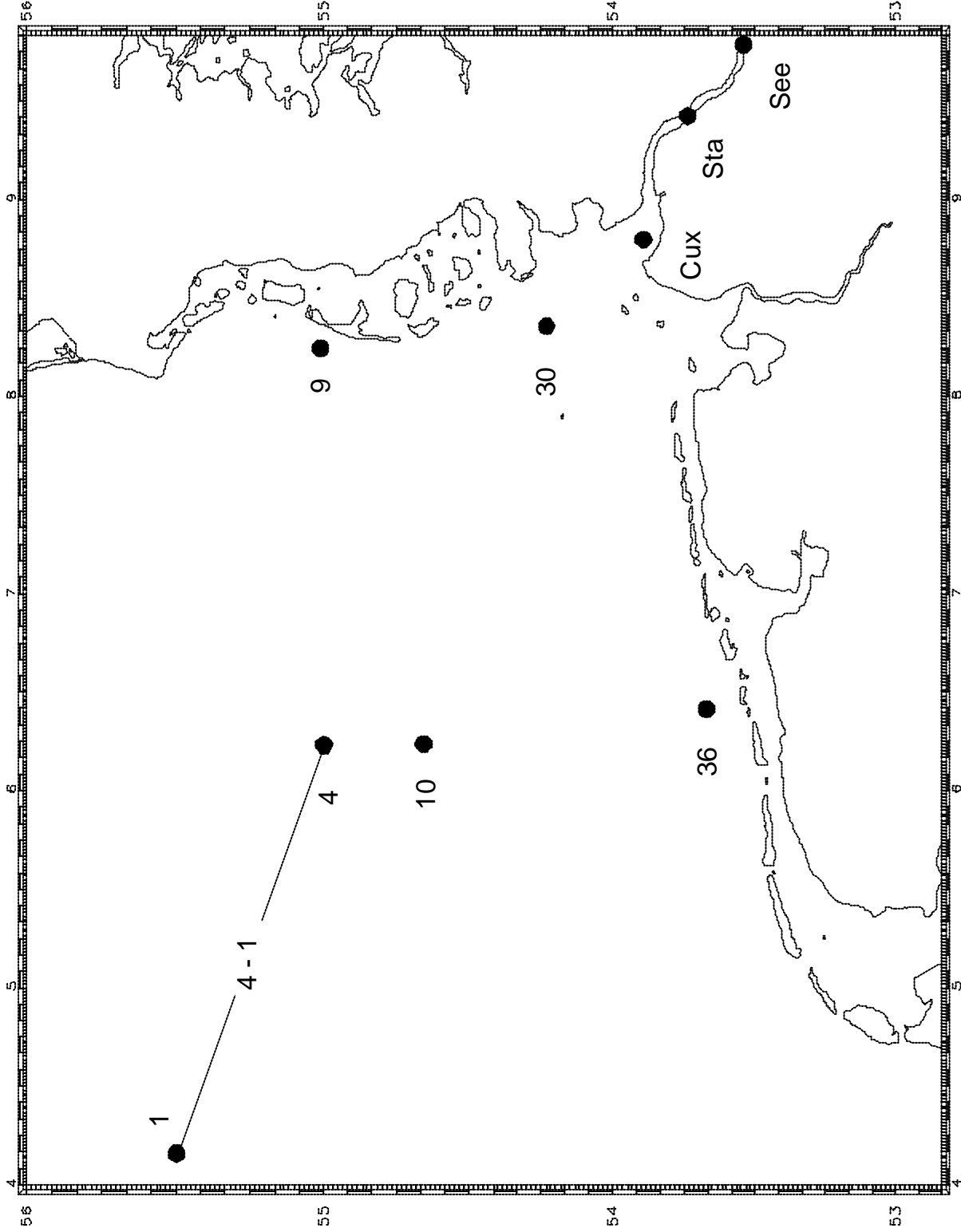
	Gee 2	Gee 3	Gee 4	Gee 5	Gee 6	Gee 7
<b>MBT</b>	5,37	5,00	5,09	5,20	5,86	5,84
<b>DIBT</b>	6,09	5,59	5,51	4,71	5,86	6,27
<b>TrBT</b>	6,56	6,48	k.A.	5,33	5,82	5,94
<b>TeBT</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>MOT</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>DOT</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>THT</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>TPT</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>DIM</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>PAR</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>DEA</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>ATR</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>SIM</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>PROP</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>PROM</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>AME</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>DES</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>TER</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>HEX</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.
<b>LEN</b>	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.



**Table 6.19:** Variationsbreite von Verteilungskoeffizienten bei einer mittleren Standardabweichung (RSD) von 7,3 % sowie Rechenbeispiele für die Konzentrationsbestimmung in der flüssigen und der festen Phase auf der Grundlage von log K<sub>OC</sub>-Werten.

log K <sub>OC</sub>	4,0	5,0	6,0	7,0	8,0
log K <sub>OC</sub> - RSD	3,71	4,64	5,56	6,49	7,42
log K <sub>OC</sub> + RSD	4,29	5,37	6,44	7,51	8,58
Faktor Maximum/Minimum	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2
K <sub>OC</sub> -RSD	5105	43152	364754	3083188	26061535
K <sub>OC</sub> +RSD	19588	231739	2741574	32433962	383707245
Faktor Maximum/Minimum	3,8	5,4	7,5	10,5	14,7
Annahme 10 Gew.-% TOC					
K <sub>p</sub> -RSD	511	4315	36475	308319	2606154
K <sub>p</sub> +RSD	1959	23174	274157	3243396	38370725
Faktor Maximum/Minimum	3,8	5,4	7,5	10,5	14,7
1. Best. der Konz. in korrespondierender flüssiger Phase aus Schwebstoffuntersuchung					
Annahme: Konz. in fester Phase beträgt 10, 50, 100, 500 u. 1000 n/g TM					
max. Konz.fl Phase [ng/L]	19,6	11,6	2,74	1,62	0,384
min. Konz.fl Phase [ng/L]	5,1	2,2	0,36	0,15	0,026
Faktor Maximum/Minimum	3,8	5,4	7,5	10,5	14,7
Annahme: 10 mg/L SPM					
max. Konz. Ges. Wasserk. [ng/L]	19,7	12,1	3,7	6,6	10,4
min. Konz. Ges. Wasserk. [ng/L]	5,2	2,7	1,4	5,2	10,0
Faktor Maximum/Minimum	3,8	4,5	2,7	1,3	1,0
2. Bestimmung der Konzentration in korrespondierender fester Phase aus Filtratuntersuchung					
Annahme: Konz. in flüssiger Phase beträgt 100, 50, 10, 5 u. 1 ng/L					
max. Konz. SPM [ng/g TM]	196	1159	2742	16217	38371
min. Konz. SPM [ng/g TM]	51	216	365	1542	2606
Faktor Maximum/Minimum	3,8	5,4	7,5	10,5	14,7
Annahme: 10 mg/L SPM					
max. Konz. Ges. Wasserk. [ng/L]	1002	1012	1027	1162	1384
min. Konz. Ges. Wasserk. [ng/L]	1001	1002	1004	1015	1026
Faktor Maximum/Minimum	1,0	1,0	1,0	1,1	1,3

**Abbildung 6.1:** Probenahmestationen der Untereibe und der Deutschen Bucht während der Forschungsfahrt G 299 (FS Gauss).



## 7 LITERATUR

- [1] S.I. KAYAL; D.W. CONNELL "Partitioning of Unsubstituted PAH between Surface Sediments and the Water in the Brisbane River Estuary." *Aust. J. Mar. Freshwater* 41, (1990), S. 443-456.
- [2] B.G. WHITEHOUSE "Observation of Abnormal Solubility Behaviour of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Seawater." *Mar. Chem.* 17, (1985), S. 277-284.
- [3] J.E. BAKER; P.D. CAPEL; S.J. EISENREICH "Influence of Colloids on Sediment-Water Partition Coefficients of Polychlorobiphenyl Congeners in Natural Waters." *Environ. Sci. Technol.* 20, (1986), S. 1136-1143.
- [4] P.M. GSCHWEND; S.C. WU "On the Constancy of Sediment-Water Partition Coefficients of Hydrophobic Organic Pollutants." *Environ. Sci. Technol.* 19, (1985), Nr. 1, S. 90-96.
- [5] W.J.M. HEGEMAN; C.H. VAN DER WEIJDEN; J.P.G. LOCH "Sorption of Benzo(a)pyrene and Phenanthrene on Suspended Harbor Sediment as a Function of Suspended Sediment Concentration and Salinity: A Laboratory Study Using the Co-solvent Partition Coefficient." *Environ. Sci. Technol.* 29, (1995), Nr. 2, S. 363-371.
- [6] J.C. MEANS "Influence of Salinity upon Sediment-Water Partitioning of Aromatic Hydrocarbons." *Mar. Chem.* 51, (1995), Nr. 1, S. 3-16.
- [7] A.O. TYLER; A. TURNER; G.E. MILLWARD "An Investigation into the Partitioning of Polychlorinated Dibenzodioxins and Polychlorinated Biphenyls in Estuaries." *Organohalogen Compd.* 20, (1994), Nr. 20, S. 121-124.
- [8] B.G. WHITEHOUSE "The Effects of Temperature and Salinity on the Aqueous Solubility of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons." *Mar. Chem.* 14, (1984), S. 319-332.
- [9] B.J. BERGEN; W.G. NELSON; R.J. PRUELL "Partitioning of Polychlorinated Biphenyl Congeners in the Seawater of New Bedford Harbor, Massachusetts." *Environ. Sci. Technol.* 27, (1993), Nr. 5, S. 938-942.
- [10] W.L. LANGSTON; N.D. POPE "Determination of TBT Adsorption and Desorption in Estuarine Sediments." *Mar. Pollut. Bull.* 31, (1995), Nr. 1-3, S. 32-43.
- [11] R.D. WIJAYARATNE; J.C. MEANS "Sorption of Polycyclic Aromatic Hydro-

carbons by Natural Estuarine Colloids." *Mar. Environ. Res.* 11, (1984), S. 77-89.

[12] C.H. SUJATHA; S.M. NAIR; J. CHAKO "Sorption of Malathion and Methylparathion by Tropical Aquatic Sediments: Influence of pH." *Toxicol. Environ. Chem.* 41, (1994), S. 47-55.

[13] D.J. CONNOR; J.P. CONNOLLY "The Effect of Concentration of Adsorbing Solids on the Partition Coefficient." *Water Res.* 14, (1980), S. 1517-1523.

[14] J.M. BANNON; T.E. MYERS; J.C. PENNINGTON; C.B. PRICE "The Effect of Solids Concentration on PCB Partitioning in Spiked, Anaerobic and Oxidized Sediments." *Toxicol. Environ. Chem.* 43, (1994), S. 23-39.

[15] J.C. DUINKER "The Role of Small, Low Density Particles on the Partition of Selected PCB Congeners Between Water and Suspended Matter (North Sea Area)." *Neth. J. Sea Res.* 20, (1986), S. 229-238.

[16] T.C. VOICE; W.J. WEBER "Sorbent Concentration Effects in Liquid/Solid Partitioning." *Environ. Sci. Technol.* 19, (1985), S. 789-796.

[17] J.C. MEANS; S.G. WOOD; J.J. HASSETT; W.L. BANWART "Sorption of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons by Sediments and Soils." *Environ. Sci. Technol.* 14, (1980), S. 1524-1528.

[18] J.C. MEANS; S.G. WOOD; J.J. HASSETT; W.L. BANWART "Sorption of Amino- and Carboxy-Substituted Polycyclic Aromatic Hydrocarbons by Sediments and Soils." *Environ. Sci. Technol.* 16, (1982), S. 93-98.

[19] O.P. HEEMKEN "Optimierung der überkritischen Fluidextraktion und der beschleunigten Lösemittelextraktion für Untersuchungen zu Eintrag und Verteilung organischer Kontaminanten in der Nordsee" Dissertation, Shaker Verlag, Aachen (1997), S. 1-299, ISBN 3-8265-3072-1.

[20] O.P. HEEMKEN; N. THEOBALD; B.W. WENCLAWIAK "Comparison of ASE and SFE with Soxhlet, Sonication and Methanolic Saponification Extractions for the Determination of Organic Micropollutants in Marine Particulate Matter." *Anal. Chem.* 69, (1997), S. 2171-2180.

[21] R.C. Weast; M.J. Astle; W.H. Beyer (Hersg.) "Handbook of Chemistry and Physics" CRC Press, Inc. Boca Raton (1986-87).

- [22] RÖMPP (Hersg.) "CD Chemie Lexikon - Version 1.0." Georg Thieme Verlag, Stuttgart New York (1995).
- [23] V. LANG "Review: Polychlorinated Biphenyls in the Environment." J. Chromatogr. 595, (1992), S. 1-43.
- [24] F.I. ONUSKA B.K. Afghan; A.S.Y. Chau (Hersg.) "Analysis of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Environmental Samples /Analysis of Trace Organics in the Aquatic Environment." CRC Press, Inc. (1989), S. 205-242.
- [25] A.NOBLE "Partition Coefficients (n-octanol-water) for Pesticides." J. Chromatogr. 642, (1993), S. 3-14.
- [26] D.W. HAWKER; D.W. CONNELL "Octanol-Water Partition Coefficients of Polychlorinated Biphenyl Congeners." Environ. Sci. Technol. 22, (1988), S. 383-387.
- [27] J. DE BRUIJN; F. BUSSE; W. SEINEN; J. HERMENS "Determination of Octanol/Water Partition Coefficients for Hydrophobic Organic Chemicals with the "Slow-Stirring Method"." Environ. Toxicol. Chem. 8, (1989), S. 499-512.
- [28] W.J. DOUCETTE; A.W. ANDREN "Estimation of Octanol/Water Partition Coefficients: Evaluation of six Methods for Highly Hydrophobic Aromatic Hydrocarbons." Chemosphere 17, (1988), S. 345-359.
- [29] M.M. MILLER; S.P. WASIK; G.L. HUANG; W.Y. SHIU; D. MACKAY "Relationships between Octanol-Water Partition Coefficient and Aqueous Solubility." Environ. Sci. Technol. 19, (1985), S. 522-529.
- [30] M.J. KAMLET "Parameter Estimation Rules that allow accurate Prediction of Octanol/Water Partition Coefficients and other Solubility and Toxicity Properties of Polychlorinated Biphenyls and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons." Environ. Sci. Technol. 22, (1988), Nr. 5, S. 503-509.
- [31] B. STURM "Ein System zur automatischen und ferngesteuerten Probenahme von organischen Verunreinigungen in Küstengewässern: Untersuchung zur Festphasenextraktion ausgewählter chlorierter und polycyclisch-aromatischer Kohlenwasserstoffe unter besonderer Berücksichtigung des Einflusses von Huminstoffen." Dissertation, Universität Hannover (1996).
- [32] H. GÜSTEN; D. HORVATIC; A. SABLJIC "Modelling N-Octanol/Water Parti-

tion Coefficients by Molecular Topology: Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and their Alkyl Derivates." *Chemosphere* (1991), Nr. 2, S. 199-213.

[33] S.H. YALKOWSKY; S.C. VALVANI "Relationships between Aqueous Solubilities, Partition Coefficients and Molecular Surface Areas of Rigid Aromatic Hydrocarbons." *J. Chem. Eng. Data* 24, (1979), S. 127-129.

[34] J. SANGSTER "Octanol-Water Partition Coefficients of Simple Organic Compounds." *J. Phys. Chem. Ref. Data* 18, (1989), Nr. 3, S. 1111-1227.

[35] N.N. NIRMALAKHANDAN; R.E. SPEECE "Prediction of Aqueous Solubility of Organic Chemicals based on Molecular Structure. 2. Application to PNAs, PCBs, PCDDs, etc." *Environ. Sci. Technol.* 23, (1989), S. 708-713.

[36] R.P. SCHWARZENBACH; P.M. GSCHWEND; D.M. IMBODEN (Hersg.) "Environmental Organic Chemistry." John Wiley & Sons, Inc. (1993), S. 818-825.

[37] A.J. NIIMI "Solubility of Organic Chemicals in Octanol, Triolein and Cod Liver Oil and Relationships between Solubility and Partition Coefficients." *Wat. Res.* 25, (1991), Nr. 12, S. 1515-1521.

[38] W.E. MAY; S.P. WASIK "Determination of the Solubility Behavior of some Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Water." *Anal. Chem.* 50, (1978), S. 997-1000.

[39] W.W. DAVIS; M.E. KRAHL; G.H.A CLOWES "Solubility of Carcinogenic and Related Hydrocarbones in Water." *J. Am. Chem. Soc.* 64, (1942), S. 108-110.

[40] D. MACKAY; W.Y. SHIU "Aqueous Solubility of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons." *J. Chem. Eng. Data* 22, (1977), Nr. 4, S. 399-402.

[41] J. NEFF "Bioaccumulation of Organic Micropollutants from Sediments and Suspended Particulates by Aquatic Animals." *Fresenius Z. Anal. Chem.* 319, (1984), S. 132-136.

[42] W.J. ADAMS K.L. Dickson; A.W. Maki; W.A. Brungs (Hersg.) "Bioavailability of Neutral Liphophilic Organic Chemicals Contained in Sediments: A Review." in: *Fate and Effects of Sediment-Bound Chemicals in Aquatic Systems*, Pergamon Press, New York (1987), S. 219-244.

[43] S.W. KARICKHOFF; D.S. BROWN; T.A. SCOTT "Sorption of Hydrophobic Pollutants on Natural Sediments." *Water Res.* 13, (1979), S. 241-248.

- [44] D.S. BROWN; E.W. FLAGG "Empirical Prediction of Organic Pollutant Sorption in Natural Sediments." *J. Environ. Qual.* 10, (1981), Nr. 3, S. 382-386.
- [45] C.T. CHIOU; L.J. PETERS; V.H. FREED "A Physical Concept of Soil-Water Equilibria for Nonionic Organic Compounds." *Science* 206, (1979), S. 831-832.
- [46] C.T. CHIOU; P.E. PORTER; D.W. SCHMEDDING "Partition Equilibria of Nonionic Organic Compounds between Soil Organic Matter and Water." *Environ. Sci. Technol.* 17, (1983), S. 227-231.
- [47] W. WHIPPLE; J.V. HUNTER "Petroleum Hydrocarbons in Urban Runoff." *Water Resour. Res.* 15, (1979), S. 1096-1105.
- [48] S.P. PAVLOU; R.A. BAKER (Hersg.) "Contaminants and Sediments, Analysis, Chemistry, Biology." Ann Arbor Science Publishers Inc., MI (1980), S. 323-332.
- [49] M.I. VENKATESAN "Occurrence and Possible Sources of Perylene in Marine Sediments - A Review." *Mar. Chem.* 25, (1988), S. 1-27.
- [50] Z. AIZENSHTAT "Perylene and its Geochemical Significance." *Geochim. Cosmochim. Acta* 37, (1973), S. 559-567.
- [51] W.J. LYMAN; W.F. REEHL; D.H. ROSENBLATT (Hersg.) "Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Environmental Behaviour of Organic Compounds." McGraw-Hill Book Company, New York (1982).
- [52] J.E. BAKER; S.J. EISENREICH; D.L. SWACKHAMER; R.A. BAKER (Hersg.) "Field-Measured Associations between Polychlorinated Biphenyls and Suspended Solids in Natural Waters: An Evaluation of Partitioning Paradigm." in: *Organic Substances and Sediments in Water, II*, Am. Chem. Soc., Washington (1991), S. 79-89.
- [53] N. THEOBALD, W. LANGE, A. RAVE, U. POHLE, P. KOENNCKE "Ein 100 l Glaskugelschöpfer zur kontaminationsfreien Entnahme von Seewasser für die Analyse lipophiler organischer Stoff" *Dt. Hydrogr. Z.* 43 (1990), S- 311-322.
- [54] D. STERZENBACH "Entwicklung eines Analyseverfahrens zur Bestimmung von chlorierten Kohlenwasserstoffen in marinen Sedimenten und Schwebstoffen unter besonderer Berücksichtigung der überkritischen Fluidextraktion" Dissertation, Shaker Verlag, Aachen (1997), S. 1-230, ISBN 3-8265-2450-0.