

Austrag und Abbau von Aufbereitungshilfsstoffen  
(AHS) aus den Prozessen der Kalirohsalzaufberei-  
tung im Werk Werra am Beispiel ausgewählter  
Carbonsäuren

# Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften  
(Dr. rer. nat.)

der Naturwissenschaftlichen Fakultät II  
Chemie, Physik und Mathematik

der Martin-Luther-Universität  
Halle-Wittenberg

vorgelegt von

M. Sc. Juliane Apelt  
geb. am 23.12.1990 in Eisenach

Gutachter:

1. Prof. Dr. Wilhelm Georg Lorenz
2. Dr. habil. Helko Borsdorf

Tag der Verteidigung: 19. Februar 2021

)

)

o h k

)

" = h ) † 8 0 " Mo  
o U M Mo  
u = h ) 8  
" = ) " u -

" Mo " u #  
Mo ° - 7 "

= ) † ) o ) - -  
= k ) 7 -  
-

U ) = ) o ) " ) U  
y ) k 7 ) U  
M k y ° -

) U Mo ° - 7 0 y -

o °  
= - U )

8 -  
" M ° K #

- y 8 °

@ 7 7

-

M

@M

k

Mo

t

#

7

t

Mo

t

t

o

o

h

@

h

#

"

o

h

t

-

-

y

\

=h0# UoUo - K

"

7

h

8

@

t

=

k

)

#

U

O

~

y

#

k

y

@

Mo

t

Mo

t

t

u

=h0# UoUo

h

8

@

u

V ) k

) @ - o -

h

° =o°

° # °



° h°

Atmospheric Pressure

° h@

@

Atmospheric Pressure Ionisation

° h#@

#

@

Atmospheric Pressure Chemical Ionisation

° hh@

h

Atmospheric Pressure Photoionisation

° uh°

" 8 "

" ° "

=

# °

#

# \ °

M

# ° °

#

# \ \ = °

#

# # °

M



) \ # °

8

M

Dissolved Organic Carbon

- o@ °

-

@

- ou °

-

7 °

-

7 " °

-



7 # °

-



= hG# °

=

High Pressure Liquid Chromatography

@ = °

International Centerence on Harmonisation

@ °

@

-

o)	o	
h	h	
m/z	U	O
U-#		M
U-	U	
UkU		<i>Multiple Reaction Monitoring</i>
UoUo	u	U
V°)	V	
V8	V	
\=	=	
h°M		M
h7†	h	
M	o	
hV-#	V	M
k#k	k	<i>Risk Characterisation Ratio</i>
k-°#=#	†	-8
<i>Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals</i>		
o-†	o	
	o	
oh-	7	<i>Solid Phase Extraction</i>
okU		<i>Selected Reaction Monitoring</i>
	=	
u8)	u	O
u@	u	
uV	8	o
u\#	8	M
y†	y	
‡ 7k	‡	
		<i>Technical Guidance Document on Risk Assessment Part II</i>
		<i>Total Nitrogen bound</i>
		<i>Total Organic Carbon</i>

**Inhaltsverzeichnis**

<b>Danksagung</b>	<b>II</b>
<b>Kurzfassung</b>	<b>III</b>
<b>Abstract</b>	<b>III</b>
<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>IV</b>
<b>Inhaltsverzeichnis</b>	<b>VI</b>
<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Theoretischer Teil</b>	<b>4</b>
-	.....
#	.....
# 8 " k	.....
) U	.....
U	.....
7	.....
7	.....
U	.....
y	.....
<b>3. Materialien und Methoden</b>	<b>31</b>
8 #	.....
8 †	.....
#	.....
-	.....
h	.....
U	.....
j	.....
<b>4. Untersuchung des betrachteten Fließgewässerabschnitts</b>	<b>39</b>
h h	.....
# - h	.....
" 7	.....
7	.....

<b>5. Untersuchungen zum Abbau der aromatischen Carbonsäuren</b>	<b>58</b>
U	#
M	
u	
O	
y	U
	#
	7
	#
	7
V	M
-	M
=	
y	U
<b>6. Ökotoxikologische Bewertung</b>	<b>102</b>
<b>7. Zusammenfassung</b>	<b>104</b>
<b>8. Abstract</b>	<b>106</b>
<b>9. Literaturverzeichnis</b>	<b>VIII</b>
<b>10. Abbildungsverzeichnis</b>	<b>XVII</b>
<b>11. Tabellenverzeichnis</b>	<b>XXII</b>
<b>12. Anhang</b>	<b>XXVII</b>
<b>13. Eidesstattliche Erklärung</b>	<b>CXI</b>
<b>14. Lebenslauf</b>	<b>CXII</b>

# 1. Einleitung

@ K † 8 = u  
M ) ° 8 †  
K Mo8 = Mo°  
o M † ) k  
† † MoU ° 8 = o -  
o - @ " h O -  
° - † † o † =  
= h y y  
) k 8 U °  
# = o )  
= = V # M U o\ · = \ # MU # · = \  
o M# ) † k y  
V † °  
o @ ° -  
U †  
@ O - M 8 -  
M ) = -  
7 u ) -  
= h "  
o h k M -  
) O u ~  
O - M o M -  
" o M - 8 M  
k = ° o -  
7 ~ - =  
† ° o O -  
V ) O o -  
U U = 7  
o " M ) U -



o o o V -  
7 = U o  
U - 7 = -  
V " u ) °  
-ou° ° h  
" u 7 )  
k o M  
" o ° o  
@ = † o  
M k V #  
" 7 u -  
M 8 † )  
° † O  
7 V # 7  
° - - ° h Mo  
) k M -  
- ) k -  
= † = u -  
) - o † o  
h y - † - -  
k @ k U  
h 7 y -  
† ° ) -  
h 7 o o -  
@ k h -  
† ° M -  
- ° † 7 -  
°  
k -  
o ° #

- ) y  
°=o' h M † † " °  
# - j =h# UoUo  
U ) °=o' # °  
- 'k " M  
# # " - ° h  
7 h  
U °  
) = ° 8 † † °  
7 U = ° ) † † † °  
# ° † M ° o  
- M °  
o °

## 2. Theoretischer Teil

### 2.1 Elektrostatisches Aufbereitungsverfahren

) ... u ... -ou t ...  
Mo ... u ... U ... 7  
) @ ... k ... h ...  
... @ ... t ...  
... u ... M ...  
o

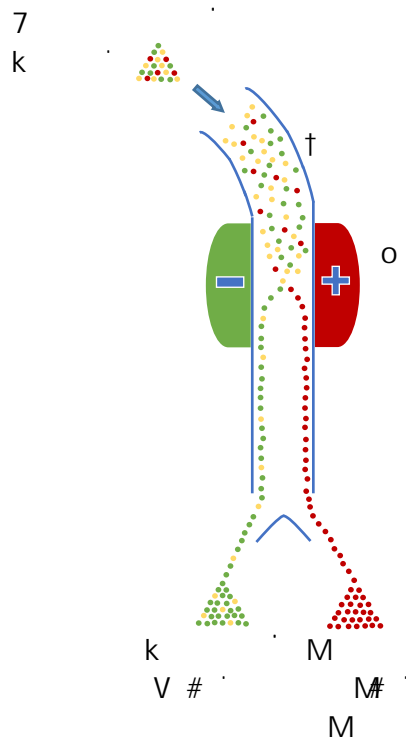
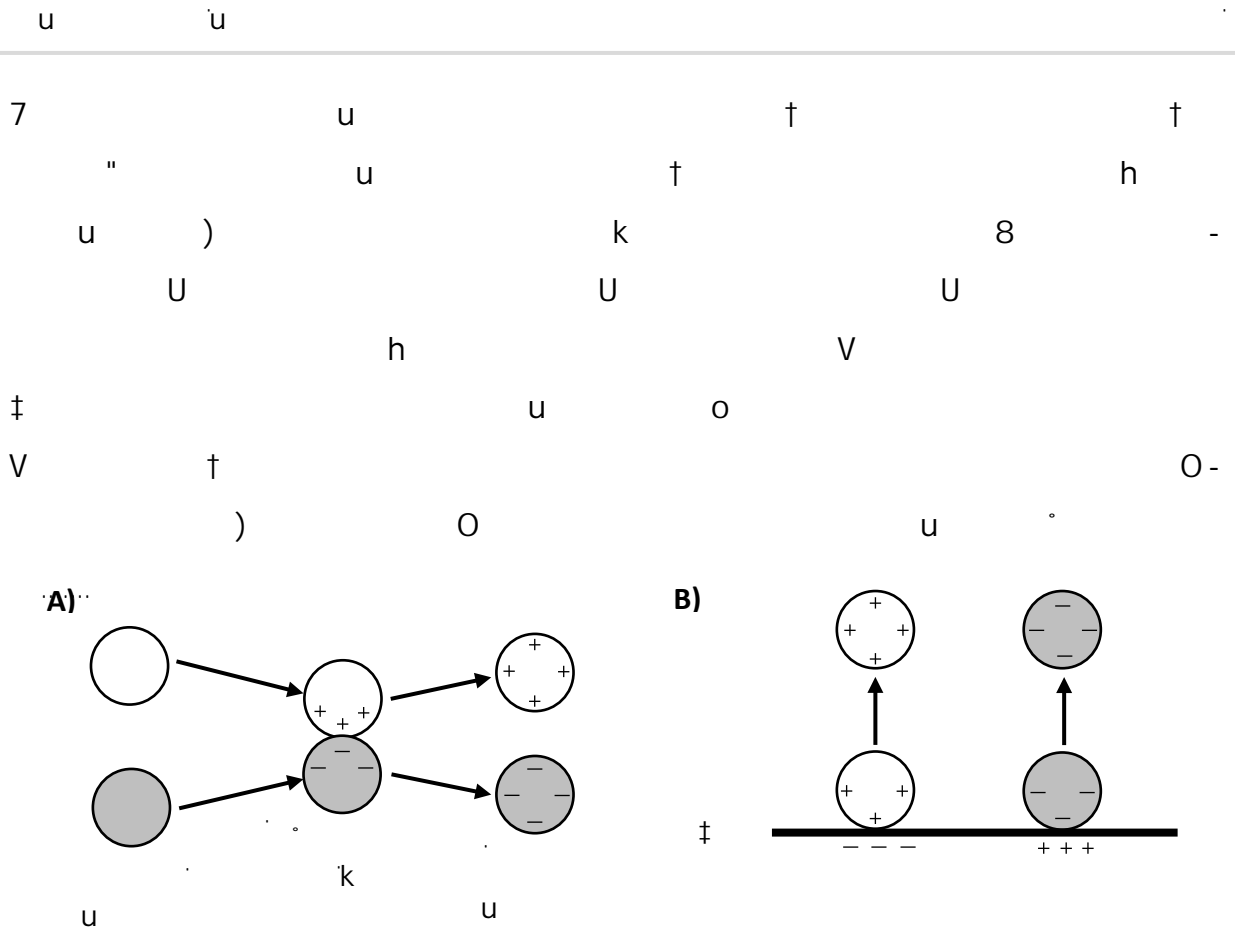


Abbildung 1: Trennung der Salzmineralien mittels ESTA

) t ... h ... O ... u ... t ...  
o h ...  
y ... O ... u ... o ...  
8 ... U ... = ...  
... = ... u ... u ... U ...  
... o ... 7 ... M ... U ...  
t ... u ... k ... M ...



**Abbildung 2: Triboelektrische Aufladung von Teilchen**

**A) Teilchen-Teilchen-Kontakt; B) Teilchen-Wand-Kontakt**

) ... .. " .. u  
 ) 7 # .. 8 7 k u  
 7 -ou† .. O .. U  
 ) † .. k  
 .. 7 .. ) - M  
 .. O .. u .. U  
 ) .. M .. - ..  
 .. .. k .. = .. h  
 " o # .. M .. M .. o  
 † .. ..

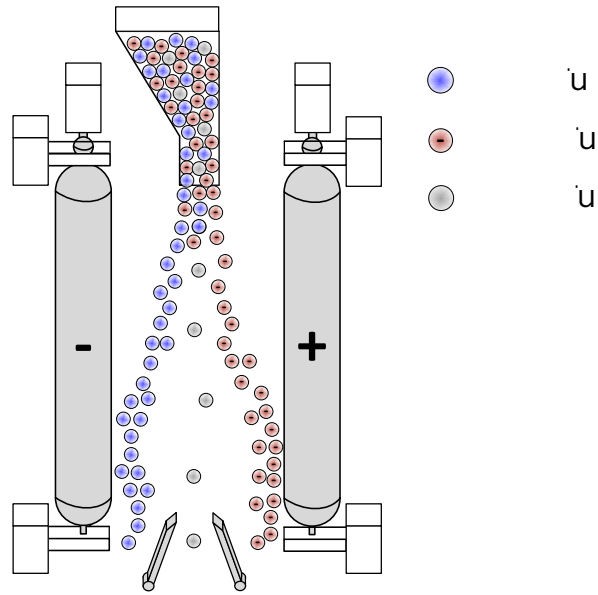


Abbildung 3: Rohr-Freifall-Scheider

) u U k -7 -0 ° -  
 - - 7 -  
 u h  
 V ‡ M ° U -  
 O ) † - -  
 M o k  
 = - 7 @ °  
 7 u ‡ ‡ -

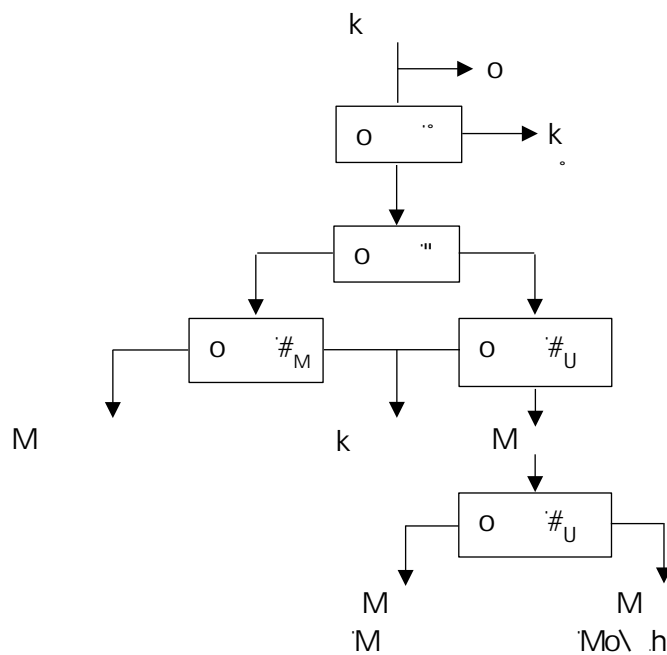


Abbildung 4: Fließbild einer elektrostatischen Trennanlage von K+S

## 2.2 Aromatische Carbonsäuren

#

@ @ k = M U

# o M

=

" ) h

o V t 7 " "

= = h o " h

M

- # " o o

t h

) t h h

k o k U o ‡

o t ‡

o k t V h o

o M k

o ‡ 7 o

h " o h

o ‡ h - u

o " h - )

) o - "

- o =

) - = -

) o ) V

- V " o

- " h 7 o

o " h

o # ‡

o t M = 7

h @ O " o

- M ) ‡ t

u

u

# h k =  
 h h 7 "  
 @ = h " M  
 - h o  
 @ M  
 M  
 ) #  
 † h † y  
 ) †  
 o # -  
 h# h  
 - " y #  
 u o

**Tabelle 1: Physikalisch-chemische Eigenschaften der eingesetzten Carbonsäuren**

#	o )	M #	† # O	\ † † † M†	o M M#	) # u
o	#					-
k	#					-
-	#		#			-
"	#					
#						-

j

u

**Tabelle 2: Physikalisch-chemische Eigenschaften der mögliche Reaktionsprodukte**

#	o )	M #	† # O	\ † M†	o M M#	) # u
#	#	.	.	.	.	-
#	#	.	.	.	.	-
#	#	.	.	.	.	-
#	#	.	.	.	.	-
#	#	.	.	.	.	-
"	#	.	.	.	.	-
"	#	.	.	.	.	-
"	#	.	.	.	.	-

j u

# † u ) † 7

o † †

M † h 8

h 8

M  $\frac{\#}{\# \dagger}$

o † O † ) †

o ) M U 7 †

h 8

o † )



u u

---

h - k ) t O "

o " t " \

) ~ " O

- h ))u' O t ) ‡

\ ‡ ‡

‡ " o h ‡ )

# O O

‡ ) ) ‡

8 - M " \ ‡ ‡

M ) ‡ \

O 7 ) M ‡

O ‡ M ‡ )

# ‡ M

‡ ) \ 7

) M y #

- k y

**2.3 Chemische Grundlage der Bildung der Reaktionsprodukte**

) o ) o

t h h

) h Mo

- V -ou' t M o

# k ‡

" 8

= o

) = o

o k k k

o y t O ‡ ) k

M U o ) "

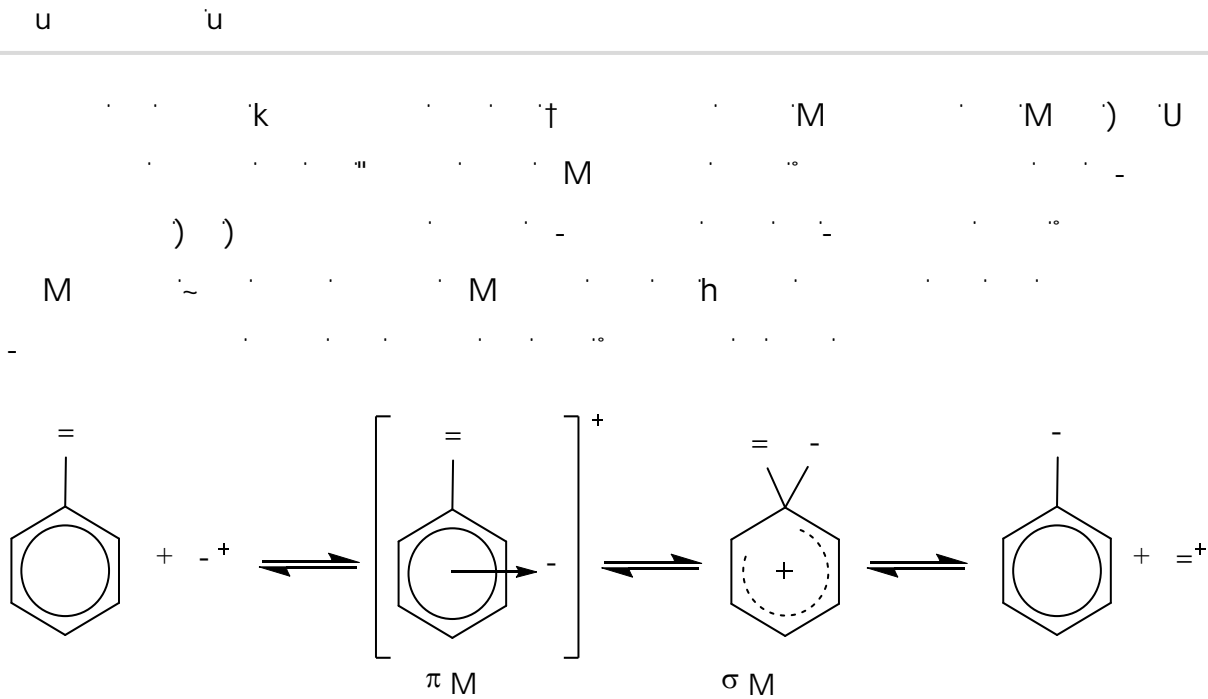
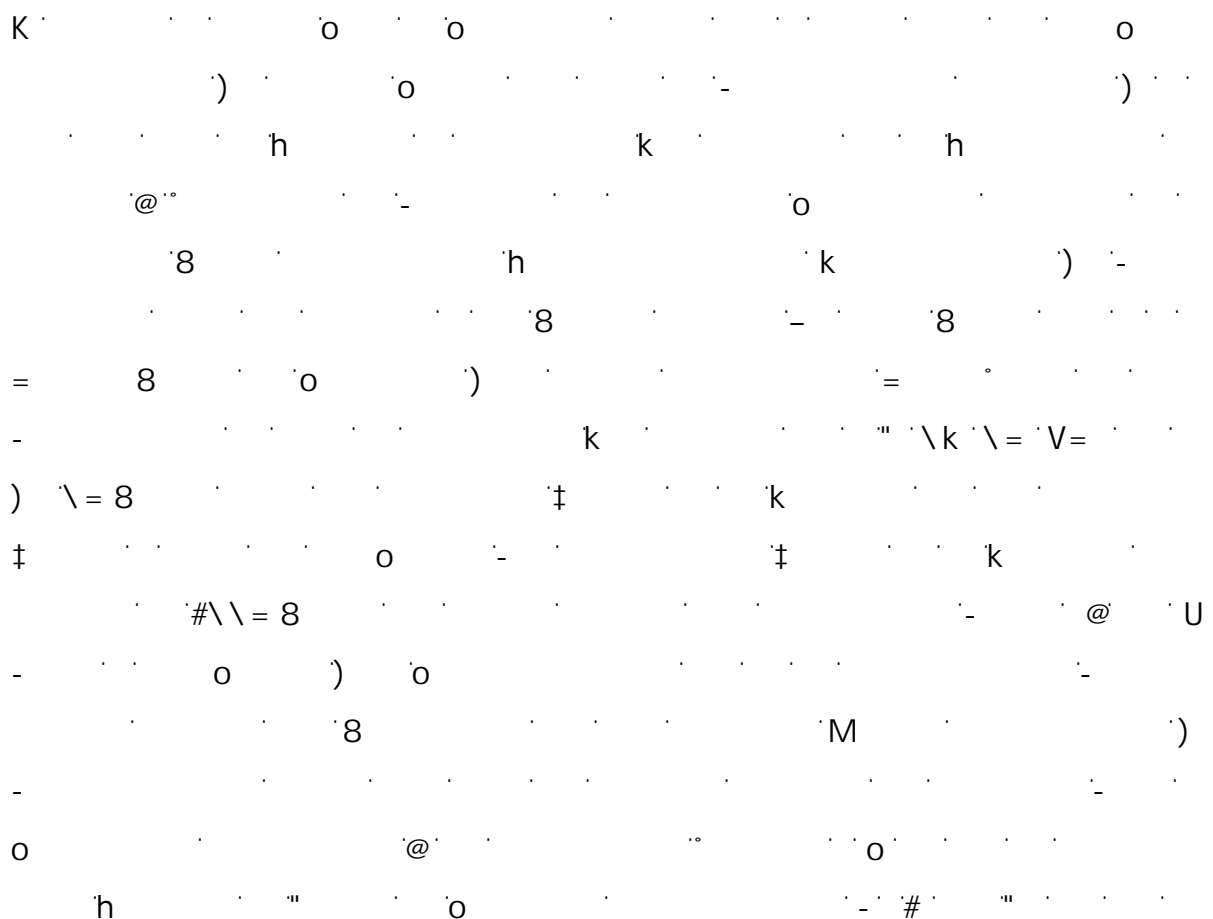


Abbildung 5: Mechanismus der elektrophilen aromatischen Substitution (E = Cl, Br)



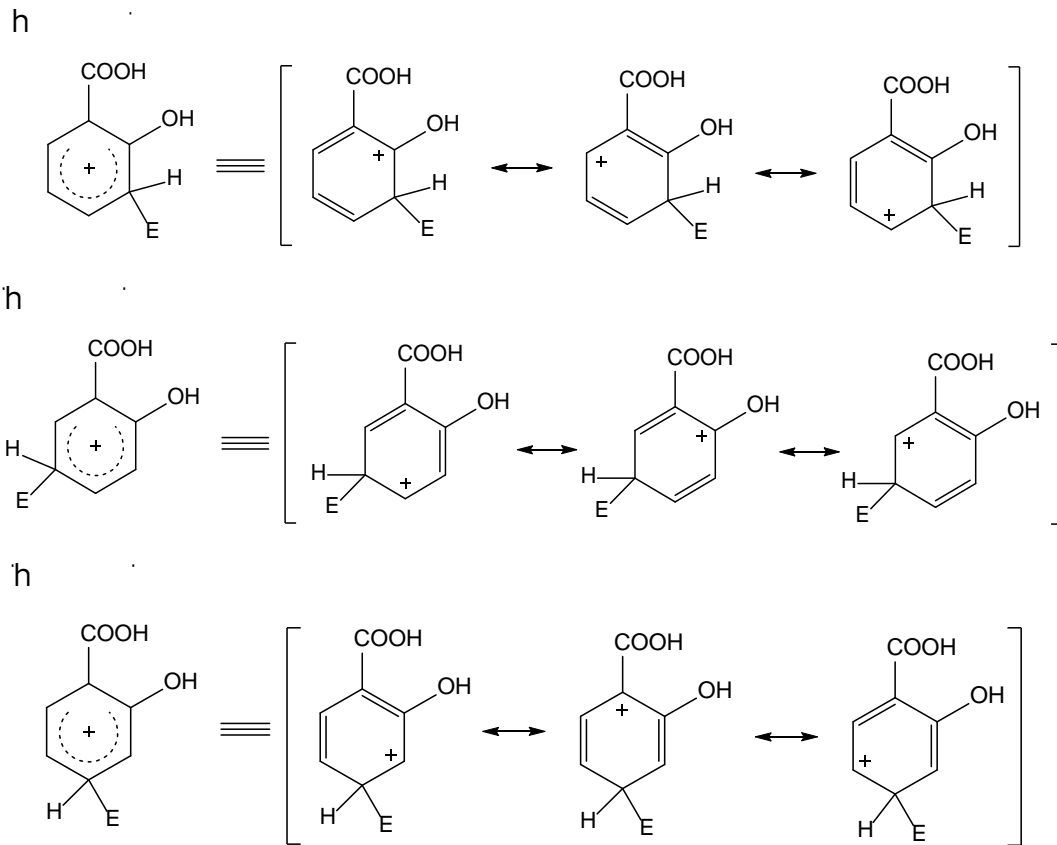


Abbildung 6: Substitutionsmuster am Beispiel der Salicylsäure

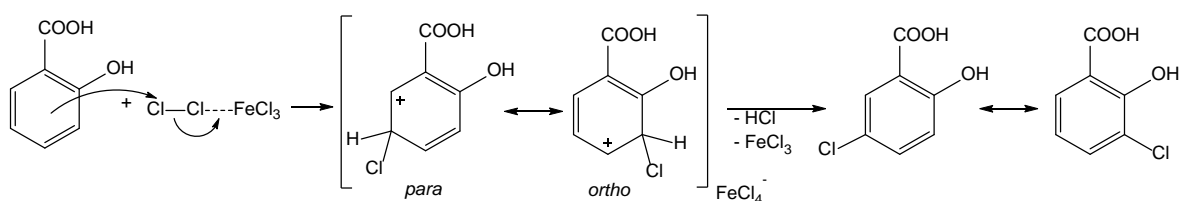
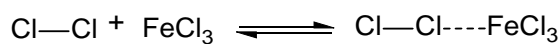
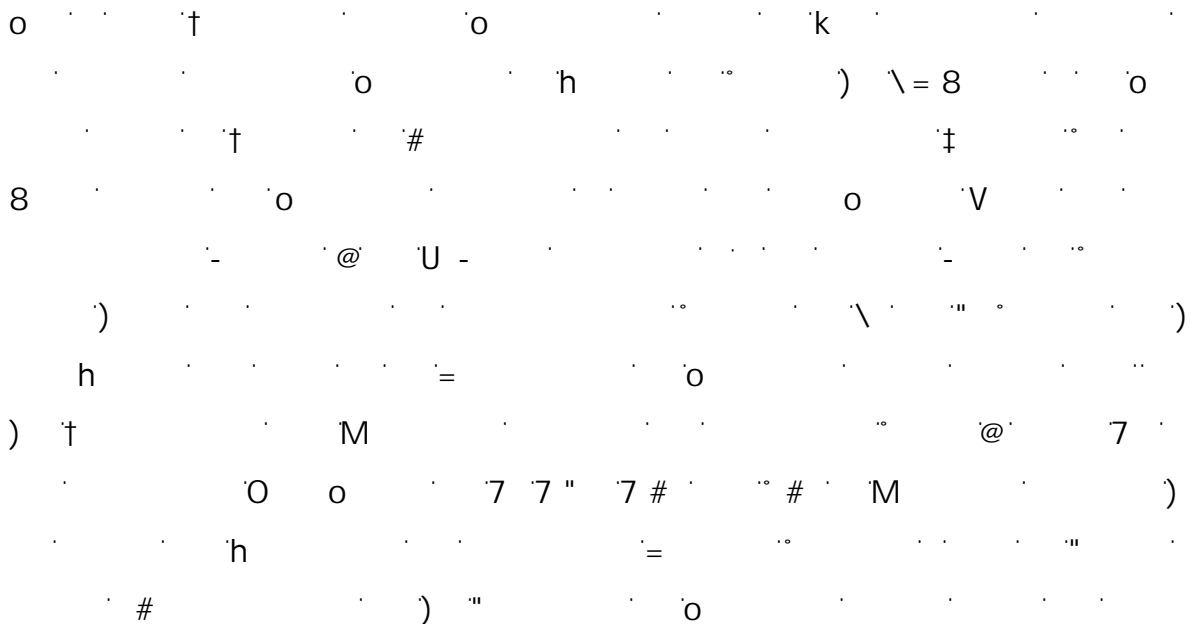


Abbildung 7: Bildung der 3- bzw. 5-Chlorsalicylsäure

## 2.4 Degradation und Mineralisation

# y 7  
u h o )  
‡ V h ) )  
- † y  
- †  
† y h O ‡ " " U  
h ) u h  
= k k  
) " k  
\ ‡ @  
# y  
† † h  
† ‡ M - u  
# y U o  
= h  
@ V ) †  
V  
o y  
@ U o  
M ) o † 7  
)  
‡ ) h † o  
h " # o  
U o h  
)  
y " u = ‡ o U  
o h  
- k  
o k † o  
- " U k u )

u u  

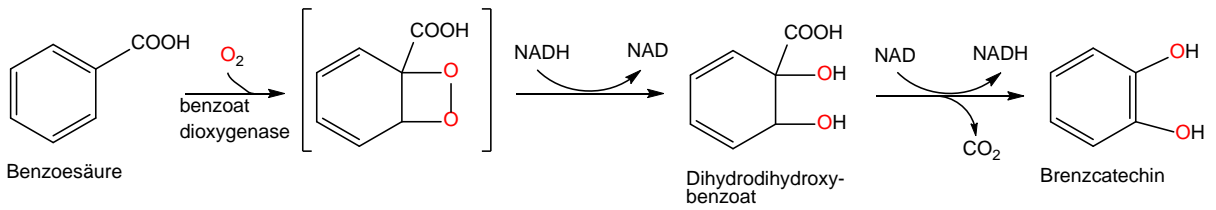

---

 h 8 -  
 U - u -  
 y k o = β-- -  
 k -k ‡ h h  
 ) M ) h 8 † -  
 o ° 8 8 O † -  
 \ V u 8 o -  
 o @  
 o - h  
 h O o o -  
 k V V ‡ U  
 " u - = 8  
 k " M \=-k k -  
 o " #  
 " ° U  
 U ) ° " 8 -  
 o ) †  
 † U u U -  
 ) - " h - -  
 7 U ‡ " °  
 ) ° @ \ u  
 o ~ U o  
 ° # ) #  
 ° " = °  
 o U ° -  
 † ) " ° -  
 " Œ " -u -  
 " ° " -  
 ) ° \ -

*Pseudomonaden*

Tabelle 3: Übersicht an Mikroorganismen

U	†	‡ o	†
<i>Arthrobacter sp.</i>	"	"	# -
<i>Pseudomonas fluorescens</i>	" ‡	"	" o #
<i>Pseudomonas putida</i>	"	"	" # -
<i>Pseudomonas stutzeri</i>	"	"	-
<i>Pseudaminobacter salicylatoxidans</i>	‡		o #
<i>Rhodopseudomonas palustris</i>			#
<i>Aspergillus niger</i>	"	o h	o
<i>Pseudomonas sp.</i>			# #
<i>Azotobacter chroococcum</i>	" 8	"	#
<i>Burkholderia cepaia</i>	" 8		#
<i>Alcaligenes eutrophus</i>			#
<i>Flavobacterium sp.</i>			#
<i>Alcaligenes denitrificans</i>			#
<i>Corynebacterium sepedonicum</i>			#
<i>Bacillus brevis</i>			# "



**Abbildung 8: Oxygenasereaktion von Benzoesäure**

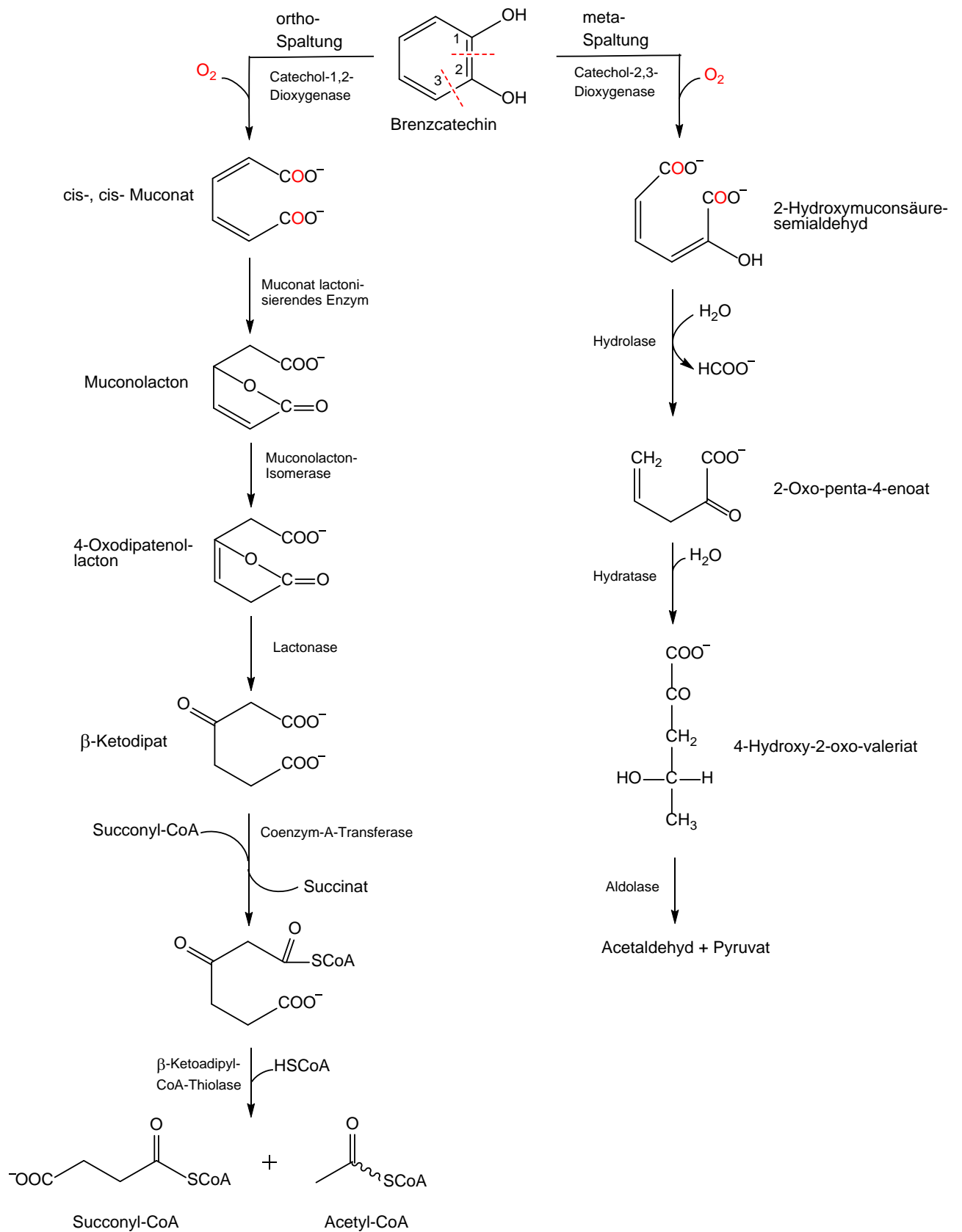
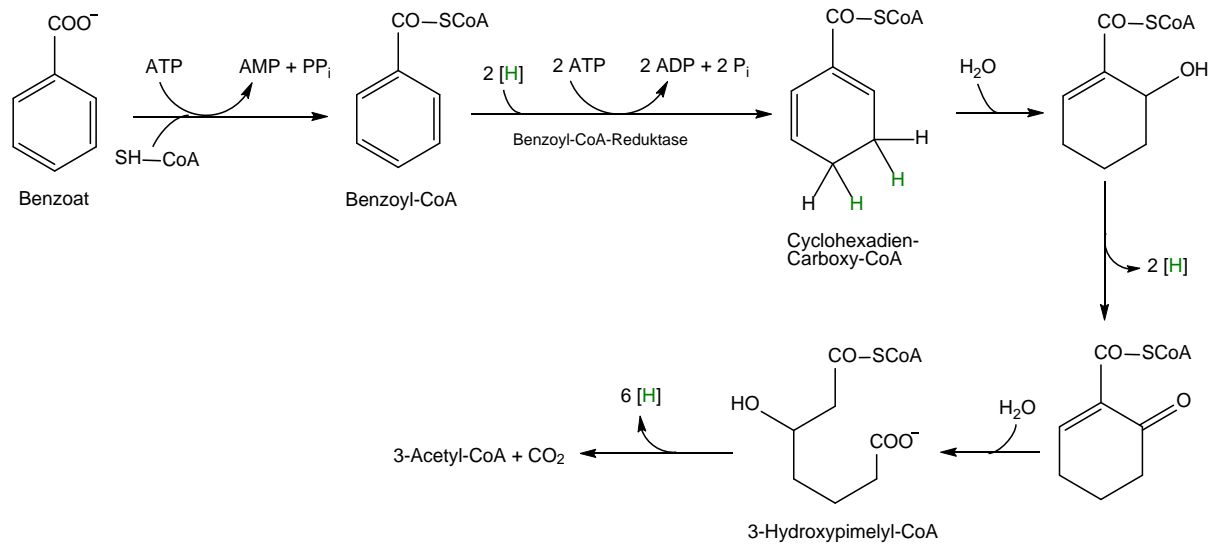


Abbildung 9: Aerobe Abbauwege von Brenzcatechin





**Abbildung 10: Anaerobe Abbau von Benzoat**

*Desulfomonile tridjei*



## 2.5 Analytische Methodik

– # U  
U ) M 7  
o M 7 # u  
U U o U o @  
7 U

### 2.5.1 Festphasenextraktion

) h h  
U h )  
7 h  
7 V

#### ) 7 ch- Solid Phase Extraction

u U  
h h h )  
o 7

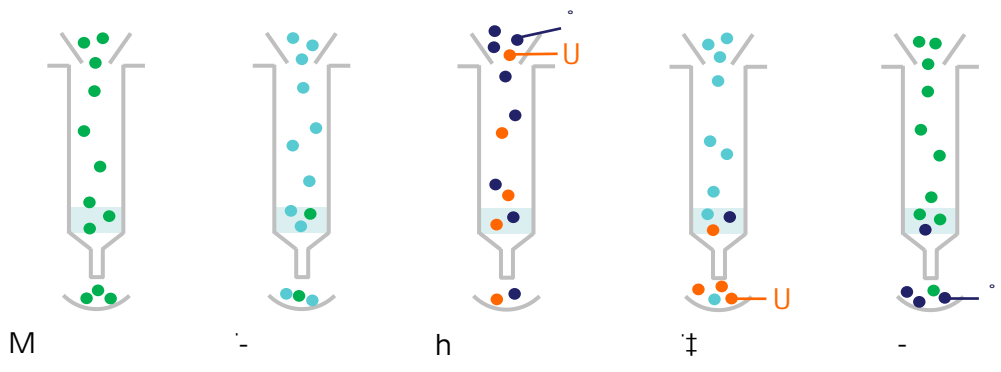


Abbildung 13: Schritte der Festphasenextraktion

) h †  
† U o M

u u

---

h ) - O -  
 ‡ o ) ° \ -  
 ) o h = h  
 o M K h °  
 U o ° ° -  
 M ° M @ -  
 h ) ° ° o ‡ -  
 π- -" ‡ ‡ -  
 - - h ° ° -  
 ° ) - o -  
 - U ‡ -  
 Clean-up h @ o °  
 O 7 ° U U  
 ‡ -8 - ) - -  
 O

### 2.5.2 Flüssigchromatographie

) 7 8 u o -  
 h h @ ‡ 8 -  
 u ° ‡ )  
 - = u h  
 ° 7 ) = -  
 =hG# High Performance Liquid Chromatography  
 M u - =hG#-°  
 U ° o

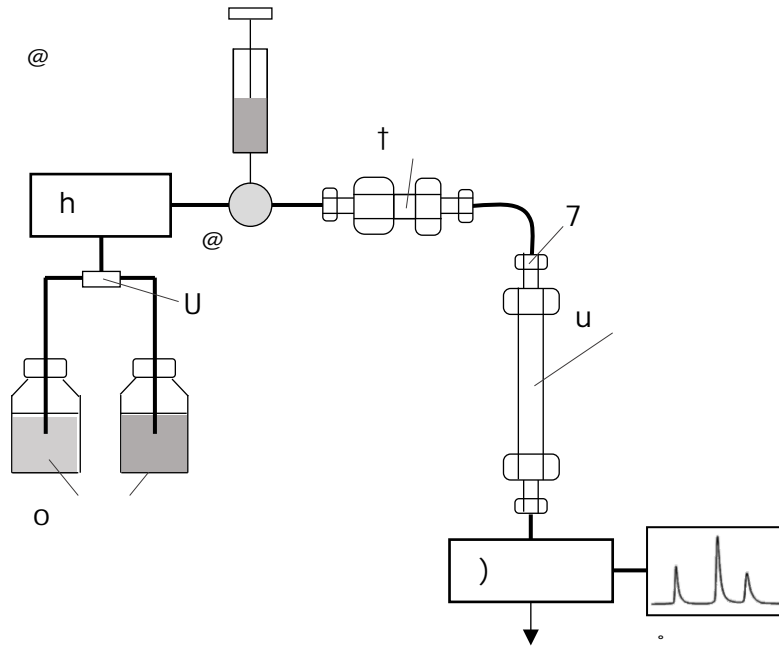


Abbildung 14: Aufbau einer HPLC-Anlage

) h O  
 k t u  
 - h u  
 - t u  
 8 ) 8  
 u o h  
 h )  
 M h  
 / O  
 t u o t  
 o ) h  
 u 7  
 M V o u t  
 h  
 o " h  
 K O o h  
 h u h  
 h Similia Similibus Solvuntur / ) h

u u

M V y *reversed*

phase 7

V

#

u

M

\

\

o

=

8

8

‡

)

)

‡

O

O

h

=

=

h

)

y

v

M

K

=

8

U

O

"

\

\

h

=

M

)

\

M

M

o

)

‡

u

h

#

)

*Endcapping*

o

u

o

y

#

‡

k

-

h

‡

U

h

v

h

u

h

-

u

K

u

u

)

-

M

"

o

h

U

8

h

)

h

v

u

)

)

)

y†)

7

o

=hG#

U

-

‡

M

-

=hG#

K

)

7

U

‡

)

M

k

U

### 2.5.3 Massenspektrometrie

7 † ° 8 U ) u  
" U U 7 "  
° h - 8  
@ ° h M  
u 7 - h@  
- @ -o@ ° h#@# @ °  
° hh@h ) Uo )  
) o #  
U ) † M  
° @ u o  
G# 8# Uoo o -  
- U @ U )  
°  
) @ @ ° )  
7 " h u - h  
@ ° U  
°  
) @ G# UoM -  
@ -o@ ° o ) -o@u @ °  
° 7 † u ) ° @  
° - "  
° o @ @

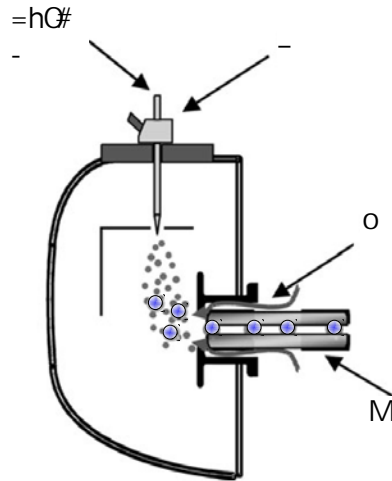
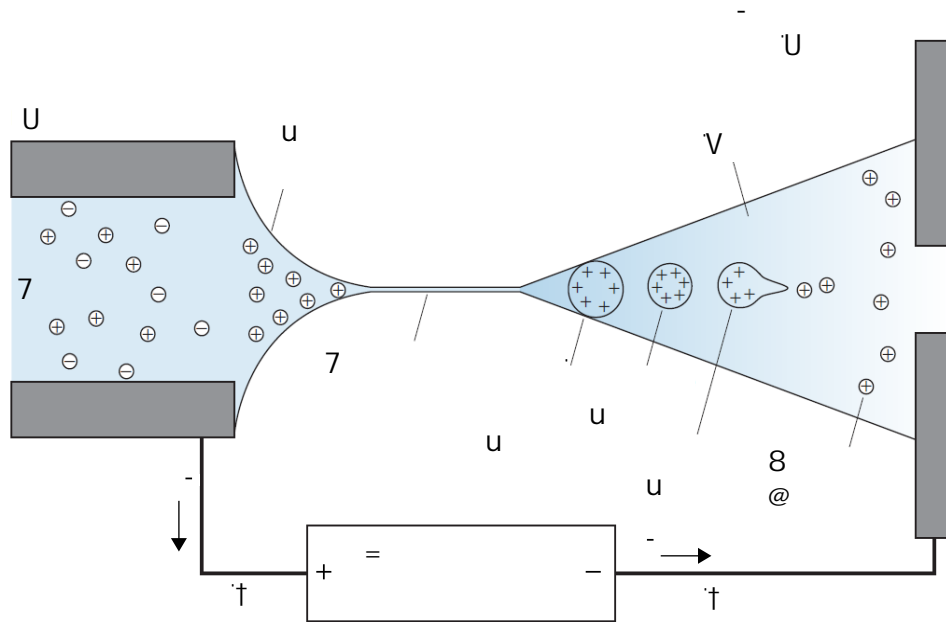


Abbildung 15: Elektrospray-Ionenquelle (positiver Modus)

o M @ Uo 8 )  
M  
h  
7 ) 7 O  
@ M 7  
@ Uo 8 ) 8  
M V O  
O ) U M ) M  
u M 7 ‡  
\  
7 k 8 )  
o ~ @  
M o U ) #  
@ u o )  
u 7 " "  
7 h = Sheath Gas \  
o u M - @  
o u M o )  
Sheath Gas " o † O  
O \  
" O \  
U ) k O





**Abbildung 16: Darstellung der Taylor-Konusbildung bis zur Entstehung des feinen Sprays mit isolierten Ionen (positiver Modus)**

8 '0 . . . . . U . . . . . y . . . . . )  
 ‡ . . . . . ) ‡ . . . . . @  
 . . . . . @ . . . . . ) @ . . . . . -o@  
 . . . . . j . . . . . @ h U . . . . . h  
 U = . . . . . V U . . . . . U = . . . . .  
 k . . . . . M . . . . . U j  
 u j . . . . . j u\7 \ u j U  
 . . . . . u  
 . . . . . u ‡ . . . . . @ ‡ . . . . .  
 O . . . . . o . . . . . o Ion Funnels @  
 . . . . . @ U . . . . . ) Ion Funnels k  
 o . . . . . k  
 a . . . . . V ‡ . . . . .  
 @ . . . . . 7 . . . . . 7  
 . . . . . ) @ . . . . . j  
 U . . . . . j . . . . . o

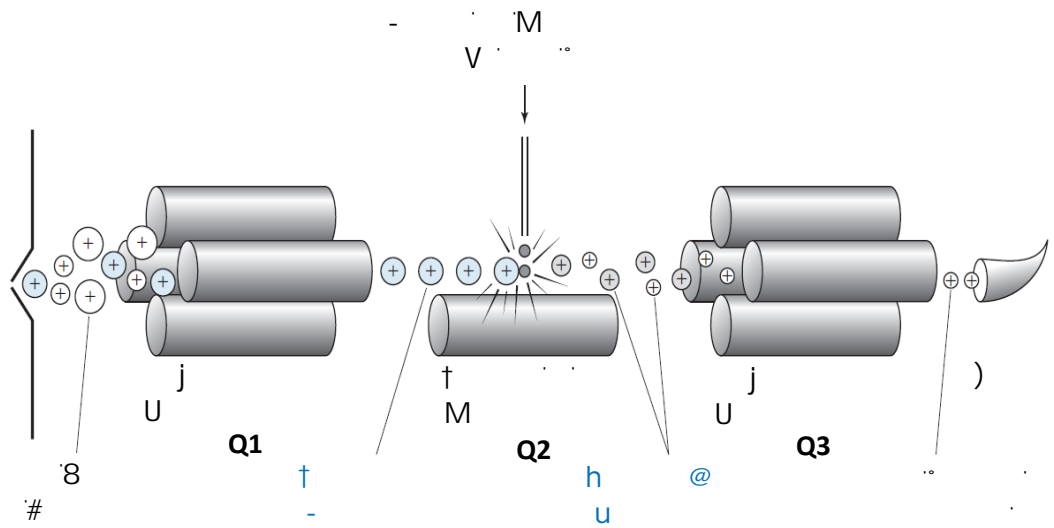


Abbildung 17: Aufbau eines Triple-Quadrupol-Massenspektrometers

Selected Reaction Monitoring  
 triple quadrupole  
 $m/z$



### 2.6 Untersuchungsgebiet

) y  
 =  
 O " o † † MoU  
 " 8 ="

) † j † u o o  
 u ~ = † V 7  
 = U † V  
 \

o V  
 - M y #  
 - † o  
 M y

o † 7  
 - h ) - k  
 h †

#  
 o U O  
 †

Æ " u " y y  
 † - y "  
 o h @ o  
 M † V

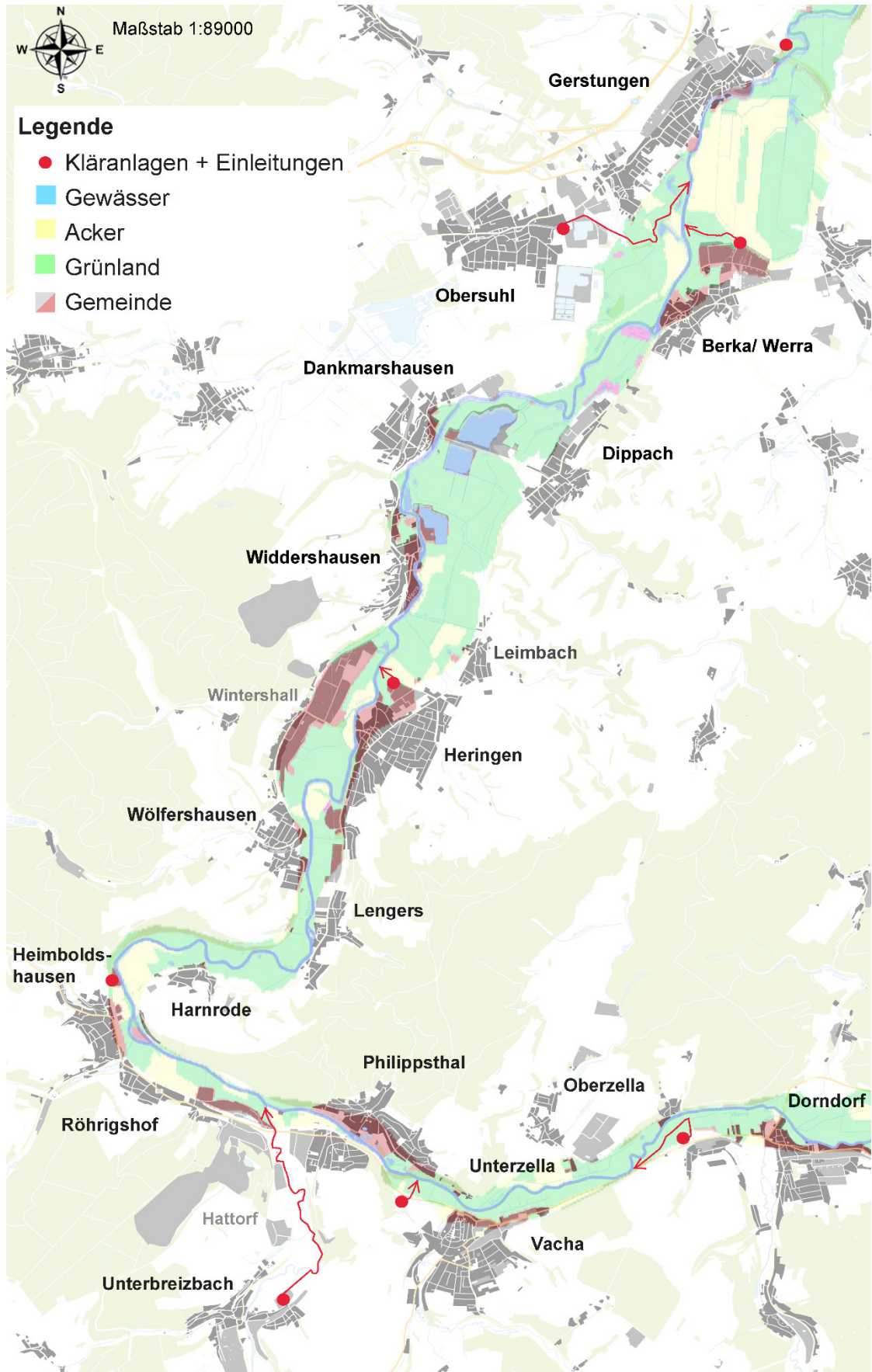


Abbildung 19: Darstellung der Kläranlageneinleitungen und Landnutzung des Flussgebiets

### 3. Materialien und Methoden

#### 3.1. Geräte und Chemikalien

##### 3.1.1 Geräte und Verbrauchsmaterialien

@ ... 8 ... † ...

=hQ# ... @ ... " ... G# ... ° ... u

U ... o ... u ... j ... G# Uo ... ° ... u

u ... M ... h ... = ... Ł ...

o

y ... " ... o ... )

- ... o ... o ... o ... o ... o ... o

\ ... =O' oh- M

oh- k ... 7 ... G#u

##### 3.1.2 Chemikalien

@u ... # ... k ... =

Tabelle 4: Verwendete Chemikalien

#	k j	=
#		o \
"		-
#		o \
#		o °
7 @u)		o °
"		o °
#		o \
#		o \
"		o °

Fortsetzung Tabelle 4:

#	k j	=
#		o
		† k #
"		† k #
"		o \
-	=hG#	† k #
M		U
U =		U
U =		U
U	G# U o	U
V		U
o		o o
k		o \
-		o \

– = h – k  
 o U ) U – †  
 y U j j h –  
 ) M *Sheath Gas* o k  
 ) *Sheath Gas* o O h  
 o k – k  
 M o k  
 o " 8 k  
 † " "

### 3.2 Entsorgung

) O o M  
# O" o  
O

### 3.3 Probenvorbereitung

= M h h  
7 U ) h  
7 ch- k 7 O#u 8 = ch-  
h o \ =O O ‡ )  
M - ch- M OU O  
k o O# h  
" ) o † h  
h h ch- h O  
h ch- h ch- M  
Ok o  
) - U U O -  
@ 8 O  
- o O ch- h ) U  
O U h  
- V ) - =hG# †  
7 o @u) =hG# U o U o  
) @u) 8 ) ch-  
h # M O y  
7 # 8 O # h-u  
o 7 U V †  
h @u) O - @u) h  
M @ † U



### 3.4 Messbedingungen

) " # h =hG#  
 UoUo° o u k h M  
 h = h ) h O  
 h o 7  
 O U  
 h V= ° h U  
 ) o o  
 ~ 8 u M

Tabelle 5: Gradientenverlauf

-											
-											

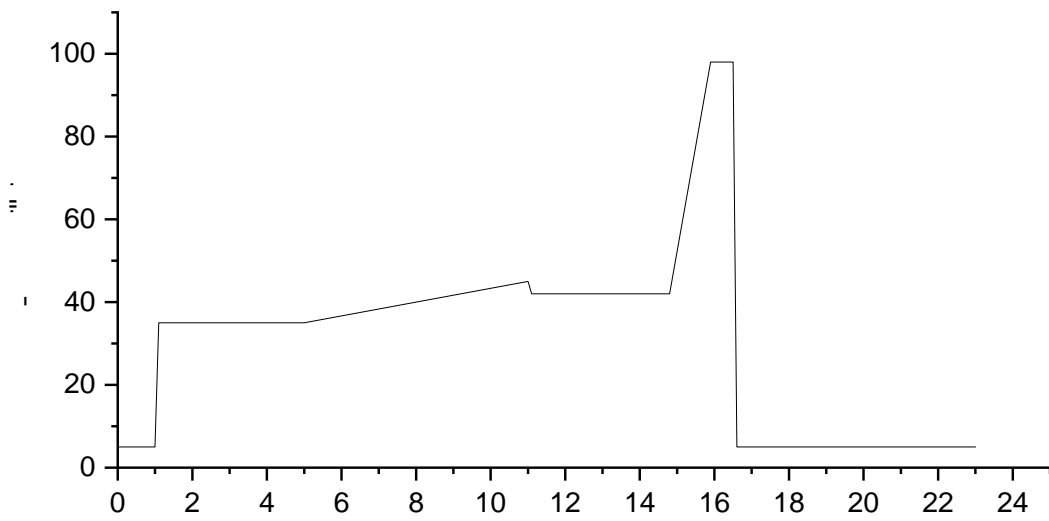


Abbildung 20: Gradientenverlauf

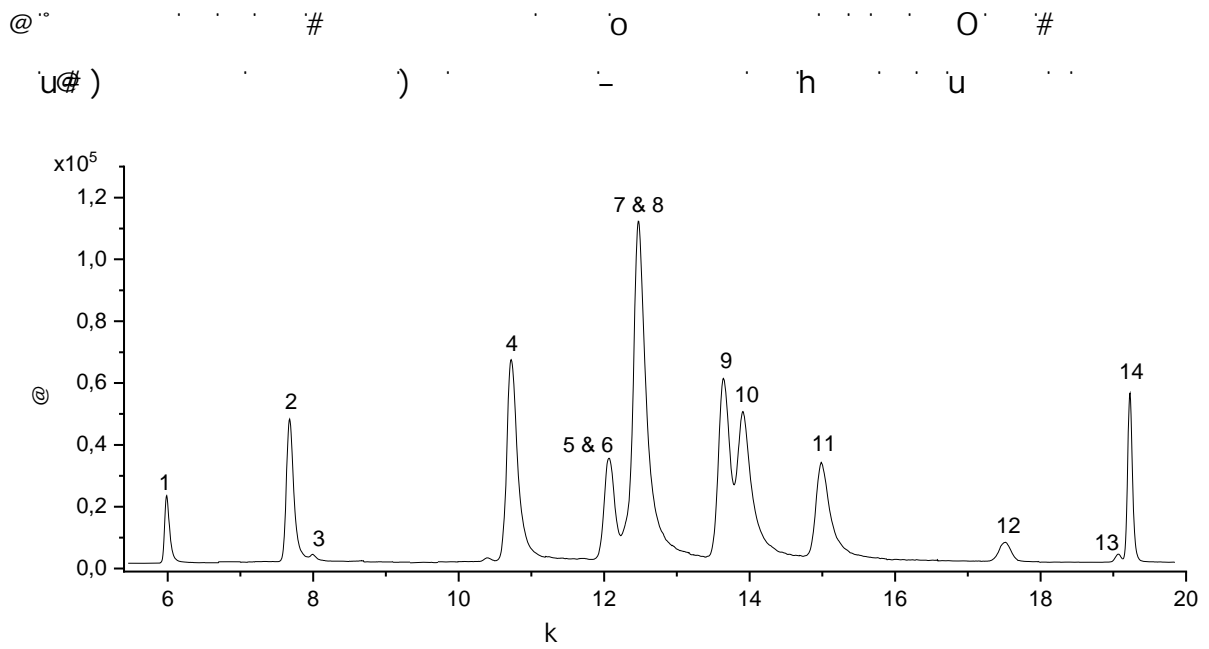


Abbildung 21: Chromatogramm der Carbonsäuren (TIC)

Tabelle 6: Peakzuordnung mit zugehörigen Retentionszeiten der Analyte

h		k
		k
		o
		#
		#
		"
		"
	7	@u)
	#	
	#	
	"	
	"	
	#	
	-	
	#	

U U

---

) U UKU U *Multiple Reaction Monitoring*

7 m/z ~ ) M

@u Uoh h h

UoUo) #

U - j j

k UKU ~

8 #

**Tabelle 7: MS-Parameter**

Uoh	
@	O
8	#
8	O
-	
<i>Sheath Gas u</i>	#
<i>Sheath Gas 7</i>	O
M	†
V	†
) -U†	†
-	

**Tabelle 8: Precursor- und Product-Ionen der Analyte**

	h @ m/z	h @ @ m/z	h @ @ m/z
#			
#			
#			
"			
7 @u)			
0			
#			
#			

Fortsetzung Tabelle 8:

	h @ m/z	h @ @ m/z	h @ @@ m/z
#			
"			
"			
"			
-			
k			

- j ~ h @ h @ @  
~ h @ @ j

### 3.5 Qualitätssicherung

) † @ = k U

k ) h

j U O V "

‡ U U

7 M " O

M )

M k O

U M

) ‡ M k

k † "

u o (FF @) † †

#

" - ~ k U M

M ‡

u o (FF @) †

o

- † h o

o †



## 4. Untersuchung des betrachteten Fließgewässerabschnitts

### 4.1 Parameter und Probenahmestandorte

– " ° ° # –  
 h u ° o –  
 h – # h –  
 ‡ h –  
 u ) u o =-‡  
 ) h ) ° h \ –  
 @ M  
 U

Tabelle 9: Parameterliste

h	"
O °	o
# °	o
# °	o
" °	o
# °	o
M °	o
U °	o
V °	o
o °	o
h °	o
° o °	o
V °	o
u\# °	o
)\# °	o
uV °	o
= °	o

y 7  
 " 7 h 7 -  
 ) h 7 h 8 -  
 8 † † @ k h  
 ) Mo- h † -  
 " o h °  
 o ) 7 ° -  
 † = † " @ =  
 -- -ou°-† † -#  
 - o † 7 -  
 o = o -M †  
 ) U h  
 ~ ° # - @ u -  
 h

**Tabelle 10: Beschreibung der Probenahmestellen in der Werra**

V	"	y	-
	† † h "	O	
	h "	o	=
V	† † 7 u	O	
	h "	o	
-	† = u h	O	
	= 7 u h	o	
	† † = u	O	
	h "	o	
V	† = h =	O	
	= †	o	
V	M =	k	
		o	
	=	k	
		o	

## Fortsetzung Tabelle 10:

V		y	
	V =	k o	
	- = O u	O o	
	† † O "	O o	
	† - M o † † @ M =	O o	†
	V - o † † † 7	O o	†
	† † " 7 "	O o	
	V † † V † h † = †	O o	
	" )	k o	
	)	k o	
	† " †	O o	
	" 8	O o	
	h 8 - =	O o	†



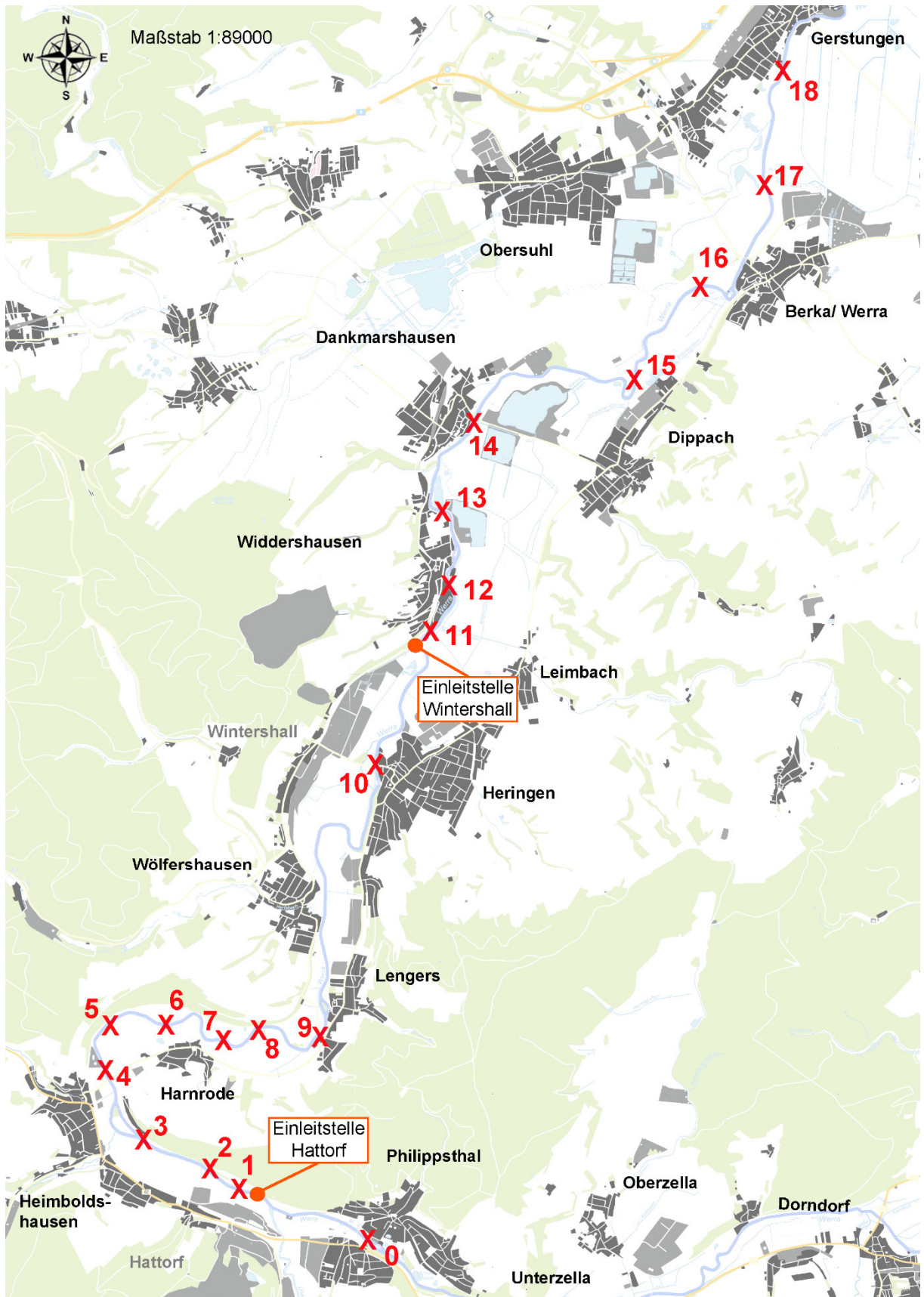


Abbildung 22: Probenahmestellen in der Werra

) h ... t ‡ ... V ...  
# = )

U ) t ...  
V V ...  
† ... o ...  
M 7

) U ... u ...  
) ‡

) ‡ @\ V h 7  
) y

Mo o M  
7 ‡

) - ‡  
)  
) ‡ 7

t y ‡ U  
o u ) o  
) 7 o )

h u ) )  
h u M ) h  
7 = \

‡ o ) ‡ ‡  
o ‡

) u h o ) "  
u U  
u k o " h  
o

) h K o  
- ) h  
u K u ) h

### 4.2 Chemische Zusammensetzung der Prozessabwässer

h h # M  
h h  
)  
" V # o  
@ - h h h h h  
h 7 o  
= h u  
) h h  
)  
h h u ) u  
@ = h  
h

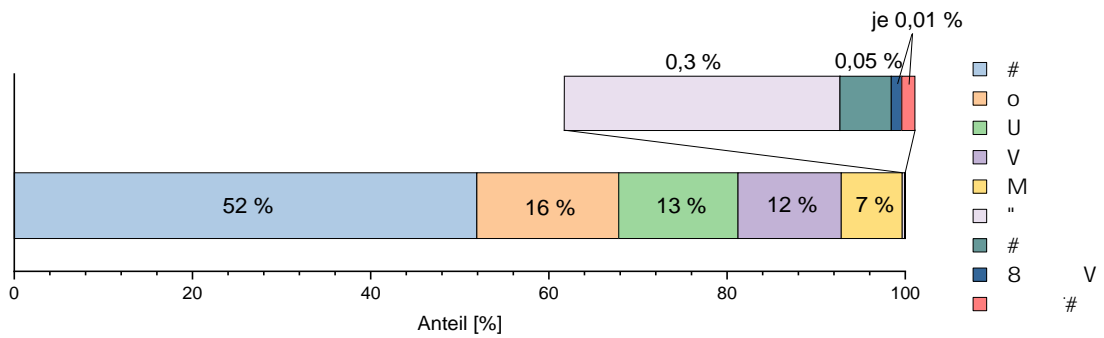


Abbildung 23: %-Zusammensetzung der Prozessabwässer 2019 des Standorts Hattorf

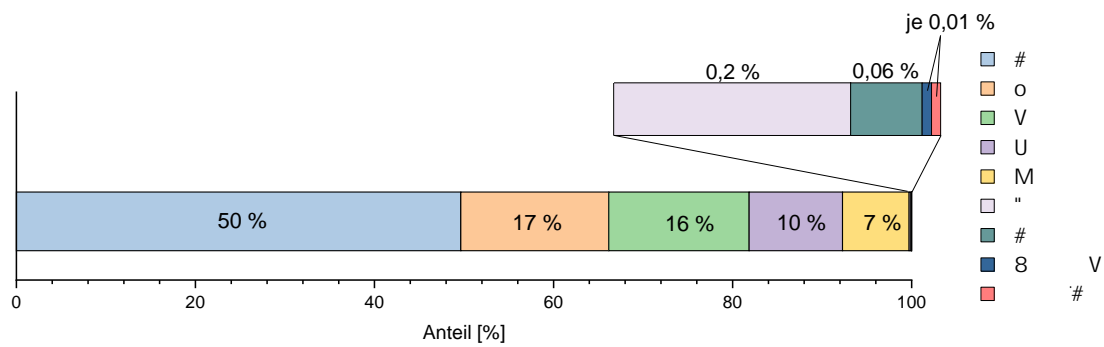


Abbildung 24: %-Zusammensetzung der Prozessabwässer 2019 des Standorts Wintershall

) h # " V #  
o U o\ -  
o h )  
# h

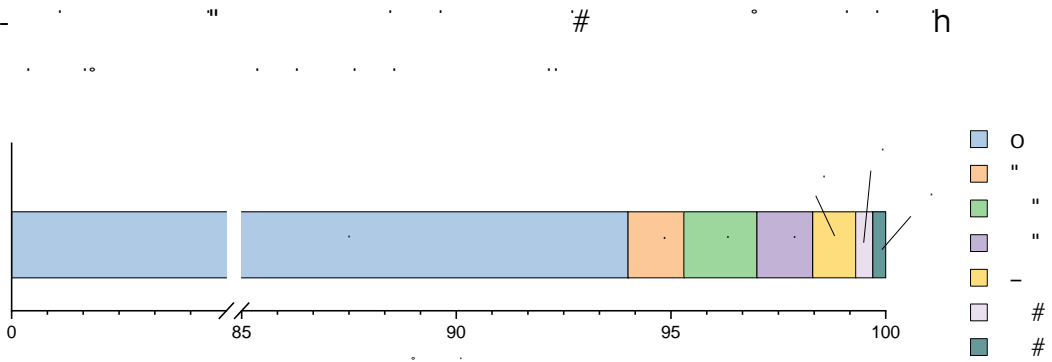


Abbildung 25: %-Zusammensetzung der aromatischen Carbonsäuren in den Prozessabwässern vom Standort Hattorf 2019

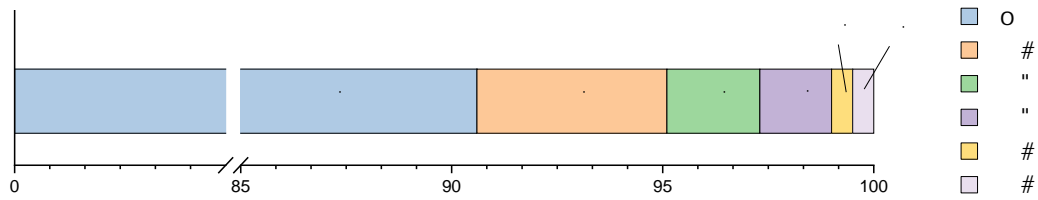


Abbildung 26: %-Zusammensetzung der aromatischen Carbonsäuren in den Prozessabwässern vom Standort Wintershall 2019

) = # h o

@ = o ‡

) ‡ h = "

@ K " o =

" 8 h

) @ ‡ " "

) M o

) h )

‡ M - -

= # - ‡ ) -

# u -

K 8 #

### 4.3 Beschaffenheit des Fließgewässers

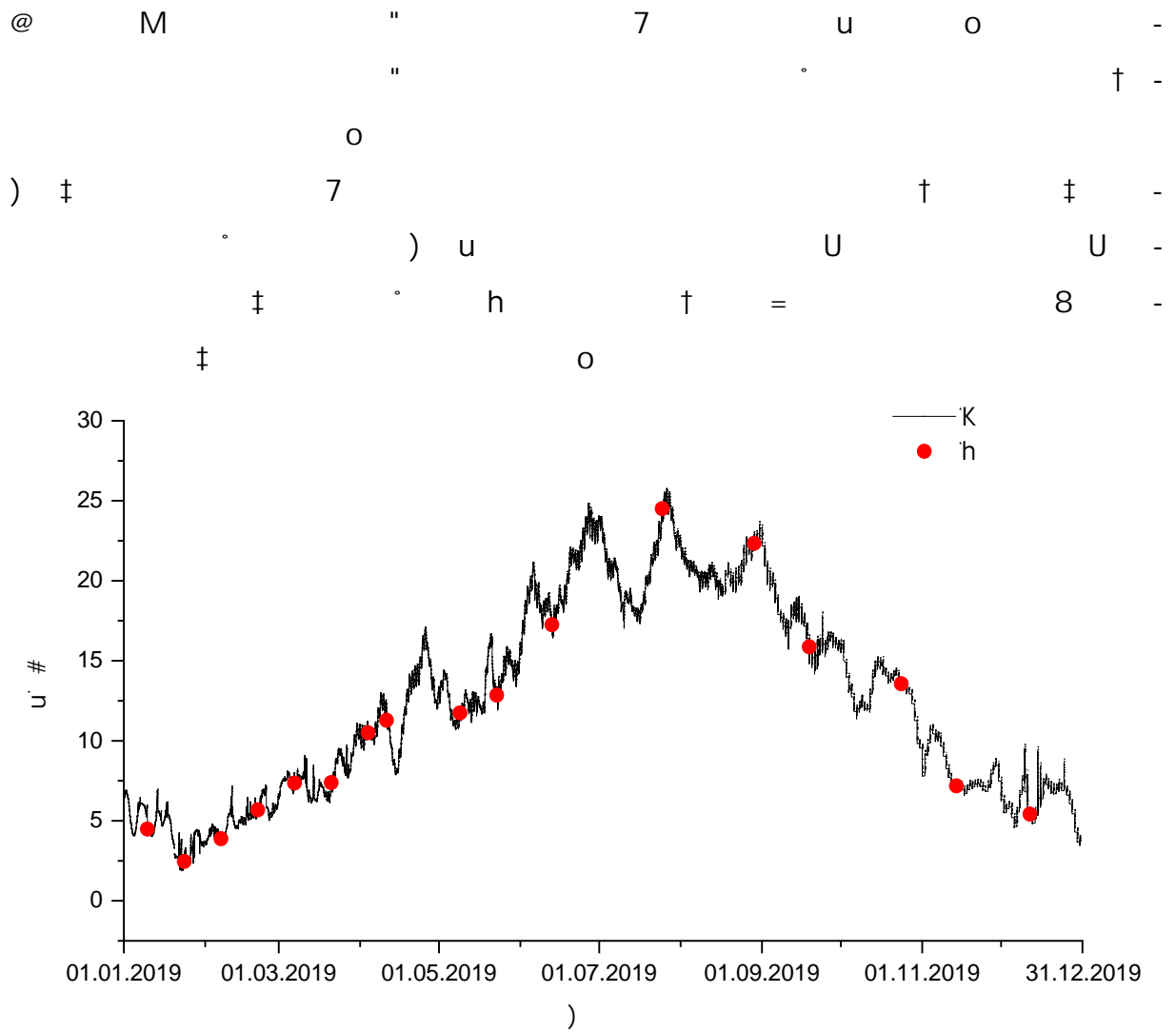


Abbildung 27: Temperaturverlauf 2019 der Werra

o u )  
 ‡ K # ) u  
 # ) u  
 † o U  
 u ‡ U  
 ) † U  
 u  
 o

---

) M o

V t 7 t u  
@ " U U K

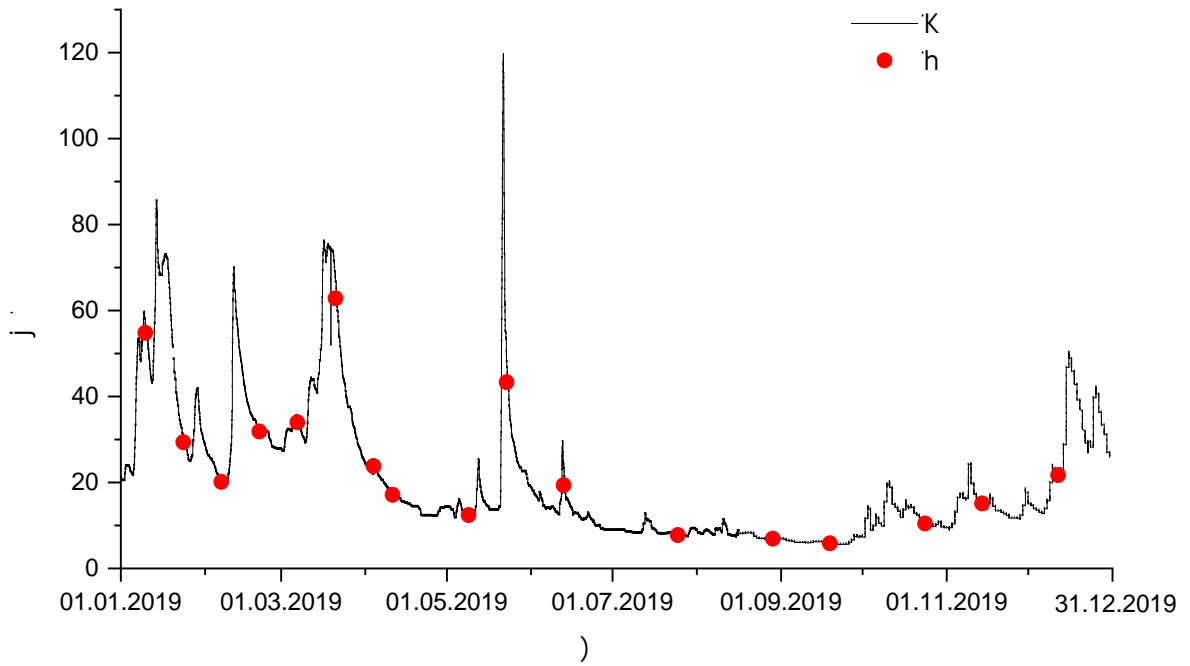
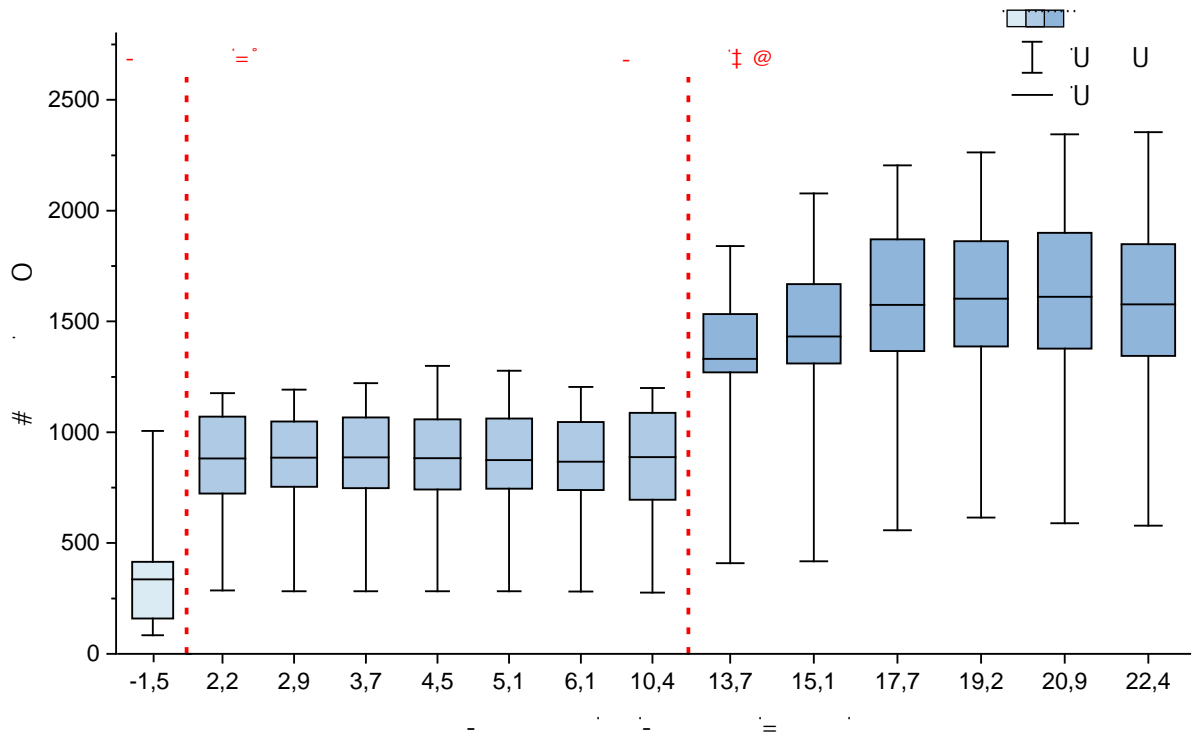


Abbildung 28: Jahresverlauf 2019 der Fließgeschwindigkeit

@ t 7 )  
o t @ U o -  
h  
) ) t O j -  
- h t ) h -  
# -  
o " V #  
# 7 - 8 -  
o M \ -  
# " M \ -  
t - o ) -  
o K # -M -  
t ) ) u °  
o (E)



**Abbildung 29: Chlorid-Konzentrationen in der Werra 2019**  
(hell: Vorbelastung, 1,5 km vor der Einleitung Hattorf;  
mittel: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)

† ... h

8 # h o =

† ) ) h o =

† 7 7 M

o † = U h

† = ) #

† † = ) †

† - † 7 )

... #

V 8 # M

o †

= † U

† † ) †

= - ) 8

8 # M o

) M )  
 ) )  
 8 M 8 ‡ M ‡ )  
 k U @u  
 K U U ‡ o M  
 8

**Tabelle 11: Salzparameter Ablauf Kiessee Dankmarshausen**

	M	V	#	U	#	"	o	=
U								
U								
U								

# 7 V M U  
 ) M o "  
 o M ) V # o  
 ‡ M # - U M  
 - o M ‡ ) )  
 o O

h o ) M 8 h  
 " M o ) M 8 h  
 o



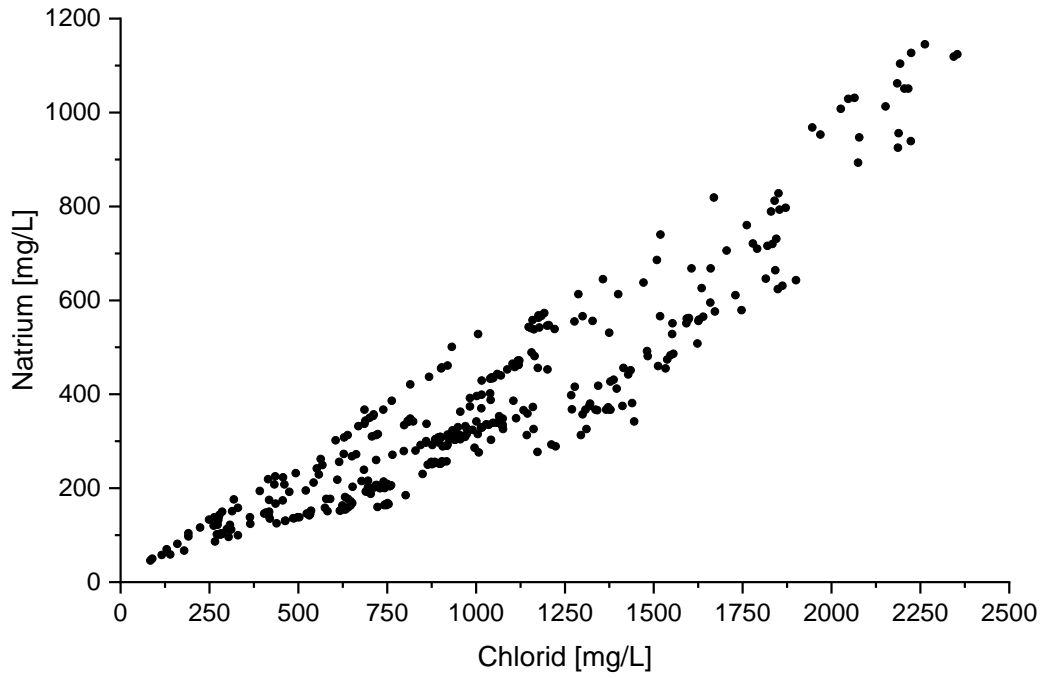


Abbildung 30: Streudiagramm

) " " # " " h " " †  
o " M " o " ~ " u\# " )\# 8  
" " " " M " o  
" " M " 8 " u\# total organic carbon  
" " M " " )\# dissolved organic carbon  
" " M " @\ " " )\#  
" " o " " = " "  
" " † " " † " " h  
)\# " † " " " # O) U " " =  
" " U " " " " o  
" " † " " M " " "  
" " † " " u " " o @) " " "  
" " † " " h " " " " =  
" " " " † " " 7 " " 8 " M  
" " ) " " " " @ " " "  
" " )\# M " " " M " " "  
" " ) " " " " " " " 7

V u o 8 h  
t ) o  
t k  
)  
h ) o o  
t ) j u

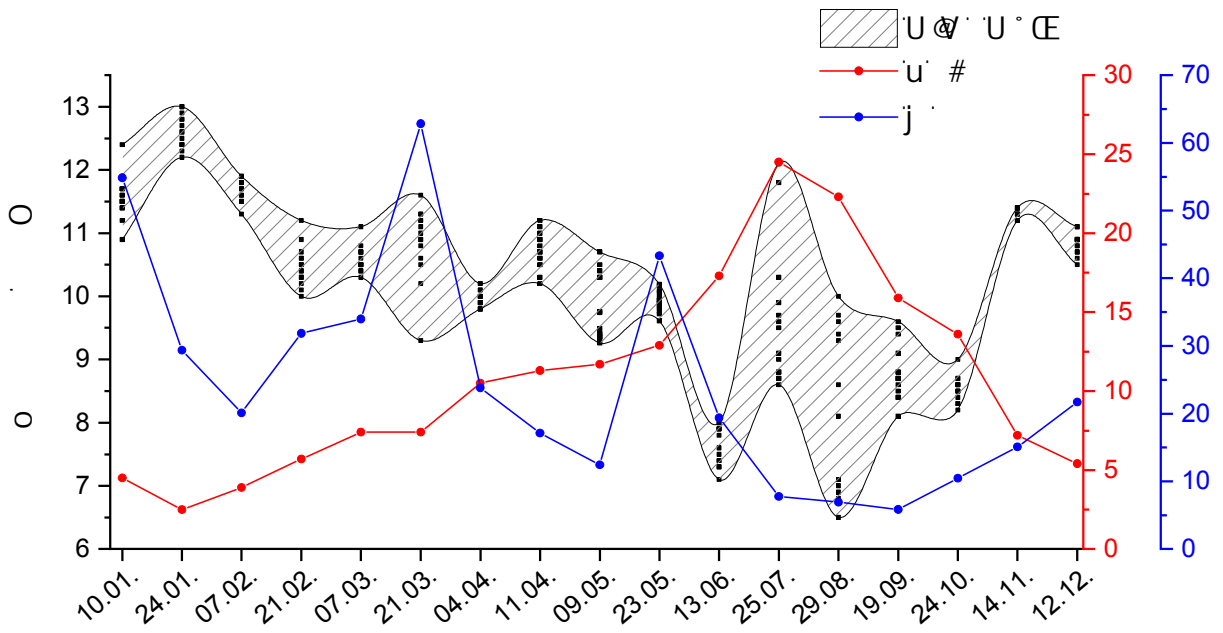


Abbildung 31: Sauerstoffgehalt im Jahresverlauf 2019

o )  
h @ K o  
o h  
t †  
# # ) M  
o ) †  
t @ † o  
o = - -  
O o

) o K u

o O

" U 8 o

o h

) o †

7

) o V o

h h 8 h

- h M

o

o

o h

o 7 V V o

† h ~

V h y

O @ @

= u

- V † V

8 ) " h K

o O O O

= † M 8 V

o =

o M † V

M #

"

U = " †

) = † = †

@ † = † " 7

o

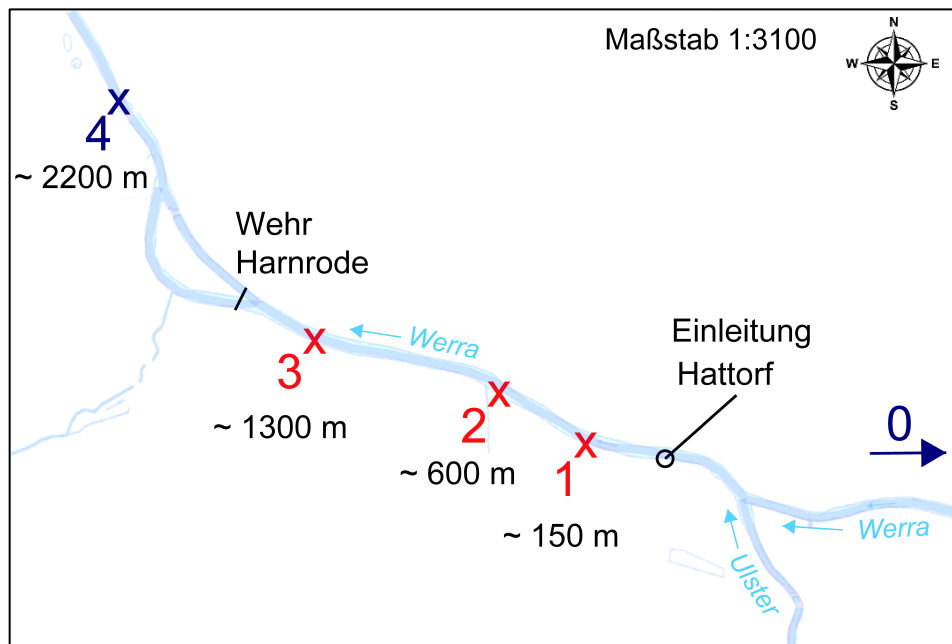
@ † †

u † †

M = # =  
 o o ) = 8 h  
 8 = ‡ o U

#### 4.4 Fahnenbildung

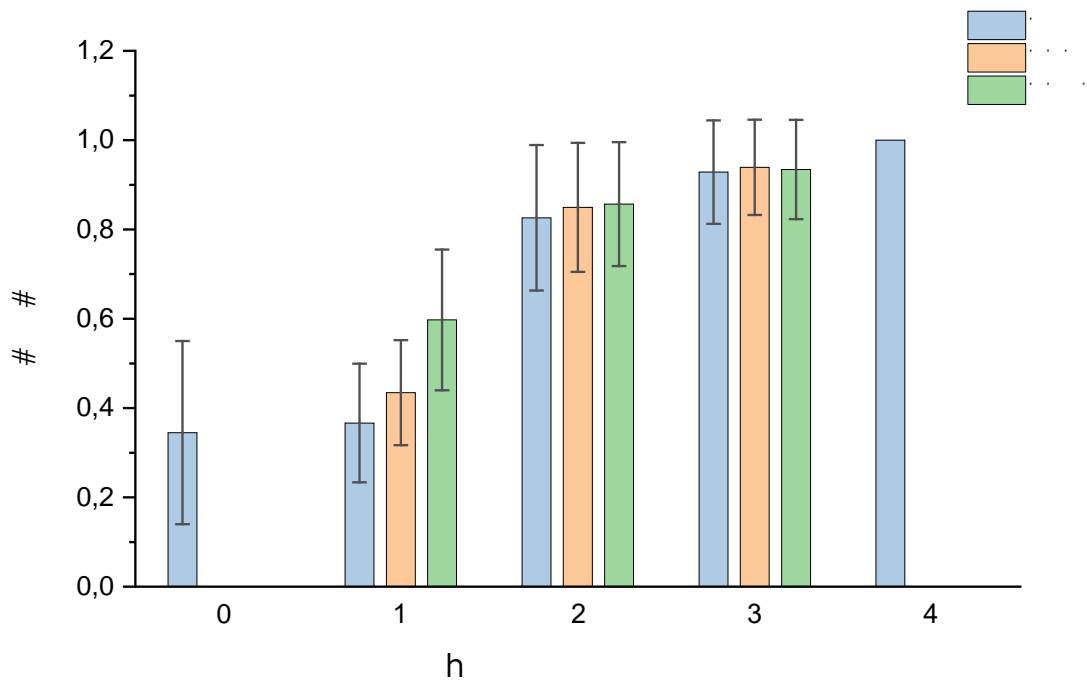
@ M h 7  
 o h )  
 ) U y ‡ #  
 7  
 u



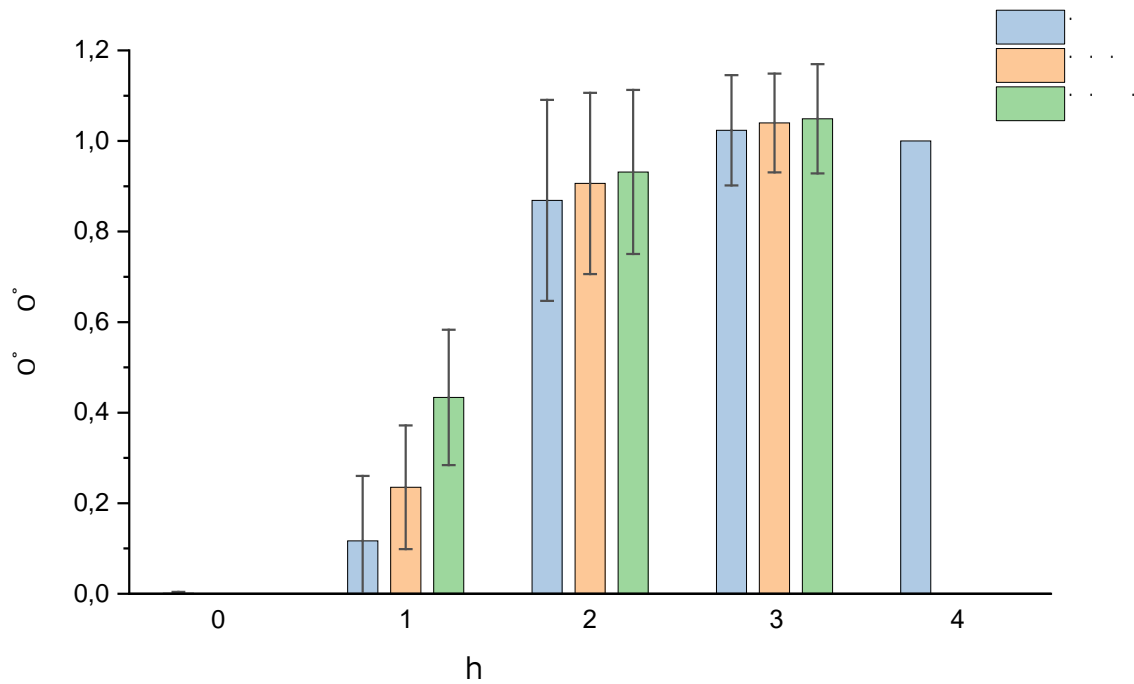
**Abbildung 32: Übersichtskarte der Beprobung mit Boot  
 (rot: Probenahme Tiefenprofil; blau: oberflächennahe Beprobung)**

) h ‡ ‡  
 = ) h  
 h o  
 h 7 u

o k o 0 7 h  
 h †  
 † \ h ) U  
 u U † o Mo 7 @ -  
 h =  
 h u )  
 h =  
 U † = o )  
 h  
 o ) U =  
 † = † o  
 † M ) o  
 - # o  
 ) ) u o



**Abbildung 33: normierte Chlorid-Werte der Probenahmestellen 0 bis 4**  
 ( $[Cl]_0$  = Probenahmestelle 4)



**Abbildung 34: normierte Salicylsäure-Werte der Probenahmestellen 0 bis 4 ([SA]<sub>0</sub> = Probenahmestelle 4)**

@ ... † # °  
M ... h ) # 8 ... h  
... 7 ... †  
... † U ... h  
7 ... U ... ) U  
... M ... u ... 7  
... ) ... †  
o ... h  
) ... # † ...  
... M ... y ) h  
... " h ... y ... U  
... o ... †  
† = h  
- " ... † † #  
... 7 ... o ... )  
" ... † h ... ) #  
... U ... o ... o



y

7

---

) U " 7 ) ‡  
† #  
h )  
k "



### 5. Untersuchungen zum Abbau der aromatischen Carbonsäuren

#### 5.1 Modellversuche zum Abbau der aromatischen Carbonsäuren

y #

U O = †

h =

) y " y "

- ) u o M

o O o

† †

- † ) ) h

† #

) ) v # O

† U o

M o # o #

† U

) 7 "

† y h

@ U

@ # U o U o

M v y

- \ † #

o

) - U

h † k M o

O k

h " †

O

### 5.1.1 Konzentrationsabhängigkeit

- y

" @ ‡ M -

- h -

o @ k o ) -

‡ ) M -

) h " -

K o -M O

@ o )

o -M " "8 O @

o M 7 -

- ) ) ° u ° °

o ☞ ☞ ☞ ) † -

U " M ) U

o y -

K o M @-

o # -M " -

O -#

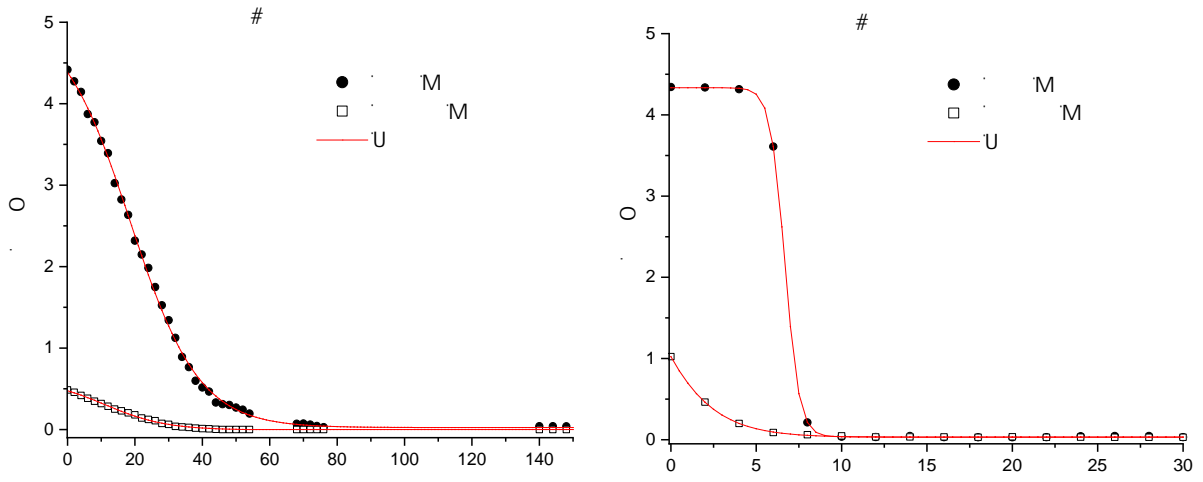


Abbildung 36: Konzentrationsabhängige Funktionen der Chlorsalicylsäuren

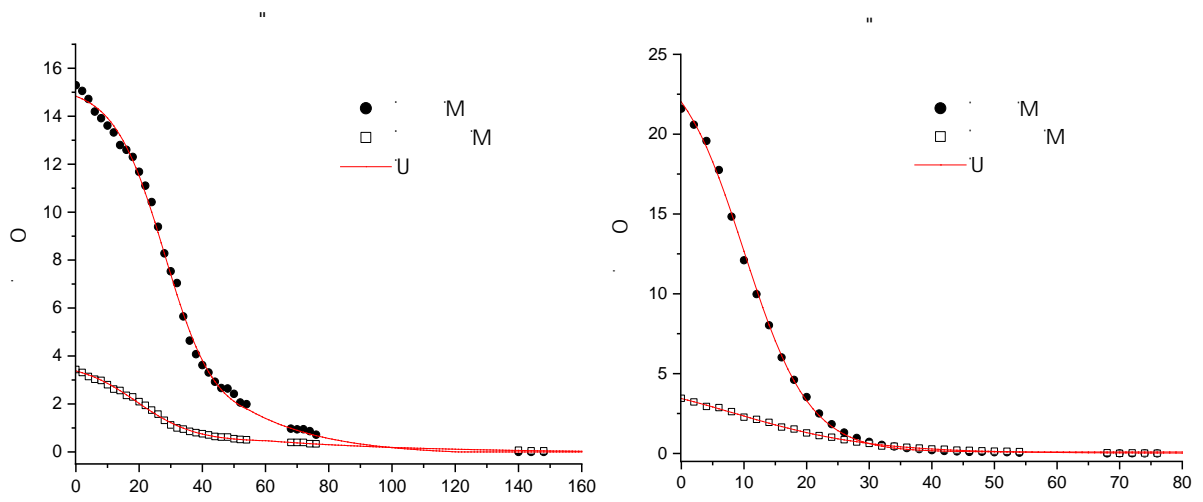


Abbildung 37: Konzentrationsabhängige Funktionen der Bromsalicylsäuren

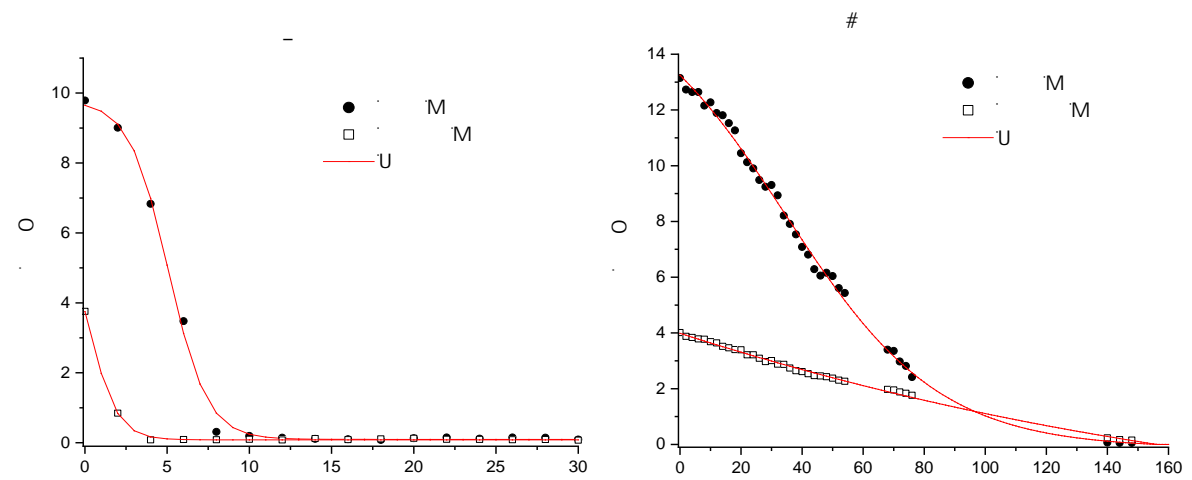


Abbildung 38: Konzentrationsabhängige Funktionen der trans-Zimtsäure und 4-Chlorbenzoesäure

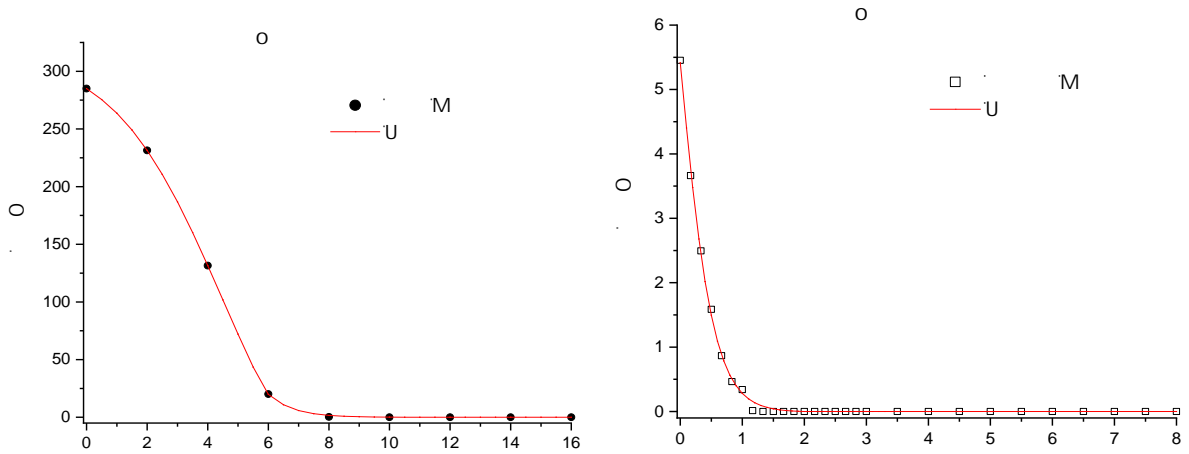


Abbildung 39: Konzentrationsabhängige Funktion der Salicylsäure

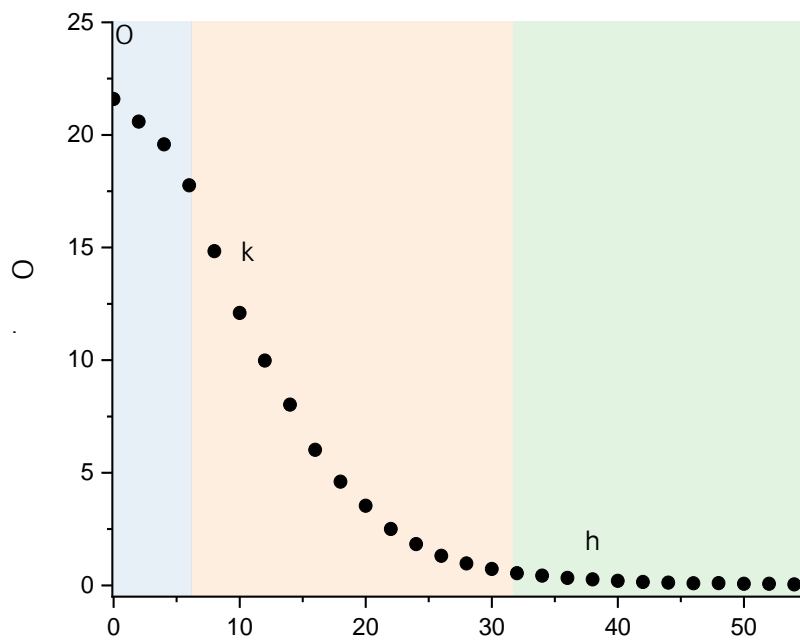
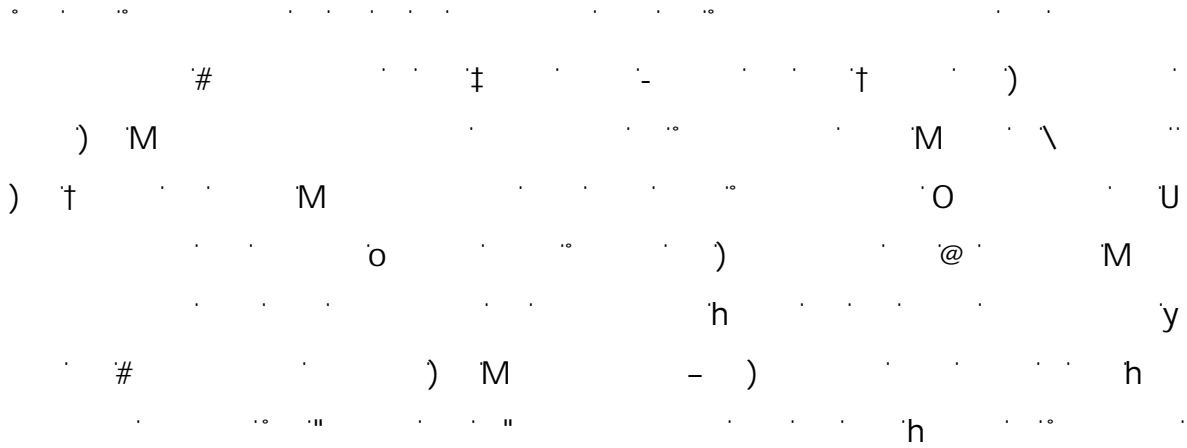


Abbildung 40: Phasen des metabolischen Abbaus am Beispiel der 5-Bromsalicylsäure

y

#

" . . . . . o . . . . . h . . . . .

h ) M . . . . . # . . . . . U . . . . .

v . . . . . ) . . . . . t . . . . .

" . . . . . ) . . . . . † . . . . .

u . . . . . o . . . . . † . . . . .

@ . . . . . k . . . . .

† . . . . . U . . . . . y . . . . . h . . . . .

v " h v . . . . .

h . . . . .

- . . . . . U . . . . . " . . . . . M . . . . .

o ) . . . . . " . . . . .

M . . . . . † . . . . . ) . . . . . † . . . . .

) . . . . . " . . . . . U . . . . . \ . . . . . \ . . . . .

U . . . . . † . . . . . U . . . . . U . . . . .

7 . . . . . o . . . . . " . . . . .

† U . . . . . " . . . . . 7 . . . . .

@ . . . . . " . . . . .

U . . . . . - . . . . .

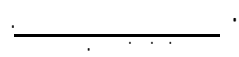
U . . . . . h . . . . . o . . . . . ) . . . . .

y . . . . . † . . . . . o . . . . .

7 . . . . . 7 . . . . . o . . . . .

7 8 . . . . . v . . . . . M . . . . . ) o7 . . . . .

o . . . . . † . . . . .



o

M

†

†

y

#

)

U =

U =

U

**Tabelle 12: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) zum Konzentrationseinfluss**

	M			M		
	O		O	O		O
O						
#						
#						
"						
"						
-						
#						

K O # = )

=

# M "

O =

O ) o

-# -- ) -

O M 7

-# M = -

M ) M -

† M -#

= ‡ k = -KM o

M "

† "

y

#

-o " - -o -  
7 - † -#  
k " ) -  
=  
- M = ‡ U -  
) - o - - *Sphingomonas sp. Stamm CHY-1*  
o -M ° ) ° -  
U o U ) o -  
o - " ‡  
† U @ °  
U U - M -  
° h o o  
° ° o  
) U ° h  
°  
- 8 M h °  
# o @ ° o M -  
o # - " °  
- ° M °  
o o " °  
- " M O † -# -  
M O †

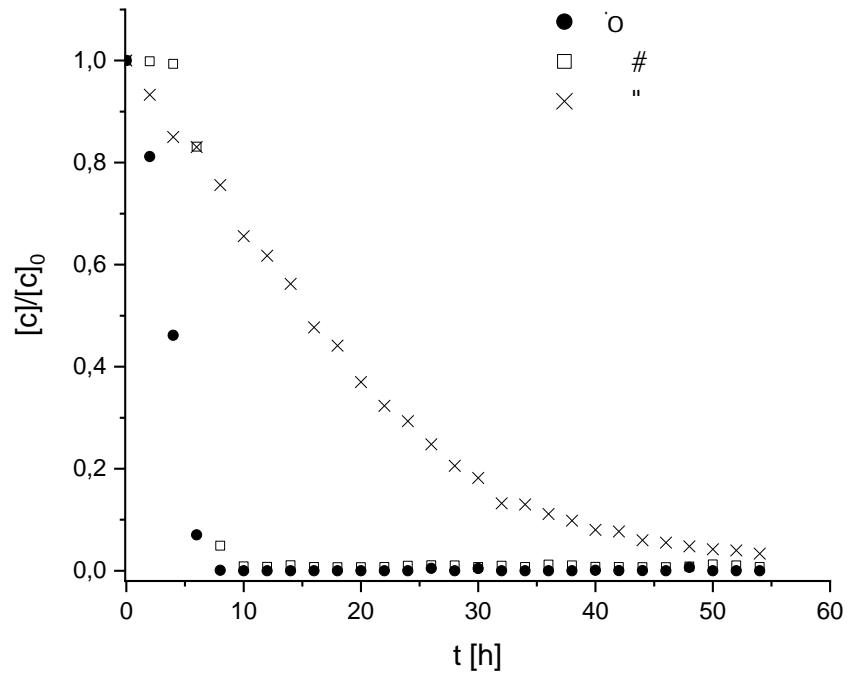


Abbildung 41: Effekt der Substituenten auf die Abbaugeschwindigkeit

o " o ) o  
y o M  
t ) " o  
) )  
o U 8 =  
" #  
7 " o  
‡ " o  
) # o



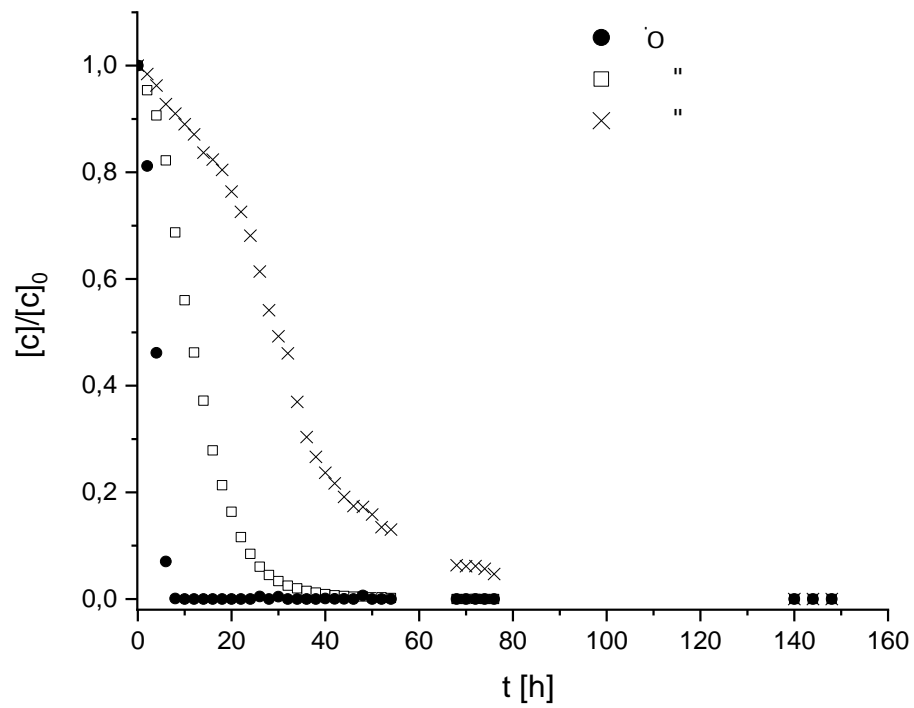
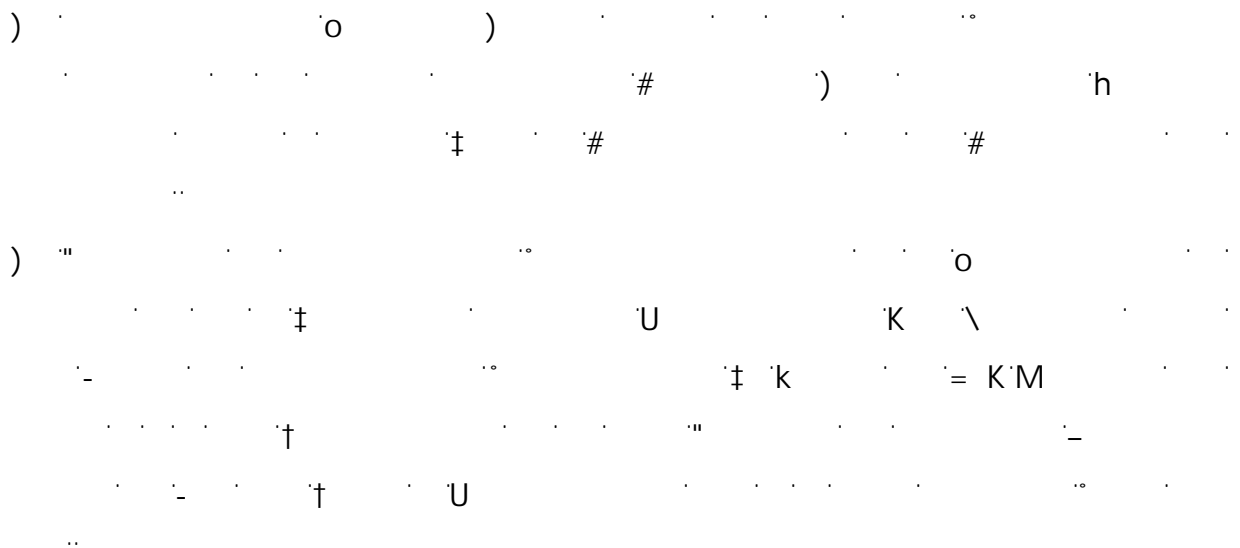


Abbildung 42: Effekt der Position des Substituenten auf die Abbaugeschwindigkeit



### 5.1.2 Temperaturabhängigkeit

V 7 u - K u -  
- t - t O -  
k u " 8 -  
= u - u -  
t u o 8 -  
h t -  
- \  
@ O M # -  
u ) t -  
t - u -  
° # ) † u -  
° u † ) † o  
U U † ° o

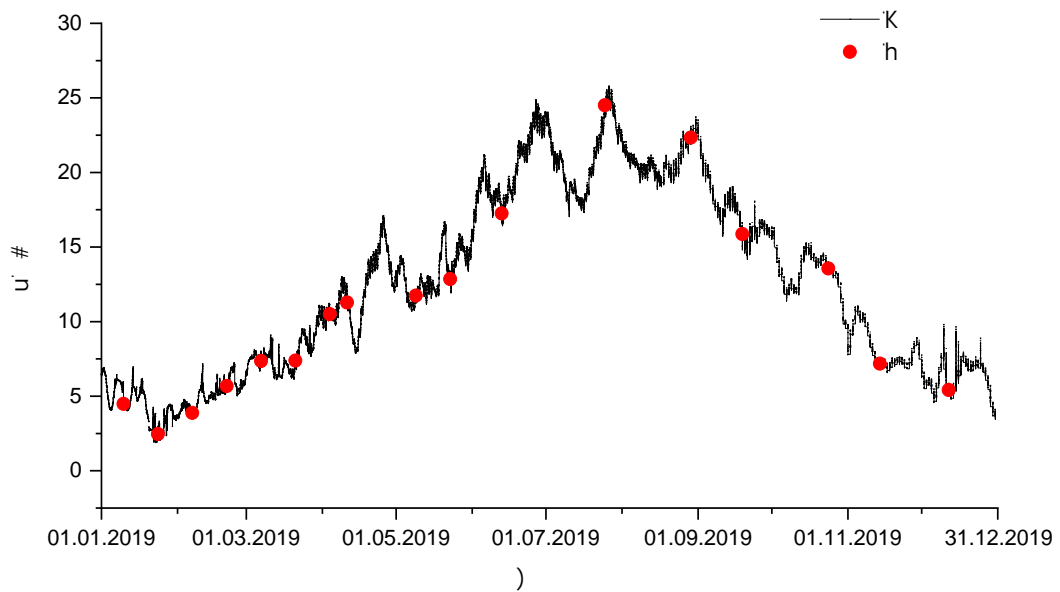


Abbildung 43: Temperaturverlauf der Werra 2019

- o " t k #  
t M # )  
M # °  
o @ ° # ° ° °

o OEF@ OEF@ ) u o OEF OEF@

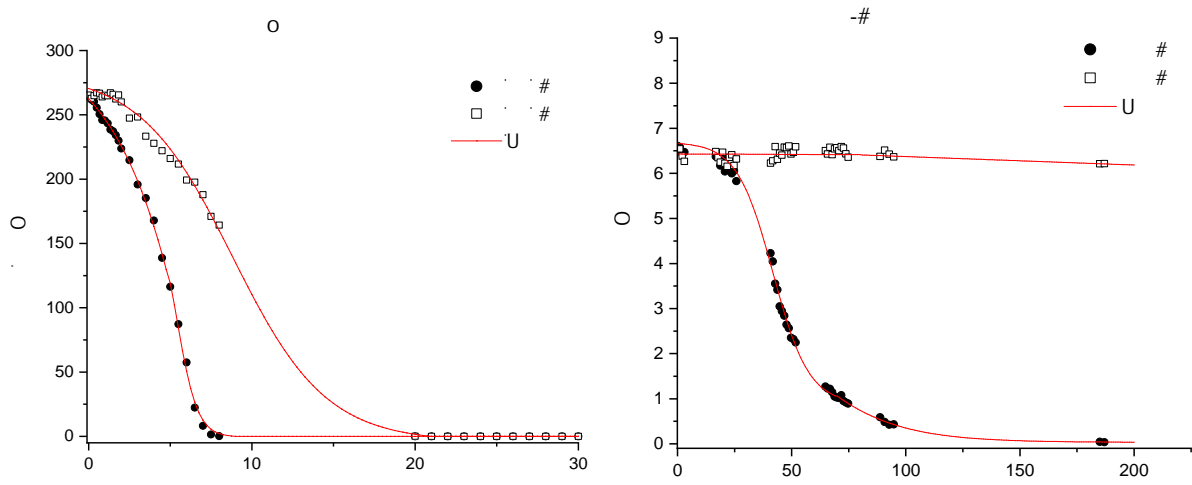


Abbildung 44: Temperaturabhängige Konzentrations-Zeit-Verläufe der Salicylsäure und 4-Chlorbenzoesäure

) M y M O M  
 - U y O M  
 7 8 o - = 8 =  
 u = =

Tabelle 13: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) zum Temperatureinfluss

	#			#		
	O		O	O		O
O						
#						
#						
"						
"						
-						
#						

y

#

) u

†

o

=

"

#

M

#

o

u

"

"

O o

-

U

M

y

"

=

o

-

)

=

o

7

-

7

)

†

†

†

)

†

#

u

†

O

#

"

#

#

u

M

-

†

=

"

=

-

"

†

u

M

)

U

"

†

u

#

o

u

-

"

o

)

M

†

o

u

†

O

u

#

U

†

#

7

U

"

M

U

-

u

o

k

†

)

U

u

#

†

=

o

7

"

†

#

=

)

†

†

=

) t U  
 O † @  
 ) † u  
 † @ o  
 ) - #

### 5.1.3 Lichtabhängigkeit

@ o o k  
 h  
 ) o † h  
 ) † o o  
 † †  
 " )  
 # -  
 - o  
 † ) †  
 " "  
 7 † o O  
 8 ) U  
 u M h o ) #  
 \ h  
 k 8 h  
 † k = = h  
 o =

---

) @ o u K ) h o  
 K † o 8 @ † /  
 " o † o @ u  
 h o U U o ) -  
 h 8

y #

) @ ) k

†

- O #

† O † † O

o O O O) u

o o ) U O

@u =

h

o M o #

) #

o O O O) u

o O O O O O

**Tabelle 14: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) zur Lichtabhängigkeit**

	O			O		
	O		O	O		O
o						
#						
#						
"						
"						
-						
#						

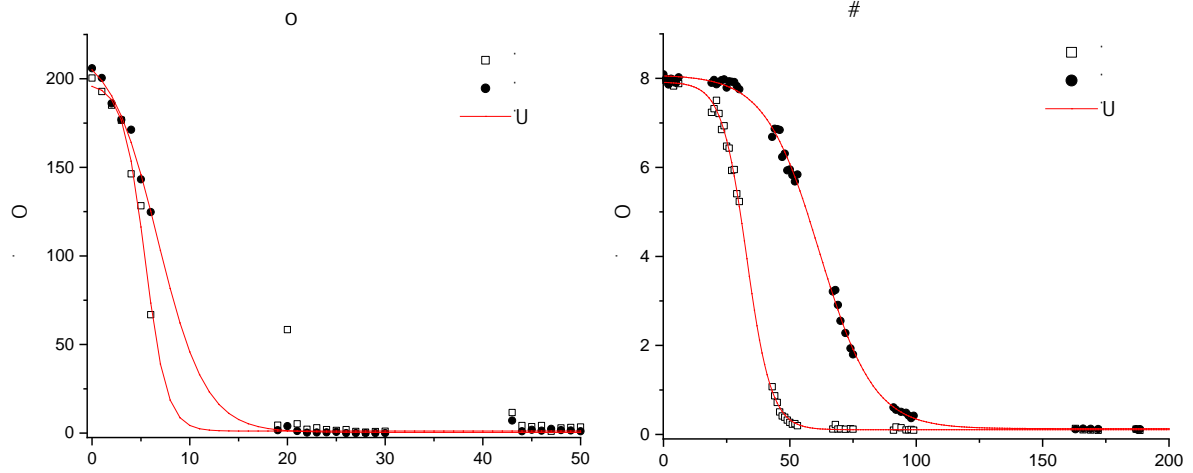


Abbildung 45: Lichtabhängiger Konzentrationsverlauf der Salicylsäure und 4-Chlorbenzoesäure

) h @ O M  
 # † =  
 o - #  
 @ † ) # #  
 h 7 - h  
 " † O U o M  
 † #  
 " o - )  
 M  
 M y ) U  
 ) o  
 = ) † o -  
 † h° M  
 † 7 h 8  
 o † ) \# o  
 o h  
 o O O †  
 ) o  
 8 h M 8 " o h  
 h° M \

y

#

) k h U h -  
 ° h ) -  
 o U k -  
 ° = " V -  
 V h 8 y O  
 @ = o 8 -  
 † o -  
 V -M ° \ V --  
 = U OV - V -  
 @ - o ) =  
 @ k O k  
 h ° -  
 M †

### 5.1.4 biotischer und abiotischer Abbau

- y - M U -  
 # U -  
 ) † h -  
 u O ° # ° -  
 V † ° ° -  
 8 † k ° -  
 7 u † - "  
 ° † U  
 U oyh\k ° h h - -  
 † † M @ O o  
 M \ M  
 ) - " U - h )V°  
 ) o - °  
 ° - -  
 U † U





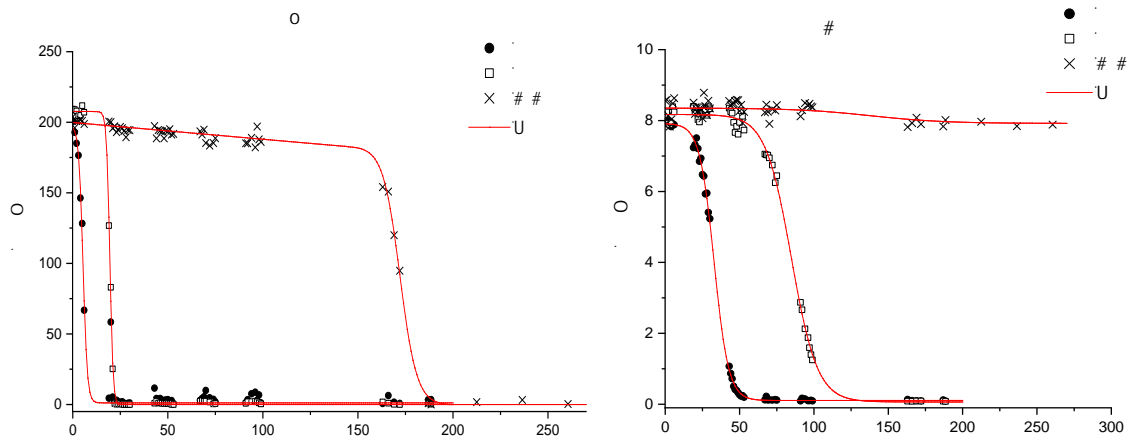


Abbildung 46: Konzentrationsverläufe von Salicylsäure und 4-Chlorbenzoesäure

) U t = t )  
U t # # - )  
M ) =  
7 #  
k =  
k k V h  
t t  
h " k -  
" o  
) t U  
t o t  
@ t =  
t 7 ) h  
= h ) o  
U u h t  
)  
# h  
) t # t  
O "  
# O M

y

#

M

y

"

-#

) U

-

°

)

M

-#

k

h

=

)

-

# #

‡

"

M

@

-M

-

-

7

h

@ †

°

†

-"

-

-#

-#

°

u

"

=

)

-

# #

-

°

U

‡

#

-

-

M

#

=

°

"

#

o

)

M

V

°

h

†

M

‡

‡

M

"

M

†

M

M

o

U

-

U

h

=

°

"

O o

k

o

)

"

"

y

V

"

o

-

#

"

-

-

°

) ‡

# #

†

†

°

"

°

o

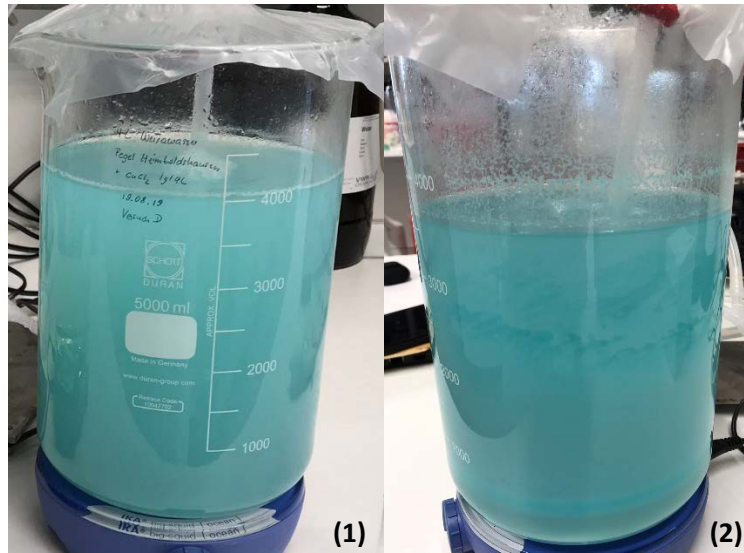


Abbildung 47: Modellversuch mit CuCl<sub>2</sub>-Zugabe (1) Versuchsbeginn (2) 10 Tage später

7 o # " - O

M )

U M

M ) h t U

V - M

# ‡ k ) t

‡ M " - h

#

- u8) #

- " u o

o o " o

" o M ) "

y ‡ t

) ) ‡ o

= ) "

y

#

) = U U  
 † M  
 " † k  
 O = "  
 o † # O M  
 " = ) =  
 # " o 7 U  
 † ) 8  
 o ) - † K  
 = V

### 5.1.5 Untersuchung auf Metabolite

y " #  
 U @ O  
 o k U ) @  
 h  
 o M k  
 † " = U  
 o ) † M  
 O" #  
 U M ) h  
 o V  
 U - †  
 M O # )  
 M U u  
 M U † †  
 o U )  
 7 U U  
 " @ U M o u  
 o / " M

y

#

)

"8 O@U O o

" O V

M t O )

" M o O O O )

M O O

) O " t O

M " u

o O O O @ - " M

‡ " U

M " u

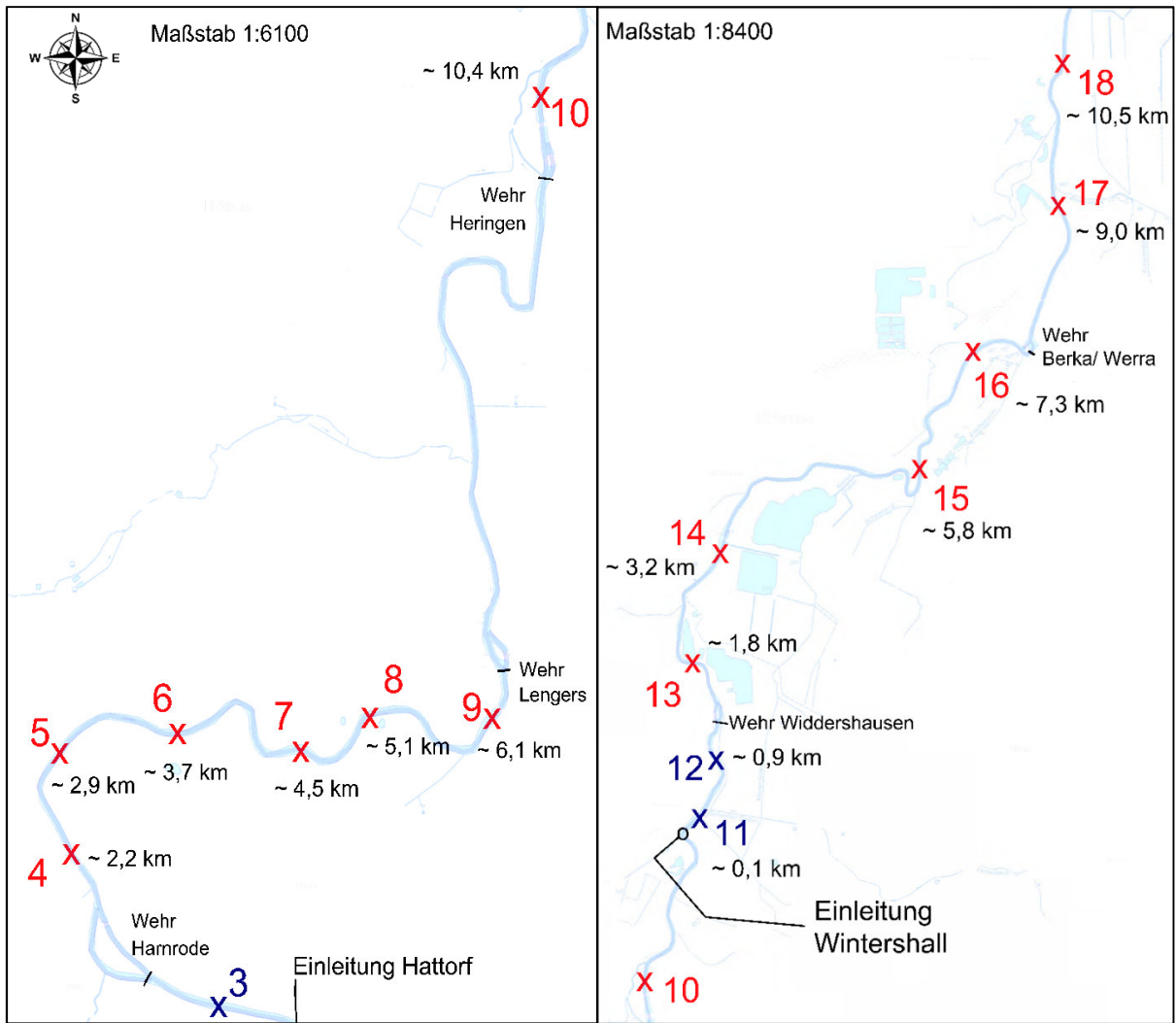
o O Oh ) -

" U O

## 5.2 Austrag und Abbau der aromatischen Carbonsäuren im Fließgewässer

### 5.2.1 Austrag und Verteilung der aromatischen Carbonsäuren im Fließgewässer

y M # h -  
 7 - ° -  
 ° o - o  
 = ‡ @ h h  
 8 - h  
 ‡ o = ‡  
 ° o h o u  
 = ° M  
 o ° o = o -- =  
 ‡ -# -  
 ) h ‡ M  
 o h " -  
 ) M U -  
 ‡ = h - -  
 = ‡ h - ‡ -  
 @ ° o ~ h -  
 -



**Abbildung 48: Übersichtskarte der Probenahmestellen**  
 (links: Abschnitt Hattorf; rechts: Abschnitt Wintershall;  
 blau: inhomogene Verteilung; rot: Annahme einer homogenen Verteilung)

@ k . . . . . U . . . . . y  
 † . . . . . 8 . . . . . † . . . . . ) ' M  
 # . . . . . † . . . . . o . . . . . O"  
 ) . . . . . M . . . . . #  
 M . . . . . h . . . . . o . . . . . -  
 M . . . . . † . . . . . - . . . . . h . . . . . ) -  
 . . . . . ) . . . . . † . . . . .  
 8 . . . . . - . . . . . † . . . . .  
 # . . . . . † . . . . . † . . . . . -  
 . . . . . h . . . . . † . . . . . . . . . . u  
 . . . . . - . . . . . M . . . . . " . . . . .



y

#

"8 O # † "

"8 O

u o # † # @

) M K )

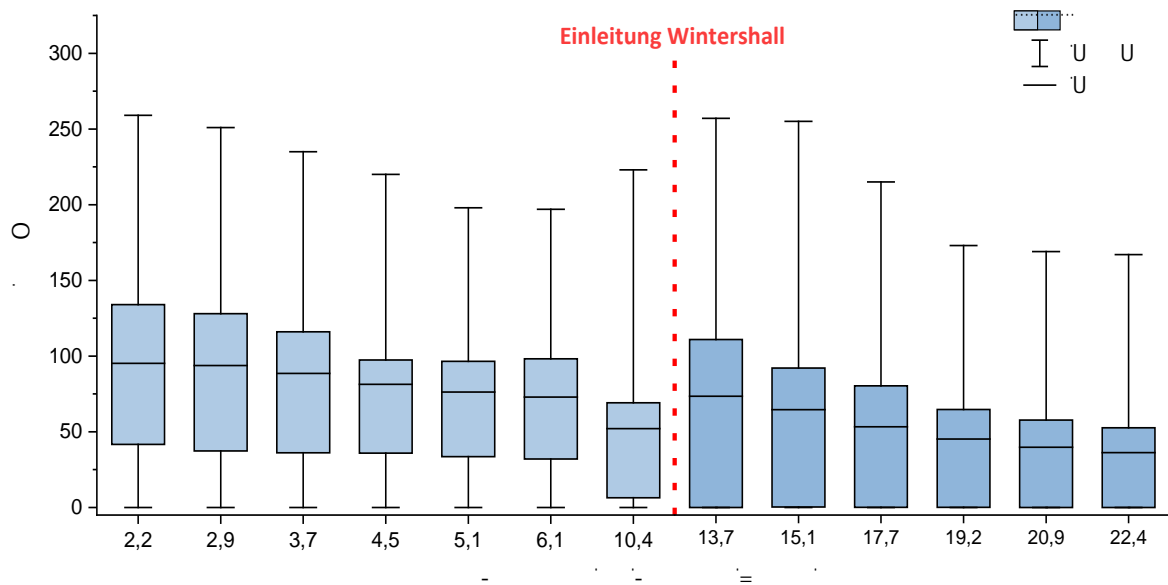
h " † h @

" h o ) " h )

# - "

o # @ # @ )

u o @ @ @ @ # @



**Abbildung 49: Salicylsäure-Konzentrationen in der Werra**  
 (hell: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)

o o " M \

@ k k o

U h° M - †

j M o @ † M

"8 "8 O O † K

) M # u

† K o u )

† - = o

y

#

" # M † M

o O Oo h

† " )

M - -

† )

# †

8 h U

#

@ 7 = - =

8 " " = † " -

† = M #

h 8

- = @ † -

M o - M

† @ M o

M h - o M

M

† † † M

# ) 8

h # M "

y 8

h U V )

o # † @ h

u - †

u o )

# h

8 u @ o

h o

# ) )

# u o # † @ # @

o # @ #

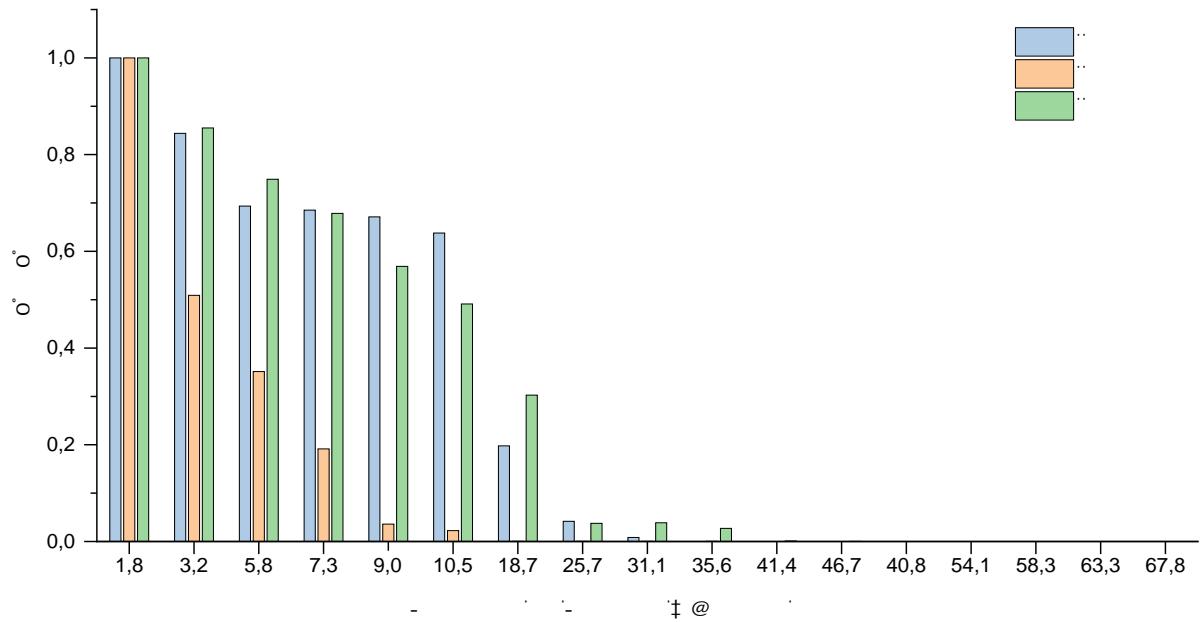


Abbildung 50: Normierte Salicylsäure-Werte der erweiterten Probenahme

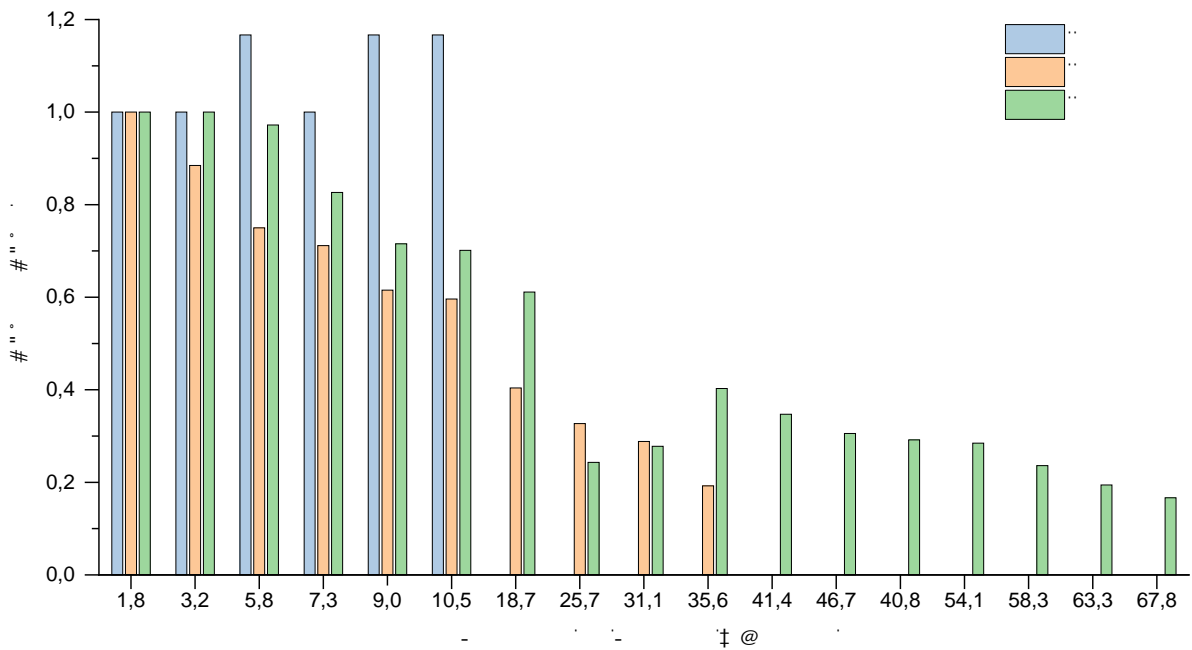


Abbildung 51: Normierte 4-Chlorbenzoesäure-Werte der erweiterten Probenahme

y

#

7 o M "8 U V

h @ ) o

M @u

# " † M

" "

o o

7 #

O h - † † K

u M

u M O )

M @ U V

M "8

@ o M

- h O

- † 7 - † =

u 7 - " o

M @ U V

h ) # M †

- † o

M "

o 7

) ) 7 8 u

# † ) -

h -

) -

† - † u

- † )

) 7 † u

## 5.2.2 Natürliche Konzentrationsänderung

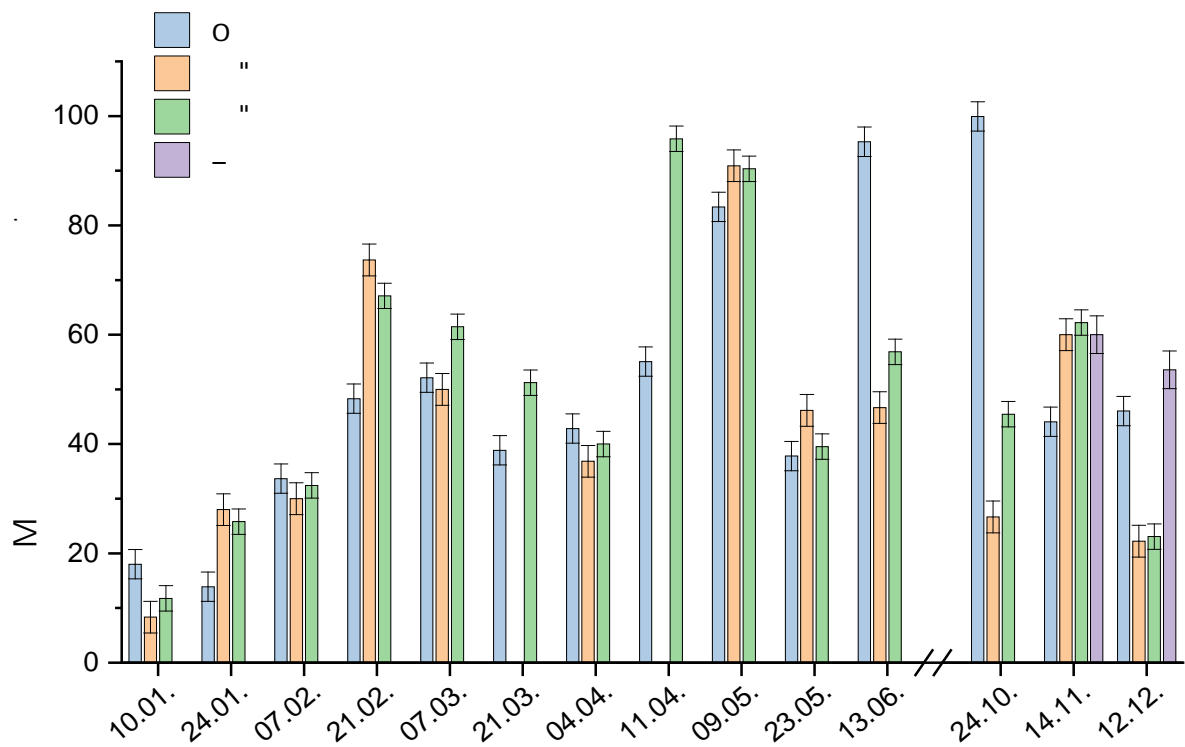
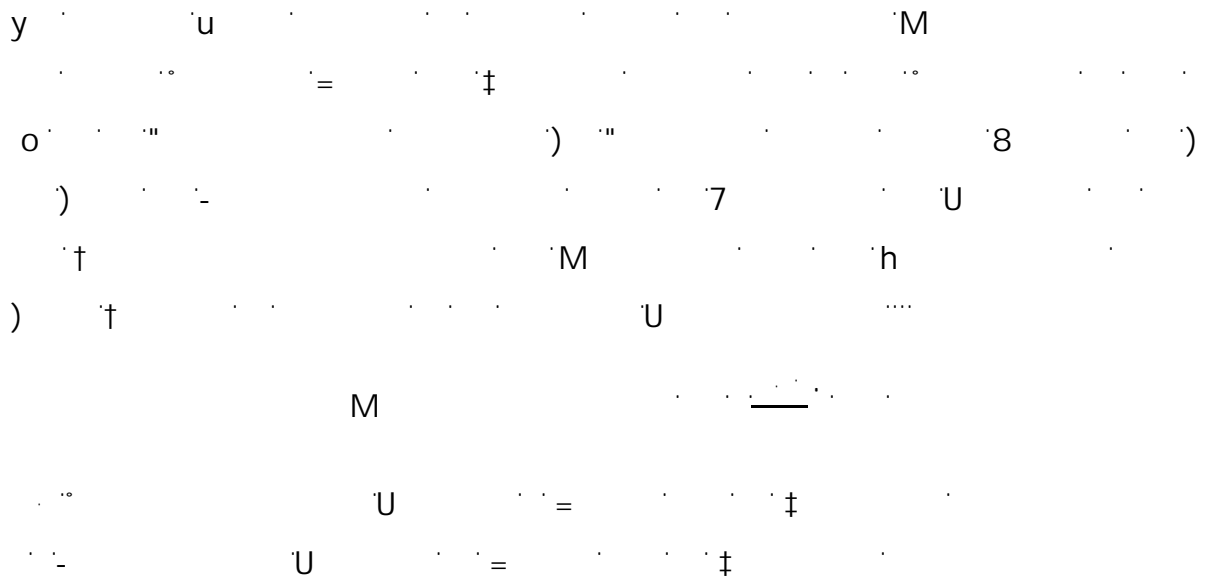


Abbildung 52: Prozentuale Abnahme der Konzentration im Abschnitt Hattorf

(Unterbrechung: keine Detektionen am 25.07.2019, 29.08.2019 und 19.09.2019)

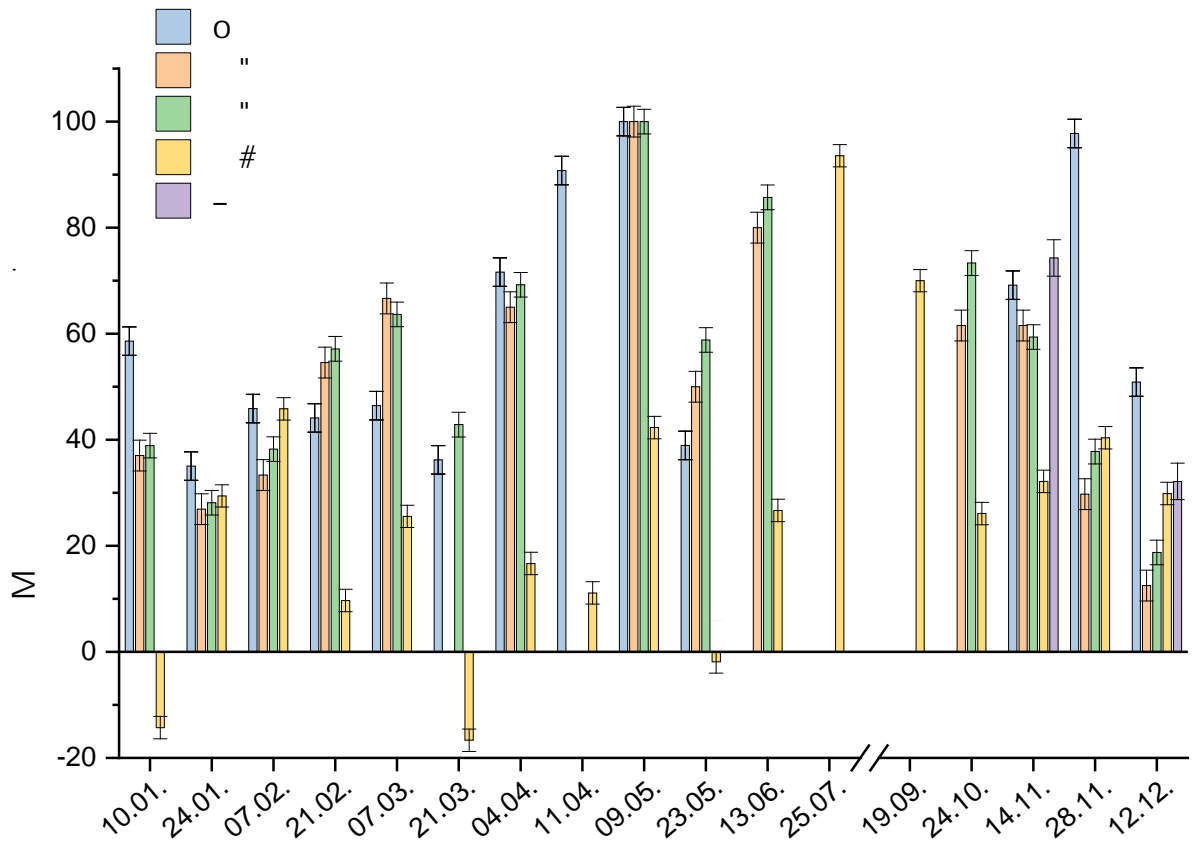


Abbildung 53: Prozentuale Änderung der Konzentration im Abschnitt Wintershall  
(Unterbrechung: keine Detektionen am 29.08.2019)

# ‡ ) ‡  
 ‡ 8 " "8 O  
 M u -  
 ) " ‡  
 = h =  
 ) M =  
 ‡ ‡ ‡  
 )  
 o ) # ‡  
 # 7 M  
 ) U -  
 ) O o  
 " u "  
 M " O

y #  
 = " -  
 † o  
 M U  
 M o  
 = M #  
 † 7 M -  
 7 # M  
 ) M  
 @ † # h  
 M ) M u  
 u

**Tabelle 16: Prozentualer Konzentrationsanstieg von 4-Chlorbenzoesäure**

†	O		
M			

" " M †  
 7 - M  
 o † U  
 ) o #  
 h u  
 M ) O h  
 k @ M o 7 )  
 † h

y

#

h † ) 7  
 ) M  
 † 8 8  
 ) 8  
 † ) † 7 M  
 7  
 ) o y  
 \_ ) )  
 " j # M " #  
 † † ~  
 \_ " \_ # 8  
 @  
 M ) y \_  
 o M u M o  
 8 ~ " † V  
 ) M

### 5.2.3 Einflussfaktoren auf die natürliche Konzentrationsänderung

M y  
 7 M @ 7 7  
 " M u )  
 † h o v \  
 M o  
 7 - M †  
 o U \ † V  
 - †  
 o " o o  
 # o # @ # † @



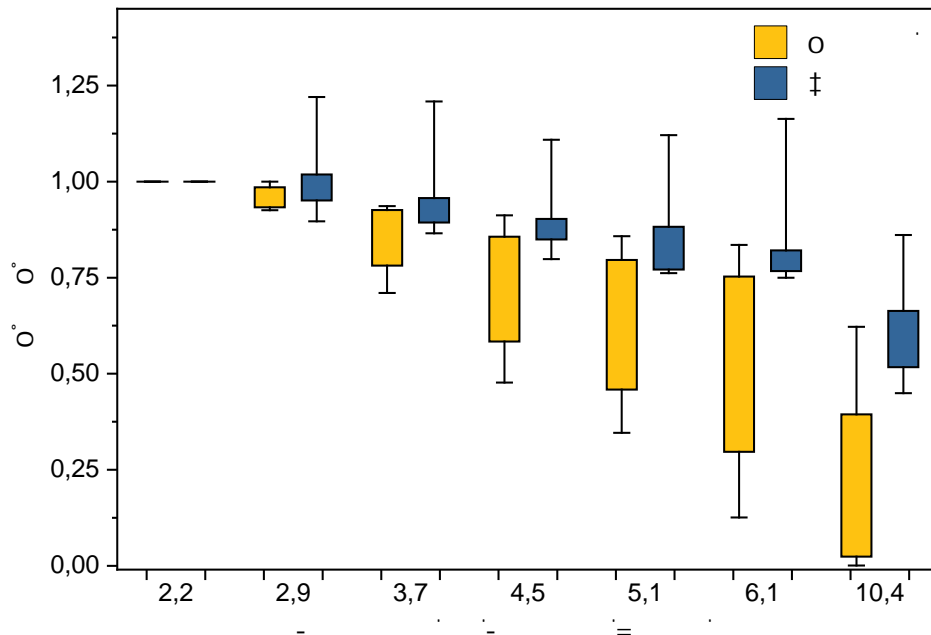


Abbildung 54: Änderung der normierten Salicylsäure-Konzentrationen Sommer/ Winter im Abschnitt Hattorf

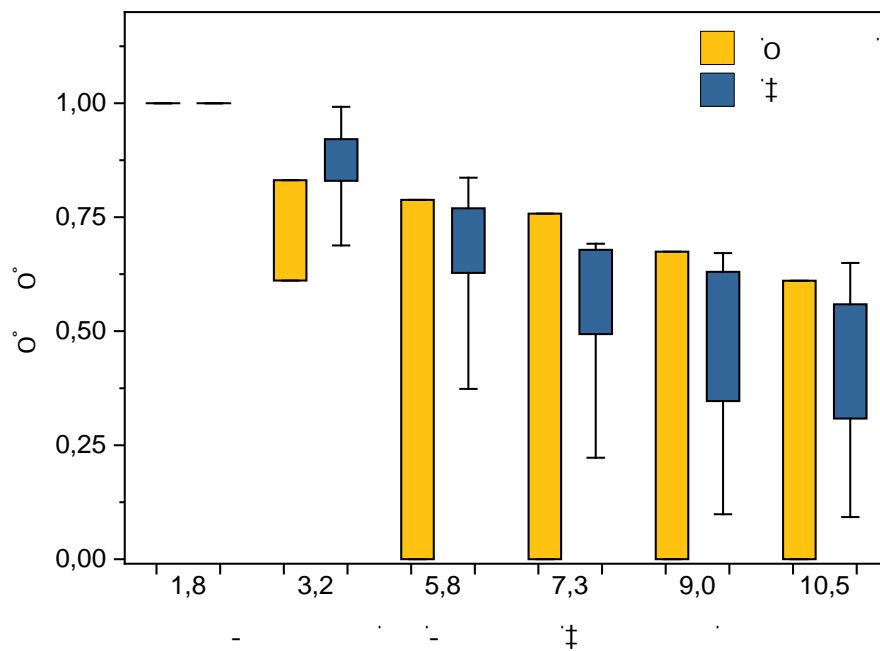


Abbildung 55: Änderung der normierten Salicylsäure-Konzentrationen Sommer/ Winter im Abschnitt Wintershall

@ t

t

o

h

M

@

o

t

h

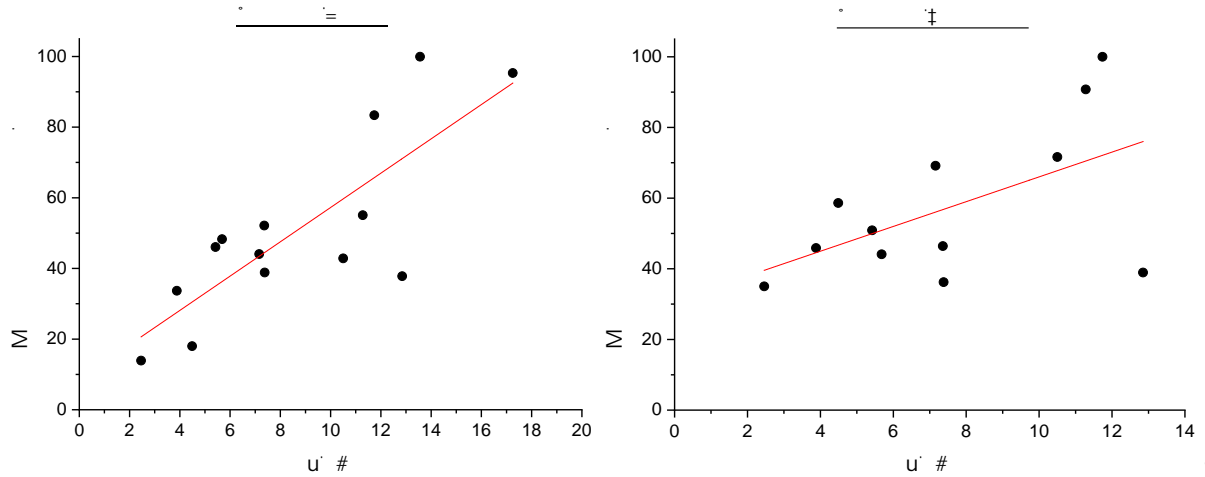
)

t

o

"

y #  
 † u # "8  
 ) o#@ #†@  
 = † † †  
 # h  
 M † o  
 o M " o  
 ) - # )  
 † † @ o  
 h -  
 " - u O U M  
 o  
 y - M u  
 " o - M  
 u ) #  
 † o#@ #@E



**Abbildung 56: Korrelation Konzentrationsabnahme Salicylsäure mit Temperatur**

) M M =  
 † † k "  
 M u M M  
 ) M #  
 u o

**Tabelle 17: Korrelationskoeffizienten von Konzentrationsabnahme und Temperatur  
(lineares Modell)**

	=	†
o		
"		
"		
#		

) U M o

u - #

) † † # o -

= 7 )

= #

@ † † † #

U

) M = u

7 - M @

o K o o

u # † †

) M @

M " "8 O † †

) " M

k M o ) M #

h K

- )

h @u o

- o M u

) u "

Tabelle 18: Vergleich der Probenahmetage 10.01.2019 und 24.10.2019 am Beispiel der Salicylsäure

O		
O		
M		
u #		
)		

M

K

M

)

)

†

†

M

@

= M

u

)

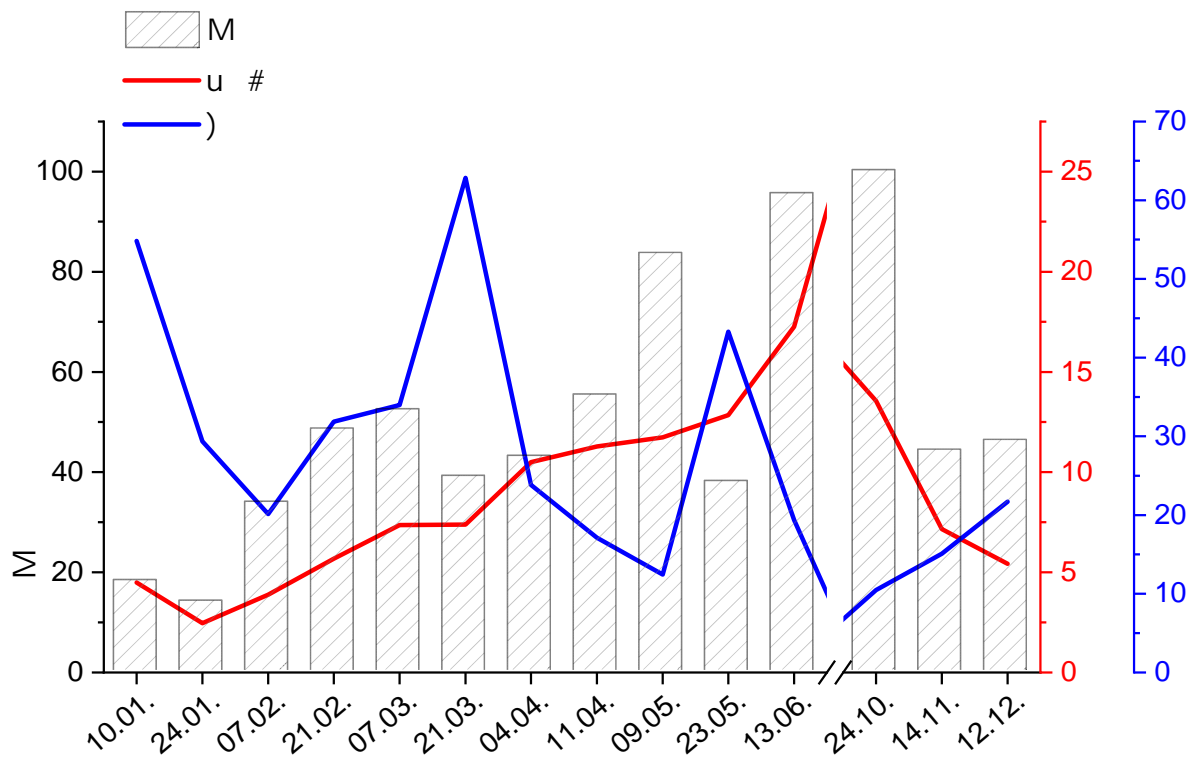


Abbildung 57: Vergleich der Konzentrationsabnahme von Salicylsäure mit der Temperatur und dem Durchfluss im Abschnitt Hattorf (Unterbrechung: 25.07.2019, 29.08.2019 und 19.09.2019)

y

#

= )

#

- )

‡

M

o

M

h

=

7

)

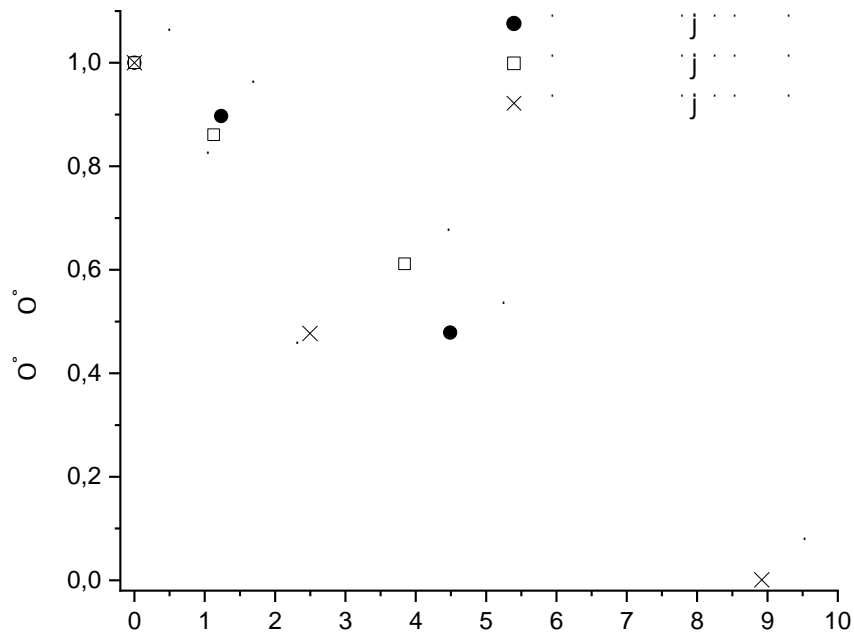
h

‡

u

**Tabelle 19: Vergleich der Parameter und Salicylsäure-Konzentrationen vom 07.03.2019, 21.03.2019 und 24.10.2019 (Abschnitt Hattorf)**

o			
o			" 8
M			
u #			
)			



**Abbildung 58: Einfluss der Verweilzeit auf die Konzentrationsabnahme im Abschnitt Hattorf (Beschriftung: Probenahmestellen; 4 = Heimbaldshausen; 7 = nach Harnrode; 10 = Heringen; vgl. Abbildung 22 und Tabelle 10, S. 40 – 42)**

)

7

8

M

)

Mo @ k

)

) t o t

7 U t

o t M

t ) k

t t

### 5.2.4 Halbwertszeiten

- 8 U M

o ) h = ) )

h

7 " o k

) 7 ) - =

U o7 M 8 o t

" =

U @

h o k

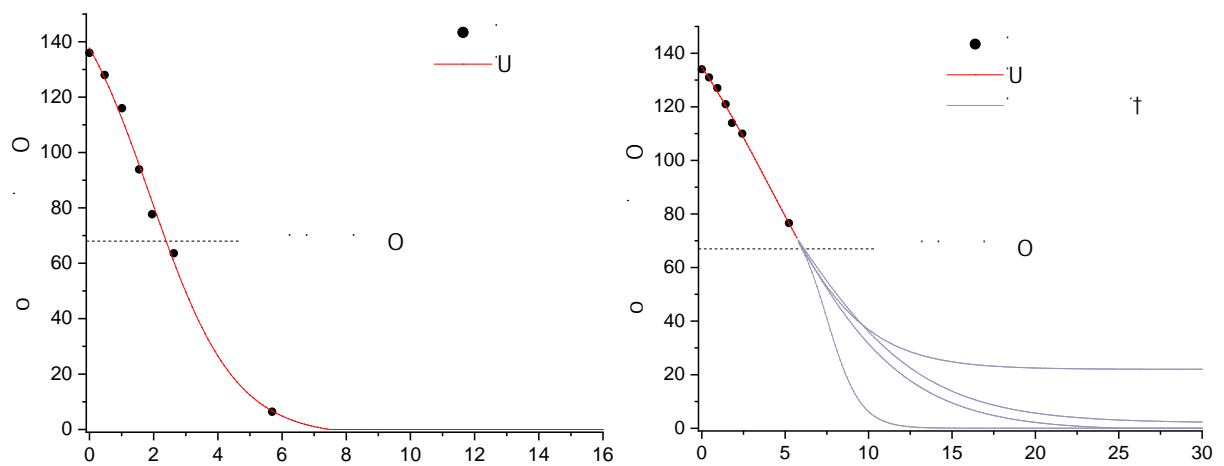


Abbildung 59: Konzentrationsverläufe zur Berechnung der Halbwertszeiten am Beispiel der Salicylsäure

O = U

" )

) M

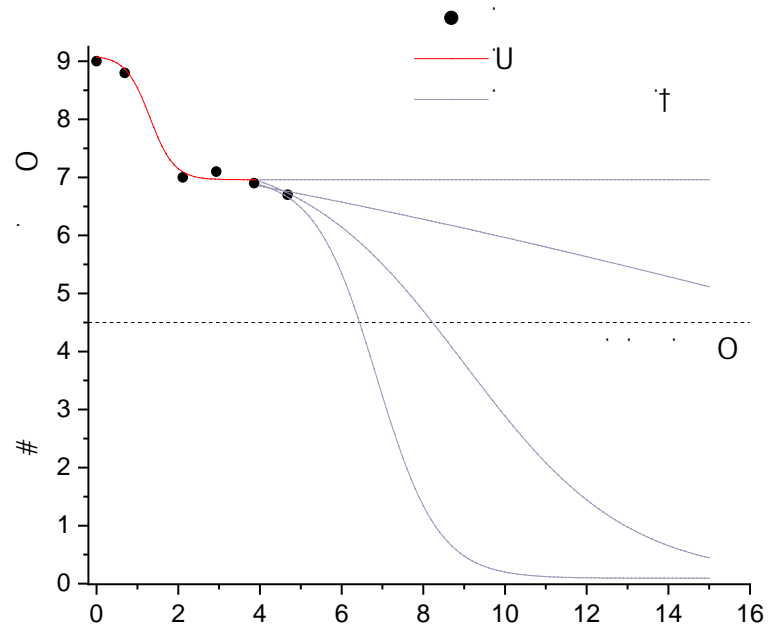


Abbildung 60: Konzentrationsverläufe zur Berechnung der Halbwertszeiten am Beispiel der 4-Chlorbenzoesäure

U

#

=

†

u

O

Tabelle 20: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) von Salicylsäure und trans-Zimtsäure des Abschnitts Hattorf

)	O			-		
	O		O	O		O
				" 8		
				" 8		
				" 8		
				" 8		
				" 8		
				" 8		
				" 8		
				" 8		

## Fortsetzung Tabelle 20:

)	0			-		
	0		0	0		0
				" 8		
				" 8		
				" 8		

0

" 8

**Tabelle 21: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) von 3- und 5-Bromsalicylsäure des Abschnitts Hattorf**

)	"			"		
	0		0	0		0
	" 8					
	" 8					

0

" 8



**Tabelle 22: : Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) von Salicylsäure und 4-Chlorbenzoesäure des Abschnitts Wintershall**

)	O			#		
	O		O	O		O
	" 8					
	" 8					
	" 8					
	" 8					
	" 8					

O

**Tabelle 23: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) von 3- und 5-Bromsalicylsäure des Abschnitts Wintershall**

)	"			"		
	O		O	O		O

O

Fortsetzung Tabelle 23:

)	"			"		
	0		0	0		0
	"8					
	"8			"8		

..... 0

..... "8

) M = † )

u o † =

U ) † =

U " M

7 † " M

o

† †

" = "

) = o - )

8 = U =

" # † =

U ) †

" )

y h y

U - M O

u M o

y #

V \ U

† - M

o h 8 "

h M \

h -

# h o

- y - M

) † - †

- M † #

...

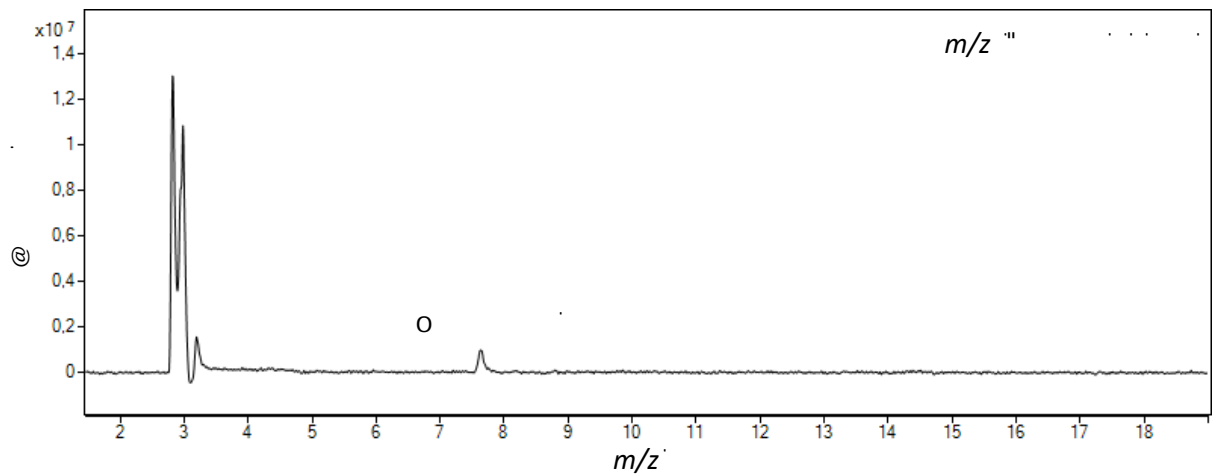
**5.2.5 Untersuchung auf Metabolite**

" # o

† U o U

" o o h "

U



**Abbildung 61: Screening Werrawasser (TIC)**

k k M

† h V \

) † #

" M h h k

o h o h k

y

#

t o " = O )

h U

o ) t @ )

) t k

k - t UKU ~

o ) o

o # @ - j )

t U " " M

#

= h )

o j t

) -

t " ) v 7 )

8 O " "

t k " h

## 6. Ökotoxikologische Bewertung

The following table provides a summary of the ecotoxicological assessment, including the predicted no-effect concentration (PNEC) and the risk characterization ratio (RCR).

Parameter	Value	Unit
Predicted No Effect Concentration (PNEC)	0.001	µg/L
Measured Environmental Concentration (MEC)	0.001	µg/L
Risk Characterisation Ratio (RCR)	1	-

The RCR is calculated as follows:

$$RCR = \frac{MEC}{PNEC} = \frac{0.001 \text{ µg/L}}{0.001 \text{ µg/L}} = 1$$

Since the RCR is equal to 1, the risk is considered to be low.

The following table provides a summary of the ecotoxicological assessment, including the predicted no-effect concentration (PNEC) and the risk characterization ratio (RCR).

Parameter	Value	Unit
Predicted No Effect Concentration (PNEC)	0.001	µg/L
Measured Environmental Concentration (MEC)	0.001	µg/L
Risk Characterisation Ratio (RCR)	1	-

The RCR is calculated as follows:

$$RCR = \frac{MEC}{PNEC} = \frac{0.001 \text{ µg/L}}{0.001 \text{ µg/L}} = 1$$

Since the RCR is equal to 1, the risk is considered to be low.

y k#k  
 a \ o  
 8 y  
 @u hV-# † M U  
 h 8 k#k j  
 ) M U  
 " @ " k#k † u  
 ° o #E

**Tabelle 24: PNEC-Werte mit berechnete RCR-Verhältnisse**

	hV-# <sub>o</sub> † O	U-# <sub>o</sub> 8 O	k#k	U-# <sub>o</sub> 8 O	k#k
o					
#					
-					
"					
"					
#					
#					

k#k o 8  
 k a u M  
 † o - u  
 # U K h  
 M ) #  
 hV-# † k#k †  
 8 ) o  
 #  
 k y

## 7. Zusammenfassung

@  
# h M † † 7  
‡ ) U M O  
u U O  
U 7 †  
# o - k  
" M # #  
" ) U M  
a † - -  
u O o †  
#  
‡ † M  
h # 7 o  
= o ) † o  
o ) ) o  
M o  
o = #  
‡ # =  
)  
U o " u  
O M ) †  
# h "  
= h  
h # \  
‡ ) h  
7 h 8 h  
‡ † ) " 8 -  
o = † = y 7  
- " ) )  
h 7 - =

h † †  
# ) - h  
k ) 7 K  
h M  
)  
- h  
) h  
o o o u\# )\# V  
o h u = †  
@ 7 M  
M a M  
h v †  
) k - ) 8  
† 7 )  
7 M  
M 7 ) =  
) o  
U = ) -  
7 a k †  
) U = K  
o = k  
=  
- k #  
† M )  
† - y  
† † ) "  
y k y "  
y #  
k a



## 8. Abstract

@

u

†

†

†

u

†

u

7

=

u

u

u

o

@

†

u

h

8

†

u

=

=

u

\

†

@

---

rate of the river. However, no direct correlation of the flow rate could be determined due to the varying composition of the process wastewater.

In addition, further parameters were considered which are relevant for biodegradation. This list of parameters included not only certain individual parameters but also groups of substances such as oxygen content, the sum parameters TOC and DOC, the nutrients nitrogen and phosphorus as well as temperature and pH.

Concentration decreases of between 9.7 – 100 % were determined within the flow section. Due to the complexity of aquatic ecosystems, the decrease in concentration is not dependent on a single parameter. Besides water temperature and initial concentration, the flow rate played a decisive role. A low flow rate results in a longer flow time and higher retention times. This promotes the time-dependent degradation process. Half-lives could be calculated from the correlation of the flow time and the flow rate. These were between 0.5 and 22.1 hours and thus lower than the half-lives determined from the model tests. Due to the interaction of various factors in the aquatic ecosystem, faster degradation could be observed in the real system (river Werra). However, it should be noted that half-lives could not be modelled for all substances in the real system if the half-life concentration was not approximately reached.

For further classification of the results, a risk assessment of the aromatic carboxylic acids was carried out for the concentrations measured in the river Werra. The ecotoxicological effect is directly related to the environmental concentrations and the environmental chemical behavior of the respective compound under consideration. The environmental relevance was assessed using an ecotoxicological risk analysis. Taking into account the environmental concentrations, an acceptable risk for the aquatic ecosystem was determined for the aromatic carboxylic acids.

## 9. Literaturverzeichnis

- [1] K+S Aktiengesellschaft [Hrsg.], *Ein Jahrhundert Kalibergbau an Werra und Ulster*, Kassel: Firmenschrift, **2001**.
- [2] I. Stahl, W. W. Beer, K. R. Wambach-Sommerhoff und R. Keidel, *Produkte der Kaliindustrie*, 5. Aufl., Band 8 - Ernährung, Gesundheit, Konsumgüter, Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KG, **2005**.
- [3] H. Rauche, *Die Kaliindustrie im 21. Jahrhundert*, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, **2015**.
- [4] M. Dötterl, U. Wachsmuth, L. Waldmann, H. Flachberger, M. Mirkowska, L. Brands, P.-M. Beier und I. Stahl, *Electrostatic Separation*, in Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Weinheim, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, **2016**.
- [5] C. Wiegand, *Entstehung und Deutung wichtiger organischer Trivialnamen*, *Angew. Chem. A.*, *60*, 109 – 111, **1948**.
- [6] G. Eisenbrand und P. Schreier, *RÖMPP Lexikon Lebensmittelchemie*, 2. Aufl., Stuttgart: Georg Thieme Verlag KG, **2006**.
- [7] M. Bahadir, H. Parlar und M. Spittler, *Umweltlexikon*, Heidelberg: Springer-Verlag, **2000**.
- [8] D. F. Klessig und J. Malamy, *The salicylic acid signal in plants*, *Plant Mol. Biol.*, *26*, 1439 – 1458, **1994**.
- [9] D. F. K. J. Malamy, *Salicylic acid and plant disease resistance*, *Plant J.*, *5*, 643 – 654, **1992**.
- [10] D. A. Dempsey und D. F. Klessig, *How does the multifaceted plant hormone salicylic acid combat disease in plants and are similar mechanisms utilized in humans?*, *BMC Biology.*, *23*, **2017**.
- [11] D. A. Dempsey, A. C. Vlotb, M. C. Wildermuthc und D. F. Klessiga, *Salicylic Acid Biosynthesis and Metabolism*, ASPB, p. e0156, **2011**.
- [12] G. Szalai, S. Horgosi, V. Soós, I. Majláth, E. Balázs und T. Janda, *Salicylic acid treatment of pea seeds induces its de novo synthesis*, *J. Plant Physiol.*, *168*, 213 – 219, **2011**.

- [13] D. W. Russell und E. E. Conn, *The cinnamic acid 4-hydroxylase of pea seedlings*, Arch. Biochem. Biophys., 122, 256 – 258, **1967**.
- [14] B. B. Buchanan, W. Gruissem und R. L. Jones, *Biochemistry & Molecular Biology of Plants*, 2. Aufl., Oxford: John Wiley & Sons, **2015**.
- [15] W. Han, P. Zhang, W. Zhu, J. Yin und L. Li, *Photocatalysis of p-chlorobenzoic acid in aqueous solution under irradiation of 254nm and 185nm UV light*, Water Res., 4197 – 4203, **2004**.
- [16] Y. He, F. Grieser und M. Ashokkumar, *Kinetics and Mechanism for the Sonophotocatalytic Degradation of p-Chlorobenzoic Acid*, J. Phys. Chem. A., 115, 6582 – 6588, **2011**.
- [17] Gangwang, G. Liu, H. Liu, N. Zhang und Y. Wang, *Photodegradation of salicylic acid in aquatic environment: Effect of different forms of nitrogen*, Sci. Total Environ., 573 – 577, **2012**.
- [18] H. H. Richnow, R. Seifert, J. Hefter, M. Kästner, B. Mahro und W. Michaelis, *Metabolites of xenobiotica and mineral oil constituents linked to macromolecular organic matter in polluted environments*, Org. Geochem., 3 - 5, 671 – 681, **1994**.
- [19] „SciFinder,“ <https://scifinder.cas.org/scifinder/view/scifinder/scifinderExplore.jsf>. [Online; **21.06.2018**].
- [20] D. R. Lide, *Handbook of Chemistry and Physics*, 85<sup>th</sup> ed. Hrsg., Boca Raton: CRC Press LLC, **2004**.
- [21] J. H. Montgomery, *Groundwater Chemicals Desk Reference*, 3. Aufl. , Boca Raton: CRC Press LLC, **2000**.
- [22] Sicherheitsdatenblätter der aromatischen Carbonsäuren
- [23] R. A. Hites, J. D. Raff und P. Wiesen, *Umweltchemie*, Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, **2017**.
- [24] H. P. Latscha, U. Kazmaier und H. A. Klein, *Organische Chemie*, 7. Aufl., Heidelberg: Springer-Verlag, **2016**.
- [25] E. Breitmaier und G. Jung, *Organische Chemie*, 6. Aufl., Stuttgart: Georg Thieme Verlag, **2009**.

- [26] N. W. Hirwe und B. V. Patil, *Derivatives of Salicylic Acid*, Proc. Indian Acad. Sci., 321 – 325, **1937**.
- [27] C. Knorr und T. v. Schell, *Mikrobieller Schadstoffabbau*, Wiesbaden: Friedr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, **1997**.
- [28] W. Klöpffer, *Verhalten und Abbau von Umweltchemikalien*, 2. Aufl., Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, **2012**.
- [29] G. C. Miller und R. G. Zepp, *Effects of suspended sediments on photolysis rates of dissolved pollutants*, Water Res., 13, 453 – 459, **1979**.
- [30] G. R. Chaudhry und S. Chapalamaadugu, *Biodegradation of Halogenated Organic Compounds*, Microbiol. Rev., 59 – 79, **1991**.
- [31] T. S. Marks, R. W. Smith und A. V. Quirk, *Degradation of 4-Chlorobenzoic Acid by Arthobacter sp.*, Appl. Environ. Microbiol., 1020 – 1025, **1984**.
- [32] P. Nikodem, V. Hecht, M. Schlömann und D. H. Pieper, *New Bacterial Pathway for 4- and 5- Chlorosalicylate Degradation via 4-Chlorocatechol and Maleylacetate in Pseudomonas sp. Strain MT1*, J. Bacteriol., 6790 – 6800, **2003**.
- [33] G. Fuchs, *Allgemeine Mikrobiologie*, 9. Aufl., Stuttgart: Georg Thieme Verlag, **2014**.
- [34] D. E. Hughes, *The Metabolism of Halogen-substituted Benzoic Acid by Pseudomonas fluorescens*, Biochem. J., 96, 181 – 188, **1965**.
- [35] T. R. Silva, E. Valdman, B. Valdman und S. G. F. Leite, *Salicylic acid degradation from aqueous solutions using Pseudomonas fluorescens HK44: Parameters studies and application tools*, J. of Microbiol., 38, 39 – 44, **2007**.
- [36] P. G. England, J. Gibson und C. S. Harwood, *Reductive, Coenzyme A-Mediated Pathway for 3-Chlorobenzoate degradation in the Phototrophic Bacterium Rhodospseudomonas palustris*, Appl. Environ. Microbiol., 67, 1396 – 1399, **2001**.
- [37] F. Baum, *Physiologische und biochemische Studien über den Abbau von Salicylsäure durch Aspergillus niger 2. Untersuchungen über den Abbauweg der Salicylsäure*, Allg. Mikrobiol., 43, 185 – 198, **1904**.
- [38] N. Walker und D. Harris, *Metabolism of 3-Chlorobenzoic acid by azotobacter species*, Soil. Biol. Biochem., 2, 27 – 32, **1970**.

- [39] V. Andreoni und G. Bestetti, *Comparative analysis of different Pseudomonas strains that degrade cinnamic acid*, Appl. Environ. Microbiol., 4, 930 – 934, **1986**.
- [40] T. R. A. S. J.-P. Hintner, *Biochemical and Molecular Characterization of a Ring Fission Dioxygenase with the Ability to Oxidize (Substituted) Salicylate(s) from Pseudaminobacter salicylatoxidans*, J. Biol. Chem., 36, 37250 – 37260, **2004**.
- [41] R. L. Crawford, P. E. Olson und T. D. Frick, *Catabolism of 5-Chlorosalicylate by a Bacillus Isolated from the Mississippi River*, Appl. Environ. Microbiol., 38, 379 – 384, **1979**.
- [42] E. Dorn, M. Hellwig, W. Reineke und H.-J. Knackmuss, *Isolation and Characterization of a 3-Chlorobenzoate degrading Pseudomonad*, Arch. Microbiol., 61 – 70, **1974**.
- [43] P. H. Clarke und M. H. Richmond, *Genetics and Biochemistry of Pseudomonas*, London New York Sydney Toronto: John Wiley & Sons, **1975**.
- [44] B. Vrchotová, M. Macková, T. Macek und K. Demnerová, *Bioremediation of Chlorobenzoic Acids*, Applied Bioremediation - Active and Passive Approaches, **2013**.
- [45] D. C. Harris, *Lehrbuch der Quantitativen Analyse*, 8. Aufl. , Heidelberg: Springer-Verlag, **2014**.
- [46] M. Otto, *Analytische Chemie*, 4. Aufl. , Weinheim: Wiley-VCH Verlag & Co. KGaA, **2011**.
- [47] K. Cammann, *Instrumentelle Analytische Chemie*, 1. Aufl., Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, **2001**.
- [48] S. Kromidas, *Das HPLC-MS-Buch für Anwender*, Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, **2017**.
- [49] J. H. Gross, *Massenspektrometrie*, Heidelberg: Springer-Verlag, **2013**.
- [50] Arbeitsgemeinschaft für die Reinhaltung der Elbe, *Ausgewählte organische Spurenverunreinigungen in der Elbe und Elbenebenflüssen im Zeitraum 1994 – 1990*, **2000**.
- [51] A. Bergmann, R. Fohrmann und F.-A. Weber, *Zusammenstellung von Monitoringdaten zu Umweltkonzentrationen von Arzneimitteln*, Umweltbundesamt, **2011**.

- [52] Bund/Länderausschluss für Chemikaliensicherheit (BLAC), *Arzneimittel in der Umwelt Auswertung der Untersuchungsergebnisse*, **2003**.
- [53] D. Stülten, *Untersuchung zum Vorkommen von Arzneimittelwirkstoffen und deren Humanmetaboliten in der aquatischen Umwelt*, Institut für Umweltforschung, Technische Universität Dortmund, **2009**.
- [54] D. Janke und W. Fritsche, *Mikrobielle Dechlorierung von Pesticiden und anderen Umweltchemikalien*, *Z. allg. Mikrobiologie*, **18**, 365 – 382, **1978**.
- [55] R. S. Horvath, *Microbial Co-Metabolism and the Degradation of Organic Compound in Nature*, *Bacteriol. Rev.*, **36**, 146 – 155, **1972**.
- [56] S. Yan und X. Dong, *Perception of the plant immune signal salicylic acid*, *Curr. Opin. Plant Biol.*, **20**, 64 – 68, **2014**.
- [57] DIN EN ISO 5667-1, *Wasserbeschaffenheit - Probenahme - Teil 1: Anleitung zur Erstellung von Probenahmeprogrammen und Probenahmetechniken*, **2007**.
- [58] DIN EN ISO 5667-6, *Wasserbeschaffenheit - Probenahme - Teil 6: Anleitung zur Probenahme aus Fließgewässern*, **2016**.
- [59] A. H. Neilson und A.-S. Allard, *Organic Chemicals in the Environment: Mechanisms of Degradation and Transformation*, 2. Aufl., Boca Raton: Taylor & Francis Group, **2013**.
- [60] J. Brehm und M. P. D. Meijering, *Fließgewässerkunde*, 3. Aufl., Wiesbaden: Quelle & Meyer Verlag, **1996**.
- [61] W. Kölle, *Wasseranalysen - richtig beurteilt*, 4. Aufl., Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, **2017**.
- [62] K. Fent, *Ökotoxikologie*, 4. Aufl., Stuttgart: Georg Thieme Verlag, **2013**.
- [63] Kali und Salz AG und U. Kleine-Kleffmann, *Untersuchung der biologischen Abbaubarkeit von Konditionierungsmitteln in Salzlaugen*, **1985**.
- [64] DIN EN ISO 9. 1999, *Bestimmung der aeroben biologischen Abbaubarkeit organischer Stoffe im wässrigen Medium*, **1999**.
- [65] [https://www.umwelt-online.de/regelwerk/cgi-bin/suchausgabe.cgi?pfad=/eu/14a/14a\\_0260c.htm&such=Abbau](https://www.umwelt-online.de/regelwerk/cgi-bin/suchausgabe.cgi?pfad=/eu/14a/14a_0260c.htm&such=Abbau), [Online; **10.02.2019**].

- [66] S. Simkins und M. Alexander, *Models for Mineralization Kinetics with the Variables of Substrate Concentration and Population Density*, Appl. Environ. Microbiol., 6, 1299 – 1306, **1984**.
- [67] S. K. Schmidt, S. Simkins und M. Alexander, *Models for the Kinetics of Biodegradation of Organic Compounds Not Supporting Growth*, Appl. Environ. Microbiol., 2, **1985**.
- [68] G. Okpokwasili und C. Nweke, *Microbial growth and substrate utilization kinetics*, Afr. J. Biotechnol., 5, 305 – 317, **2005**.
- [69] W. Reineke und H.-J. Knackmuss, *chemical structure and biodegradability of halogenated aromatic compounds - substituent effects on 1,2-dioxygenation of benzoic acid*, Biochim. Biophys. Acta, 542, 412 – 423, **1978**.
- [70] Y. Jouanneau, J. Micoud und C. Meyer, *Purification and Characterization of a Three-Component Salicylate 1-Hydroxylase from Sphingomonas sp. Strain CHY-1*, Appl. Environ. Microbiol., 23, 7515 – 7521, **2007**.
- [71] M. M. Häggblom, *Microbial breakdown of halogenated aromatic pesticides and related compounds*, FEMS Microbiol. Rev., 29 – 72, **1992**.
- [72] J.-H. Kang und F. Kondo, *Effects of bacterial counts and temperature on the biodegradation of bisphenol A in river water*, Chemosphere, 49, 493 – 498, **2002**.
- [73] M. A. Manzano, J. A. Perales, D. Sales und J. M. Quiroga, *The effect of temperature on the biodegradation of a nonylphenol polyethoxylate in river water*, Wat. Res., 33, 2593 – 2600, **1999**.
- [74] J. G. Leahy und R. R. Colwell, *Microbial Degradation of Hydrocarbons in the Environment*, Microbiol. Rev., 54, 305 – 315, **1990**.
- [75] R. P. Schwarzenbach und D. M. I. P. M. Gschwend, *Environmental organic chemistry*, 2. Aufl., Hoboken: John Wiley & Sons, **2003**.
- [76] R. G. Zepp und D. M. Cline, *Rates of Direct Photolysis in Aquatic Environment*, Environ. Sci. Technol., 11, 359 – 366, **1977**.
- [77] J.-S. Seo, Y.-S. Keum und Q. X. Li, *Bacterial Degradation of Aromatic Compounds*, Int. J. Environ. Res. Public Health, 6, 278 – 309, **2009**.



- [78] R. G. Zepp, P. F. Schlotzhauer und R. M. Sink, *Photosensitized Transformations Involving Electronic Energy Transfer in Natural Waters: Role of Humic Substances*, Environ. Sel. Technol., 19, 74 – 81, **1985**.
- [79] S. J. Stohs und D. Bagchi, *oxidative mechanisms in the toxicity of metal ions*, Free Radic. Biol. Med., 18, 321 – 225, **1995**.
- [80] A. Schmidt, A. Schmidt, G. Haferburg und E. Kothe, *Superoxide dismutases of heavy metal resistant streptomycetes*, J. Basic Microbiol., 47, 56 – 62, **2007**.
- [81] A. Y. Dursun, G. Uslu, Y. Cuci und Z. Aksu, *Bioaccumulation of copper(II), lead(II) and chromium(VI) by growing Aspergillus niger*, Process Biochem., 1647 – 1651, **2003**.
- [82] G. F. Condike und A. E. Martell, *mixed ligand chelates of copper(II)*, J. inorg. nucl. Chem., 31, 2455 – 2466, **1969**.
- [83] G. A. L'Heureux und A. E. Martell, *mixed ligand chelates of copper(II)*, J. inorg. Nucl. Chem., 26, 481 – 491, **1966**.
- [84] M. Puchoňová, M. Mazúr, Z. Růžičková, D. Valigura und J. Moncol, *Several salicylatocopper(II) complexes with diethylnicotinamide: Preparation, structure, spectral properties and Hirshfeld surface analysis*, J. Mol. Struct., 1181, 373 – 382, **2019**.
- [85] H. R. Dash, N. Mangwani, J. Chakraborty, S. Kumari und S. Das, *Marine bacteria: potential candidates for enhanced bioremediation*, Appl. Microbiol. Biotechnol., 561 – 571, **2013**.
- [86] B. El-Deeb, *Natural combination of genetic systems for degradation of phenol and resistance to heavy metals in phenol and cyanide assimilating bacteria*, Malays. J. Microbiol., 5, 94 – 103, **2009**.
- [87] European Commission, *Technical Guidance Document on Risk Assessment Part II*, Ispra/ Italien, **2003**.
- [88] D. Ning, H. Wang und Y. Zhuang, *Induction of functional cytochrome P450 and its involvement in degradation of benzoic acid by Phanerochaete chrysosporium*, Biodegradation, 21, 297 – 308, **2010**.

- [89] K. F. Ho, S. S. H. Ho, S. C. Lee, K. Kawamura, S. C. Zou, J. J. Cao und H. M. Xu, *Summer and winter variations of dicarboxylic acids, fatty acids and benzoic acid in PM2.5 in Pearl Delta River Region, China*, *Atmos. Chem. Phys.*, 2197 – 2208, **2011**.
- [90] R. G. Zepp und P. F. Schlotzhauer, *Influence of algae on photolysis rates of chemicals in water*, *Environ. Sol. Technol.*, 17, 462 – 468, **1983**.
- [91] S. L. Fuenmayor, M. Wild, A. L. Boyes und P. A. Williams, *A Gene Cluster Encoding Steps in Conversion of Naphthalene to Gentisate in Pseudomonas sp. Strain U2*, *J. Bacteriol.*, 9, 2522 – 2530, **1998**.
- [92] M. R. Harpel und J. D. Lipscomb, *Gentisate 1,2-Dioxygenase from Pseudomonas*, *J. Biol. Chem.*, 11, 6301 – 6311, **1990**.
- [93] B. H. Juurlink, H. J. Azouz, A. M. Aldalati, B. M. AlTinawi und P. Ganguly, *Hydroxybenzoic acid isomers and the cardiovascular system*, *Nutr. J.*, 63, 1 – 10, **2014**.
- [94] „Apple Maps“, [Online; **21.01.2020**].
- [95] K+S, „<http://www.kali-gmbh.com/dede/company/werk-werra/index.html>“, [Online; **19.02.2019**].
- [96] F. Beck, *Elektroorganische Chemie*, Berlin: Akademie-Verlag, **1974**.
- [97] T. Zheng, L. Yong und e. al., *Electrochemical bromination of late stage intermediates and drug*, *Tetrahedron Lett.*, 3014 – 3018, **2017**.
- [98] B. V. Lyalin und V. A. Petrosyan, *Electrochemical Halogenation of Organic Compounds*, *Russ. J. Electrochem.*, 6, 497 – 529, **2013**.
- [99] K+S, *Karte Probenahme Werra*, **2016**.
- [100] D. F. Klessig und J. Malamy, *The salicylic acid signal in plants*, *Plant Mol. Biol.*, 26, 1439 – 1458, **1994**.
- [101] B. f. Naturschutz,  
„<http://www.geodienste.bfn.de/flussauen/#?centerX=3578040.457?centerY=5647306.071?scale=100000?layers=20497>“, [Online; **06.05.2019**].
- [102] N. u. U. Thüringer Ministerium für Landwirtschaft, *Beseitigung von kommunalem Abwasser im Freistaat Thüringen - Lagebericht*, **2017**.

- 
- [103] HLNUG, „<http://wrrl.hessen.de/mapapps/resources/apps/wrrl/index.html?lang=de>“, [Online; **06.05.2019**].
- [104] K+S, „<http://www.ks-kali.de/dede/company/authority/processing/esta.html>“, [Online; **27.11.2019**].
- [105] K. Deavers, T. Macek, U. G. Karlson und S. Trapp, *Removal of 4-chlorobenzoic acid from spiked hydroponic solution by willow trees (Salix viminalis)*, Environ. Sci. Pollut. Res., *17*, 1355 – 1361, **2010**.
- [106] ICH-Leitlinie Q2 (R1), *Validierung von Prüfverfahren: Text und Methodologie*, **26.02.2014**.
- [107] S. Kromidas, *Validierung in der Analytik*, Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, **1999**.
- [108] DIN 32645: *Chemische Analytik – Nachweis-, Erfassungs- und Bestimmungsgrenze unter Wiederholbedingungen – Begriffe, Verfahren, Auswertung*, Beuth Verlag GmbH, Berlin, **2008**.

**10. Abbildungsverzeichnis**

Abbildung 1: Trennung der Salzminerale mittels ESTA	4
Abbildung 2: Triboelektrische Aufladung von Teilchen	
A) Teilchen-Teilchen-Kontakt; B) Teilchen-Wand-Kontakt	5
Abbildung 3: Rohr-Freifall-Scheider	6
Abbildung 4: Fließbild einer elektrostatischen Trennanlage von K+S	6
Abbildung 5: Mechanismus der elektrophilen aromatischen Substitution (E = Cl, Br)	11
Abbildung 6: Substitutionsmuster am Beispiel der Salicylsäure	12
Abbildung 7: Bildung der 3- bzw. 5-Chlorsalicylsäure	12
Abbildung 8: Oxygenasereaktion von Benzoesäure	16
Abbildung 9: Aerobe Abbauewege von Brenzcatechin	17
Abbildung 10: Anaerobe Abbau von Benzoat	18
Abbildung 11: Oxygenolytische Dehalogenierung von 2-Chlorbenzoesäure	19
Abbildung 12: Abbau von 3-Chlorbrenzcatechin über den ortho-Weg	19
Abbildung 13: Schritte der Festphasenextraktion	20
Abbildung 14: Aufbau einer HPLC-Anlage	22
Abbildung 15: Elektrospray-Ionenquelle (positiver Modus)	25
Abbildung 16: Darstellung der Taylor-Konusbildung bis zur Entstehung des feinen Sprays mit isolierten Ionen (positiver Modus)	26
Abbildung 17: Aufbau eines Triple-Quadrupol-Massenspektrometers	27
Abbildung 18: Darstellung eines diskreten Sekundärelektronenvervielfachers	28
Abbildung 19: Darstellung der Kläranlageneinleitungen und Landnutzung des Flussgebiets	30
Abbildung 20: Gradientenverlauf	34
Abbildung 21: Chromatogramm der Carbonsäuren (TIC)	35
Abbildung 22: Probenahmestellen in der Werra	42
Abbildung 23: %-Zusammensetzung der Prozessabwässer 2019 des Standorts Hattorf	44
Abbildung 24: %-Zusammensetzung der Prozessabwässer 2019 des Standorts Wintershall	44
Abbildung 25: %-Zusammensetzung der aromatischen Carbonsäuren in den Prozessabwässern vom Standort Hattorf 2019	45
Abbildung 26: %-Zusammensetzung der aromatischen Carbonsäuren in den Prozessabwässern vom Standort Wintershall 2019	45
Abbildung 27: Temperaturverlauf 2019 der Werra	46

---

Abbildung 28: Jahresverlauf 2019 der Fließgeschwindigkeit	47
Abbildung 29: Chlorid-Konzentrationen in der Werra 2019 (hell: Vorbelastung, 1,5 km vor der Einleitung Hattorf; mittel: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)	48
Abbildung 30: Streudiagramm	50
Abbildung 31: Sauerstoffgehalt im Jahresverlauf 2019	51
Abbildung 32: Übersichtskarte der Beprobung mit Boot (rot: Probenahme Tiefenprofil; blau: oberflächennahe Beprobung)	53
Abbildung 33: normierte Chlorid-Werte der Probenahmestellen 0 bis 4 ([Cl] <sub>0</sub> = Probenahmestelle 4)	54
Abbildung 34: normierte Salicylsäure-Werte der Probenahmestellen 0 bis 4 ([SA] <sub>0</sub> = Probenahmestelle 4)	55
Abbildung 35: Vertikale Verteilung der Salicylsäure in die obere Werrawasserphase	56
Abbildung 36: Konzentrationsabhängige Funktionen der Chlorsalicylsäuren	60
Abbildung 37: Konzentrationsabhängige Funktionen der Bromsalicylsäuren	60
Abbildung 38: Konzentrationsabhängige Funktionen der trans-Zimtsäure und 4-Chlorbenzoesäure	60
Abbildung 39: Konzentrationsabhängige Funktion der Salicylsäure	61
Abbildung 40: Phasen des metabolischen Abbaus am Beispiel der 5-Bromsalicylsäure	61
Abbildung 41: Effekt der Substituenten auf die Abbaugeschwindigkeit	65
Abbildung 42: Effekt der Position des Substituenten auf die Abbaugeschwindigkeit	66
Abbildung 43: Temperaturverlauf der Werra 2019	67
Abbildung 44: Temperaturabhängige Konzentrations-Zeit-Verläufe der Salicylsäure und 4-Chlorbenzoesäure	68
Abbildung 45: Lichtabhängiger Konzentrationsverlauf der Salicylsäure und 4-Chlorbenzoesäure	72
Abbildung 46: Konzentrationsverläufe von Salicylsäure und 4-Chlorbenzoesäure	75
Abbildung 47: Modellversuch mit CuCl <sub>2</sub> -Zugabe (1) Versuchsbeginn (2) 10 Tage später	77
Abbildung 48: Übersichtskarte der Probenahmestellen (rechts: Abschnitt Hattorf; links: Abschnitt Wintershall; blau inhomogene Verteilung; rot: Annahme einer homogenen Verteilung)	81

---

Abbildung 49: Salicylsäure-Konzentrationen in der Werra (hell: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)	82
Abbildung 50: Normierte Salicylsäure-Werte der erweiterten Probenahme	84
Abbildung 51: Normierte 4-Chlorbenzoesäure-Werte der erweiterten Probenahme	84
Abbildung 52: Prozentuale Abnahme der Konzentration im Abschnitt Hattorf (Unterbrechung: keine Detektion am 25.07., 29.08. und 19.09.2019)	86
Abbildung 53: Prozentuale Änderung der Konzentration im Abschnitt Wintershall (Unterbrechung: keine Detektion am 29.08.2019)	87
Abbildung 54: Änderung der normierten Salicylsäure-Konzentrationen Sommer/ Winter im Abschnitt Hattorf	90
Abbildung 55: Änderung der normierten Salicylsäure-Konzentrationen Sommer/ Winter im Abschnitt Wintershall	90
Abbildung 56: Korrelation Konzentrationsabnahme Salicylsäure mit Temperatur	91
Abbildung 57: Vergleich der Konzentrationsabnahme von Salicylsäure mit der Temperatur und dem Durchfluss im Abschnitt Hattorf (Unterbrechung: 25.07.2019, 29.08.2019 und 19.09.2019)	93
Abbildung 58: Einfluss der Verweilzeit auf die Konzentrationsabnahme im Abschnitt Hattorf (Beschriftung: Probenahmestellen; 4 = Heiboldshausen; 7 = nach Harnorode; 10 = Heringen; vgl. Abbildung 22 und Tabelle 10, S. 40 – 42)	94
Abbildung 59: Konzentrationsverläufe zur Berechnung der Halbwertszeiten am Beispiel der Salicylsäure	95
Abbildung 60: Konzentrationsverläufe zur Berechnung der Halbwertszeiten am Beispiel der 4-Chlorbenzoesäure	96
Abbildung 61: Screening Werrawasser (TIC)	100
Abbildung A 1: Streudiagramme der Korrelationen der Chloridkonzentration mit der Magnesium- und Kaliumkonzentration	XLV
Abbildung A 2: Streudiagramme der Korrelationen der Sulfatkonzentration mit der Natrium-, Magnesium- und Kaliumkonzentration	XLV

---

Abbildung A 3: TOC-Konzentrationen in der Werra 2019 (hell: Vorbelastung, 1,5 km vor der Einleitung Hattorf; mittel: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)	LIII
Abbildung A 4: DOC-Konzentrationen in der Werra 2019 (hell: Vorbelastung, 1,5 km vor der Einleitung Hattorf; mittel: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)	LIV
Abbildung A 5: Nitratstickstoff-Gehalt in der Werra 2019 (hell: Vorbelastung, 1,5 km vor der Einleitung Hattorf; mittel: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)	LX
Abbildung A 6: Gesamtphosphat-Gehalt in der Werra 2019 (hell: Vorbelastung, 1,5 km vor der Einleitung Hattorf; mittel: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)	LXI
Abbildung A 7: Ammonium-Stickstoff in der Werra 2019 (hell: Vorbelastung, 1,5 km vor der Einleitung Hattorf; mittel: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)	LXI
Abbildung A 8: Temperaturabhängige Konzentrations-Zeit-Verläufe der 3- und 5-Chlorsalicylsäure	LXXIII
Abbildung A 9: Temperaturabhängige Konzentrations-Zeit-Verläufe der 3- und 5-Bromsalicylsäure	LXXIV
Abbildung A 10: Temperaturabhängiger Konzentrations-Zeit-Verlauf der trans-Zimtsäure	LXXIV
Abbildung A 11: Lichtabhängige Konzentrations-Zeit-Verläufe der 3- und 5-Chlorsalicylsäure	LXXX
Abbildung A 12: Lichtabhängige Konzentrations-Zeit-Verläufe der 3- und 5-Bromsalicylsäure	LXXX
Abbildung A 13: Lichtabhängiger Konzentrations-Zeit-Verlauf der trans-Zimtsäure	LXXX
Abbildung A 14: Biotische/ abiotische Konzentrations-Zeit-Verläufe der 3- und 5-Chlorsalicylsäure	LXXXVI
Abbildung A 15: Biotische/ abiotische Konzentrations-Zeit-Verläufe der 3- und 5-Bromsalicylsäure	LXXXVI
Abbildung A 16: Biotischer/ abiotischer Konzentrations-Zeit-Verlauf der trans-Zimtsäure	LXXXVII

---

Abbildung A 17: Konzentrationsverlauf Benzoesäure (Modellversuch: Lichtabhängigkeit)	LXXXVIII
Abbildung A 18: 3-Bromsalicylsäure-Konzentrationen in der Werra 2019 (hell: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)	XCI
Abbildung A 19: 5-Bromsalicylsäure-Konzentrationen in der Werra 2019 (hell: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)	XCII
Abbildung A 20: 4-Chlorbenzoesäure-Konzentrationen in der Werra 2019	XCIII
Abbildung A 21: Trans-Zimtsäure-Konzentrationen in der Werra 2019 (hell: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)	XCIV
Abbildung A 22: Karte erweiterte Probenahme	XCVII
Abbildung A 23: Normierte 3-Bromsalicylsäure-Werte der erweiterten Probenahme in der Werra	XCIX
Abbildung A 24: Normierte 5-Bromsalicylsäure-Werte der erweiterten Probenahme in der Werra	C
Abbildung A 25: Konzentrationsänderung Sommer/ Winter von 3-Bromsalicylsäure	CIV
Abbildung A 26: Konzentrationsänderung Sommer/ Winter von 5-Bromsalicylsäure	CVI
Abbildung A 27: Konzentrationsänderung Sommer/ Winter von 4-Chlorbenzoesäure	CVII
Abbildung A 28: Konzentrationsänderung Winter von trans-Zimtsäure	CVIII
Abbildung A 29: Korrelation Konzentrationsabnahme [%] und Temperatur – 3-Bromsalicylsäure	CVIII
Abbildung A 30: Korrelation Konzentrationsabnahme [%] und Temperatur – 5-Bromsalicylsäure	CVIII
Abbildung A 31: Korrelation Konzentrationsabnahme [%] und Temperatur – 4-Chlorbenzoesäure	CIX
Abbildung A 32: Fullscan Dihydroxybenzoesäuren (negative Ionisation)	CIX
Abbildung A 33: Fragmentmuster Dihydroxybenzoesäuren (negative Ionisation)	CIX



**11. Tabellenverzeichnis**

Tabelle 1: Physikalisch-chemische Eigenschaften der eingesetzten Carbonsäuren	8
Tabelle 2: Physikalisch-chemische Eigenschaften der mögliche Reaktionsprodukte	9
Tabelle 3: Übersicht an Mikroorganismen	15
Tabelle 4: Verwendete Chemikalien	31
Tabelle 5: Gradientenverlauf	34
Tabelle 6: Peakzuordnung mit zugehörigen Retentionszeiten der Analyte	35
Tabelle 7: MS-Parameter	36
Tabelle 8: Precursor- und Product-Ionen der Analyte	36
Tabelle 9: Parameterliste	39
Tabelle 10: Beschreibung der Probenahmestellen in der Werra	40
Tabelle 11: Salzparameter Ablauf Kieselsee Dankmarshausen	49
Tabelle 12: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) zum Konzentrationseinfluss	63
Tabelle 13: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) zum Temperatureinfluss	68
Tabelle 14: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) zur Lichtabhängigkeit	71
Tabelle 15: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) zum biotischen und abiotischen Abbau	74
Tabelle 16: Prozentualer Konzentrationsanstieg von 4-Chlorbenzoesäure	88
Tabelle 17: Korrelationskoeffizienten von Konzentrationsabnahme und Temperatur (lineares Modell)	92
Tabelle 18: Vergleich der Probenahmetage 10.01.2019 und 24.10.2019 am Beispiel der Salicylsäure	93
Tabelle 19: Vergleich der Parameter und Salicylsäure-Konzentrationen vom 07.03.2019, 21.03.2019 und 24.10.2019 (Abschnitt Hattorf)	94
Tabelle 20: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) von Salicylsäure und trans-Zimtsäure des Abschnitts Hattorf	96
Tabelle 21: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) von 3- und 5-Bromsalicylsäure des Abschnitts Hattorf	97

Tabelle 22: : Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) von Salicylsäure und 4-Chlorbenzoesäure des Abschnitts Wintershall	98
Tabelle 23: Halbwertskonzentrationen ( $c_{1/2}$ ), -zeiten ( $t_{1/2}$ ) und Abbaugeschwindigkeiten ( $\bar{k}$ ) von 3- und 5-Bromsalicylsäure des Abschnitts Wintershall	98
Tabelle 24: PNEC-Werte mit berechnete RCR-Verhältnisse	103
Tabelle A 1: Daten der Carbonsäuren	XXVII
Tabelle A 2: Regressionsdaten der aromatischen Carbonsäuren (Kalibrierbereich 0 – 10 µg/L)	XXVIII
Tabelle A 3: Messwerte der Kalibrierung von Benzoesäure (0 – 10 µg/L)	XXIX
Tabelle A 4: Messwerte der Kalibrierung von 2-Chlorbenzoesäure (0 – 10 µg/L)	XXIX
Tabelle A 5: Messwerte der Kalibrierung von 3-Chlorbenzoesäure (0 – 10 µg/L)	XXX
Tabelle A 6: Messwerte der Kalibrierung von 4-Chlorbenzoesäure (0 – 10 µg/L)	XXX
Tabelle A 7: Messwerte der Kalibrierung von Salicylsäure (0 – 10 µg/L)	XXX
Tabelle A 8: Messwerte der Kalibrierung von 3-Chlorsalicylsäure (0 – 10 µg/L)	XXXI
Tabelle A 9: Messwerte der Kalibrierung von 4-Chlorsalicylsäure (0 – 10 µg/L)	XXXI
Tabelle A 10: Messwerte der Kalibrierung von 5-Chlorsalicylsäure (0 – 10 µg/L)	XXXI
Tabelle A 11: Messwerte der Kalibrierung von 3-Bromsalicylsäure (0 – 10 µg/L)	XXXI
Tabelle A 12: Messwerte der Kalibrierung von 4-Bromsalicylsäure (0 – 10 µg/L)	XXXII
Tabelle A 13: Messwerte der Kalibrierung von 5-Bromsalicylsäure (0 – 10 µg/L)	XXXII
Tabelle A 14: Messwerte der Kalibrierung von Resorcyllsäure (0 – 10 µg/L)	XXXII
Tabelle A 15: Messwerte der Kalibrierung von trans-Zimtsäure (0 – 10 µg/L)	XXXII
Tabelle A 16: Messwerte zur Ermittlung der Wiederfindungsraten	XXXIII
Tabelle A 17: Mess- und Methodenpräzisionen	XXXV
Tabelle A 18: Messwerte der Kalibrierung von Benzoesäure (0,6 – 8 µg/L)	XXXV
Tabelle A 19: Messwerte der Kalibrierung von 2-Chlorbenzoesäure (0,1 – 1,0 µg/L)	XXXVI
Tabelle A 20: Messwerte der Kalibrierung von 3-Chlorbenzoesäure (0,1 – 1,0 µg/L)	XXXVI
Tabelle A 21: Messwerte der Kalibrierung von 4-Chlorbenzoesäure (0,1 – 1,0 µg/L)	XXXVII
Tabelle A 22: Messwerte der Kalibrierung von Salicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)	XXXVII
Tabelle A 23: Messwerte der Kalibrierung von 3-Chlorsalicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)	XXXVII
Tabelle A 24: Messwerte der Kalibrierung von 4-Chlorsalicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)	XXXVIII
Tabelle A 25: Messwerte der Kalibrierung von 5-Chlorsalicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)	XXXVIII

Tabelle A 26: Messwerte der Kalibrierung von 3-Bromsalicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)	XXXVIII
Tabelle A 27: Messwerte der Kalibrierung von 4-Bromsalicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)	XXXIX
Tabelle A 28: Messwerte der Kalibrierung von 5-Bromsalicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)	XXXIX
Tabelle A 29: Messwerte der Kalibrierung von Resorcylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)	XXXIX
Tabelle A 30: Messwerte der Kalibrierung von trans-Zimtsäure (0,1 – 1,0 µg/L)	XL
Tabelle A 31: Berechnete Nachweis- und Bestimmungsgrenzen sowie angegebene Bestimmungsgrenzen	XL
Tabelle A 32: Zusammensetzung der Prozessabwässer von Hattorf 2019 [%]	XLI
Tabelle A 33: Zusammensetzung der Prozessabwässer von Wintershall 2019 [%]	XLI
Tabelle A 34: Zusammensetzung der arom. Carbonsäuren in den Prozessabwässer von Hattorf 2019 [%]	XLII
Tabelle A 35: Zusammensetzung der arom. Carbonsäuren in den Prozessabwässer von Wintershall 2019 [%]	XLIII
Tabelle A 36: Chlorid-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 10 mg/L)	XLIV
Tabelle A 37: Bromid-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,5 mg/L)	XLVI
Tabelle A 38: Sulfat-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,5 mg/L)	XLVI
Tabelle A 39: Calcium-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,05 mg/L)	XLVII
Tabelle A 40: Kalium-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,5 mg/L)	XLVIII
Tabelle A 41: Natrium-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,2 mg/L)	XLIX
Tabelle A 42: Magnesium-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,05 mg/L)	L
Tabelle A 43: TOC-Konzentrationen [mg C/L] in der Werra (BG = 1,0 mg C/L)	LI
Tabelle A 44: DOC-Konzentrationen [mg C/L] in der Werra (BG = 1,0 mg C/L)	LII
Tabelle A 45: Sauerstoffsättigungen [%] in der Werra	LIV
Tabelle A 46: Sauerstoff-Konzentrationen [mg/L] in der Werra	LV
Tabelle A 47: TNb-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 1,0 mg/L)	LVI
Tabelle A 48: Nitrat-Stickstoff-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,2 mg/L)	LVII
Tabelle A 49: Gesamtphosphat-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,02 mg/L)	LVIII
Tabelle A 50: Ammonium-Stickstoff-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,015 mg/L)	LIX
Tabelle A 51: pH-Werte in der Werra	LXII
Tabelle A 52: Hydrogencarbonat-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 6,1 mg/L)	LXII
Tabelle A 53: Normierte und gemittelte Daten der Beprobung mit dem Boot 2019	LXIII

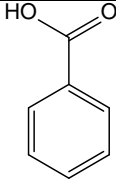
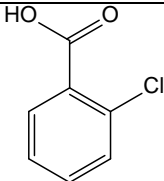
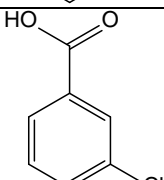
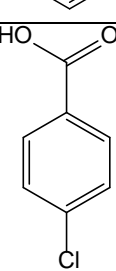
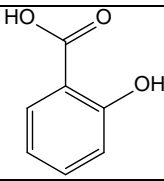
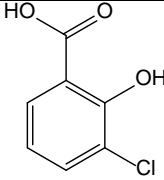
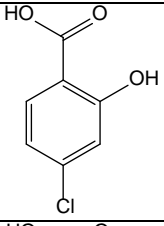
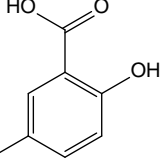
Tabelle A 54: Daten zum Versuch: Fahnenbildung	LXIV
Tabelle A 55: Daten zum Versuch: Fahnenbildung	LXIV
Tabelle A 56: Daten konzentrationsabhängiger Abbauversuch – hohe Konzentrationen	LXV
Tabelle A 57: Daten konzentrationsabhängiger Abbauversuch – niedrige Konzentrationen	LXVII
Tabelle A 58: Daten temperaturabhängiger Abbauversuch – 23 °C	LXIX
Tabelle A 59: Daten temperaturabhängiger Abbauversuch – 10 °C	LXXI
Tabelle A 60: Daten Abbauversuch – unter Lichteinfluss und unbehandelt	LXXIV
Tabelle A 61: Daten lichtabhängiger Abbauversuch – unter Lichtausschluss	LXXVII
Tabelle A 62: Daten biotische/ abiotischer Abbauversuch – sterilfiltriert	LXXXI
Tabelle A 63: Daten biotische/ abiotischer Abbauversuch – Zugabe von CuCl <sub>2</sub>	LXXXIII
Tabelle A 64: Benzoesäure-Konzentrationen Modellversuch zur Lichtabhängigkeit (BG = 1,5 µg/L)	LXXXVII
Tabelle A 65: Salicylsäure-Konzentrationen in der Werra [µg/L] (BG = 0,5 µg/L)	LXXXVIII
Tabelle A 66: 3-Bromsalicylsäure-Konzentrationen in der Werra [µg/L] (BG = 0,5 µg/L)	LXXXIX
Tabelle A 67: 5-Bromsalicylsäure-Konzentrationen in der Werra [µg/L] (BG = 0,5 µg/L)	XCI
Tabelle A 68: 4-Chlorbenzoesäure-Konzentrationen in der Werra [µg/L] (BG = 0,5 µg/L)	XCIII
Tabelle A 69: Trans-Zimtsäure [µg/L] (BG = 1,0 µg/L)	XCIV
Tabelle A 70: 3-Chlorsalicylsäure-Konzentrationen in der Werra [µg/L] (BG = 0,5 µg/L)	XCIV
Tabelle A 71: 5-Chlorsalicylsäure-Konzentrationen in der Werra [µg/L] (BG = 0,5 µg/L)	XCVI
Tabelle A 72: Salicylsäure-Konzentrationen der erweiterten Probenahmen in der Werra (BG = 0,5 µg/L)	XCVIII
Tabelle A 73: 4-Chlorbenzoesäure-Konzentrationen der erweiterten Probenahmen in der Werra (BG = 0,5 µg/L)	XCVIII
Tabelle A 74: 3-Bromsalicylsäure-Konzentrationen der erweiterten Probenahmen in der Werra (BG = 0,5 µg/L)	C
Tabelle A 75: 5-Bromsalicylsäure-Konzentrationen der erweiterten Probenahmen in der Werra (BG = 0,5 µg/L)	CI
Tabelle A 76: Normierte Salicylsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%] – Abschnitt Hattorf	CI

---

Tabelle A 77: Normierte Salicylsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%] – Abschnitt Wintershall	CII
Tabelle A 78: Normierte 3-Bromsalicylsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%] – Abschnitt Hattorf	CIII
Tabelle A 79: Normierte 3-Bromsalicylsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%] – Abschnitt Wintershall	CIII
Tabelle A 80: Normierte 5-Bromsalicylsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%] – Abschnitt Hattorf	CIV
Tabelle A 81: Normierte 5-Bromsalicylsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%] – Abschnitt Wintershall	CV
Tabelle A 82: Normierte 4-Chlorbenzoesäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%] – Abschnitt Wintershall	CVI
Tabelle A 83: Normierte trans-Zimtsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%] – Abschnitt Hattorf	CVII
Tabelle A 84: Berechnete RCR-Verhältnisse von der Probenahmestelle in Gerstungen	CX

## 12. Anhang

Tabelle A 1: Daten der Carbonsäuren

Verbindung	CAS-Nummer	molare Masse [g/mol]	Struktur
Benzoessäure	65-85-0	122,12	
2-Chlorbenzoessäure	118-91-2	156,57	
3-Chlorbenzoessäure	535-80-8	156,57	
4-Chlorbenzoessäure	74-11-3	156,57	
Salicylsäure	69-72-7	138,12	
3-Chlorsalicylsäure	1829-32-9	172,57	
4-Chlorsalicylsäure	5106-98-9	172,57	
5-Chlorsalicylsäure	321-14-2	172,57	

Fortsetzung Tabelle A 1:

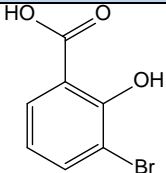
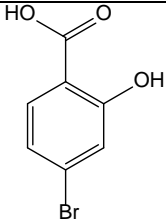
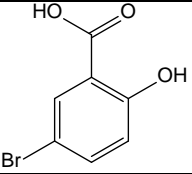
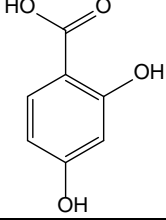
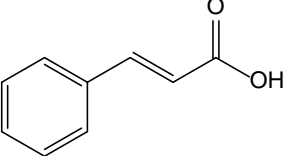
Verbindung	CAS-Nummer	molare Masse [g/mol]	Struktur
3-Bromsalicylsäure	3883-95-2	217,02	
4-Bromsalicylsäure	1666-28-0	217,02	
5-Bromsalicylsäure	89-55-4	217,02	
Resorcylsäure	89-86-1	154,12	
trans-Zimtsäure	140-10-3	148,16	

Tabelle A 2: Regressionsdaten der aromatischen Carbonsäuren (Kalibrierbereich 0 – 10 µg/L)

Analyt	Geradengleichung $y = b \cdot x + a$		Reststandardabweichung $s_y$	rel. Verfahrensstandardabweichung [%] $V_{x0}$	Bestimmtheitsmaß $R^2$
	Empfindlichkeit b	Achsenabschnitt a			
Benzoessäure	0,164	0,240	0,024	4,62	0,9988
2-Chlorbenzoessäure	0,039	-0,002	0,007	5,57	0,9983
3-Chlorbenzoessäure	0,236	-0,012	0,017	2,32	0,9997
4-Chlorbenzoessäure	1,898	-0,114	0,110	1,83	0,9998

Fortsetzung Tabelle A 2:

Analyt	Geradengleichung $y = b \cdot x + a$		Reststandardabweichung $s_y$	rel. Verfahrensstandardabweichung [%] $V_{x0}$	Bestimmtheitsmaß $R^2$
	Empfindlichkeit b	Achsenabschnitt a			
Salicylsäure	2,289	0,265	0,135	1,86	0,9998
3-Chlorsalicylsäure	4,727	-0,037	0,031	0,20	0,9999
4-Chlorsalicylsäure	4,870	-0,114	0,097	0,63	0,9999
5-Chlorsalicylsäure	9,609	-0,337	0,346	1,14	0,9999
3-Bromsalicylsäure	1,540	0,039	0,070	1,43	0,9999
4-Bromsalicylsäure	2,011	-0,152	0,125	1,96	0,9998
5-Bromsalicylsäure	2,075	-0,020	0,046	0,69	0,9999
Resorcylsäure	0,412	0,034	0,034	2,58	0,9996
trans-Zimtsäure	0,081	0,0004	0,004	1,57	0,9999

Tabelle A 3: Messwerte der Kalibrierung von Benzoesäure (0 – 10 µg/L)

Benzoesäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,217	0,221	0,373	<b>0,270</b>	0,089	32,9
0,5	0,315	0,325	0,326	<b>0,322</b>	0,006	1,8
1,0	0,378	0,411	0,420	<b>0,403</b>	0,022	5,5
2,5	0,579	0,637	0,652	<b>0,623</b>	0,039	6,2
5,0	0,975	1,001	1,136	<b>1,038</b>	0,087	8,3
10,0	1,933	1,885	1,860	<b>1,893</b>	0,037	2,0

Tabelle A 4: Messwerte der Kalibrierung von 2-Chlorbenzoesäure (0 – 10 µg/L)

2-Chlorbenzoesäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,000	0,000	0,000	<b>0,000</b>	0,000	-
0,5	0,021	0,018	0,020	<b>0,019</b>	0,001	7,1
1,0	0,041	0,035	0,035	<b>0,037</b>	0,003	9,2



Fortsetzung Tabelle A 4:

2-Chlorbenzoesäure						
c [ $\mu\text{g/L}$ ]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
2,5	0,101	0,102	0,095	<b>0,099</b>	0,004	3,7
5,0	0,155	0,200	0,188	<b>0,181</b>	0,023	12,8
10,0	0,398	0,385	0,395	<b>0,393</b>	0,007	1,7

Tabelle A 5: Messwerte der Kalibrierung von 3-Chlorbenzoesäure (0 – 10  $\mu\text{g/L}$ )

3-Chlorbenzoesäure						
c [ $\mu\text{g/L}$ ]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,000	0,000	0,000	<b>0,000</b>	0,000	-
0,5	0,109	0,108	0,107	<b>0,108</b>	0,000	0,7
1,0	0,227	0,220	0,235	<b>0,227</b>	0,007	3,3
2,5	0,583	0,571	0,560	<b>0,572</b>	0,012	2,0
5,0	1,100	1,127	1,189	<b>1,138</b>	0,046	4,0
10,0	2,354	2,420	2,305	<b>2,360</b>	0,057	2,4

Tabelle A 6: Messwerte der Kalibrierung von 4-Chlorbenzoesäure (0 – 10  $\mu\text{g/L}$ )

4-Chlorbenzoesäure						
c [ $\mu\text{g/L}$ ]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,040	0,024	0,023	<b>0,029</b>	0,010	33,1
0,5	0,850	0,816	0,878	<b>0,848</b>	0,031	3,7
1,0	1,722	1,750	1,800	<b>1,757</b>	0,040	2,3
2,5	4,389	4,638	4,528	<b>4,518</b>	0,125	2,8
5,0	8,612	9,325	9,922	<b>9,286</b>	0,656	7,1
10,0	18,261	19,335	19,238	<b>18,940</b>	0,594	3,1

Tabelle A 7: Messwerte der Kalibrierung von Salicylsäure (0 – 10  $\mu\text{g/L}$ )

Salicylsäure						
c [ $\mu\text{g/L}$ ]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,068	0,128	0,143	<b>0,113</b>	0,040	34,9
0,5	1,323	1,377	1,383	<b>1,361</b>	0,033	2,4
1,0	2,523	2,528	2,682	<b>2,577</b>	0,090	3,5
2,5	6,071	6,214	6,167	<b>6,151</b>	0,073	1,2
5,0	11,175	11,993	12,287	<b>11,820</b>	0,576	4,9
10,0	22,902	23,421	22,866	<b>23,060</b>	0,311	1,3

Tabelle A 8: Messwerte der Kalibrierung von 3-Chlorsalicylsäure (0 – 10 µg/L)

3-Chlorsalicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,000	0,000	0,000	<b>0,000</b>	0,000	-
0,5	2,363	2,239	2,352	<b>2,318</b>	0,069	3,0
1,0	4,669	4,599	4,741	<b>4,670</b>	0,071	1,5
2,5	11,568	12,031	11,652	<b>11,750</b>	0,247	2,1
5,0	22,336	23,419	25,133	<b>23,630</b>	1,410	6,0
10,0	46,906	47,400	47,392	<b>47,230</b>	0,283	0,6

Tabelle A 9: Messwerte der Kalibrierung von 4-Chlorsalicylsäure (0 – 10 µg/L)

4-Chlorsalicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,000	0,000	0,000	<b>0,000</b>	0,000	-
0,5	2,300	2,249	2,330	<b>2,293</b>	0,041	1,8
1,0	4,715	4,457	4,673	<b>4,615</b>	0,138	3,0
2,5	12,194	12,188	11,841	<b>12,070</b>	0,202	1,7
5,0	23,034	24,838	25,009	<b>24,290</b>	1,094	4,5
10,0	47,333	50,378	47,998	<b>48,570</b>	1,601	3,3

Tabelle A 10: Messwerte der Kalibrierung von 5-Chlorsalicylsäure (0 – 10 µg/L)

5-Chlorsalicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,000	0,000	0,000	<b>0,000</b>	0,000	-
0,5	4,701	4,528	4,580	<b>4,603</b>	0,089	1,9
1,0	9,027	8,762	9,074	<b>8,954</b>	0,168	1,9
2,5	23,039	23,593	23,172	<b>23,270</b>	0,289	1,2
5,0	44,903	47,790	51,232	<b>47,980</b>	3,168	6,6
10,0	94,651	99,274	93,323	<b>95,750</b>	3,124	3,3

Tabelle A 11: Messwerte der Kalibrierung von 3-Bromsalicylsäure (0 – 10 µg/L)

3-Bromsalicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,000	0,000	0,000	<b>0,000</b>	0,000	-
0,5	0,761	0,757	0,829	<b>0,783</b>	0,041	5,2
1,0	1,441	1,567	1,606	<b>1,538</b>	0,086	5,6
2,5	3,897	4,146	3,883	<b>3,975</b>	0,148	3,7
5,0	7,597	7,617	8,214	<b>7,809</b>	0,351	4,5
10,0	15,491	15,528	15,128	<b>15,380</b>	0,221	1,4

Tabelle A 12: Messwerte der Kalibrierung von 4-Bromsalicylsäure (0 – 10 µg/L)

4-Bromsalicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,000	0,000	0,000	<b>0,000</b>	0,000	-
0,5	0,875	0,794	0,798	<b>0,823</b>	0,046	5,6
1,0	1,788	1,961	1,874	<b>1,874</b>	0,087	4,6
2,5	4,712	4,961	4,704	<b>4,792</b>	0,146	3,0
5,0	9,519	9,489	10,251	<b>9,753</b>	0,432	4,4
10,0	20,270	19,883	19,999	<b>20,050</b>	0,199	1,0

Tabelle A 13: Messwerte der Kalibrierung von 5-Bromsalicylsäure (0 – 10 µg/L)

5-Bromsalicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,000	0,000	0,000	<b>0,000</b>	0,000	-
0,5	1,018	0,978	1,036	<b>1,011</b>	0,030	2,9
1,0	2,040	1,984	1,938	<b>1,988</b>	0,051	2,6
2,5	5,150	5,372	5,081	<b>5,201</b>	0,152	2,9
5,0	10,318	10,331	10,540	<b>10,400</b>	0,125	1,2
10,0	20,921	20,774	20,431	<b>20,710</b>	0,251	1,2

Tabelle A 14: Messwerte der Kalibrierung von Resorcyssäure (0 – 10 µg/L)

Resorcyssäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,000	0,000	0,000	<b>0,000</b>	0,000	-
0,5	0,240	0,241	0,248	<b>0,234</b>	0,004	1,8
1,0	0,464	0,460	0,411	<b>0,445</b>	0,030	6,7
2,5	1,102	1,104	1,010	<b>1,072</b>	0,054	5,0
5,0	2,125	2,166	2,137	<b>2,143</b>	0,021	1,0
10,0	4,197	4,198	3,975	<b>4,123</b>	0,128	3,1

Tabelle A 15: Messwerte der Kalibrierung von trans-Zimtsäure (0 – 10 µg/L)

trans-Zimtsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,0	0,000	0,000	0,000	<b>0,000</b>	0,000	-
0,5	0,038	0,049	0,039	<b>0,042</b>	0,006	14,6
1,0	0,076	0,077	0,090	<b>0,081</b>	0,008	9,9
2,5	0,185	0,224	0,190	<b>0,200</b>	0,021	10,5
5,0	0,386	0,431	0,426	<b>0,414</b>	0,025	6,0
10,0	0,832	0,779	0,827	<b>0,813</b>	0,030	3,6

Tabelle A 16: Messwerte zur Ermittlung der Wiederfindungsraten

Benzooesäure				2-Chlorbenzooesäure			
$y = 0,164x + 0,240$				$y = 0,039x - 0,002$			
PFV	C <sub>soll</sub> [µg/L]	C <sub>ist</sub> [µg/L]	WFR [%]	PFV	C <sub>soll</sub> [µg/L]	C <sub>ist</sub> [µg/L]	WFR [%]
0,533	2,00	1,79	89,33	0,021	0,50	0,59	117,95
0,608	2,00	2,24	112,04	0,018	0,50	0,51	102,56
0,583	2,00	2,09	104,51	0,020	0,50	0,56	112,82
0,975	5,00	4,48	89,60	0,155	5,00	4,03	80,51
1,001	5,00	4,64	92,80	0,200	5,00	5,18	103,59
1,136	5,00	5,46	109,27	0,188	5,00	4,87	97,44
1,933	10,00	10,32	103,23	0,398	10,00	10,26	103,23
1,885	10,00	10,03	100,30	0,385	10,00	9,92	99,23
1,860	10,00	9,88	98,78	0,395	10,00	10,18	101,79
3-Chlorbenzooesäure				4-Chlorbenzooesäure			
$y = 0,236x - 0,012$				$y = 1,898x - 0,114$			
PFV	C <sub>soll</sub> [µg/L]	C <sub>ist</sub> [µg/L]	WFR [%]	PFV	C <sub>soll</sub> [µg/L]	C <sub>ist</sub> [µg/L]	WFR [%]
0,109	0,50	0,51	102,54	0,850	0,50	0,51	101,58
0,108	0,50	0,51	101,69	0,816	0,50	0,49	98,00
0,107	0,50	0,50	100,85	0,878	0,50	0,52	104,53
1,100	5,00	4,71	94,24	8,612	5,00	4,60	91,95
1,127	5,00	4,83	96,53	9,325	5,00	4,97	99,46
1,189	5,00	5,09	101,78	9,922	5,00	5,29	105,75
2,354	10,00	10,03	100,25	18,261	10,00	9,68	96,81
2,420	10,00	10,31	103,05	19,335	10,00	10,25	102,47
2,305	10,00	9,82	98,18	19,238	10,00	10,20	101,96
Salicylsäure				3-Chlorsalicylsäure			
$y = 2,289x + 0,265$				$y = 4,727x - 0,037$			
PFV	C <sub>soll</sub> [µg/L]	C <sub>ist</sub> [µg/L]	WFR [%]	PFV	C <sub>soll</sub> [µg/L]	C <sub>ist</sub> [µg/L]	WFR [%]
1,323	0,50	0,46	92,44	2,363	0,50	0,51	101,54
1,377	0,50	0,49	97,16	2,239	0,50	0,48	96,30
1,383	0,50	0,49	97,68	2,352	0,50	0,51	101,08
11,175	5,00	4,77	95,33	22,336	5,00	4,73	94,66
11,993	5,00	5,12	102,47	23,419	5,00	4,96	99,24
12,287	5,00	5,25	105,04	25,133	5,00	5,32	106,49
22,902	10,00	9,89	98,89	46,906	10,00	9,93	99,31
23,421	10,00	10,12	101,16	47,400	10,00	10,04	100,35
22,866	10,00	9,87	98,74	47,392	10,00	10,03	100,34

Fortsetzung Tabelle A 16:

4-Chlorsalicylsäure				5-Chlorsalicylsäure			
$y = 4,870x - 0,114$				$y = 9,609x - 0,337$			
PFV	C <sub>soll</sub> [µg/L]	C <sub>ist</sub> [µg/L]	WFR [%]	PFV	C <sub>soll</sub> [µg/L]	C <sub>ist</sub> [µg/L]	WFR [%]
2,300	0,50	0,50	99,14	4,701	0,50	0,52	104,86
2,249	0,50	0,49	97,04	4,528	0,50	0,51	101,26
2,330	0,50	0,50	100,37	4,580	0,50	0,51	102,34
23,034	5,00	4,75	95,06	44,903	5,00	4,71	94,16
24,838	5,00	5,12	102,47	47,790	5,00	5,01	100,17
25,009	5,00	5,16	103,17	51,232	5,00	5,37	107,33
47,333	10,00	9,74	97,43	94,651	10,00	9,89	98,85
50,378	10,00	10,37	103,68	99,274	10,00	10,37	103,66
47,998	10,00	9,88	98,79	93,323	10,00	9,75	97,47
3-Bromsalicylsäure				4-Bromsalicylsäure			
$y = 1,540x + 0,039$				$y = 2,011x - 0,152$			
PFV	C <sub>soll</sub> [µg/L]	C <sub>ist</sub> [µg/L]	WFR [%]	PFV	C <sub>soll</sub> [µg/L]	C <sub>ist</sub> [µg/L]	WFR [%]
0,761	0,50	0,47	93,77	0,875	0,50	0,51	102,14
0,757	0,50	0,47	93,25	0,794	0,50	0,47	94,08
0,829	0,50	0,51	102,60	0,798	0,50	0,47	94,48
7,597	5,00	4,91	98,16	9,519	5,00	4,81	96,18
7,617	5,00	4,92	98,42	9,489	5,00	4,79	95,88
8,214	5,00	5,31	106,17	10,251	5,00	5,17	103,46
15,491	10,00	10,03	100,34	20,270	10,00	10,16	101,55
15,528	10,00	10,06	100,58	19,883	10,00	9,96	99,63
15,128	10,00	9,80	97,98	19,999	10,00	10,02	100,20
5-Bromsalicylsäure				Resorcylsäure			
$y = 2,075x - 0,020$				$y = 0,412x + 0,034$			
PFV	C <sub>soll</sub> [µg/L]	C <sub>ist</sub> [µg/L]	WFR [%]	PFV	C <sub>soll</sub> [µg/L]	C <sub>ist</sub> [µg/L]	WFR [%]
1,018	0,50	0,50	100,05	0,240	0,50	0,50	100,00
0,978	0,50	0,48	96,19	0,241	0,50	0,50	100,49
1,036	0,50	0,51	101,78	0,248	0,50	0,52	103,88
10,318	5,00	4,98	99,64	2,125	5,00	5,08	101,50
10,331	5,00	4,99	99,77	2,166	5,00	5,17	103,50
10,540	5,00	5,09	101,78	2,137	5,00	5,10	102,09
20,921	10,00	10,09	100,92	4,197	10,00	10,10	101,04
20,774	10,00	10,02	100,21	4,198	10,00	10,11	101,07
20,431	10,00	9,86	98,56	3,975	10,00	9,57	95,66

Fortsetzung Tabelle A 16:

trans-Zimtsäure			
$y = 0,081x + 0,0004$			
PFV	$c_{\text{Soll}}$ [ $\mu\text{g/L}$ ]	$c_{\text{Ist}}$ [ $\mu\text{g/L}$ ]	WFR [%]
0,076	1,00	0,93	93,33
0,077	1,00	0,95	94,57
0,090	1,00	1,11	110,62
0,386	5,00	4,76	95,21
0,431	5,00	5,32	106,32
0,426	5,00	5,25	105,09
0,832	10,00	10,27	102,67
0,779	10,00	9,61	96,12
0,827	10,00	10,20	102,05

Tabelle A 17: Mess- und Methodenpräzisionen

Analyt	Messpräzision $V_{x0}$ [%]	Methodenpräzision $V_{x0}$ [%]
Benzoessäure	5,69	7,68
2-Chlorbenzoessäure	3,31	3,66
3-Chlorbenzoessäure	2,01	2,03
4-Chlorbenzoessäure	2,39	2,47
Salicylsäure	1,75	2,31
3-Chlorsalicylsäure	2,20	2,27
4-Chlorsalicylsäure	2,60	3,35
5-Chlorsalicylsäure	1,92	2,39
3-Bromsalicylsäure	3,02	4,22
4-Bromsalicylsäure	4,01	5,30
5-Bromsalicylsäure	2,54	3,53
Resorcylsäure	2,13	3,04
trans-Zimtsäure	2,60	2,62

Tabelle A 18: Messwerte der Kalibrierung von Benzoessäure (0,6 – 8  $\mu\text{g/L}$ )

Benzoessäure						
$c$ [ $\mu\text{g/L}$ ]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,6	0,538	0,523	0,513	<b>0,525</b>	0,012	2,3
0,8	0,589	0,591	0,588	<b>0,589</b>	0,001	0,2
1,0	0,595	0,635	0,607	<b>0,612</b>	0,021	3,4
2,0	0,778	0,816	0,811	<b>0,802</b>	0,021	2,6

Fortsetzung Tabelle A 18:

Benzooesäure						
c [ $\mu\text{g/L}$ ]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
3,0	0,963	0,951	1,062	<b>0,992</b>	0,061	6,1
4,0	1,184	1,067	1,136	<b>1,129</b>	0,059	5,2
5,0	1,346	1,387	1,450	<b>1,394</b>	0,053	3,8
6,0	1,511	1,546	1,492	<b>1,516</b>	0,027	1,8
7,0	1,642	1,621	1,665	<b>1,643</b>	0,022	1,3
8,0	1,912	1,824	1,814	<b>1,850</b>	0,054	2,9

Tabelle A 19: Messwerte der Kalibrierung von 2-Chlorbenzooesäure (0,1 – 1,0  $\mu\text{g/L}$ )

2-Chlorbenzooesäure						
c [ $\mu\text{g/L}$ ]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,1	0,003	0,003	0,004	<b>0,003</b>	0,000	11,1
0,2	0,009	0,009	0,007	<b>0,008</b>	0,001	10,7
0,3	0,012	0,014	0,014	<b>0,013</b>	0,001	7,9
0,4	0,013	0,012	0,012	<b>0,013</b>	0,000	3,3
0,5	0,013	0,015	0,015	<b>0,014</b>	0,001	9,1
0,6	0,019	0,022	0,021	<b>0,021</b>	0,001	6,7
0,7	0,023	0,022	0,024	<b>0,023</b>	0,001	4,7
0,8	0,023	0,028	0,027	<b>0,026</b>	0,002	9,4
0,9	0,031	0,029	0,032	<b>0,031</b>	0,002	5,2
1,0	0,039	0,033	0,038	<b>0,037</b>	0,003	9,5

Tabelle A 20: Messwerte der Kalibrierung von 3-Chlorbenzooesäure (0,1 – 1,0  $\mu\text{g/L}$ )

3-Chlorbenzooesäure						
c [ $\mu\text{g/L}$ ]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,1	0,030	0,026	0,020	<b>0,025</b>	0,005	18,8
0,2	0,044	0,051	0,048	<b>0,048</b>	0,003	6,8
0,3	0,056	0,073	0,071	<b>0,066</b>	0,009	14,1
0,4	0,090	0,082	0,082	<b>0,085</b>	0,005	5,5
0,5	0,108	0,111	0,111	<b>0,110</b>	0,002	1,9
0,6	0,131	0,126	0,124	<b>0,127</b>	0,003	2,7
0,7	0,149	0,157	0,151	<b>0,152</b>	0,004	2,5
0,8	0,166	0,166	0,175	<b>0,169</b>	0,005	3,1
0,9	0,192	0,195	0,195	<b>0,194</b>	0,001	0,8
1,0	0,228	0,216	0,220	<b>0,221</b>	0,006	2,9

Tabelle A 21: Messwerte der Kalibrierung von 4-Chlorbenzoesäure (0,1 – 1,0 µg/L)

4-Chlorbenzoesäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,1	0,184	0,178	0,177	<b>0,180</b>	0,003	1,9
0,2	0,384	0,335	0,347	<b>0,355</b>	0,025	7,2
0,3	0,517	0,516	0,501	<b>0,512</b>	0,009	1,8
0,4	0,658	0,691	0,623	<b>0,657</b>	0,024	5,2
0,5	0,900	0,838	0,817	<b>0,852</b>	0,043	5,1
0,6	0,979	1,026	0,974	<b>0,993</b>	0,029	2,9
0,7	1,132	1,160	1,159	<b>1,150</b>	0,016	1,4
0,8	1,314	1,311	1,286	<b>1,304</b>	0,015	1,2
0,9	1,460	1,432	1,479	<b>1,457</b>	0,023	1,6
1,0	1,673	1,665	1,712	<b>1,683</b>	0,025	1,5

Tabelle A 22: Messwerte der Kalibrierung von Salicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)

Salicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,1	0,577	0,611	0,652	<b>0,613</b>	0,037	6,1
0,2	0,837	0,804	0,745	<b>0,796</b>	0,046	5,8
0,3	0,962	0,953	0,957	<b>0,958</b>	0,005	0,5
0,4	1,209	1,264	1,266	<b>1,246</b>	0,032	2,6
0,5	1,564	1,396	1,492	<b>1,484</b>	0,084	5,7
0,6	1,684	1,654	1,606	<b>1,648</b>	0,039	2,4
0,7	1,886	1,855	1,846	<b>1,862</b>	0,021	1,1
0,8	2,143	2,047	2,089	<b>2,093</b>	0,048	2,3
0,9	2,326	2,277	2,318	<b>2,307</b>	0,026	1,1
1,0	2,502	2,498	2,500	<b>2,500</b>	0,002	0,1

Tabelle A 23: Messwerte der Kalibrierung von 3-Chlorsalicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)

3-Chlorsalicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,1	0,470	0,408	0,465	<b>0,448</b>	0,034	7,7
0,2	0,845	0,776	0,765	<b>0,795</b>	0,043	5,4
0,3	1,139	1,161	1,233	<b>1,178</b>	0,049	4,2
0,4	1,640	1,578	1,606	<b>1,608</b>	0,031	1,9
0,5	1,590	1,718	1,784	<b>1,697</b>	0,099	5,8
0,6	2,124	2,249	2,371	<b>2,248</b>	0,123	5,5
0,7	2,666	2,739	2,901	<b>2,768</b>	0,120	4,3
0,8	3,000	3,027	3,101	<b>3,043</b>	0,052	1,7
0,9	3,324	3,256	3,370	<b>3,317</b>	0,058	1,7
1,0	4,027	3,906	3,720	<b>3,884</b>	0,154	4,0



Tabelle A 24: Messwerte der Kalibrierung von 4-Chlorsalicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)

4-Chlorsalicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,1	0,406	0,443	0,399	<b>0,415</b>	0,023	5,6
0,2	0,862	0,821	0,861	<b>0,848</b>	0,024	2,8
0,3	1,250	1,268	1,324	<b>1,281</b>	0,039	3,0
0,4	1,818	1,685	1,655	<b>1,719</b>	0,087	5,1
0,5	2,334	2,132	2,098	<b>2,188</b>	0,128	5,8
0,6	2,470	2,585	2,420	<b>2,492</b>	0,084	3,4
0,7	2,873	3,057	2,849	<b>2,926</b>	0,113	3,9
0,8	3,377	3,448	3,527	<b>3,451</b>	0,075	2,2
0,9	3,769	3,750	3,796	<b>3,771</b>	0,023	0,6
1,0	4,474	4,029	4,423	<b>4,309</b>	0,244	5,7

Tabelle A 25: Messwerte der Kalibrierung von 5-Chlorsalicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)

5-Chlorsalicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,1	0,721	0,694	0,965	<b>0,793</b>	0,149	18,8
0,2	1,690	1,620	1,634	<b>1,648</b>	0,037	2,2
0,3	2,297	2,512	2,398	<b>2,402</b>	0,107	4,5
0,4	3,366	3,393	3,383	<b>3,381</b>	0,014	0,4
0,5	4,237	4,157	4,410	<b>4,268</b>	0,129	3,0
0,6	5,015	5,198	4,947	<b>5,053</b>	0,130	2,6
0,7	6,044	6,110	6,076	<b>6,076</b>	0,033	0,5
0,8	6,766	6,924	6,944	<b>6,878</b>	0,097	1,4
0,9	7,614	7,516	7,797	<b>7,642</b>	0,143	1,9
1,0	8,796	8,419	8,946	<b>8,720</b>	0,271	3,1

Tabelle A 26: Messwerte der Kalibrierung von 3-Bromsalicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)

3-Bromsalicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,1	0,126	0,119	0,141	<b>0,129</b>	0,011	8,8
0,2	0,261	0,317	0,273	<b>0,284</b>	0,030	10,4
0,3	0,393	0,460	0,435	<b>0,429</b>	0,034	7,9
0,4	0,590	0,574	0,576	<b>0,580</b>	0,008	1,5
0,5	0,605	0,697	0,682	<b>0,661</b>	0,049	7,4
0,6	0,736	0,804	0,803	<b>0,781</b>	0,039	5,0
0,7	0,936	0,982	0,952	<b>0,957</b>	0,024	2,5
0,8	1,103	1,124	1,049	<b>1,092</b>	0,039	3,5
0,9	1,155	1,213	1,220	<b>1,196</b>	0,036	3,0
1,0	1,339	1,312	1,366	<b>1,339</b>	0,027	2,0

Tabelle A 27: Messwerte der Kalibrierung von 4-Bromsalicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)

4-Bromsalicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,1	0,154	0,136	0,171	<b>0,154</b>	0,017	11,2
0,2	0,267	0,309	0,328	<b>0,301</b>	0,031	10,4
0,3	0,452	0,462	0,505	<b>0,473</b>	0,028	6,0
0,4	0,690	0,684	0,593	<b>0,656</b>	0,054	8,3
0,5	0,822	0,771	0,771	<b>0,788</b>	0,029	3,7
0,6	0,995	0,954	0,933	<b>0,961</b>	0,032	3,3
0,7	1,024	1,132	1,038	<b>1,065</b>	0,059	5,5
0,8	1,278	1,233	1,236	<b>1,249</b>	0,025	2,0
0,9	1,424	1,371	1,448	<b>1,414</b>	0,039	2,8
1,0	1,627	1,562	1,652	<b>1,614</b>	0,046	2,9

Tabelle A 28: Messwerte der Kalibrierung von 5-Bromsalicylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)

5-Bromsalicylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,1	0,189	0,163	0,181	<b>0,178</b>	0,013	7,6
0,2	0,426	0,382	0,370	<b>0,393</b>	0,029	7,4
0,3	0,529	0,569	0,517	<b>0,538</b>	0,027	5,1
0,4	0,742	0,745	0,702	<b>0,730</b>	0,024	3,3
0,5	0,941	0,923	0,860	<b>0,908</b>	0,042	4,7
0,6	1,150	1,092	1,068	<b>1,103</b>	0,042	3,8
0,7	1,223	1,286	1,252	<b>1,254</b>	0,032	2,5
0,8	1,397	1,472	1,448	<b>1,439</b>	0,039	2,7
0,9	1,591	1,592	1,606	<b>1,596</b>	0,009	0,5
1,0	1,863	1,821	1,758	<b>1,814</b>	0,053	2,9

Tabelle A 29: Messwerte der Kalibrierung von Resorcylsäure (0,1 – 1,0 µg/L)

Resorcylsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,1	0,064	0,058	0,063	<b>0,062</b>	0,003	4,7
0,2	0,088	0,101	0,095	<b>0,095</b>	0,007	7,0
0,3	0,133	0,162	0,153	<b>0,149</b>	0,015	9,9
0,4	0,184	0,210	0,171	<b>0,188</b>	0,020	10,7
0,5	0,143	0,250	0,226	<b>0,206</b>	0,056	27,1
0,6	0,196	0,304	0,285	<b>0,262</b>	0,058	22,0
0,7	0,295	0,375	0,330	<b>0,334</b>	0,040	12,1
0,8	0,371	0,423	0,419	<b>0,404</b>	0,029	7,1
0,9	0,431	0,424	0,484	<b>0,447</b>	0,033	7,3
1,0	0,487	0,462	0,504	<b>0,485</b>	0,021	4,4

**Tabelle A 30: Messwerte der Kalibrierung von trans-Zimtsäure (0,1 – 1,0 µg/L)**

trans-Zimtsäure						
c [µg/L]	1 [PFV]	2 [PFV]	3 [PFV]	$\bar{x}$ [PFV]	$s_x$ [PFV]	$V_k$ [%]
0,1	0,006	0,011	0,011	<b>0,009</b>	0,003	31,4
0,2	0,017	0,017	0,020	<b>0,018</b>	0,002	9,7
0,3	0,023	0,026	0,028	<b>0,026</b>	0,003	11,0
0,4	0,034	0,036	0,031	<b>0,034</b>	0,002	6,7
0,5	0,043	0,043	0,041	<b>0,042</b>	0,001	3,1
0,6	0,058	0,053	0,051	<b>0,054</b>	0,004	6,6
0,7	0,063	0,060	0,058	<b>0,061</b>	0,002	3,7
0,8	0,070	0,072	0,070	<b>0,071</b>	0,001	1,2
0,9	0,078	0,077	0,073	<b>0,076</b>	0,003	3,5
1,0	0,083	0,083	0,092	<b>0,086</b>	0,005	6,0

**Tabelle A 31: Berechnete Nachweis- und Bestimmungsgrenzen sowie angegebene Bestimmungsgrenzen**

Analyt	NG [µg/L]	BG [µg/L]	angegebene BG [µg/L]
Benzoessäure	0,261	0,901	1,5
2-Chlorbenzoessäure	0,095	0,285	1,0
3-Chlorbenzoessäure	0,024	0,084	0,5
4-Chlorbenzoessäure	0,020	0,070	0,5
Salicylsäure	0,022	0,077	0,5
3-Chlorsalicylsäure	0,045	0,150	0,5
4-Chlorsalicylsäure	0,019	0,067	0,5
5-Chlorsalicylsäure	0,014	0,050	0,5
3-Bromsalicylsäure	0,027	0,092	0,5
4-Bromsalicylsäure	0,023	0,081	0,5
5-Bromsalicylsäure	0,015	0,054	0,5
Resorcylsäure	0,062	0,197	0,5
trans-Zimtsäure	0,023	0,079	1,0



Fortsetzung Tabelle A 33:

	23.05.	13.06.	25.07.	29.08.	19.09.	24.10.	14.11.	12.12.	$\bar{x}$
Chlorid	51,64	45,28	46,48	45,87	k. E.	47,13	47,49	50,94	<b>49,45</b>
Sulfat	13,95	21,14	17,79	18,56	k. E.	18,44	19,24	15,47	<b>16,65</b>
Magnesium	12,15	16,18	23,47	22,91	k. E.	21,23	16,83	15,19	<b>15,88</b>
Natrium	11,43	9,90	6,30	6,55	k. E.	7,79	10,33	10,89	<b>10,31</b>
Kalium	10,47	7,16	5,74	5,87	k. E.	5,22	5,86	7,26	<b>7,41</b>
Bromid	0,28	0,18	0,09	0,10	k. E.	0,13	0,19	0,19	<b>0,20</b>
Calcium	0,05	0,12	0,11	0,13	k. E.	0,05	0,03	0,04	<b>0,06</b>
TOC	0,01	0,02	0,01	0,01	k. E.	0,01	0,01	0,01	<b>0,01</b>
Gesamt-N	0,01	0,01	0,00	0,00	k. E.	0,00	0,01	0,01	<b>0,01</b>
Summe arom. Carbonsäuren	0,01	0,01	0,00	0,00	k. E.	0,00	0,01	0,01	<b>0,01</b>

k. E.: keine Einleitung

Tabelle A 34: Zusammensetzung der arom. Carbonsäuren in den Prozessabwässer von Hattorf 2019 [%]

	10.01.	24.01.	07.02.	21.02.	07.03.	21.03.	04.04.	11.04.	09.05.
Salicylsäure	96,51	86,92	94,15	95,02	95,85	94,71	94,78	95,37	93,41
Benzoesäure	0,22	10,95	1,94	0,42	0,39	0,83	0,68	0,54	0,35
5-Bromsalicylsäure	1,61	1,05	1,82	2,15	1,76	1,98	1,98	1,72	2,53
3-Bromsalicylsäure	1,21	0,74	1,39	1,68	1,39	1,55	1,55	1,24	1,90
trans-Zimtsäure	0,31	0,14	0,27	0,31	0,18	0,26	0,36	0,28	0,42
5-Chlorsalicylsäure	0,09	0,10	0,25	0,24	0,25	0,38	0,36	0,47	0,77
3-Chlorsalicylsäure	0,04	0,09	0,18	0,18	0,18	0,30	0,28	0,39	0,61
	23.05.	13.06.	25.07.	29.08.	19.09.	24.10.	14.11.	12.12.	$\bar{x}$
Salicylsäure	97,19	93,02	k. E.	k. E.	k. E.	93,01	91,35	95,30	<b>94,0</b>
Benzoesäure	0,10	0,89	k. E.	k. E.	k. E.	0,34	0,09	0,02	<b>1,3</b>
5-Bromsalicylsäure	1,14	1,71	k. E.	k. E.	k. E.	2,11	2,21	0,66	<b>1,7</b>

k. E.: keine Einleitung

Fortsetzung Tabelle A 34:

	23.05.	13.06.	25.07.	29.08.	19.09.	24.10.	14.11.	12.12.	$\bar{x}$
3-Bromsalicylsäure	0,95	1,34	k. E.	k. E.	k. E.	1,54	1,68	0,56	<b>1,3</b>
trans-Zimtsäure	0,10	2,28	k. E.	k. E.	k. E.	1,62	3,83	3,16	<b>1,0</b>
5-Chlorsalicylsäure	0,29	0,42	k. E.	k. E.	k. E.	0,76	0,48	0,16	<b>0,4</b>
3-Chlorsalicylsäure	0,23	0,33	k. E.	k. E.	k. E.	0,63	0,36	0,14	<b>0,3</b>

k. E.: keine Einleitung

Tabelle A 35: Zusammensetzung der arom. Carbonsäuren in den Prozessabwässer von Wintershall 2019 [%]

	10.01.	24.01.	07.02.	21.02.	07.03.	21.03.	04.04.	11.04.	09.05.
Salicylsäure	90,90	93,24	91,48	89,57	88,50	91,57	93,67	92,63	89,67
4-Chlorbenzoesäure	4,90	3,54	4,52	5,66	7,44	2,75	1,43	3,44	2,60
5-Bromsalicylsäure	2,01	1,54	1,80	2,27	1,80	2,78	2,29	1,49	3,66
3-Bromsalicylsäure	1,70	1,20	1,39	1,81	1,46	2,10	1,85	1,24	2,81
5-Chlorsalicylsäure	0,27	0,26	0,43	0,36	0,40	0,43	0,41	0,65	0,68
3-Chlorsalicylsäure	0,20	0,19	0,35	0,29	0,32	0,30	0,33	0,54	0,56
Benzoesäure	0,02	0,03	0,03	0,04	0,07	0,06	0,02	0,01	0,01
	23.05.	13.06.	25.07.	29.08.	19.09.	24.10.	14.11.	12.12.	$\bar{x}$
Salicylsäure	91,25	91,23	91,58	88,58	k. E.	88,23	90,39	87,36	<b>90,62</b>
4-Chlorbenzoesäure	6,40	2,32	5,50	6,45	k. E.	3,96	2,52	8,20	<b>4,48</b>
5-Bromsalicylsäure	0,95	3,11	1,00	1,92	k. E.	3,34	3,01	1,98	<b>2,18</b>
3-Bromsalicylsäure	0,76	2,49	0,81	1,48	k. E.	2,42	2,27	1,62	<b>1,71</b>
5-Chlorsalicylsäure	0,37	0,48	0,56	0,76	k. E.	1,06	0,93	0,46	<b>0,53</b>

k. E.: keine Einleitung

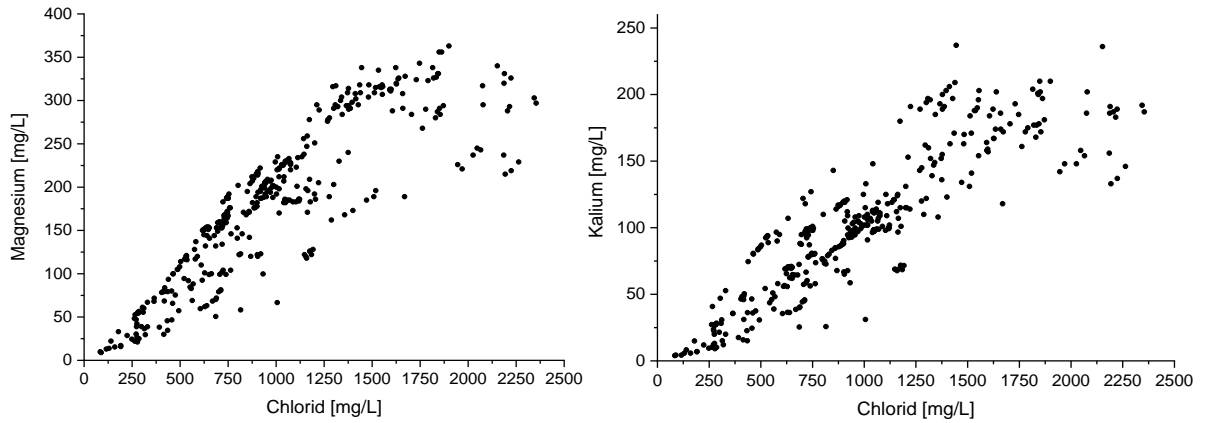
Fortsetzung Tabelle A 35:

	23.05.	13.06.	25.07.	29.08.	19.09.	24.10.	14.11.	12.12.	$\bar{x}$
3-Chlorsalicylsäure	0,27	0,37	0,54	0,77	k. E.	0,97	0,85	0,36	<b>0,45</b>
Benzoesäure	0,01	0,00	0,00	0,05	k. E.	0,02	0,03	0,01	<b>0,03</b>

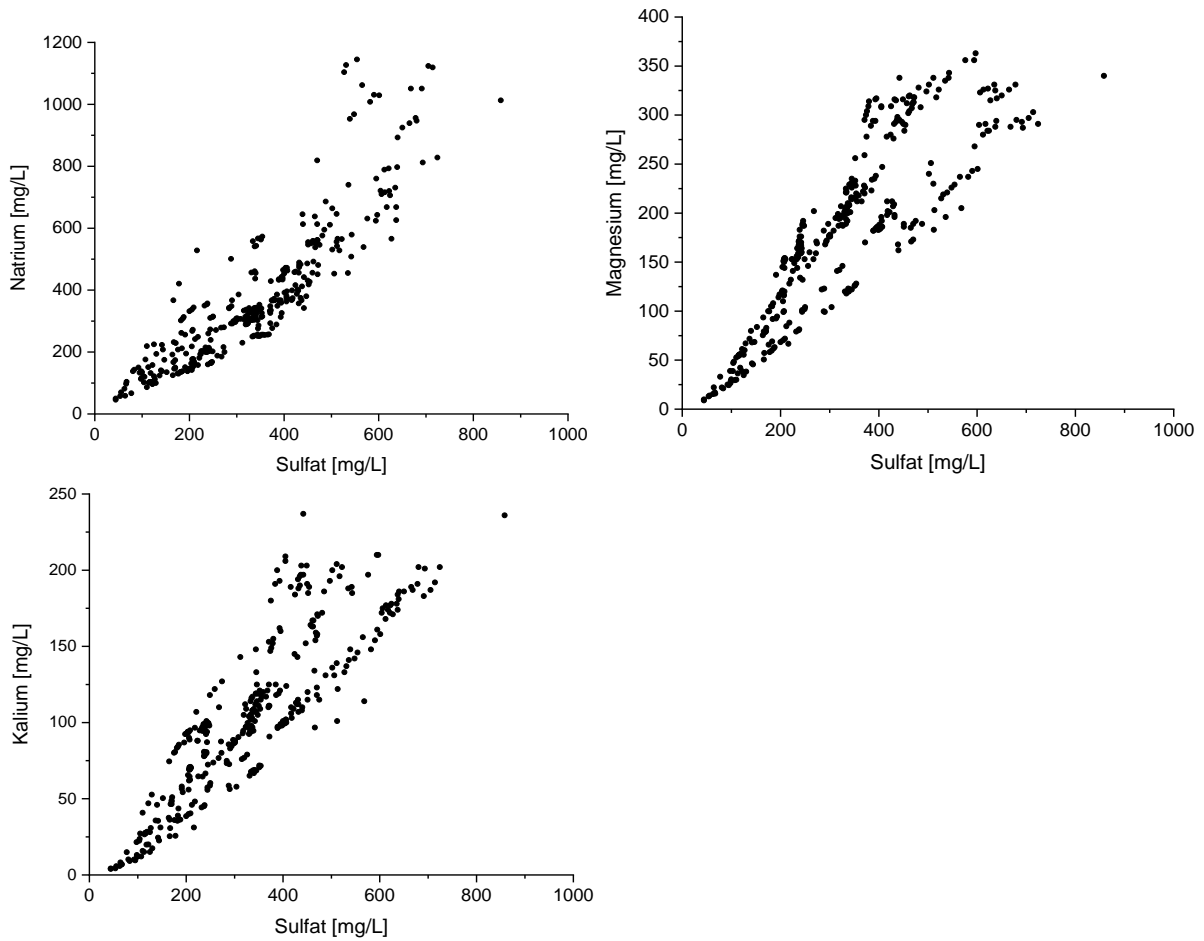
k. E.: keine Einleitung

Tabelle A 36: Chlorid-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 10 mg/L)

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	89	191	286	160	116	84	249	319	435
2,2	503	904	1029	746	627	286	926	889	1165
2,9	524	917	1048	761	640	282	935	885	1120
3,7	528	906	1067	758	647	282	943	859	1119
4,5	533	904	1058	745	652	283	943	844	1122
5,1	533	884	1062	746	624	282	943	860	1118
6,1	531	874	1036	747	582	281	955	901	1103
10,4	536	996	1065	678	640	277	940	920	1088
13,7	743	1308	1415	956	1295	409	1435	1552	1606
15,1	704	1319	1481	974	1311	418	1483	1639	1705
17,7	715	1428	1597	1001	1341	558	1672	1659	1871
19,2	632	1387	1599	949	1377	615	1626	1842	1854
20,9	590	1378	1593	970	1372	663	1627	1815	1830
22,4	579	1344	1553	974	1336	651	1592	1730	1762
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	130	264	815	686	1006	415	278	191	
2,2	723	1160	1163	920	1176	1070	983	723	
2,9	754	1145	1178	904	1192	1049	1002	722	
3,7	748	1113	1221	902	1176	1060	1016	718	
4,5	742	1075	1300	868	1148	1040	1040	720	
5,1	745	1073	1277	763	1154	1044	1041	726	
6,1	744	1076	1205	739	1184	1046	1015	714	
10,4	751	1143	1200	932	1159	1109	956	696	
13,7	1224	1533	1840	1357	1509	1660	1518	1270	
15,1	1173	1623	2078	1669	1969	1779	1635	1396	
17,7	1366	1747	2205	1946	2185	2075	1845	1555	
19,2	1412	1862	2216	2047	2263	2187	1834	1547	
20,9	1439	1900	2344	2065	2224	2223	1820	1538	
22,4	1378	1849	2354	2026	2193	2189	1791	1512	



**Abbildung A 1: Streudiagramme der Korrelationen der Chloridkonzentration mit der Magnesium- und Kaliumkonzentration**



**Abbildung A 2: Streudiagramme der Korrelationen der Sulfatkonzentration mit der Natrium-, Magnesium- und Kaliumkonzentration**



**Tabelle A 37: Bromid-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,5 mg/L)**

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5	<0,5
2,2	1,8	3,7	4,8	3,6	3,1	1,0	3,6	3,3	3,6
2,9	1,9	3,9	4,5	3,8	3,1	1,0	3,7	3,3	3,4
3,7	2,0	3,8	4,3	3,7	3,2	1,0	3,7	3,1	3,4
4,5	2,0	3,8	4,5	3,7	3,1	1,0	3,7	3,0	3,4
5,1	2,0	3,6	4,5	3,6	3,1	1,0	3,7	3,1	3,4
6,1	2,0	3,7	4,4	3,6	2,9	1,0	3,8	3,3	3,4
10,4	1,9	4,2	4,5	3,0	3,1	1,0	3,7	3,4	3,3
13,7	2,9	5,9	5,8	4,2	7,1	1,4	5,7	5,5	5,1
15,1	2,7	5,9	5,9	4,3	7,0	1,4	5,6	5,6	5,2
17,7	2,6	5,7	6,1	4,0	6,7	1,5	5,8	5,4	5,3
19,2	2,3	5,6	6,0	3,8	7,0	1,7	5,7	5,9	5,1
20,9	2,1	5,5	5,9	3,9	7,0	1,8	5,6	6,0	5,0
22,4	2,1	5,4	6,0	4,0	6,7	1,8	5,5	5,7	4,8
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	<0,5	<0,5	0,8	0,7	0,9	<0,5	<0,5	<0,5	
2,2	3,7	4,8	2,6	1,9	1,9	3,2	3,2	2,8	
2,9	3,9	4,8	2,7	1,8	2,0	3,1	3,3	2,8	
3,7	3,8	4,6	2,9	1,8	2,0	3,1	3,4	2,8	
4,5	3,8	4,4	3,2	1,7	1,9	3,1	3,6	2,7	
5,1	3,7	4,5	3,1	1,4	1,9	3,1	3,7	2,7	
6,1	3,7	4,6	2,9	1,4	2,0	3,2	3,7	2,7	
10,4	3,8	5,4	3,1	1,4	1,8	3,4	3,4	2,6	
13,7	6,1	6,8	4,7	2,5	2,9	5,0	5,5	4,7	
15,1	5,7	6,9	4,9	2,9	3,4	5,1	5,7	5,0	
17,7	6,2	6,9	4,3	3,4	3,7	5,5	5,9	5,5	
19,2	6,4	7,2	4,3	3,6	3,7	5,7	5,8	5,5	
20,9	6,6	7,3	4,5	3,6	3,5	5,8	5,8	5,5	
22,4	6,3	7,1	4,4	3,5	3,4	5,7	5,7	5,5	

**Tabelle A 38: Sulfat-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,5 mg/L)**

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	44	66	92	63	54	44	95	107	125
2,2	198	368	350	242	208	116	331	299	407

Fortsetzung Tabelle A 38:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
2,9	200	353	352	239	209	116	334	294	403
3,7	203	344	346	238	210	116	335	291	406
4,5	204	356	343	238	204	115	334	293	403
5,1	205	365	333	237	191	116	339	308	398
6,1	207	346	348	234	208	114	317	318	400
10,4	274	437	460	337	393	170	471	517	637
13,7	259	435	462	340	395	170	472	522	624
15,1	249	442	468	337	376	171	481	485	639
17,7	221	450	470	333	380	191	463	502	621
19,2	208	454	471	333	379	207	461	511	612
20,9	206	452	467	330	374	206	457	497	595
22,4	44	66	92	63	54	44	95	107	125
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	56	81	178	166	216	110	84	67	
2,2	246	394	512	331	354	389	406	233	
2,9	245	386	568	340	351	395	417	233	
3,7	245	372	513	339	341	389	429	236	
4,5	245	370	451	304	338	393	427	241	
5,1	246	353	451	290	345	397	417	235	
6,1	248	352	475	288	334	422	405	228	
10,4	384	535	693	439	488	617	627	416	
13,7	375	542	680	470	539	604	637	438	
15,1	393	543	668	548	565	640	635	449	
17,7	405	576	691	601	554	650	622	435	
19,2	405	597	714	590	531	665	613	432	
20,9	388	594	705	582	527	678	606	425	
22,4	56	81	178	166	216	110	84	67	

Tabelle A 39: Calcium-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,05 mg/L)

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	42	62	77	57	46	45	76	87	94
2,2	46	65	80	61	50	48	76	84	95
2,9	46	64	80	60	49	48	76	83	94
3,7	46	64	79	61	49	47	76	84	93

Fortsetzung Tabelle A 39:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
4,5	46	64	79	61	49	47	76	84	95
5,1	46	64	79	61	49	47	76	83	95
6,1	46	64	79	61	49	48	77	83	95
10,4	48	69	84	66	54	47	75	84	93
13,7	46	65	80	62	49	48	78	86	100
15,1	46	66	82	63	50	48	80	88	99
17,7	48	70	86	66	53	51	85	93	104
19,2	47	69	85	66	53	51	85	97	104
20,9	46	69	86	66	54	51	85	96	105
22,4	47	70	87	67	55	52	86	95	105
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	56	66	117	98	134	75	63	55	
2,2	58	70	118	111	131	80	68	59	
2,9	59	68	118	114	131	79	67	58	
3,7	56	68	116	115	131	80	67	58	
4,5	56	67	116	115	129	79	68	59	
5,1	57	66	116	112	128	79	68	58	
6,1	57	64	123	109	130	79	67	58	
10,4	56	62	120	118	131	79	67	57	
13,7	56	65	117	123	138	79	69	58	
15,1	56	68	127	134	156	82	73	60	
17,7	60	73	134	142	160	91	77	63	
19,2	60	76	131	148	164	90	78	63	
20,9	60	76	133	149	164	90	77	63	
22,4	60	77	136	151	164	94	79	64	

Tabelle A 40: Kalium-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,5 mg/L)

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	4	7	10	56	4	4	10	12	15
2,2	87	120	107	80	69	28	93	87	107
2,9	92	121	111	81	71	28	93	86	100
3,7	93	119	119	80	71	28	95	85	99
4,5	94	119	114	80	70	27	95	83	102
5,1	94	117	112	81	66	27	94	85	100

Fortsetzung Tabelle A 40:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
6,1	94	117	105	81	58	27	95	90	98
10,4	89	125	105	65	62	27	93	95	101
13,7	127	197	163	108	162	48	171	196	184
15,1	122	196	163	109	160	49	170	202	178
17,7	118	197	159	108	149	51	172	186	181
19,2	107	191	157	104	155	57	167	200	172
20,9	95	189	158	105	152	65	167	204	168
22,4	90	185	154	104	147	62	164	193	161
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	6	10	26	25	31	16	9	7	
2,2	95	124	97	68	72	99	99	96	
2,9	100	121	101	65	72	97	102	96	
3,7	98	118	114	67	71	99	106	97	
4,5	98	111	122	68	69	96	112	99	
5,1	100	110	120	58	69	98	113	99	
6,1	99	109	115	56	69	99	110	97	
10,4	98	121	115	59	68	109	100	95	
13,7	191	188	201	108	131	174	171	189	
15,1	180	189	202	118	148	172	174	203	
17,7	193	185	187	142	156	186	178	203	
19,2	206	197	183	158	146	186	177	190	
20,9	209	210	192	154	137	189	177	188	
22,4	200	210	187	148	133	191	175	184	

Tabelle A 41: Natrium-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,2 mg/L)

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	50	97	150	81	58	46	133	176	225
2,2	138	255	336	204	157	104	304	305	481
2,9	146	257	339	206	159	103	306	304	463
3,7	145	256	341	204	163	102	308	297	462
4,5	145	257	339	204	168	102	308	292	472
5,1	144	256	341	206	163	102	308	300	472
6,1	142	256	335	208	151	103	313	307	465
10,4	152	286	353	215	177	101	303	314	453

Fortsetzung Tabelle A 41:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
13,7	200	367	456	304	313	148	451	528	668
15,1	188	375	492	315	326	150	481	565	706
17,7	202	442	559	342	366	229	576	595	797
19,2	181	431	562	330	367	256	556	664	793
20,9	177	427	561	332	372	272	559	646	789
22,4	177	418	551	327	367	268	551	611	760
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	70	138	421	367	528	219	143	104	
2,2	160	373	538	461	568	440	392	205	
2,9	166	359	542	457	573	435	396	204	
3,7	164	349	539	455	563	443	399	206	
4,5	164	335	566	437	543	433	402	207	
5,1	165	333	555	386	541	436	388	204	
6,1	165	326	547	367	567	434	370	202	
10,4	168	313	546	501	558	458	363	203	
13,7	289	455	812	645	686	668	566	368	
15,1	277	508	947	819	953	721	626	412	
17,7	367	579	1051	968	1062	893	731	486	
19,2	375	631	1051	1029	1145	925	720	483	
20,9	381	643	1119	1031	1127	939	716	474	
22,4	367	624	1124	1008	1104	956	710	460	

Tabelle A 42: Magnesium-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,05 mg/L)

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	9	17	25	15	13	10	24	30	35
2,2	114	218	226	170	151	57	201	176	196
2,9	117	222	230	176	154	56	202	176	186
3,7	117	216	233	176	154	55	204	172	184
4,5	120	214	231	172	153	55	205	168	186
5,1	121	212	230	171	145	55	205	171	186
6,1	120	212	225	171	137	55	209	182	183
10,4	116	229	229	144	144	54	199	187	183
13,7	169	295	302	207	316	79	318	318	288
15,1	160	293	304	208	317	79	318	326	284

Fortsetzung Tabelle A 42:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
17,7	153	295	311	200	304	83	328	308	294
19,2	132	291	313	189	314	93	320	331	284
20,9	120	290	313	194	309	100	319	338	280
22,4	117	284	307	199	300	99	312	324	268
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	14	22	58	51	67	30	21	16	
2,2	183	247	171	123	126	185	188	159	
2,9	192	238	183	120	128	182	192	156	
3,7	189	234	205	122	126	185	198	153	
4,5	187	226	203	120	122	182	207	155	
5,1	188	228	189	104	120	184	212	159	
6,1	188	228	186	99	122	186	212	156	
10,4	187	256	192	100	118	201	196	149	
13,7	289	335	287	168	189	291	315	278	
15,1	278	338	295	189	221	290	325	298	
17,7	294	343	288	226	237	317	331	316	
19,2	308	356	293	245	229	320	327	315	
20,9	309	363	303	243	219	326	326	316	
22,4	294	356	297	237	215	331	323	309	

Tabelle A 43: TOC-Konzentrationen [mg C/L] in der Werra (BG = 1,0 mg C/L)

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	7,2	3,0	2,9	3,0	3,0	4,0	2,5	2,8	2,8
2,2	7,2	5,5	3,3	3,6	4,6	3,2	3,5	2,7	2,7
2,9	9,2	5,5	3,0	7,4	4,4	5,5	3,3	2,6	2,7
3,7	8,2	3,1	2,8	3,2	3,4	3,7	2,9	2,7	2,9
4,5	8,8	2,8	2,8	2,9	3,3	3,9	2,9	2,7	2,7
5,1	8,7	2,8	3,1	2,8	3,4	3,8	2,8	2,7	2,8
6,1	8,8	2,8	2,9	3,0	4,5	4,6	2,7	2,8	2,7
10,4	8,5	3,0	2,9	3,1	3,3	3,8	2,8	2,7	3,1
13,7	9,4	2,9	3,2	2,9	3,4	3,8	3,0	2,9	2,9
15,1	8,6	2,8	2,9	2,9	3,3	4,2	3,0	2,9	3,0
17,7	9,2	3,1	3,0	2,9	3,2	4,3	3,1	2,7	3,3
19,2	8,7	3,2	3,0	2,8	3,3	3,8	3,1	3,0	3,2

Fortsetzung Tabelle A 43:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
20,9	9,7	2,7	2,8	3,0	3,5	4,3	3,1	2,8	3,5
22,4	9,4	2,8	2,9	2,3	3,8	5,1	3,0	2,8	3,4
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	6,3	4,8	3,8	5,7	3,8	3,0	2,8	4,3	
2,2	7,6	5,1	3,7	4,2	3,2	3,0	2,7	3,4	
2,9	7,5	5,6	3,6	4,0	3,6	3,0	3,3	3,4	
3,7	7,4	5,2	4,3	4,5	3,3	3,1	2,8	3,4	
4,5	7,6	6,2	3,7	4,2	3,2	3,0	2,9	3,0	
5,1	7,4	6,3	4,2	4,4	3,6	2,9	2,9	3,5	
6,1	7,6	6,6	4,4	4,2	3,1	3,1	3,0	3,7	
10,4	7,6	7,6	4,8	3,4	3,3	3,3	2,7	4,6	
13,7	8,4	6,6	6,5	3,8	5,3	3,0	3,0	4,1	
15,1	7,7	6,7	6,3	3,8	3,5	3,5	3,0	4,0	
17,7	8,7	6,4	6,4	4,3	3,9	3,7	3,2	4,0	
19,2	7,2	6,4	7,0	7,1	3,9	3,1	2,9	4,0	
20,9	8,4	6,2	8,1	4,4	4,3	3,3	3,0	3,9	
22,4	8,3	7,2	8,6	5,9	4,1	3,1	3,2	3,8	

Tabelle A 44: DOC-Konzentrationen [mg C/L] in der Werra (BG = 1,0 mg C/L)

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	3,6	n. b.	2,4	2,2	2,4	2,5	2,1	2,3	2,3
2,2	3,8	n. b.	2,6	2,2	2,5	2,5	2,3	2,2	2,6
2,9	3,8	n. b.	2,6	2,0	2,4	2,6	2,2	2,1	2,1
3,7	3,7	n. b.	2,7	2,1	2,3	2,4	2,1	2,3	2,1
4,5	3,9	n. b.	2,6	2,1	2,3	2,5	2,2	2,2	2,1
5,1	3,9	n. b.	2,7	2,2	2,5	2,6	2,2	2,2	2,2
6,1	3,8	n. b.	2,5	2,2	2,5	2,5	2,1	2,1	2,1
10,4	3,9	n. b.	2,5	2,1	2,2	2,7	2,2	2,2	2,2
13,7	4,8	n. b.	2,4	2,2	2,3	2,6	2,5	2,4	2,2
15,1	4,7	n. b.	2,3	2,2	2,3	2,6	2,5	2,4	2,3
17,7	4,7	n. b.	2,3	2,2	2,2	2,6	2,4	2,4	2,3
19,2	4,7	n. b.	2,2	2,3	2,3	2,6	2,5	2,4	2,4
20,9	4,8	n. b.	2,5	2,1	2,1	2,6	2,5	2,3	2,4
22,4	4,8	n. b.	2,4	2,3	2,4	2,7	2,4	2,4	2,5

n. b.: nicht bestimmt

Fortsetzung Tabelle A 44:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019
-1,5	4,8	4,1	3,0	3,8	3,1	2,7	2,2	2,5
2,2	5,0	3,8	2,8	3,4	2,9	2,8	2,4	2,7
2,9	4,9	3,7	2,9	3,5	3,0	2,9	2,5	2,9
3,7	5,2	3,8	3,2	3,3	2,8	2,8	2,4	2,7
4,5	5,2	3,8	2,9	3,2	2,7	2,8	2,5	2,7
5,1	5,2	3,5	3,0	3,4	2,8	2,6	2,6	2,8
6,1	5,0	3,5	2,9	3,3	2,8	2,8	2,5	2,6
10,4	5,4	3,6	3,1	2,9	2,9	2,8	2,4	2,3
13,7	5,5	3,5	3,1	3,1	3,0	2,7	2,6	2,8
15,1	5,5	3,4	3,3	2,9	3,0	2,8	2,5	3,2
17,7	5,8	3,7	3,2	3,1	2,8	2,8	2,5	2,9
19,2	5,7	3,6	2,8	3,5	3,1	2,7	2,5	2,9
20,9	5,9	3,5	3,5	3,0	3,2	2,5	2,5	2,9
22,4	5,9	3,5	3,6	3,3	3,0	2,6	2,6	2,8

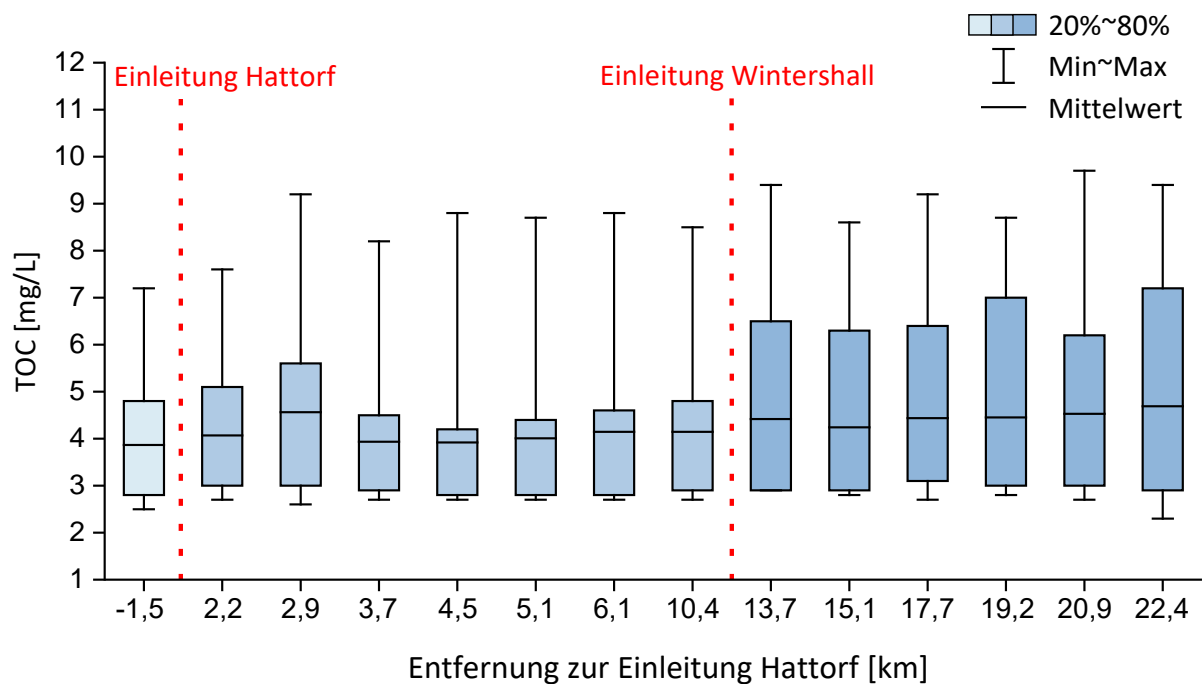


Abbildung A 3: TOC-Konzentrationen in der Werra 2019

(hell: Vorbelastung, 1,5 km vor der Einleitung Hattorf; mittel: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)



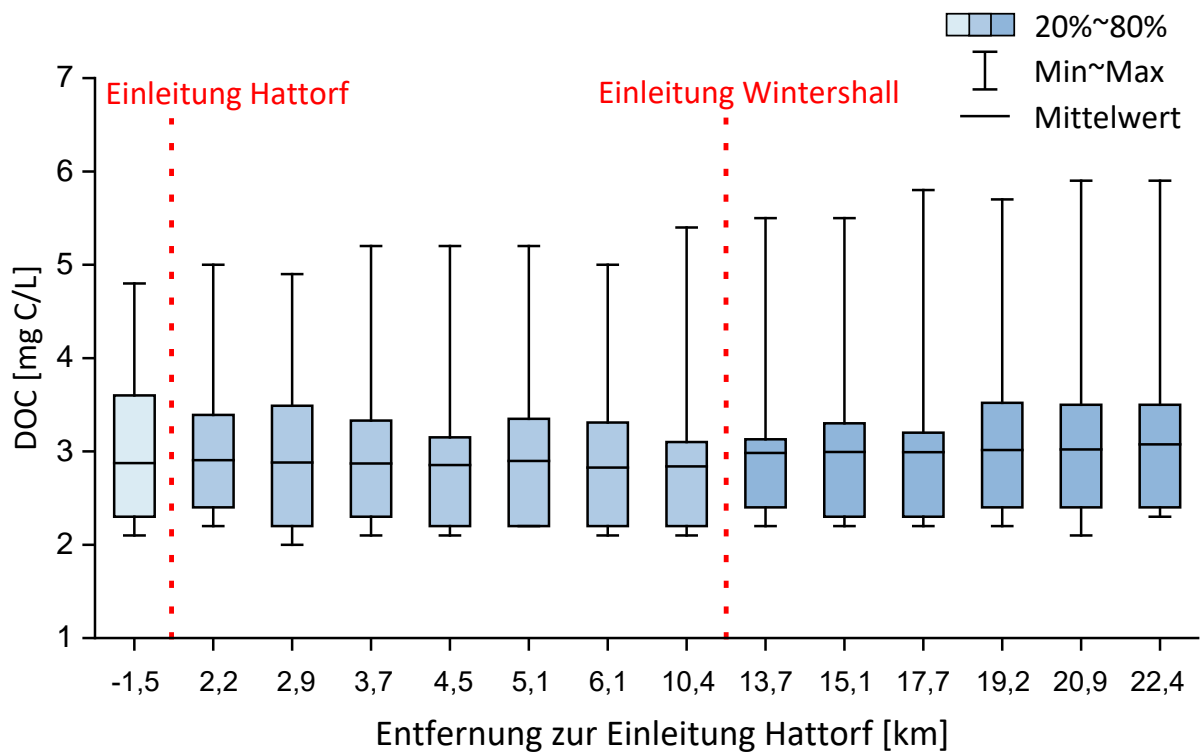


Abbildung A 4: DOC-Konzentrationen in der Werra 2019

(hell: Vorbelastung, 1,5 km vor der Einleitung Hattorf; mittel: Abschnitt Hattorf;  
dunkel: Abschnitt Wintershall)

Tabelle A 45: Sauerstoffsättigungen [%] in der Werra

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	101	103	96	95	104	99	94	98	92
2,2	97	99	96	90	98	96	93	99	93
2,9	96	97	96	90	98	96	94	98	91
3,7	94	97	97	90	99	98	94	98	92
4,5	96	98	96	99	98	98	94	97	93
5,1	93	97	96	89	97	99	94	98	94
6,1	95	97	96	88	97	99	94	97	92
10,4	95	97	95	88	97	94	92	99	96
13,7	96	100	96	90	100	101	93	103	99
15,1	97	100	97	91	100	105	93	107	105
17,7	97	99	96	90	100	103	94	110	110
19,2	97	101	97	91	99	101	94	106	106
20,9	96	99	96	90	97	102	95	108	105
22,4	96	100	96	90	99	104	95	107	107

Fortsetzung Tabelle A 45:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019
- 1,5	100	86	109	86	86	88	98	98
2,2	100	88	110	90	93	87	99	96
2,9	99	87	107	90	93	87	99	93
3,7	100	88	106	88	92	87	100	93
4,5	99	87	105	85	90	86	99	93
5,1	99	86	107	88	89	86	99	93
6,1	99	86	116	81	87	85	98	93
10,4	101	85	120	100	91	84	99	93
13,7	101	82	128	111	100	87	100	93
15,1	103	86	131	126	104	90	102	93
17,7	103	86	117	121	94	90	102	95
19,2	101	86	139	121	98	87	101	95
20,9	102	85	159	123	105	88	101	95
22,4	101	86	163	127	104	89	101	93

Tabelle A 46: Sauerstoff-Konzentrationen [mg/L] in der Werra

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	12,4	13,0	11,9	11,2	11,1	10,8	10,2	10,3	9,4
2,2	11,7	12,3	11,9	10,6	10,4	10,2	9,8	10,9	9,4
2,9	11,5	12,4	11,7	10,9	10,5	10,5	10,1	10,7	9,3
3,7	11,2	12,4	11,9	10,7	10,7	10,9	10,1	10,7	9,3
4,5	11,9	12,8	11,9	10,6	10,6	11,0	10,2	10,6	9,4
5,1	10,9	12,4	11,7	10,3	10,5	11,2	10,0	10,5	9,5
6,1	11,4	12,5	11,8	10,0	10,5	11,2	10,0	10,5	9,4
10,4	11,4	12,2	11,6	10,2	10,3	9,3	9,9	10,2	9,8
13,7	11,5	13,0	11,8	10,4	10,8	11,1	9,8	10,6	9,7
15,1	11,7	12,7	11,7	10,5	10,7	11,6	9,8	11,1	10,3
17,7	11,6	12,6	11,6	10,3	10,5	11,3	9,9	11,2	10,7
19,2	11,6	12,9	11,3	10,4	10,4	10,6	9,9	10,8	10,4
20,9	11,5	12,6	11,5	10,5	10,7	10,9	10,0	11,0	10,3
22,4	11,7	12,8	11,5	10,1	10,5	11,3	10,0	10,9	10,5
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	10,1	7,9	9,1	7,1	8,7	9,0	11,2	11,1	
2,2	10,2	7,9	9,0	7,1	8,8	8,6	11,3	10,7	

Fortsetzung Tabelle A 46:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019
2,9	10,2	7,9	8,8	7,1	8,7	8,7	11,4	10,9
3,7	9,9	8,0	8,7	7,0	8,7	8,6	11,4	11,1
4,5	10,1	8,0	8,6	6,8	8,5	8,6	11,3	10,8
5,1	9,9	7,9	8,7	6,9	8,4	8,6	11,2	10,8
6,1	9,6	7,8	9,5	6,5	8,1	8,5	11,3	10,9
10,4	9,9	7,6	9,6	8,1	8,6	8,5	11,3	10,9
13,7	9,8	7,4	9,7	8,6	9,1	8,4	11,2	10,7
15,1	10,0	7,5	9,9	9,7	9,4	8,7	11,4	10,6
17,7	9,9	7,4	8,8	9,3	8,4	8,5	11,4	10,9
19,2	9,8	7,3	10,3	9,4	8,8	8,2	11,2	10,9
20,9	9,8	7,1	11,8	9,6	9,6	8,3	11,4	10,9
22,4	9,7	7,3	12,1	10,0	9,5	8,3	11,4	10,5

Tabelle A 47: TNb-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 1,0 mg/L)

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	4,3	4,3	3,6	n. b.	3,0	3,2	3,6	3,7	3,5
2,2	4,7	4,5	4,1	n. b.	3,0	3,2	3,8	3,5	3,5
2,9	4,9	4,4	4,1	n. b.	3,1	3,3	3,8	3,5	3,4
3,7	4,8	4,2	4,0	n. b.	3,0	3,3	3,8	3,5	3,4
4,5	4,8	4,2	4,1	n. b.	3,0	3,3	3,8	3,5	3,4
5,1	4,8	4,2	4,1	n. b.	3,0	3,3	3,8	3,4	3,4
6,1	4,8	4,2	4,1	n. b.	3,1	3,3	3,6	3,3	3,3
10,4	4,8	4,2	3,0	n. b.	2,9	3,3	3,7	3,4	3,4
13,7	3,7	4,2	4,0	n. b.	2,9	3,2	3,7	3,3	3,2
15,1	3,7	4,2	4,0	n. b.	2,9	3,4	3,7	3,3	3,1
17,7	3,8	4,1	4,0	n. b.	2,8	3,4	3,7	3,3	3,1
19,2	3,7	4,1	4,0	n. b.	3,0	3,4	3,8	3,4	3,2
20,9	3,7	4,2	3,9	n. b.	2,9	3,4	3,7	3,4	3,2
22,4	3,7	4,2	3,9	n. b.	2,9	3,5	3,8	3,4	3,3
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	3,7	3,6	3,2	3,3	3,9	2,4	2,8	3,4	
2,2	3,6	3,7	3,4	3,2	4,0	2,3	2,7	3,3	
2,9	3,5	3,7	3,4	3,2	4,0	2,5	3,0	3,3	

n. b.: nicht bestimmt

Fortsetzung Tabelle A 47:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019
3,7	3,4	3,6	3,3	3,4	3,9	2,6	2,9	3,3
4,5	3,5	3,7	3,3	3,4	3,9	2,5	2,9	3,2
5,1	3,4	2,8	3,3	3,4	3,9	2,1	3,0	3,3
6,1	3,4	2,9	3,3	3,3	4,0	2,5	2,9	3,1
10,4	3,4	3,1	3,2	3,1	3,9	2,5	2,8	2,6
13,7	3,3	3,0	3,2	3,0	3,8	2,5	2,9	3,5
15,1	3,2	3,1	3,1	3,0	3,6	2,4	2,9	3,5
17,7	3,3	3,2	3,0	3,0	3,7	2,5	3,0	3,5
19,2	3,3	3,3	2,9	3,2	3,6	2,5	2,9	3,5
20,9	3,3	3,3	2,9	2,9	3,4	2,5	2,9	3,5
22,4	3,4	3,4	3,0	3,1	3,5	2,6	3,0	3,5

Tabelle A 48: Nitrat-Stickstoff-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,2 mg/L)

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	4,1	4,1	4,1	3,8	2,7	3,2	3,4	3,4	3,2
2,2	4,3	4,3	4,3	4,1	2,9	3,2	3,4	3,2	3,2
2,9	4,3	4,3	4,1	3,8	2,9	3,2	3,4	3,2	3,2
3,7	4,3	4,1	4,1	3,8	2,9	3,2	3,4	3,2	3,2
4,5	4,3	4,1	4,1	3,8	2,9	3,2	3,4	3,2	3,2
5,1	4,3	4,1	4,1	3,8	2,9	3,2	3,4	3,2	3,2
6,1	4,3	4,1	4,1	3,8	2,9	3,2	3,4	3,2	3,2
10,4	4,3	4,1	4,1	3,8	2,9	3,2	3,4	3,2	3,2
13,7	4,3	4,1	4,1	3,8	2,9	3,2	3,4	3,2	2,9
15,1	4,3	4,1	4,1	3,8	2,9	3,2	3,4	3,2	2,9
17,7	4,3	4,3	4,1	4,1	2,9	3,2	3,4	3,2	3,2
19,2	4,3	4,1	4,1	4,1	2,9	3,2	3,4	3,2	3,2
20,9	4,3	4,1	3,8	4,1	2,9	3,2	3,4	3,2	3,2
22,4	4,3	4,3	4,1	4,1	2,9	3,2	3,4	3,4	3,2
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	3,2	2,7	2,7	2,7	3,4	2,2	2,7	2,9	
2,2	3,2	2,7	2,9	2,9	3,4	2,3	2,7	3,2	
2,9	2,9	2,7	2,9	2,9	3,4	2,3	2,7	3,2	
3,7	2,9	2,7	2,9	3,2	3,4	2,3	2,7	3,2	
4,5	2,9	2,7	2,9	3,2	3,4	2,3	2,7	3,2	

Fortsetzung Tabelle A 48:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019
5,1	2,9	2,7	2,7	3,2	3,4	2,3	2,7	3,2
6,1	2,9	2,7	2,7	3,2	3,4	2,3	2,7	3,2
10,4	2,9	2,7	2,7	2,9	3,4	2,3	2,7	3,2
13,7	3,2	2,7	2,5	2,9	3,2	2,3	2,7	3,2
15,1	3,2	2,9	2,5	2,9	3,2	2,3	2,7	3,2
17,7	3,2	2,9	2,3	2,9	3,2	2,3	2,7	3,2
19,2	3,2	2,9	2,1	2,7	3,2	2,3	2,7	3,2
20,9	3,2	2,9	2,0	2,7	2,9	2,3	2,7	3,2
22,4	3,2	2,9	2,0	2,7	3,2	2,3	2,7	3,2

Tabelle A 49: Gesamtphosphat-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,02 mg/L)

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	n. b.	0,11	0,12	0,09	0,10	0,06	0,09	0,10	0,13
2,2	n. b.	0,11	0,12	0,09	0,09	0,06	0,09	0,09	0,15
2,9	n. b.	0,11	0,12	0,08	0,09	0,05	0,09	0,09	0,15
3,7	n. b.	0,11	0,12	0,08	0,09	< BG	0,09	0,09	0,15
4,5	n. b.	0,11	0,11	0,08	0,09	0,05	0,08	0,10	0,16
5,1	n. b.	0,10	0,11	0,09	0,09	<0,05	0,09	0,09	0,15
6,1	n. b.	0,10	0,11	0,08	0,09	< BG	0,09	0,10	0,14
10,4	n. b.	0,10	0,11	0,09	0,10	0,05	0,10	0,09	0,15
13,7	n. b.	0,10	0,12	0,08	0,09	0,06	0,10	0,10	0,14
15,1	n. b.	0,10	0,11	0,09	0,09	0,05	0,10	0,10	0,16
17,7	n. b.	0,10	0,12	0,08	0,09	0,05	0,10	0,10	0,14
19,2	n. b.	0,11	0,11	0,09	0,09	0,05	0,10	0,10	0,14
20,9	n. b.	0,10	0,11	0,08	0,10	< BG	0,10	0,10	0,14
22,4	n. b.	0,11	0,12	0,08	0,10	0,05	0,11	0,10	0,15
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	0,15	0,24	0,21	0,28	0,22	0,17	0,15	0,14	
2,2	0,14	0,23	0,20	0,24	0,21	0,17	0,14	0,13	
2,9	0,16	0,22	0,20	0,23	0,21	0,17	0,13	0,13	
3,7	0,14	0,23	0,20	0,24	0,22	0,18	0,14	0,13	
4,5	0,15	0,23	0,21	0,25	0,23	0,17	0,14	0,13	
5,1	0,14	0,23	0,20	0,26	0,23	0,21	0,13	0,13	

n. b.: nicht bestimmt

Fortsetzung Tabelle A 49:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019
6,1	0,15	0,23	0,20	0,26	0,23	0,18	0,13	0,13
10,4	0,15	0,25	0,20	0,23	0,22	0,19	0,13	0,13
13,7	0,15	0,26	0,18	0,21	0,23	0,20	0,13	0,14
15,1	0,16	0,25	0,19	0,20	0,22	0,18	0,13	0,14
17,7	0,15	0,26	0,19	0,19	0,22	0,21	0,13	0,14
19,2	0,15	0,28	0,17	0,18	0,22	0,17	0,13	0,13
20,9	0,15	0,28	0,16	0,19	0,21	0,19	0,13	0,13
22,4	0,16	0,27	0,17	0,18	0,22	0,19	0,14	0,13

Tabelle A 50: Ammonium-Stickstoff-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 0,015 mg/L)

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	0,10	0,20	0,16	0,08	0,06	0,03	0,10	0,03	0,06
2,2	0,14	0,25	0,22	0,12	0,11	0,05	0,14	0,10	0,11
2,9	0,13	0,24	0,22	0,12	0,11	0,05	0,14	0,10	0,10
3,7	0,14	0,25	0,22	0,13	0,11	0,06	0,14	0,11	0,10
4,5	0,14	0,24	0,22	0,12	0,12	0,06	0,14	0,10	0,09
5,1	0,13	0,23	0,22	0,12	0,13	0,06	0,14	0,10	0,10
6,1	0,14	0,25	0,22	0,12	0,12	0,06	0,14	0,10	0,10
10,4	0,14	0,25	0,22	0,11	0,14	0,05	0,18	0,10	0,08
13,7	0,17	0,29	0,27	0,13	0,18	0,06	0,21	0,14	0,10
15,1	0,16	0,29	0,25	0,12	0,17	0,06	0,25	0,14	0,09
17,7	0,16	0,30	0,29	0,13	0,16	0,06	0,25	0,13	0,08
19,2	0,15	0,29	0,25	0,11	0,18	0,06	0,25	0,15	0,10
20,9	0,15	0,28	0,24	0,12	0,16	0,06	0,24	0,14	0,09
22,4	0,15	0,27	0,23	0,12	0,15	0,06	0,26	0,12	0,09
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	0,09	0,25	0,04	0,28	0,04	0,06	0,06	0,09	
2,2	0,15	0,30	0,10	0,19	0,12	0,13	0,13	0,14	
2,9	0,15	0,29	0,11	0,17	0,11	0,13	0,14	0,13	
3,7	0,15	0,29	0,09	0,16	0,10	0,13	0,14	0,13	
4,5	0,15	0,29	0,09	0,16	0,09	0,12	0,14	0,13	
5,1	0,14	0,31	0,06	0,15	0,08	0,13	0,14	0,13	

## Fortsetzung Tabelle A 50:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019
6,1	0,15	0,33	0,04	0,15	0,08	0,13	0,14	0,13
10,4	0,14	0,37	0,03	0,07	0,06	0,12	0,12	0,13
13,7	0,17	0,40	0,04	0,03	0,05	0,16	0,16	0,19
15,1	0,16	0,42	< BG	< BG	0,05	0,15	0,15	0,20
17,7	0,16	0,42	< BG	< BG	< BG	0,15	0,37	0,22
19,2	0,18	0,45	< BG	< BG	< BG	0,15	0,14	0,21
20,9	0,18	0,46	< BG	< BG	< BG	0,15	0,14	0,21
22,4	0,17	0,43	< BG	< BG	< BG	0,15	0,14	0,20

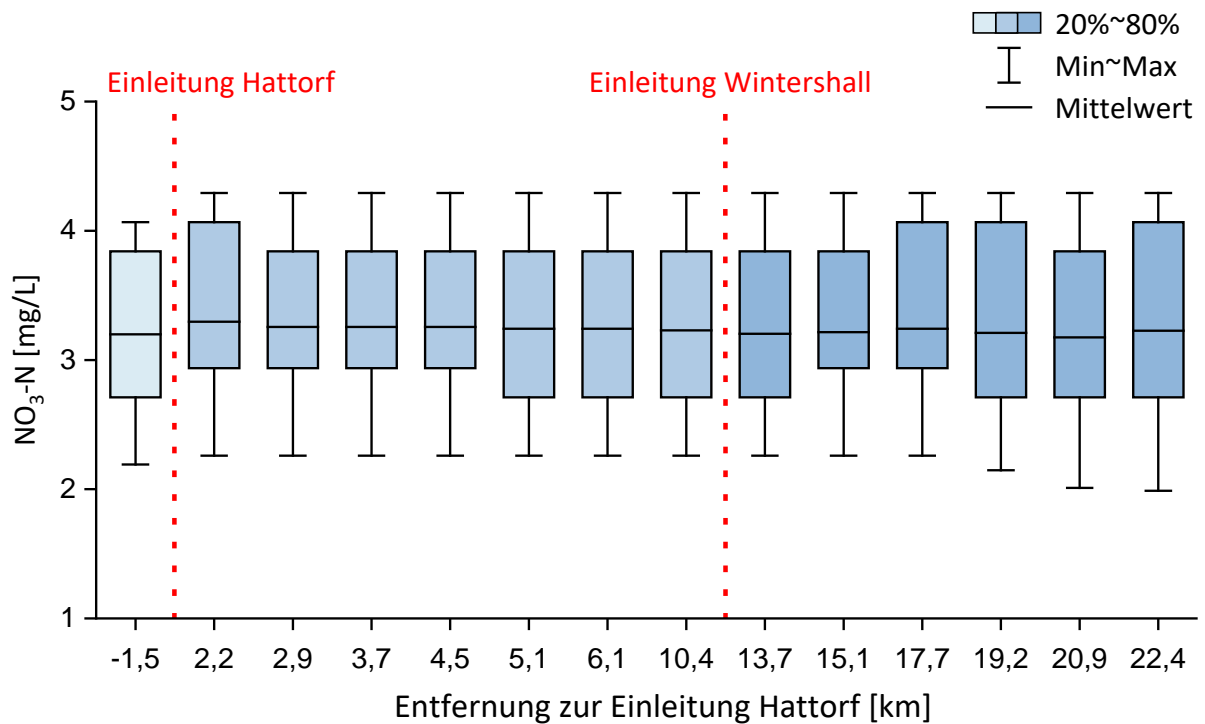
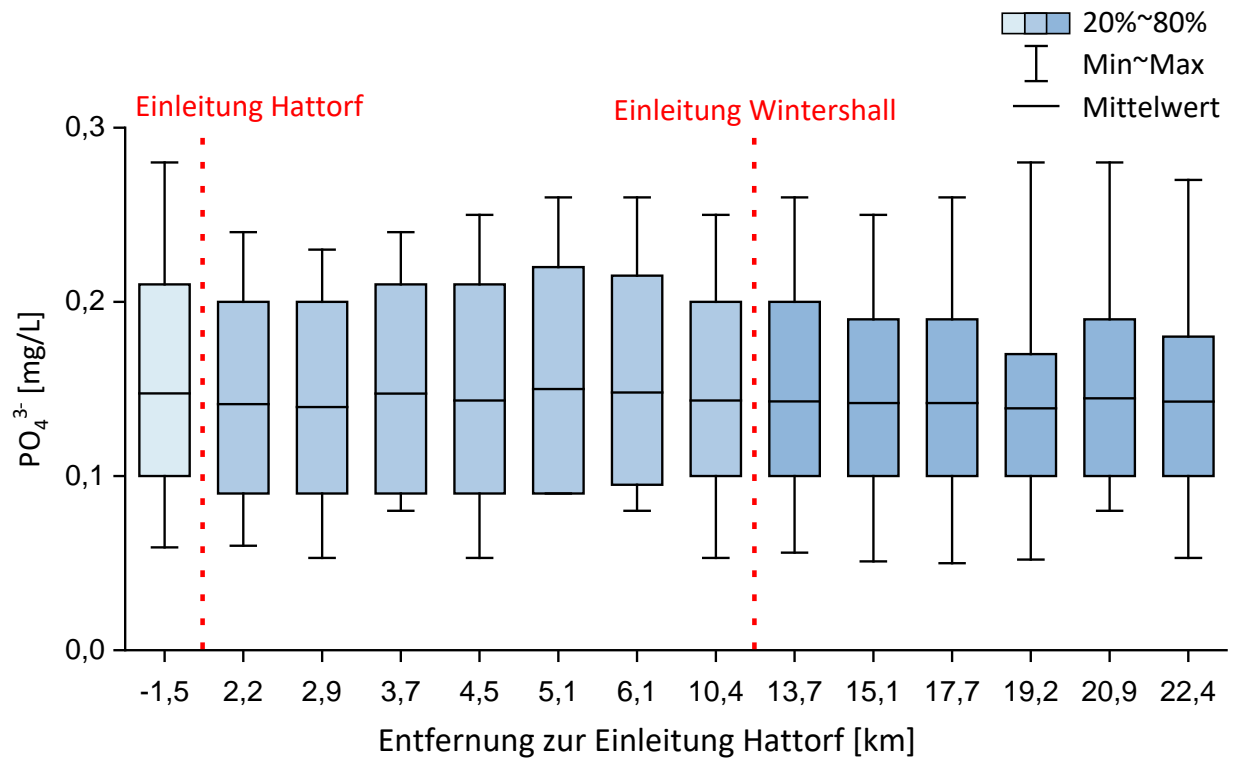


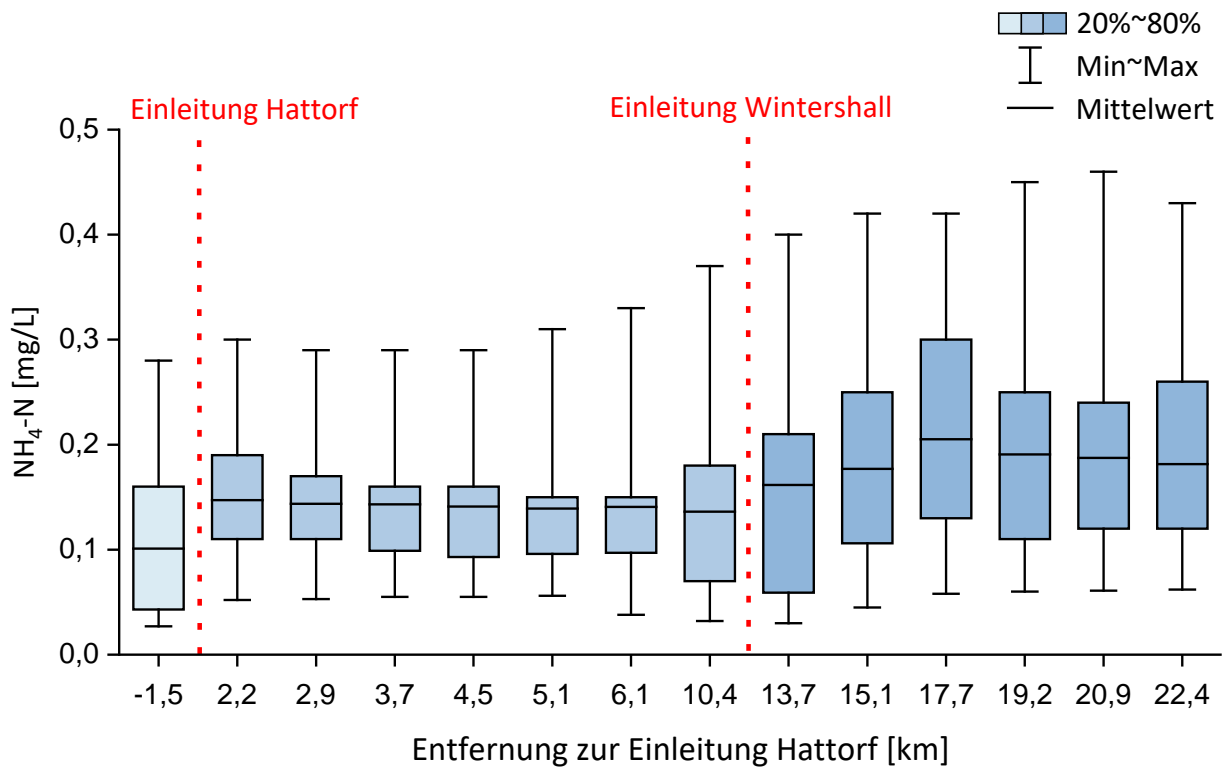
Abbildung A 5: Nitratstickstoff-Gehalt in der Werra 2019

(hell: Vorbelastung, 1,5 km vor der Einleitung Hattorf; mittel: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)



**Abbildung A 6: Gesamtphosphat-Gehalt in der Werra 2019**

(hell: Vorbelastung, 1,5 km vor der Einleitung Hattorf; mittel: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)



**Abbildung A 7: Ammonium-Stickstoff in der Werra 2019**

(hell: Vorbelastung, 1,5 km vor der Einleitung Hattorf; mittel: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)



Tabelle A 51: pH-Werte in der Werra

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	7,7	8,0	8,1	8,0	8,0	8,0	8,1	7,9	8,0
2,2	7,6	8,0	8,0	8,0	7,9	8,0	8,1	8,1	8,0
2,9	7,6	8,0	8,0	8,0	7,9	8,1	8,1	8,0	8,1
3,7	7,6	8,0	8,0	8,0	7,9	8,0	8,1	8,0	8,1
4,5	7,7	8,0	8,0	8,0	7,9	8,0	8,1	8,0	8,0
5,1	7,6	8,0	8,0	8,0	7,9	8,0	8,1	8,1	8,1
6,1	7,6	8,0	8,0	8,0	7,9	8,0	8,1	8,1	8,1
10,4	7,7	8,0	8,0	8,0	8,0	8,1	8,1	8,1	8,1
13,7	7,7	8,0	8,0	8,0	7,9	8,1	8,1	8,2	8,1
15,1	7,7	8,0	8,0	8,0	7,9	8,0	8,1	8,3	8,2
17,7	7,7	8,0	7,9	8,0	7,9	8,0	8,1	8,2	8,3
19,2	7,7	8,0	8,0	8,0	7,9	8,0	8,1	8,2	8,2
20,9	7,7	8,0	8,0	8,0	7,9	8,0	8,1	8,2	8,2
22,4	7,7	8,0	8,0	8,0	7,9	8,0	8,1	8,2	8,2
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	8,0	8,0	8,0	7,6	7,9	7,9	8,0	8,0	
2,2	7,9	7,9	8,0	7,9	8,2	7,9	8,0	7,9	
2,9	7,9	7,9	8,1	7,9	8,2	7,9	8,0	8,0	
3,7	7,9	7,9	8,0	7,9	8,2	7,8	7,9	8,0	
4,5	7,9	7,9	7,9	7,9	8,1	7,9	7,9	8,0	
5,1	7,9	7,9	7,9	7,9	8,1	7,9	7,9	8,0	
6,1	7,9	7,8	8,0	7,8	8,0	7,9	8,0	8,0	
10,4	7,9	7,8	8,2	8,1	8,1	7,9	8,0	8,0	
13,7	7,8	7,8	8,4	8,2	8,2	7,8	8,0	8,0	
15,1	7,9	7,8	8,4	8,3	8,2	7,9	8,0	7,9	
17,7	7,8	7,8	8,3	8,2	8,1	7,8	8,0	8,1	
19,2	7,9	7,8	8,5	8,3	8,2	7,8	8,0	7,9	
20,9	7,8	7,8	8,6	8,3	8,3	7,8	8,0	8,0	
22,4	7,8	7,8	8,6	8,3	8,3	7,8	8,0	7,9	

Tabelle A 52: Hydrogencarbonat-Konzentrationen [mg/L] in der Werra (BG = 6,1 mg/L)

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	85	134	146	122	110	104	146	171	171
2,2	104	134	177	165	122	134	177	177	177

Fortsetzung Tabelle A 52:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
2,9	98	134	146	159	104	128	183	165	201
3,7	92	146	146	159	110	122	177	171	165
4,5	98	140	153	140	110	122	183	177	171
5,1	104	128	153	134	110	116	183	183	177
6,1	110	146	140	146	116	122	183	171	183
10,4	98	128	165	153	116	116	165	189	183
13,7	104	128	153	159	116	122	183	177	189
15,1	104	134	165	159	116	122	171	195	177
17,7	110	128	134	159	116	128	183	207	177
19,2	104	134	165	153	110	128	183	165	177
20,9	116	146	134	177	116	140	165	183	189
22,4	85	134	146	153	116	146	183	177	171
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	140	140	220	195	256	159	183	128	
2,2	140	146	220	244	281	159	238	146	
2,9	146	159	232	232	238	153	183	146	
3,7	146	153	250	256	262	183	207	153	
4,5	153	153	250	256	275	153	232	146	
5,1	146	159	250	268	256	153	183	146	
6,1	159	140	244	256	268	159	189	159	
10,4	153	140	232	268	281	159	195	146	
13,7	153	140	250	262	244	165	195	140	
15,1	146	140	262	287	275	159	244	153	
17,7	159	146	232	287	287	153	201	165	
19,2	159	146	250	287	268	159	214	159	
20,9	153	153	232	256	275	153	220	146	
22,4	171	159	250	293	281	153	214	159	

Tabelle A 53: Normierte und gemittelte Daten der Beprobung mit dem Boot 2019

Wasserproben	Chlorid (normiert)		Salicylsäure (normiert)	
	$\bar{x}$	$s_x$	$\bar{x}$	$s_x$
0	0,35	0,21	0,00	0,00
1a	0,36	0,14	0,15	0,18
1b	0,44	0,12	0,23	0,14
1c	0,60	0,17	0,63	0,65
2a	0,81	0,17	0,86	0,23

Fortsetzung Tabelle A 53:

Wasserproben	Chlorid (normiert)		Salicylsäure (normiert)	
	$\bar{x}$	$s_x$	$\bar{x}$	$s_x$
2b	0,84	0,15	0,90	0,21
2c	0,84	0,14	0,92	0,19
3a	0,92	0,12	1,02	0,13
3b	0,93	0,11	1,04	0,11
3c	0,92	0,11	1,05	0,13
4	1,00	0,00	1,00	0,00

Tabelle A 54: Daten zum Versuch: Fahnenbildung

Probenbezeichnung	Salicylsäure [ $\mu\text{g/L}$ ]	3-Chlorsalicylsäure [ $\mu\text{g/L}$ ]	5-Chlorsalicylsäure [ $\mu\text{g/L}$ ]
0 min nach Zugabe	< BG	< BG	< BG
15 min nach Zugabe	0,7	< BG	< BG
30 min nach Zugabe	0,9	< BG	< BG
60 min nach Zugabe	1,8	< BG	< BG
120 min nach Zugabe	2,6	< BG	< BG
180 min nach Zugabe	3,1	< BG	< BG
Rührgeschwindigkeit erhöht	3,2	< BG	< BG
Rührgeschwindigkeit erhöht	4,0	< BG	< BG
vollständige Durchmischung	201,9	1,9	2,6

Tabelle A 55: Daten zum Versuch: Fahnenbildung

Probenbezeichnung	3-Bromsalicylsäure [ $\mu\text{g/L}$ ]	5-Bromsalicylsäure [ $\mu\text{g/L}$ ]	4-Chlorbenzoesäure [ $\mu\text{g/L}$ ]
0 min nach Zugabe	< BG	< BG	< BG
15 min nach Zugabe	< BG	< BG	< BG
30 min nach Zugabe	< BG	< BG	< BG
60 min nach Zugabe	< BG	< BG	< BG
120 min nach Zugabe	< BG	< BG	< BG
180 min nach Zugabe	< BG	< BG	< BG
Rührgeschwindigkeit erhöht	< BG	< BG	< BG
Rührgeschwindigkeit erhöht	< BG	< BG	< BG
vollständige Durchmischung	10,4	14,4	8,5

Tabelle A 56: Daten konzentrationsabhängiger Abbauersuch – hohe Konzentrationen

Zeit [h]	trans-Zimt-säure	Salicyl-säure	3-Chlor-salicyl-säure	5-Chlor-salicyl-säure	3-Brom-salicyl-säure	5-Brom-salicyl-säure	4-Chlor-benzoe-säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
0	9,79	285,04	4,42	4,34	15,29	21,59	13,15
2	9,01	231,44	4,27	4,34	15,05	20,59	12,73
4	6,83	131,55	4,14	4,31	14,72	19,58	12,64
6	3,48	20,09	3,87	3,61	14,19	17,76	12,64
8	(0,31) < BG	(0,29)	3,77	(0,21) < BG	13,92	14,84	12,16
10	(0,20) < BG	(0,00) < BG	3,54	(0,04) < BG	13,61	12,10	12,27
12	(0,14) < BG	(0,00) < BG	3,39	(0,03) < BG	13,32	9,98	11,89
14	(0,11) < BG	(0,00) < BG	3,02	(0,05) < BG	12,80	8,03	11,81
16	(0,10) < BG	(0,00) < BG	2,82	(0,03) < BG	12,60	6,02	11,52
18	(0,08) < BG	(0,00) < BG	2,63	(0,03) < BG	12,30	4,61	11,27
20	(0,13) < BG	(0,00) < BG	2,32	(0,03) < BG	11,68	3,53	10,45
22	(0,15) < BG	(0,00) < BG	2,15	(0,03) < BG	11,10	2,50	10,12
24	(0,12) < BG	(0,00) < BG	1,98	(0,04) < BG	10,42	1,83	9,90
26	(0,15) < BG	1,35	1,75	(0,05) < BG	9,39	1,31	9,49
28	(0,15) < BG	(0,00) < BG	1,52	(0,05) < BG	8,28	0,97	9,25
30	(0,09) < BG	1,26	1,34	(0,03) < BG	7,53	0,73	9,31
32	(0,09) < BG	(0,00) < BG	1,13	(0,04) < BG	7,04	0,54	8,94
34	(0,13) < BG	(0,00) < BG	0,89	(0,03) < BG	5,65	(0,43) < BG	8,21
36	(0,14) < BG	(0,00) < BG	0,77	(0,05) < BG	4,64	(0,33) < BG	7,91
38	(0,18) < BG	(0,00) < BG	0,60	(0,05) < BG	4,08	(0,26) < BG	7,54

Fortsetzung Tabelle A 56:

Zeit [h]	trans- Zimt- säure	Salicyl- säure	3-Chlor- salicyl- säure	5-Chlor- salicyl- säure	3-Brom- salicyl- säure	5-Brom- salicyl- säure	4-Chlor- benzoe- säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
40	(0,08) < BG	(0,26) < BG	0,52	(0,03) < BG	3,62	(0,20) < BG	7,09
42	(0,11) < BG	(0,09) < BG	(0,47) < BG	(0,03) < BG	3,31	(0,15) < BG	6,81
44	(0,14) < BG	(0,07) < BG	(0,33) < BG	(0,03) < BG	2,93	(0,12) < BG	6,29
46	(0,13) < BG	(0,01) < BG	(0,31) < BG	(0,03) < BG	2,67	(0,10) < BG	6,06
48	(0,14) < BG	1,85	(0,30) < BG	(0,04) < BG	2,64	(0,10) < BG	6,16
50	(0,15) < BG	(0,00) < BG	(0,27) < BG	(0,05) < BG	2,42	(0,07) < BG	6,04
52	(0,12) < BG	(0,00) < BG	(0,24) < BG	(0,05) < BG	2,06	(0,07) < BG	5,61
54	(0,12) < BG	(0,00) < BG	(0,20) < BG	(0,03) < BG	1,99	(0,04) < BG	5,43
68	(0,13) < BG	(0,00) < BG	(0,07) < BG	(0,03) < BG	0,97	(0,00) < BG	3,40
70	(0,11) < BG	(0,00) < BG	(0,07) < BG	(0,03) < BG	0,94	(0,00) < BG	3,36
72	(0,14) < BG	(0,00) < BG	(0,06) < BG	(0,03) < BG	0,95	(0,00) < BG	2,98
74	(0,07) < BG	(0,00) < BG	(0,04) < BG	(0,03) < BG	0,87	(0,00) < BG	2,82
76	(0,06) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,03) < BG	0,72	(0,00) < BG	2,42
140	(0,01) < BG	(0,00) < BG	(0,04) < BG	(0,02) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,07) < BG
144	(0,01) < BG	(0,00) < BG	(0,04) < BG	(0,02) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,06) < BG
148	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,04) < BG	(0,02) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,06) < BG

Tabelle A 57: Daten konzentrationsabhängiger Abbauversuch – niedrige Konzentrationen

Zeit [h]	trans-Zimt-säure	3-Chlor-salicyl-säure	5-Chlor-salicyl-säure	3-Brom-salicyl-säure	5-Brom-salicyl-säure	4-Chlor-benzoe-säure	Zeit [h]	Salicyl-säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]		c [µg/L]
0	3,76	(0,49) < BG	1,02	3,44	3,46	4,01	0,0	5,45
2	(0,84) < BG	(0,46) < BG	(0,46) < BG	3,31	3,23	3,88	0,2	3,66
4	(0,08) < BG	(0,42) < BG	(0,20) < BG	3,14	2,94	3,84	0,3	2,49
6	(0,09) < BG	(0,38) < BG	(0,09) < BG	3,03	2,87	3,79	0,5	1,59
8	(0,09) < BG	(0,35) < BG	(0,06) < BG	2,98	2,61	3,77	0,7	0,87
10	(0,10) < BG	(0,32) < BG	(0,05) < BG	2,80	2,27	3,69	0,8	(0,46) < BG
12	(0,08) < BG	(0,29) < BG	(0,03) < BG	2,62	2,14	3,64	1,0	(0,34) < BG
14	(0,12) < BG	(0,25) < BG	(0,03) < BG	2,56	1,94	3,52	1,2	(0,01) < BG
16	(0,09) < BG	(0,23) < BG	(0,03) < BG	2,36	1,65	3,47	1,3	(0,00) < BG
18	(0,11) < BG	(0,20) < BG	(0,03) < BG	2,29	1,53	3,40		
20	(0,13) < BG	(0,18) < BG	(0,04) < BG	2,09	1,28	3,40		
22	(0,10) < BG	(0,14) < BG	(0,03) < BG	1,94	1,12	3,22		
24	(0,09) < BG	(0,12) < BG	(0,03) < BG	1,74	1,01	3,22		
26	(0,08) < BG	(0,11) < BG	(0,03) < BG	1,57	0,86	3,09		
28	(0,09) < BG	(0,07) < BG	(0,03) < BG	1,32	0,71	2,97		
30	(0,07) < BG	(0,06) < BG	(0,03) < BG	1,12	0,63	3,01		
32	(0,08) < BG	(0,04) < BG	(0,03) < BG	1,00	(0,46) < BG	2,88		
34	(0,11) < BG	(0,03) < BG	(0,03) < BG	0,95	(0,45) < BG	2,87		
36	(0,10) < BG	(0,03) < BG	(0,03) < BG	0,86	(0,38) < BG	2,74		
38	(0,11) < BG	(0,02) < BG	(0,03) < BG	0,80	(0,34) < BG	2,65		

Fortsetzung Tabelle A 57:

Zeit [h]	trans- Zimt- säure	3-Chlor- salicyl- säure	5-Chlor- salicyl- säure	3-Brom- salicyl- säure	5-Brom- salicyl- säure	4-Chlor- benzoe- säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
40	(0,09) < BG	(0,01) < BG	(0,03) < BG	0,76	(0,28) < BG	2,61
42	(0,07) < BG	(0,01) < BG	(0,03) < BG	0,71	(0,27) < BG	2,54
44	(0,15) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	0,65	(0,21) < BG	2,47
46	(0,09) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	0,62	(0,19) < BG	2,46
48	(0,09) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	0,62	(0,17) < BG	2,43
50	(0,05) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	0,55	(0,15) < BG	2,38
52	(0,05) < BG	(0,00) < BG	(0,02) < BG	0,52	(0,14) < BG	2,30
54	(0,07) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	0,51	(0,12) < BG	2,27
68	(0,09) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,40) < BG	(0,04) < BG	1,97
70	(0,12) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,40) < BG	(0,01) < BG	1,96
72	(0,12) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,40) < BG	(0,04) < BG	1,88
74	(0,06) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,34) < BG	(0,02) < BG	1,84
76	(0,06) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,34) < BG	(0,01) < BG	1,76
140	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,02) < BG	(0,07) < BG	(0,00) < BG	(0,24) < BG
144	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,02) < BG	(0,05) < BG	(0,00) < BG	(0,17) < BG
148	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,02) < BG	(0,04) < BG	(0,00) < BG	(0,15) < BG

Tabelle A 58: Daten temperaturabhängiger Abbauersuch – 23 °C

Zeit [h]	trans-Zimt-säure	3-Chlor-salicyl-säure	5-Chlor-salicyl-säure	3-Brom-salicyl-säure	5-Brom-salicyl-säure	4-Chlor-benzoe-säure	Zeit [h]	Salicyl-säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]		c [µg/L]
0,00	8,42	2,03	2,49	8,20	10,97	6,61	0,0	264,43
1,00	7,91	1,98	2,42	7,75	10,94	6,59	0,2	261,78
2,00	7,78	1,86	2,35	7,69	10,99	6,43	0,3	260,26
3,00	6,95	1,83	2,31	7,75	10,94	6,47	0,5	255,55
16,75	(0,09) < BG	0,61	(0,02) < BG	6,77	6,62	6,37	0,7	250,54
17,75	(0,01) < BG	0,59	(0,01) < BG	6,46	6,20	6,38	0,8	245,96
18,75	(0,02) < BG	0,57	(0,02) < BG	6,59	6,35	6,17	1,0	245,62
19,75	(0,06) < BG	0,51	(0,02) < BG	6,54	6,33	6,33	1,2	243,37
20,75	(0,05) < BG	(0,46)	(0,01) < BG	6,22	5,86	6,04	1,3	238,57
21,75	(0,02) < BG	(0,44)	(0,01) < BG	6,30	5,77	6,08	1,5	237,23
22,75	(0,10) < BG	(0,44) < BG	(0,02) < BG	6,10	5,73	6,08	1,7	234,28
23,75	(0,02) < BG	(0,47) < BG	(0,03) < BG	6,06	5,50	6,00	1,8	229,94
24,75	(0,08) < BG	(0,41) < BG	(0,03) < BG	6,04	5,39	6,06	2,0	223,81
25,75	(0,04) < BG	(0,41) < BG	(0,02) < BG	6,04	5,15	5,83	2,5	214,71
40,75	(0,04) < BG	(0,36) < BG	(0,01) < BG	5,64	2,48	4,23	3,0	195,81
41,75	(0,06) < BG	(0,36) < BG	(0,01) < BG	5,59	2,23	4,05	3,5	185,27
42,75	(0,01) < BG	(0,32) < BG	(0,02) < BG	5,35	1,64	3,55	4,0	167,85
43,75	(0,00) < BG	(0,34) < BG	(0,01) < BG	5,22	1,61	3,42	4,5	138,76
44,75	(0,01) < BG	(0,32) < BG	(0,01) < BG	5,34	1,53	3,05	5,0	116,38
45,75	(0,01) < BG	(0,31) < BG	(0,01) < BG	5,28	1,39	2,95	5,5	87,27



Fortsetzung Tabelle A 58:

Zeit [h]	trans-Zimt-säure	3-Chlor-salicyl-säure	5-Chlor-salicyl-säure	3-Brom-salicyl-säure	5-Brom-salicyl-säure	4-Chlor-benzoe-säure	Zeit [h]	Salicyl-säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]		c [µg/L]
46,75	(0,00) < BG	(0,30) < BG	(0,01) < BG	5,50	1,07	2,84	6,0	57,52
47,75	(0,03) < BG	(0,32) < BG	(0,02) < BG	5,47	1,05	2,64	6,5	22,37
48,75	(0,01) < BG	(0,32) < BG	(0,01) < BG	5,25	1,01	2,57	7,0	8,19
49,75	(0,00) < BG	(0,30) < BG	(0,02) < BG	5,28	0,84	2,35	7,5	1,47
50,75	(0,06) < BG	(0,30) < BG	(0,01) < BG	5,30	0,87	2,32	8,0	(0,20) < BG
51,75	(0,00) < BG	(0,29) < BG	(0,01) < BG	5,10	0,80	2,25	20	(0,03) < BG
64,75	(0,06) < BG	(0,19) < BG	(0,01) < BG	3,58	(0,14) < BG	1,27	21	(0,04) < BG
65,75	(0,00) < BG	(0,18) < BG	(0,02) < BG	3,59	(0,13) < BG	1,23	22	(0,03) < BG
66,75	(0,02) < BG	(0,16) < BG	(0,01) < BG	3,36	(0,10) < BG	1,22	23	(0,02) < BG
67,75	(0,00) < BG	(0,14) < BG	(0,01) < BG	3,11	(0,09) < BG	1,15	24	(0,02) < BG
68,75	(0,01) < BG	(0,13) < BG	(0,01) < BG	3,20	(0,06) < BG	1,05		
69,75	(0,04) < BG	(0,13) < BG	(0,01) < BG	3,18	(0,07) < BG	1,03		
70,75	(0,00) < BG	(0,12) < BG	(0,02) < BG	3,10	(0,06) < BG	1,02		
71,75	(0,05) < BG	(0,12) < BG	(0,01) < BG	2,97	(0,07) < BG	1,08		
72,75	(0,02) < BG	(0,12) < BG	(0,01) < BG	2,87	(0,06) < BG	0,95		
73,75	(0,12) < BG	(0,11) < BG	(0,01) < BG	2,84	(0,05) < BG	0,92		
74,75	(80,0) < BG	(0,10) < BG	(0,01) < BG	2,71	(0,05) < BG	0,89		
88,75	(0,03) < BG	(0,01) < BG	(0,01) < BG	1,63	(0,02) < BG	0,59		
90,75	(0,07) < BG	(0,01) < BG	(0,01) < BG	1,36	(0,03) < BG	(0,49) < BG		
92,75	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,01) < BG	1,25	(0,02) < BG	(0,42) < BG		

Fortsetzung Tabelle A 58:

Zeit [h]	trans-Zimt-säure	3-Chlor-salicyl-säure	5-Chlor-salicyl-säure	3-Brom-salicyl-säure	5-Brom-salicyl-säure	4-Chlor-benzoe-säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
94,75	(0,08) < BG	(0,00) < BG	(0,01) < BG	1,23	(0,02) < BG	(0,43) < BG
185,00	(0,01) < BG	(0,00) < BG	(0,01) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,05) < BG
187,00	(0,04) < BG	(0,00) < BG	(0,01) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,04) < BG

Tabelle A 59: Daten temperaturabhängiger Abbauversuch – 10 °C

Zeit [h]	trans-Zimt-säure	3-Chlor-salicyl-säure	5-Chlor-salicyl-säure	3-Brom-salicyl-säure	5-Brom-salicyl-säure	4-Chlor-benzoe-säure	Zeit [h]	Salicyl-säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]		c [µg/L]
0	8,32	1,83	2,31	7,81	10,64	6,56	0,0	265,41
1	8,26	1,84	2,30	7,71	10,48	6,54	0,2	262,81
2	8,08	1,79	2,29	7,31	10,34	6,38	0,3	264,90
3	8,15	1,79	2,24	7,38	10,27	6,27	0,5	267,10
16,75	7,46	1,68	2,19	6,88	9,46	6,48	0,7	266,79
17,75	7,78	1,68	2,10	6,41	9,43	6,35	0,8	263,95
18,75	7,35	1,62	2,05	6,77	9,68	6,25	1,0	265,25
19,75	7,49	1,66	2,15	6,64	10,01	6,47	1,2	264,78
20,75	7,09	1,61	1,95	6,37	9,25	6,22	1,3	267,09
21,75	7,02	1,60	1,89	6,66	9,26	6,15	1,5	265,92
22,75	7,18	1,61	1,99	6,85	9,79	6,35	1,7	262,28
23,75	6,95	1,64	1,93	6,68	9,23	6,41	1,8	265,48
24,75	7,09	1,64	1,89	6,42	9,26	6,17	2,0	260,04

Fortsetzung Tabelle A 59:

Zeit [h]	trans-Zimt-säure	3-Chlor-salicyl-säure	5-Chlor-salicyl-säure	3-Brom-salicyl-säure	5-Brom-salicyl-säure	4-Chlor-benzoe-säure	Zeit [h]	Salicyl-säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]		c [µg/L]
25,75	7,08	1,61	1,94	6,41	9,46	6,32	2,5	247,43
40,75	4,79	1,49	(0,37) < BG	6,55	8,77	6,23	3,0	248,31
41,75	4,80	1,48	(0,32) < BG	6,55	8,45	6,28	3,5	233,39
42,75	4,28	1,43	(0,27) < BG	6,79	8,68	6,59	4,0	227,84
43,75	4,19	1,44	(0,20) < BG	6,46	8,39	6,31	4,5	222,08
44,75	4,34	1,45	(0,23) < BG	6,78	8,66	6,45	5,0	216,03
45,75	4,10	1,45	(0,22) < BG	6,75	8,65	6,40	5,5	211,75
46,75	3,78	1,44	(0,20) < BG	6,83	8,54	6,58	6,0	199,28
47,75	3,87	1,43	(0,20) < BG	6,95	8,56	6,57	6,5	197,63
48,75	3,78	1,43	(0,19) < BG	6,80	8,42	6,61	7,0	187,90
49,75	3,79	1,44	(0,19) < BG	6,77	8,61	6,43	7,5	171,02
50,75	3,27	1,45	(0,18) < BG	6,85	8,47	6,46	8,0	164,22
51,75	3,26	1,44	(0,14) < BG	6,94	8,36	6,59	20,0	(0,05) < BG
64,75	(0,87) < BG	1,38	(0,12) < BG	6,74	7,49	6,50	21,0	(0,01) < BG
65,75	(0,88) < BG	1,36	(0,12) < BG	6,56	7,66	6,43	22,0	(0,02) < BG
66,75	(0,89) < BG	1,40	(0,12) < BG	6,95	7,83	6,58	23,0	(0,01) < BG
67,75	(0,70) < BG	1,37	(0,12) < BG	6,97	7,88	6,42	24,0	(0,04) < BG
68,75	(0,52) < BG	1,33	(0,11) < BG	6,82	7,99	6,54		
69,75	(0,57) < BG	1,37	(0,12) < BG	6,90	7,89	6,57		
70,75	(0,57) < BG	1,37	(0,11) < BG	6,81	7,70	6,50		

Fortsetzung Tabelle A 59:

Zeit [h]	trans-Zimt-säure	3-Chlor-salicyl-säure	5-Chlor-salicyl-säure	3-Brom-salicyl-säure	5-Brom-salicyl-säure	4-Chlor-benzoe-säure
	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]
71,75	(0,35) < BG	1,38	(0,11) < BG	6,98	7,69	6,59
72,75	(0,28) < BG	1,39	(0,11) < BG	7,04	7,67	6,56
73,75	(0,26) < BG	1,39	(0,11) < BG	6,85	7,49	6,43
74,75	(0,20) < BG	1,33	(0,10) < BG	6,93	7,51	6,36
88,75	(0,04) < BG	1,32	(0,09) < BG	6,73	6,92	6,38
90,75	(0,08) < BG	1,32	(0,09) < BG	6,57	6,93	6,52
92,75	(0,08) < BG	1,30	(0,08) < BG	6,65	6,65	6,42
94,75	(0,03) < BG	1,25	(0,08) < BG	6,60	6,61	6,37
185,00	(0,06) < BG	1,13	(0,04) < BG	6,66	2,93	6,21
187,00	(0,13) < BG	1,12	(0,03) < BG	6,68	2,79	6,22

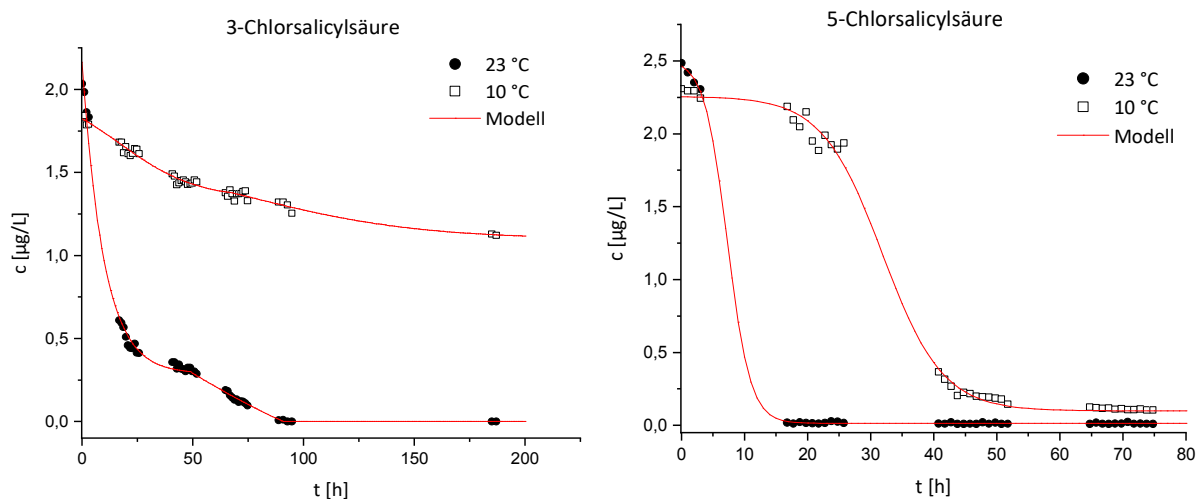


Abbildung A 8: Temperaturabhängige Konzentrations-Zeit-Verläufe der 3- und 5-Chlorsalicylsäure

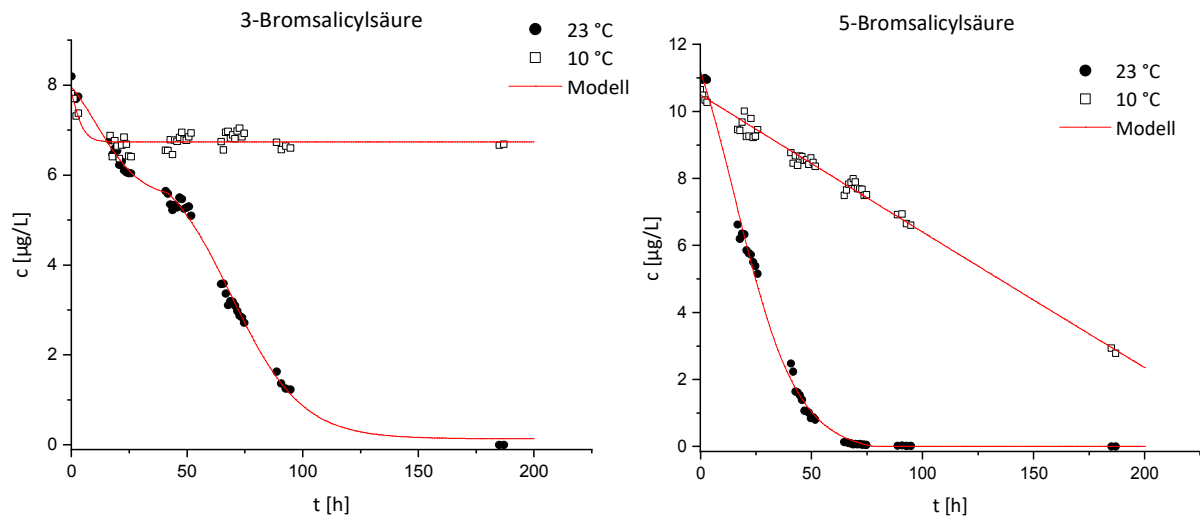


Abbildung A 9: Temperaturabhängige Konzentrations-Zeit-Verläufe der 3- und 5-Bromsalicylsäure

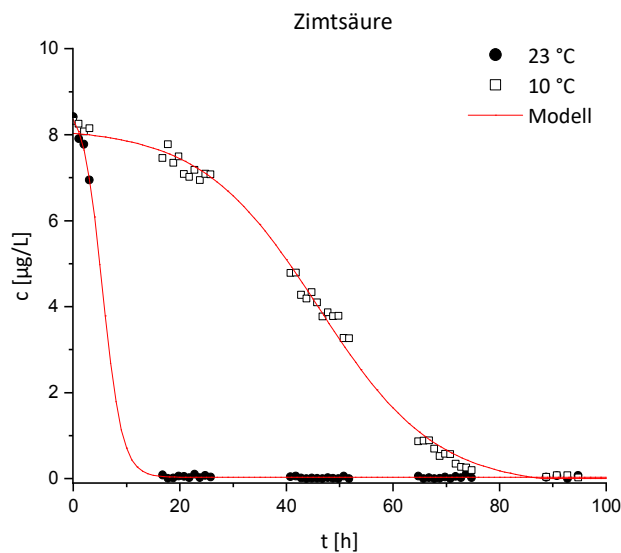


Abbildung A 10: Temperaturabhängiger Konzentrations-Zeit-Verlauf der trans-Zimtsäure

Tabelle A 60: Daten Abbauversuch – unter Lichteinfluss und unbehandelt

Zeit [h]	trans-Zimt-säure	Salicyl-säure	3-Chlor-salicyl-säure	5-Chlor-salicyl-säure	3-Brom-salicyl-säure	5-Brom-salicyl-säure	4-Chlor-benzoe-säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
0,0	9,75	200,43	2,79	2,93	4,76	6,51	7,92
1,0	9,56	192,84	2,79	2,91	4,73	6,56	7,95
2,0	9,37	185,08	2,76	2,86	4,75	6,51	7,98
3,0	9,09	176,56	2,75	2,88	4,82	6,50	7,98
4,0	8,09	146,32	2,60	2,79	4,58	6,31	7,83

Fortsetzung Tabelle A 60:

Zeit [h]	trans- Zimt- säure	Salicyl- säure	3-Chlor- salicyl- säure	5-Chlor- salicyl- säure	3-Brom- salicyl- säure	5-Brom- salicyl- säure	4-Chlor- benzoe- säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
5,0	7,48	128,29	2,66	2,75	4,77	6,27	7,90
6,0	6,95	66,82	2,66	2,63	4,59	6,17	7,88
19,0	(0,00) < BG	4,45	1,64	(0,12) < BG	4,55	5,18	7,24
20,0	(0,00) < BG	58,39	1,51	(0,07) < BG	4,37	4,59	7,32
21,0	(0,11) < BG	5,23	1,52	(0,06) < BG	4,63	4,49	7,51
22,0	(0,00) < BG	2,16	1,51	(0,05) < BG	4,43	4,37	7,21
23,0	(0,00) < BG	2,98	1,54	(0,06) < BG	4,42	4,31	6,85
24,0	(0,00) < BG	1,93	1,48	(0,06) < BG	4,15	4,07	6,94
25,0	(0,00) < BG	1,47	1,45	(0,05) < BG	4,32	3,83	6,48
26,0	(0,00) < BG	1,93	1,43	(0,05) < BG	4,31	4,03	6,43
27,0	(0,00) < BG	0,94	1,45	(0,07) < BG	4,20	3,80	5,93
28,0	(0,00) < BG	0,54	1,38	(0,05) < BG	4,08	3,81	5,95
29,0	(0,00) < BG	0,86	1,38	(0,06) < BG	3,90	3,44	5,41
30,0	(0,00) < BG	1,05	1,38	(0,06) < BG	3,90	3,52	5,23
43,0	(0,00) < BG	11,63	1,08	(0,10) < BG	3,62	3,12	1,07
44,0	(0,00) < BG	4,24	1,10	(0,05) < BG	3,47	1,78	0,87
45,0	(0,00) < BG	3,63	1,10	(0,05) < BG	3,58	1,76	0,72
46,0	(0,00) < BG	4,25	0,98	(0,06) < BG	3,16	1,24	0,51
47,0	(0,00) < BG	1,03	1,03	(0,04) < BG	3,24	1,17	(0,42) < BG
48,0	(0,00) < BG	2,92	0,92	(0,04) < BG	3,06	1,16	(0,39) < BG

Fortsetzung Tabelle A 60:

Zeit [h]	trans-Zimtsäure	Salicylsäure	3-Chlor-salicylsäure	5-Chlor-salicylsäure	3-Brom-salicylsäure	5-Brom-salicylsäure	4-Chlor-benzoesäure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
49,0	(0,00) < BG	3,15	0,98	(0,04) < BG	3,22	1,03	(0,32) < BG
50,0	(0,00) < BG	3,45	0,97	(0,05) < BG	3,14	0,91	(0,27) < BG
51,0	(0,00) < BG	1,15	0,92	(0,03) < BG	2,85	0,79	(0,23) < BG
52,0	(0,00) < BG	2,79	0,90	(0,05) < BG	2,82	0,73	(0,24) < BG
53,0	(0,00) < BG	0,73	0,82	(0,05) < BG	2,65	0,65	(0,20) < BG
67,0	(0,00) < BG	2,95	(0,42) < BG	(0,03) < BG	1,40	(0,11) < BG	(0,12) < BG
68,0	(0,00) < BG	4,15	(0,39) < BG	(0,07) < BG	1,38	0,95	(0,22) < BG
69,0	(0,00) < BG	5,39	(0,32) < BG	(0,04) < BG	1,10	(0,10) < BG	(0,12) < BG
70,0	(0,00) < BG	9,93	(0,30) < BG	(0,04) < BG	1,17	(0,10) < BG	(0,13) < BG
72,0	(0,00) < BG	4,75	(0,26) < BG	(0,06) < BG	1,00	(0,14) < BG	(0,12) < BG
74,0	(0,00) < BG	3,68	(0,20) < BG	(0,04) < BG	0,78	(0,13) < BG	(0,13) < BG
75,0	(0,00) < BG	1,88	(0,27) < BG	(0,04) < BG	0,68	(0,06) < BG	(0,12) < BG
91,0	(0,00) < BG	1,30	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,09) < BG	(0,01) < BG	(0,10) < BG
92,0	(0,00) < BG	3,38	(0,00) < BG	(0,05) < BG	(0,26) < BG	(0,39) < BG	(0,17) < BG
94,0	(0,00) < BG	7,53	(0,01) < BG	(0,05) < BG	(0,07) < BG	(0,08) < BG	(0,15) < BG
96,0	(0,00) < BG	8,67	(0,00) < BG	(0,04) < BG	(0,04) < BG	(0,04) < BG	(0,10) < BG
97,0	(0,00) < BG	3,10	(0,00) < BG	(0,04) < BG	(0,01) < BG	(0,02) < BG	(0,10) < BG
98,0	(0,00) < BG	6,75	(0,00) < BG	(0,04) < BG	(0,04) < BG	(0,03) < BG	(0,11) < BG
99,0	(0,00) < BG	1,10	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,10) < BG
163,0	(0,00) < BG	0,71	(0,00) < BG	(0,04) < BG	(0,00) < BG	(0,11) < BG	(0,13) < BG

Fortsetzung Tabelle A 60:

Zeit [h]	trans-Zimtsäure	Salicylsäure	3-Chlor-salicylsäure	5-Chlor-salicylsäure	3-Brom-salicylsäure	5-Brom-salicylsäure	4-Chlor-benzoesäure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
166,0	(0,00) < BG	6,34	(0,00) < BG	(0,04) < BG	(0,00) < BG	(0,01) < BG	(0,10) < BG
169,0	(0,00) < BG	1,64	(0,00) < BG	(0,04) < BG	(0,00) < BG	(0,01) < BG	(0,10) < BG
172,0	(0,00) < BG	0,74	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,09) < BG
187,0	(0,00) < BG	3,37	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,03) < BG	(0,15) < BG	(0,12) < BG
188,5	(0,00) < BG	3,44	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,09) < BG

Tabelle A 61: Daten lichtabhängiger Abbaubersuch – unter Lichtausschluss

Zeit [h]	trans-Zimtsäure	Salicylsäure	3-Chlor-salicylsäure	5-Chlor-salicylsäure	3-Brom-salicylsäure	5-Brom-salicylsäure	4-Chlor-benzoesäure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
0,0	10,23	205,93	2,75	2,91	4,59	6,44	8,09
1,0	10,13	200,48	2,55	2,87	4,54	6,31	7,99
2,0	9,89	186,10	2,58	2,82	4,54	6,33	7,86
3,0	9,74	176,87	2,64	2,81	4,58	6,32	7,99
4,0	9,15	171,24	2,62	2,81	4,63	6,31	7,93
5,0	9,07	143,23	2,60	2,73	4,53	6,15	7,90
6,0	8,70	124,74	2,68	2,66	4,51	6,23	8,02
19,0	(0,64) < BG	1,65	1,75	(0,10) < BG	4,52	4,81	7,90
20,0	(0,44) < BG	3,95	1,67	(0,09) < BG	4,40	4,82	7,96
21,0	(0,00) < BG	1,20	1,67	(0,09) < BG	4,38	4,60	7,87
22,0	(0,00) < BG	(0,27) < BG	1,61	(0,09) < BG	4,27	4,51	7,91
23,0	(0,00) < BG	(0,32) < BG	1,72	(0,09) < BG	4,36	4,70	7,96



Fortsetzung Tabelle A 61:

Zeit [h]	trans- Zimt- säure	Salicyl- säure	3-Chlor- salicyl- säure	5-Chlor- salicyl- säure	3-Brom- salicyl- säure	5-Brom- salicyl- säure	4-Chlor- benzoe- säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
24,0	(0,00) < BG	(0,37) < BG	1,62	(0,08) < BG	4,27	4,44	7,98
25,0	(0,00) < BG	(0,65) < BG	1,54	(0,08) < BG	4,26	4,20	7,79
26,0	(0,00) < BG	(0,03) < BG	1,57	(0,07) < BG	4,30	4,49	7,93
27,0	(0,00) < BG	(0,00) < BG	1,63	(0,08) < BG	4,34	4,47	7,92
28,0	(0,00) < BG	(0,00) < BG	1,68	(0,07) < BG	4,44	4,30	7,92
29,0	(0,00) < BG	(0,00) < BG	1,70	(0,08) < BG	4,24	3,99	7,83
30,0	(0,00) < BG	(0,00) < BG	1,60	(0,06) < BG	4,18	3,91	7,76
43,0	(0,00) < BG	7,09	1,42	(0,07) < BG	4,09	3,11	6,69
44,0	(0,01) < BG	1,07	1,45	(0,06) < BG	4,15	3,15	6,87
45,0	(0,00) < BG	1,89	1,48	(0,05) < BG	4,18	3,08	6,86
46,0	(0,00) < BG	1,37	1,45	(0,07) < BG	4,00	2,88	6,84
47,0	(0,00) < BG	2,40	1,48	(0,06) < BG	3,93	2,67	6,23
48,0	(0,00) < BG	1,67	1,49	(0,06) < BG	3,96	2,64	6,31
49,0	(0,00) < BG	1,48	1,43	(0,04) < BG	4,06	2,51	5,93
50,0	(0,00) < BG	1,05	1,42	(0,06) < BG	3,96	2,41	5,95
51,0	(0,00) < BG	1,97	1,47	(0,05) < BG	3,83	2,28	5,83
52,0	(0,00) < BG	(0,37) < BG	1,46	(0,05) < BG	3,81	2,21	5,68
53,0	(0,00) < BG	(0,01) < BG	1,44	(0,04) < BG	3,90	2,12	5,84
67,0	(0,00) < BG	1,21	1,11	(0,03) < BG	3,12	0,93	3,21
68,0	(0,00) < BG	2,08	1,16	(0,04) < BG	3,11	0,96	3,24

Fortsetzung Tabelle A 61:

Zeit [h]	trans-Zimtsäure	Salicylsäure	3-Chlor-salicylsäure	5-Chlor-salicylsäure	3-Brom-salicylsäure	5-Brom-salicylsäure	4-Chlor-benzoesäure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
69,0	(0,00) < BG	4,29	1,08	(0,06) < BG	2,98	0,90	2,91
70,0	(0,00) < BG	6,19	1,03	(0,03) < BG	3,07	0,76	2,55
72,0	(0,00) < BG	2,44	1,00	(0,03) < BG	2,99	0,64	2,28
74,0	(0,00) < BG	0,81	0,96	(0,03) < BG	2,88	0,52	1,93
75,0	(0,00) < BG	0,57	0,86	(0,03) < BG	2,58	(0,44) < BG	1,80
91,0	(0,00) < BG	0,52	0,52	(0,03) < BG	1,66	(0,13) < BG	0,61
92,0	(0,00) < BG	0,81	(0,49) < BG	(0,03) < BG	1,62	(0,09) < BG	0,55
94,0	(0,00) < BG	2,42	0,52	(0,03) < BG	1,56	(0,10) < BG	0,51
96,0	(0,00) < BG	4,01	(0,46) < BG	(0,03) < BG	1,56	(0,07) < BG	(0,49) < BG
97,0	(0,00) < BG	1,27	(0,43) < BG	(0,03) < BG	1,44	(0,07) < BG	(0,43) < BG
98,0	(0,00) < BG	2,12	(0,39) < BG	(0,03) < BG	1,24	(0,07) < BG	(0,37) < BG
99,0	(0,00) < BG	(0,33) < BG	(0,41) < BG	(0,03) < BG	1,25	(0,06) < BG	(0,42) < BG
163,0	(0,00) < BG	1,17	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,12) < BG
166,0	(0,00) < BG	1,17	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,13) < BG
169,0	(0,00) < BG	(0,28) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,13) < BG
172,0	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,12) < BG
187,0	(0,00) < BG	1,62	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,12) < BG
188,5	(0,00) < BG	0,69	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,12) < BG

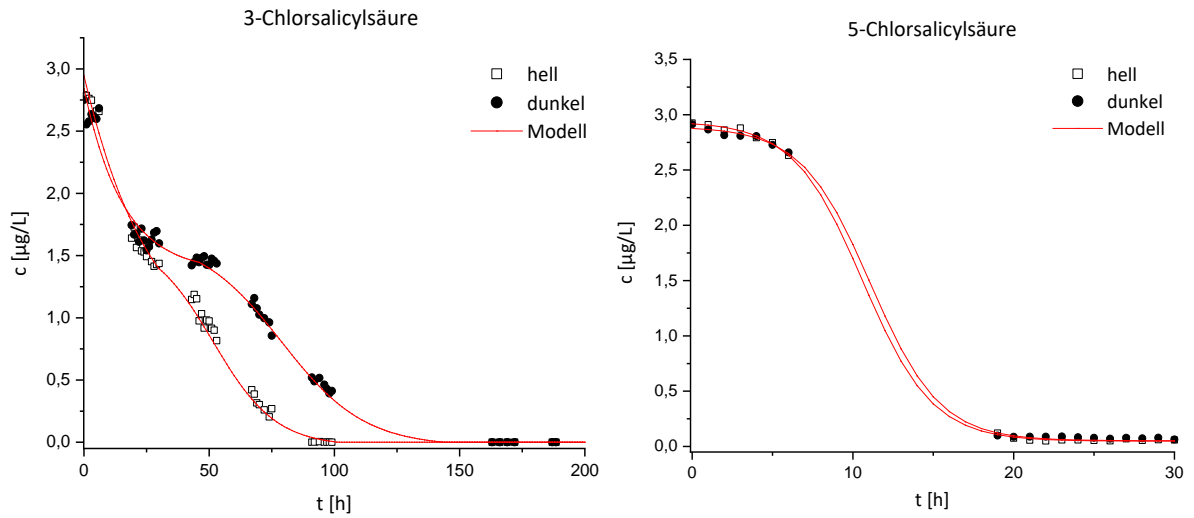


Abbildung A 11: Lichtabhängige Konzentrations-Zeit-Verläufe der 3- und 5-Chlorsalicylsäure

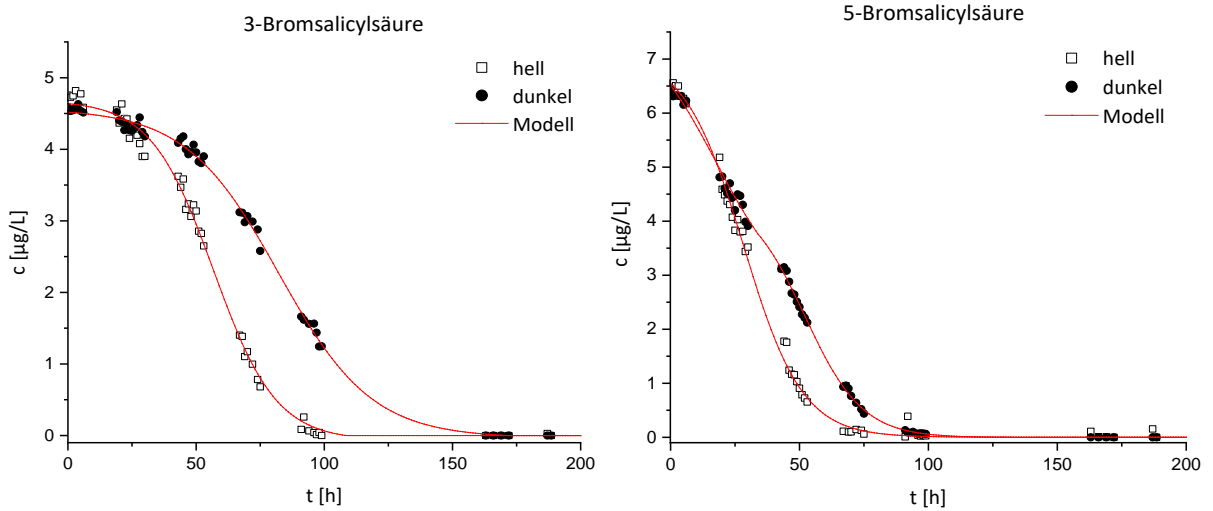


Abbildung A 12: Lichtabhängige Konzentrations-Zeit-Verläufe der 3- und 5-Bromsalicylsäure

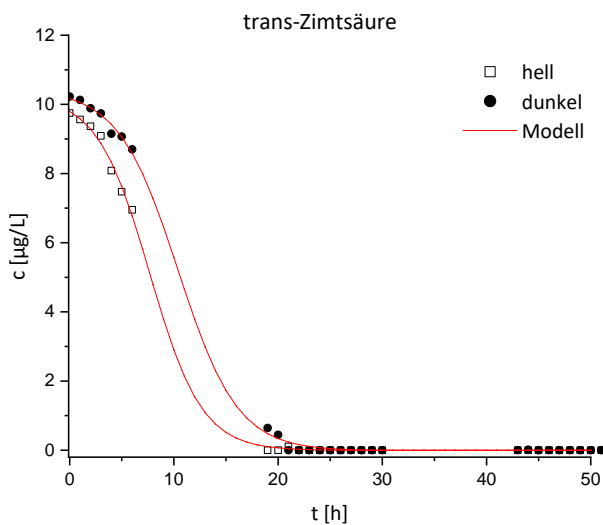


Abbildung A 13: Lichtabhängiger Konzentrations-Zeit-Verlauf der trans-Zimtsäure

Tabelle A 62: Daten biotische/ abiotischer Abbaueversuch – sterilfiltriert

Zeit [h]	trans-Zimtsäure	Salicylsäure	3-Chlor-salicylsäure	5-Chlor-salicylsäure	3-Brom-salicylsäure	5-Brom-salicylsäure	4-Chlor-benzoesäure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
0	9,79	209,31	2,58	3,01	4,60	6,34	8,16
1	9,82	208,93	2,58	2,98	4,41	6,25	8,24
2	10,04	208,04	2,58	2,98	4,51	6,39	7,92
3	9,87	204,62	2,55	2,93	4,55	6,23	7,88
4	9,75	204,86	2,61	2,98	4,54	6,19	7,94
5	10,01	211,76	2,57	2,98	4,49	6,20	8,39
6	9,99	207,08	2,55	2,98	4,57	6,22	8,24
19	9,88	126,77	2,44	2,78	4,53	6,04	8,40
20	9,83	83,06	2,41	2,51	4,43	6,05	8,24
21	9,84	25,26	2,36	2,22	4,48	6,09	8,36
22	9,42	0,73	2,28	0,72	4,45	5,66	8,03
23	9,56	(0,22) < BG	1,87	(0,15) < BG	4,33	5,05	7,96
24	9,69	(0,38) < BG	1,73	(0,06) < BG	4,27	4,76	8,39
25	9,53	0,55	1,61	(0,03) < BG	4,35	4,67	8,27
26	9,41	(0,14) < BG	1,43	(0,04) < BG	4,36	4,28	8,21
27	9,09	(0,00) < BG	1,39	(0,03) < BG	4,37	4,19	8,27
28	9,05	(0,00) < BG	1,21	(0,03) < BG	4,25	3,92	8,15
29	8,69	(0,00) < BG	1,24	(0,03) < BG	4,23	3,65	8,39
30	8,39	(0,00) < BG	1,12	(0,03) < BG	4,18	3,47	8,33
43	(0,48) < BG	0,93	0,82	(0,03) < BG	4,27	3,16	8,35
44	(0,30) < BG	2,28	0,75	(0,03) < BG	4,25	3,13	8,25

Fortsetzung Tabelle A 62:

Zeit [h]	trans-Zimtsäure	Salicylsäure	3-Chlor-salicylsäure	5-Chlor-salicylsäure	3-Brom-salicylsäure	5-Brom-salicylsäure	4-Chlor-benzoesäure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
45	(0,10) < BG	1,05	0,78	(0,03) < BG	4,17	3,17	8,21
46	(0,00) < BG	1,13	0,69	(0,03) < BG	3,92	2,95	7,95
47	(0,00) < BG	0,91	0,69	(0,03) < BG	4,03	3,01	7,66
48	(0,00) < BG	0,65	0,69	(0,03) < BG	3,98	3,09	7,84
49	(0,00) < BG	0,63	0,68	(0,03) < BG	4,10	3,01	7,61
50	(0,00) < BG	0,68	0,67	(0,03) < BG	3,95	2,98	7,95
51	(0,00) < BG	0,59	0,72	(0,03) < BG	4,15	3,08	8,28
52	(0,00) < BG	(0,08) < BG	0,68	(0,03) < BG	4,09	3,05	8,12
53	(0,00) < BG	(0,00) < BG	0,60	(0,03) < BG	3,97	2,90	7,73
67	(0,00) < BG	2,29	0,55	(0,03) < BG	3,70	2,15	7,05
68	(0,00) < BG	2,66	0,55	(0,03) < BG	3,97	2,21	7,03
69	(0,00) < BG	2,20	0,54	(0,03) < BG	3,83	2,16	7,02
70	(0,00) < BG	2,26	0,62	(0,03) < BG	3,91	2,28	6,95
72	(0,00) < BG	1,79	0,57	(0,03) < BG	3,90	2,03	6,75
74	(0,00) < BG	(0,39) < BG	0,56	(0,03) < BG	3,82	1,95	6,25
75	(0,00) < BG	0,64	0,58	(0,03) < BG	4,00	1,87	6,44
91	(0,00) < BG	0,87	0,53	(0,03) < BG	3,67	0,81	2,87
92	(0,00) < BG	1,91	0,48	(0,03) < BG	3,50	0,82	2,66
94	(0,00) < BG	2,03	0,55	(0,03) < BG	3,52	0,78	2,13
96	(0,00) < BG	2,29	0,55	(0,03) < BG	3,47	0,72	1,88

Fortsetzung Tabelle A 62:

Zeit [h]	trans-Zimtsäure	Salicylsäure	3-Chlor-salicylsäure	5-Chlor-salicylsäure	3-Brom-salicylsäure	5-Brom-salicylsäure	4-Chlor-benzoesäure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
97	(0,00) < BG	1,89	0,56	(0,03) < BG	3,46	0,61	1,59
98	(0,00) < BG	1,16	0,50	(0,03) < BG	3,44	0,54	1,40
99	(0,00) < BG	(0,41) < BG	(0,49) < BG	(0,03) < BG	3,38	0,54	1,25
163	(0,00) < BG	1,81	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,09) < BG
166	(0,00) < BG	0,93	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,08) < BG
169	(0,00) < BG	(0,14) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,01) < BG	(0,09) < BG
172	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,09) < BG
187	(0,00) < BG	0,89	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,09) < BG
188,5	(0,00) < BG	(0,23) < BG	(0,00) < BG	(0,03) < BG	(0,00) < BG	(0,00) < BG	(0,08) < BG

Tabelle A 63: Daten biotische/ abiotischer Abbauersuch – Zugabe von CuCl<sub>2</sub>

Zeit [h]	trans-Zimtsäure	Salicylsäure	3-Chlor-salicylsäure	5-Chlor-salicylsäure	3-Brom-salicylsäure	5-Brom-salicylsäure	4-Chlor-benzoesäure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
0	9,78	203,80	2,35	2,64	4,01	5,80	8,56
1	9,99	196,10	2,24	2,57	3,99	5,65	8,59
2	9,62	200,96	2,30	2,65	4,30	5,64	8,15
3	9,69	200,93	2,42	2,60	4,36	5,87	7,83
4	9,81	201,65	2,43	2,60	4,35	5,77	8,03
5	9,48	200,99	2,33	2,51	4,33	5,91	8,48
6	9,65	198,76	2,39	2,59	4,30	5,84	8,63
19	9,82	200,48	2,35	2,64	4,22	5,48	8,51

Fortsetzung Tabelle A 63:

Zeit [h]	trans- Zimt- säure	Salicyl- säure	3-Chlor- salicyl- säure	5-Chlor- salicyl- säure	3-Brom- salicyl- säure	5-Brom- salicyl- säure	4-Chlor- benzoe- säure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
20	9,48	200,11	2,39	2,60	4,23	5,63	8,19
21	9,35	195,72	2,43	2,61	4,19	5,60	8,34
22	9,79	197,11	2,46	2,67	4,03	5,61	8,22
23	9,39	193,01	2,31	2,59	4,00	5,51	8,34
24	9,83	194,62	2,27	2,56	3,97	5,55	8,32
25	9,74	196,68	2,31	2,53	4,13	5,44	8,06
26	10,09	195,79	2,24	2,52	3,97	5,39	8,79
27	9,92	193,79	2,40	2,50	4,25	5,61	8,41
28	9,99	189,40	2,35	2,61	4,32	5,60	8,15
29	9,27	194,61	2,35	2,64	4,02	5,66	8,56
30	9,76	194,37	2,30	2,59	4,09	5,60	8,34
43	9,75	197,32	2,29	2,59	4,13	5,40	8,55
44	9,48	188,59	2,27	2,50	4,14	5,31	8,43
45	10,03	194,49	2,41	2,49	4,15	5,48	8,47
46	9,47	194,09	2,32	2,53	4,23	5,53	8,49
47	9,92	193,60	2,41	2,56	4,17	5,78	8,55
48	9,86	188,56	2,38	2,55	4,29	5,60	8,59
49	9,71	193,91	2,36	2,54	4,27	5,41	8,57
50	9,42	193,57	2,31	2,54	4,08	5,48	8,27
51	9,62	195,06	2,30	2,55	4,17	5,53	8,44
52	9,46	191,26	2,22	2,45	3,99	5,54	7,93

Fortsetzung Tabelle A 63:

Zeit [h]	trans-Zimtsäure	Salicylsäure	3-Chlor-salicylsäure	5-Chlor-salicylsäure	3-Brom-salicylsäure	5-Brom-salicylsäure	4-Chlor-benzoesäure
	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]	c [µg/L]
53	9,66	191,76	2,22	2,48	3,99	5,58	8,24
67	9,45	193,55	2,24	2,57	3,98	5,63	8,23
68	9,79	191,34	2,40	2,55	4,14	5,59	8,45
69	9,49	194,72	2,21	2,44	4,18	5,45	8,25
70	9,68	185,27	2,23	2,49	4,18	5,58	7,91
72	9,79	183,45	2,22	2,52	4,22	5,59	8,32
74	10,03	185,27	2,29	2,55	4,39	5,77	8,28
75	9,86	188,70	2,36	2,59	4,24	5,68	8,43
91	9,51	185,13	2,23	2,49	4,09	5,52	8,12
92	9,93	185,09	2,36	2,59	4,05	5,40	8,29
94	9,91	188,94	2,37	2,63	4,20	5,48	8,49
96	9,39	182,26	2,27	2,56	4,35	5,36	8,42
97	9,58	196,98	2,32	2,61	4,25	5,45	8,48
98	9,66	187,89	2,24	2,61	4,04	5,54	8,40
99	9,47	186,08	2,31	2,61	4,09	5,70	8,37
163	9,29	154,14	2,21	2,53	4,08	5,31	7,82
166	8,92	150,85	2,30	2,56	4,16	5,46	7,93
169	8,69	119,98	2,27	2,58	4,21	5,39	8,08
172	7,84	94,77	2,22	2,52	4,22	5,25	7,90
187	(0,52) < BG	0,90	2,20	(0,07) < BG	4,09	4,02	7,83
188,5	(0,00) < BG	(0,05) < BG	2,20	(0,05) < BG	4,18	3,82	8,01



## Fortsetzung Tabelle A 63:

Zeit [h]	trans-Zimt-säure	Salicyl-säure	3-Chlor-salicyl-säure	5-Chlor-salicyl-säure	3-Brom-salicyl-säure	5-Brom-salicyl-säure	4-Chlor-benzoe-säure
	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]
212,5	(0,00) < BG	1,71	2,08	(0,03) < BG	4,03	2,22	7,97
236,5	(0,00) < BG	3,23	1,96	(0,04) < BG	3,98	1,55	7,84
260,5	(0,00) < BG	(0,33) < BG	1,88	(0,03) < BG	3,97	1,20	7,89

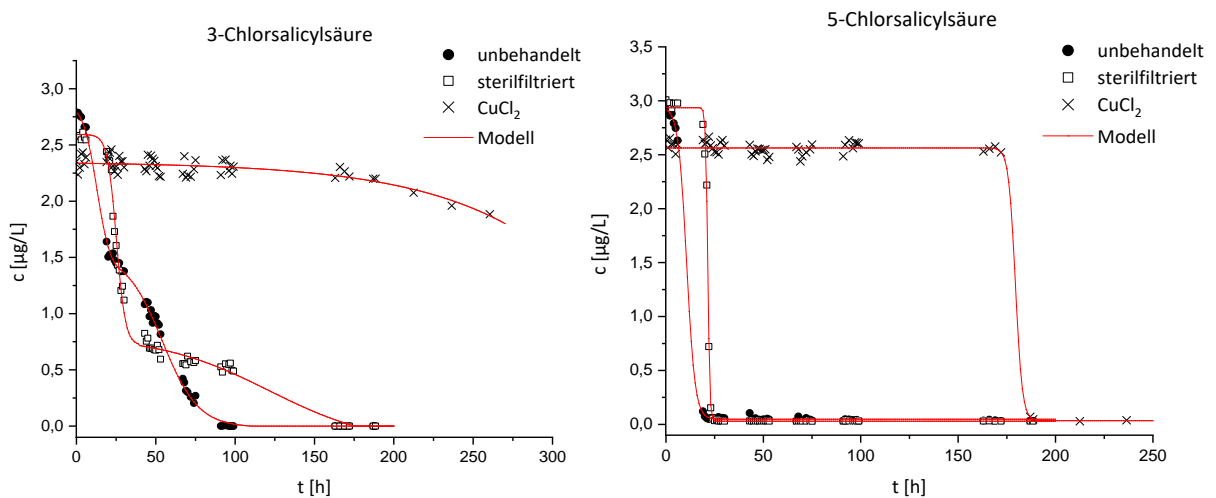


Abbildung A 14: Biotische/ abiotische Konzentrations-Zeit-Verläufe der 3- und 5-Chlorsalicylsäure

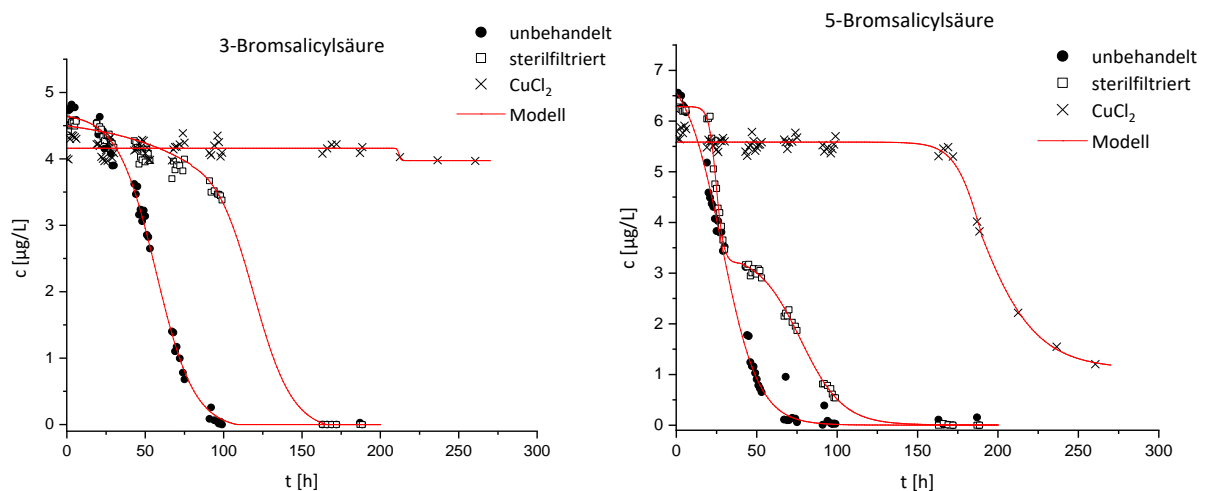


Abbildung A 15: Biotische/ abiotische Konzentrations-Zeit-Verläufe der 3- und 5-Bromsalicylsäure

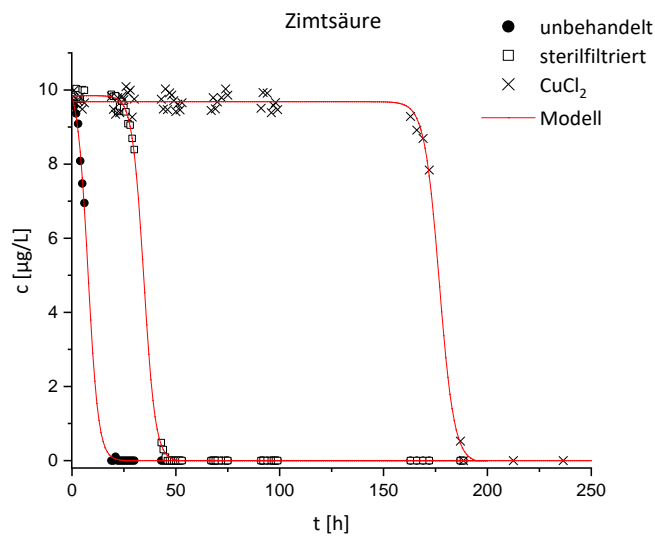


Abbildung A 16: Biotischer/ abiotischer Konzentrations-Zeit-Verlauf der trans-Zimtsäure

Tabelle A 64: Benzoesäure-Konzentrationen Modellversuch zur Lichtabhängigkeit (BG = 1,5 µg/L)

Zeit [h]	Licht	Lichtauschluss	Zeit [h]	Licht	Lichtauschluss	Zeit [h]	Licht	Lichtauschluss
	c [µg/L]	c [µg/L]		c [µg/L]	c [µg/L]		c [µg/L]	c [µg/L]
0	12,98	12,76	29	(0,60) < BG	22,89	72	2,75	3,62
1	13,99	14,29	30	19,05	(0,12) < BG	74	2,79	2,19
2	14,78	14,54	43	4,59	(0,00) < BG	75	(1,28) < BG	1,94
3	13,20	12,38	44	(0,00) < BG	(0,61) < BG	91	(0,40) < BG	(1,14) < BG
4	14,18	12,85	45	11,01	1,64	92	6,82	(0,65) < BG
5	12,50	12,12	46	1,79	(0,83) < BG	94	4,73	4,31
6	9,79	12,71	47	(0,00) < BG	(0,44) < BG	96	3,44	4,81
19	3,97	2,75	48	1,71	1,59	97	1,71	2,26
20	5,31	2,79	49	(1,01) < BG	(0,39) < BG	98	3,17	(1,10) < BG
21	2,42	1,75	50	2,17	2,73	99	(1,24) < BG	(0,78) < BG
22	(0,01) < BG	(0,00) < BG	51	(0,59) < BG	2,47	163	4,81	1,54
23	(0,33) < BG	(0,00) < BG	52	1,79	(0,20) < BG	166	4,06	3,22

## Fortsetzung Tabelle A 64:

Zeit [h]	Licht	Lichtauschluss	Zeit [h]	Licht	Lichtauschluss	Zeit [h]	Licht	Lichtauschluss
	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]		c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]		c [ $\mu\text{g/L}$ ]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]
24	(1,33) < BG	(0,15) < BG	53	(0,00) < BG	(0,22) < BG	169	(1,49) < BG	2,10
25	(1,20) < BG	1,68	67	(0,86) < BG	(0,72) < BG	172	(1,04) < BG	(0,18) < BG
26	(0,20) < BG	(0,51) < BG	68	7,08	(1,22) < BG	187	2,76	(1,43) < BG
27	(0,03) < BG	(1,10) < BG	69	1,50	(0,00) < BG	188,5	2,87	(0,81) < BG
28	(0,29) < BG	(0,07) < BG	70	1,78	(1,25) < BG			

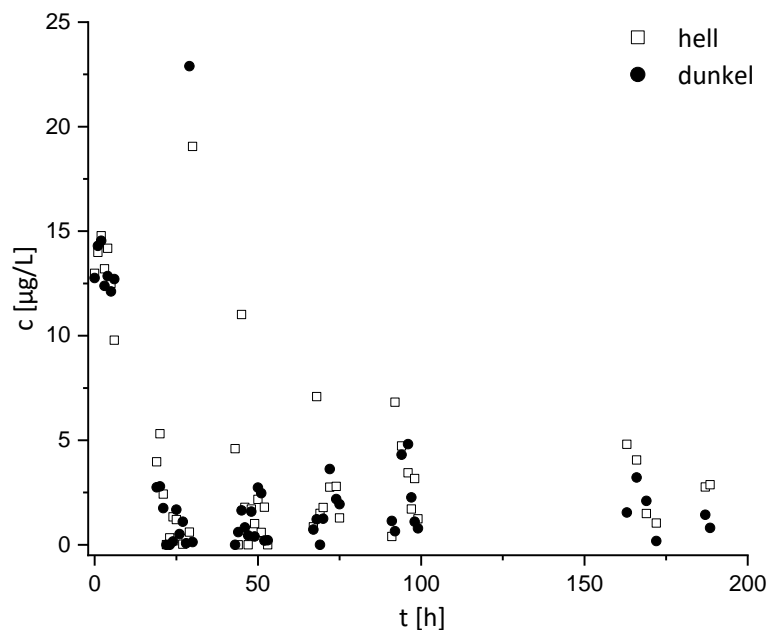


Abbildung A 17: Konzentrationsverlauf Benzoesäure (Modellversuch: Lichtabhängigkeit)

Tabelle A 65: Salicylsäure-Konzentrationen in der Werra [ $\mu\text{g/L}$ ] (BG = 0,5  $\mu\text{g/L}$ )

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	< BG	< BG	< BG	< BG	1,2	< BG	< BG	< BG	< BG
2,2	84,4	259	196	141	108	41,7	134	122	74
2,9	103,0	251	189	144	110	37,4	131	116	71,8
3,7	102,0	235	182	135	108	36,1	127	109	67,8
4,5	93,6	220	175	121	96,9	35,9	121	97,4	59,3

Fortsetzung Tabelle A 65:

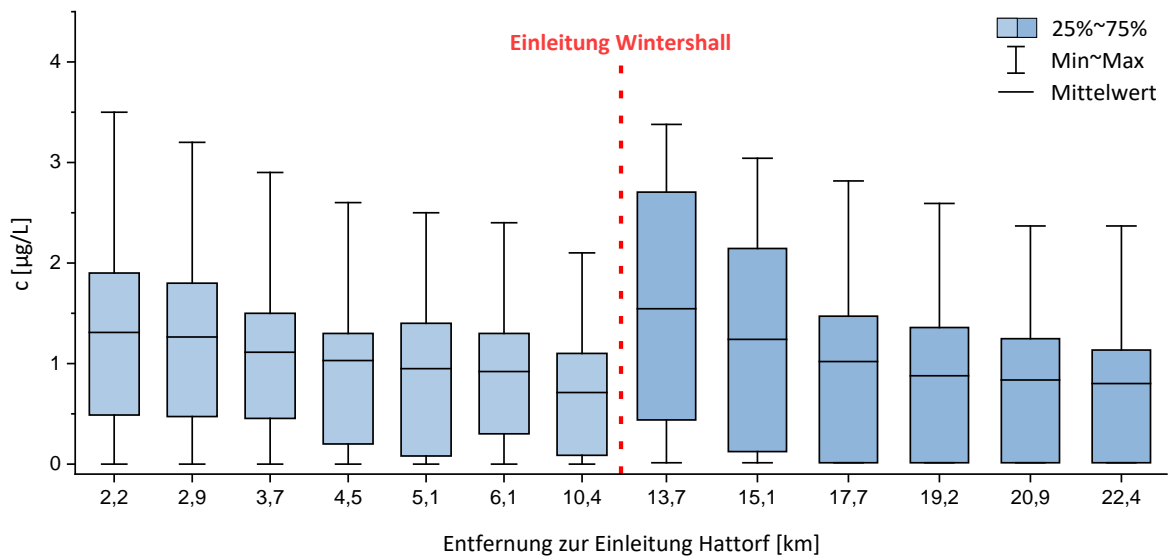
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
5,1	94,6	198	173	117	82,3	33,6	114	96,5	54,3
6,1	98,2	197	166	113	85,3	32	110	94,5	49,6
10,4	69,2	223	130	72,9	51,7	25,5	76,6	54,8	12,3
13,7	116	257	165	94,1	134	35,9	111	78,2	1,8
15,1	99,6	255	152	88,1	118	30,3	92,1	53,8	1,1
17,7	85,4	215	127	73,5	98,7	24,9	69,7	29,2	< BG
19,2	64,7	173	111	61,6	92,7	24,6	54,8	17,4	< BG
20,9	57,7	169	104	55	80,3	24,1	38,5	7,70	< BG
22,4	48,0	167	89,3	52,6	71,8	22,9	31,5	7,23	< BG
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	
2,2	105	136	< BG	< BG	< BG	39	97,8	80,8	
2,9	105	128	< BG	< BG	< BG	36,1	96,3	75,5	
3,7	98,3	116	< BG	< BG	< BG	27,7	91,5	70,7	
4,5	95,8	93,9	< BG	< BG	< BG	18,6	89,7	65,6	
5,1	90,1	77,7	< BG	< BG	< BG	13,5	88,5	62,3	
6,1	87,7	63,6	< BG	< BG	< BG	4,9	77	60,6	
10,4	65,3	6,39	< BG	< BG	< BG	< BG	54,7	43,6	
13,7	102	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	68,7	84,9	
15,1	84,8	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	50,5	72,6	
17,7	80,4	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	38,9	63,6	
19,2	77,3	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	33,7	57,6	
20,9	68,8	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	23,5	48,3	
22,4	62,3	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	21,2	41,7	

Tabelle A 66: 3-Bromsalicylsäure-Konzentrationen in der Werra [ $\mu\text{g/L}$ ] (BG = 0,5  $\mu\text{g/L}$ )

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
2,2	1,2	2,5	3,0	1,9	1,0	< BG	1,9	< BG	1,1
2,9	1,3	2,9	2,9	1,8	1,1	< BG	1,8	< BG	0,7
3,7	1,3	2,5	2,6	1,5	1,0	< BG	1,7	< BG	0,5

Fortsetzung Tabelle A 66:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
4,5	1,3	2,3	2,6	1,3	1,0	< BG	1,6	< BG	< BG
5,1	1,4	2,3	2,5	1,1	0,9	< BG	1,6	< BG	< BG
6,1	1,3	2,1	2,4	1,0	0,8	< BG	1,6	< BG	< BG
10,4	1,1	1,8	2,1	0,5	0,5	< BG	1,2	< BG	< BG
13,7	2,7	2,6	3,0	1,1	1,5	< BG	2,0	< BG	0,6
15,1	2,4	2,6	2,7	0,9	1,3	< BG	1,9	< BG	< BG
17,7	2,1	2,3	2,5	0,6	0,8	< BG	1,3	< BG	< BG
19,2	1,6	2,0	2,3	0,5	0,6	< BG	0,9	< BG	< BG
20,9	1,7	2,0	2,1	0,5	0,5	< BG	0,8	< BG	< BG
22,4	1,7	1,9	2,0	0,5	0,5	< BG	0,7	< BG	< BG
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	
2,2	1,3	1,5	< BG	< BG	< BG	1,5	3,5	0,9	
2,9	1,3	1,3	< BG	< BG	< BG	1,5	3,2	0,9	
3,7	1,1	1,1	< BG	< BG	< BG	1,3	2,9	0,8	
4,5	1,1	1,0	< BG	< BG	< BG	1,2	2,6	0,8	
5,1	0,9	0,8	< BG	< BG	< BG	1,2	2,1	0,8	
6,1	0,9	0,8	< BG	< BG	< BG	1,2	1,8	0,9	
10,4	0,7	0,8	< BG	< BG	< BG	1,1	1,4	0,7	
13,7	1,2	1,5	< BG	< BG	< BG	1,3	2,6	2,4	
15,1	1,0	0,7	< BG	< BG	< BG	0,8	1,8	2,1	
17,7	1,0	0,5	< BG	< BG	< BG	0,6	1,2	2,1	
19,2	0,9	< BG	< BG	< BG	< BG	0,6	1,2	2,1	
20,9	0,8	< BG	< BG	< BG	< BG	0,5	1,1	2,1	
22,4	0,6	< BG	< BG	< BG	< BG	0,5	1,0	2,1	



**Abbildung A 18: 3-Bromsalicylsäure-Konzentrationen in der Werra 2019**  
(hell: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)

**Tabelle A 67: 5-Bromsalicylsäure-Konzentrationen in der Werra [µg/L] (BG = 0,5 µg/L)**

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
2,2	1,7	3,1	3,7	2,5	1,7	0,7	2,5	0,7	1,7
2,9	1,8	3,5	3,6	2,4	1,7	0,7	2,5	0,5	1,1
3,7	1,7	3,2	3,3	2,0	1,4	0,7	2,4	< BG	0,7
4,5	1,8	3,0	3,2	1,7	1,5	0,7	2,2	< BG	< BG
5,1	1,8	2,8	3,1	1,4	1,3	0,6	2,1	< BG	< BG
6,1	1,8	2,9	2,9	1,3	1,2	0,6	2,1	< BG	< BG
10,4	1,5	2,3	2,5	0,8	0,7	< BG	1,5	< BG	< BG
13,7	3,6	3,2	3,4	1,4	2,2	0,7	2,6	0,5	0,7
15,1	3,2	3,1	3,1	1,1	1,7	0,6	2,2	< BG	< BG
17,7	2,9	2,7	2,7	0,8	1,2	0,6	1,6	< BG	< BG
19,2	2,0	2,4	2,5	0,7	1,0	< BG	1,1	< BG	< BG
20,9	2,2	2,4	2,3	0,6	0,8	< BG	1,0	< BG	< BG
22,4	2,2	2,3	2,1	0,6	0,8	< BG	0,8	< BG	< BG
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	
2,2	1,7	2,1	< BG	< BG	< BG	2,2	4,5	1,3	

## Fortsetzung Tabelle A 67:

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019
2,9	1,7	1,8	< BG	< BG	< BG	1,9	4,4	1,2
3,7	1,4	1,5	< BG	< BG	< BG	1,6	4,1	1,2
4,5	1,5	1,2	< BG	< BG	< BG	1,5	3,6	1,2
5,1	1,2	0,9	< BG	< BG	< BG	1,5	2,9	1,2
6,1	1,2	1,0	< BG	< BG	< BG	1,5	2,7	1,2
10,4	1,0	0,9	< BG	< BG	< BG	1,2	1,7	1,0
13,7	1,7	1,4	< BG	< BG	< BG	1,5	3,2	3,2
15,1	1,2	0,7	< BG	< BG	< BG	1,0	2,3	2,9
17,7	1,2	0,5	< BG	< BG	< BG	0,6	1,6	2,6
19,2	1,1	< BG	< BG	< BG	< BG	0,6	1,5	2,6
20,9	1,0	< BG	< BG	< BG	< BG	0,5	1,4	2,6
22,4	0,7	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	1,3	2,6

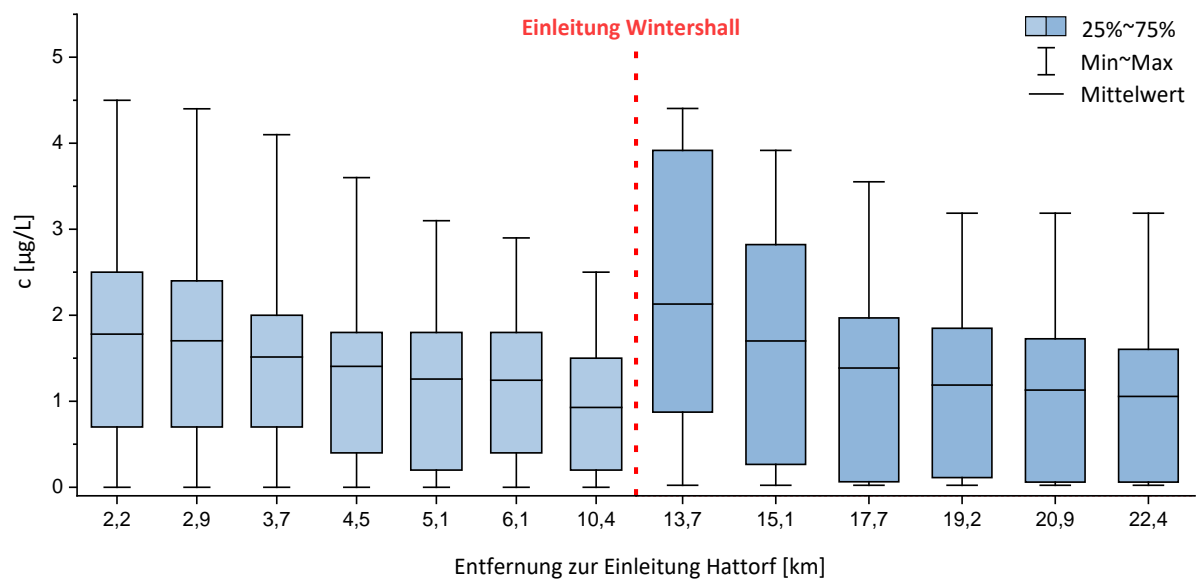
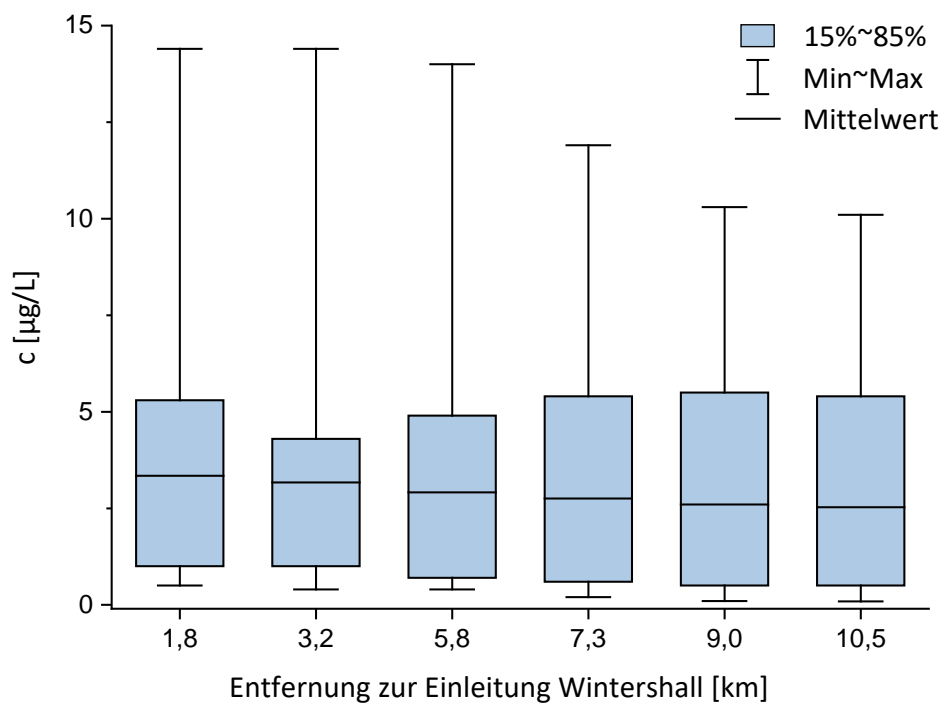


Abbildung A 19: 5-Bromsalicylsäure-Konzentrationen in der Werra 2019  
(hell: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)

**Tabelle A 68: 4-Chlorbenzoesäure-Konzentrationen in der Werra [ $\mu\text{g/L}$ ] (BG = 0,5  $\mu\text{g/L}$ )**

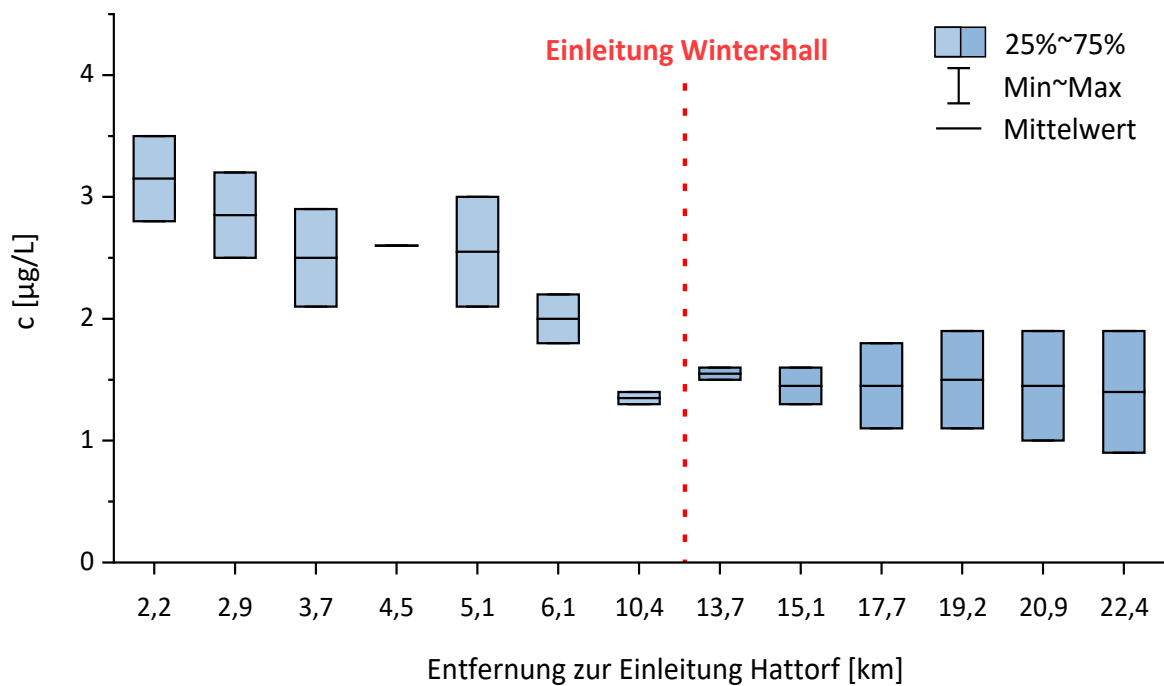
Entfernung zur Einleitung Wintershall [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
1,8	2,8	1,7	2,4	3,1	9,0	0,6	1,2	2,7	2,6
3,2	2,7	1,7	2,3	3,1	8,8	0,6	1,2	2,9	2,3
5,8	2,8	1,6	1,7	3,0	7,0	0,7	1,2	2,3	2,1
7,3	2,8	1,4	1,5	2,9	7,1	0,6	1,2	2,7	1,8
9,0	3,0	1,3	1,4	2,8	6,9	0,7	1,1	2,7	1,6
10,5	3,2	1,2	1,3	2,8	6,7	0,7	1,0	2,4	1,5
Entfernung zur Einleitung Wintershall [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
1,8	5,3	3,0	1,4	0,5	1,0	2,3	2,8	14,4	
3,2	4,3	2,3	1,1	< BG	1,0	2,1	2,7	14,4	
5,8	4,9	1,6	< BG	0,5	1,0	2,4	2,3	14,0	
7,3	5,4	1,8	< BG	0,6	0,6	2,2	2,1	11,9	
9,0	5,5	2,2	< BG	0,5	< BG	1,8	2,0	10,3	
10,5	5,4	2,2	< BG	0,5	< BG	1,7	1,9	10,1	

**Abbildung A 20: 4-Chlorbenzoesäure-Konzentrationen in der Werra 2019**



**Tabelle A 69: Trans-Zimtsäure [ $\mu\text{g/L}$ ] (BG = 1,0  $\mu\text{g/L}$ )**

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	14.11. 2019	12.12. 2019
- 1,5	< BG	< BG
2,2	3,5	2,8
2,9	3,2	2,5
3,7	2,9	2,1
4,5	2,6	2,6
5,1	2,1	3,0
6,1	1,8	2,2
10,4	1,4	1,3
13,7	1,5	1,6
15,1	1,3	1,6
17,7	1,1	1,8
19,2	1,1	1,9
20,9	1,0	1,9
22,4	< BG	1,9

**Abbildung A 21: Trans-Zimtsäure-Konzentrationen in der Werra 2019**  
(hell: Abschnitt Hattorf; dunkel: Abschnitt Wintershall)

**Tabelle A 70: 3-Chlorosalicylsäure-Konzentrationen in der Werra [ $\mu\text{g/L}$ ] (BG = 0,5  $\mu\text{g/L}$ )**

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
2,2	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
2,9	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
3,7	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
4,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
5,1	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
6,1	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
10,4	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
13,7	< BG	< BG	0,6	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
15,1	< BG	< BG	0,6	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
17,7	< BG	< BG	0,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
19,2	< BG	< BG	0,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
20,9	< BG	< BG	0,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
22,4	< BG	< BG	0,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	
2,2	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,7	0,5	< BG	
2,9	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,6	< BG	< BG	
3,7	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,6	0,5	< BG	
4,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,5	0,5	< BG	
5,1	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,5	0,6	< BG	
6,1	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,7	< BG	
10,4	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,7	< BG	
13,7	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,5	1,3	< BG	
15,1	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	1,0	< BG	
17,7	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,8	< BG	
19,2	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,8	< BG	
20,9	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,7	< BG	
22,4	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,6	< BG	

**Tabelle A 71: 5-Chlorsalicylsäure-Konzentrationen in der Werra [ $\mu\text{g/L}$ ] (BG = 0,5  $\mu\text{g/L}$ )**

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
- 1,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
2,2	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,6	0,6	0,6
2,9	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,5	0,5	0,6
3,7	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,5	< BG	0,6
4,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,6
5,1	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,6
6,1	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,6
10,4	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
13,7	< BG	< BG	0,6	< BG	0,6	< BG	0,7	0,6	< BG
15,1	< BG	< BG	0,6	< BG	0,5	< BG	0,6	< BG	< BG
17,7	< BG	< BG	0,6	< BG	< BG	< BG	0,5	< BG	< BG
19,2	< BG	< BG	0,6	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
20,9	< BG	< BG	0,6	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
22,4	< BG	< BG	0,6	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG
Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
- 1,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	
2,2	< BG	0,6	< BG	< BG	< BG	0,7	0,9	< BG	
2,9	< BG	0,6	< BG	< BG	< BG	0,7	0,8	< BG	
3,7	< BG	0,6	< BG	< BG	< BG	0,7	0,8	< BG	
4,5	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,6	0,9	< BG	
5,1	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,6	1,0	< BG	
6,1	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,5	1,1	< BG	
10,4	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	1,0	< BG	
13,7	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	1,6	0,5	
15,1	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	1,3	< BG	
17,7	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	1,2	< BG	
19,2	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	1,1	< BG	
20,9	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,9	< BG	
22,4	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	< BG	0,9	< BG	

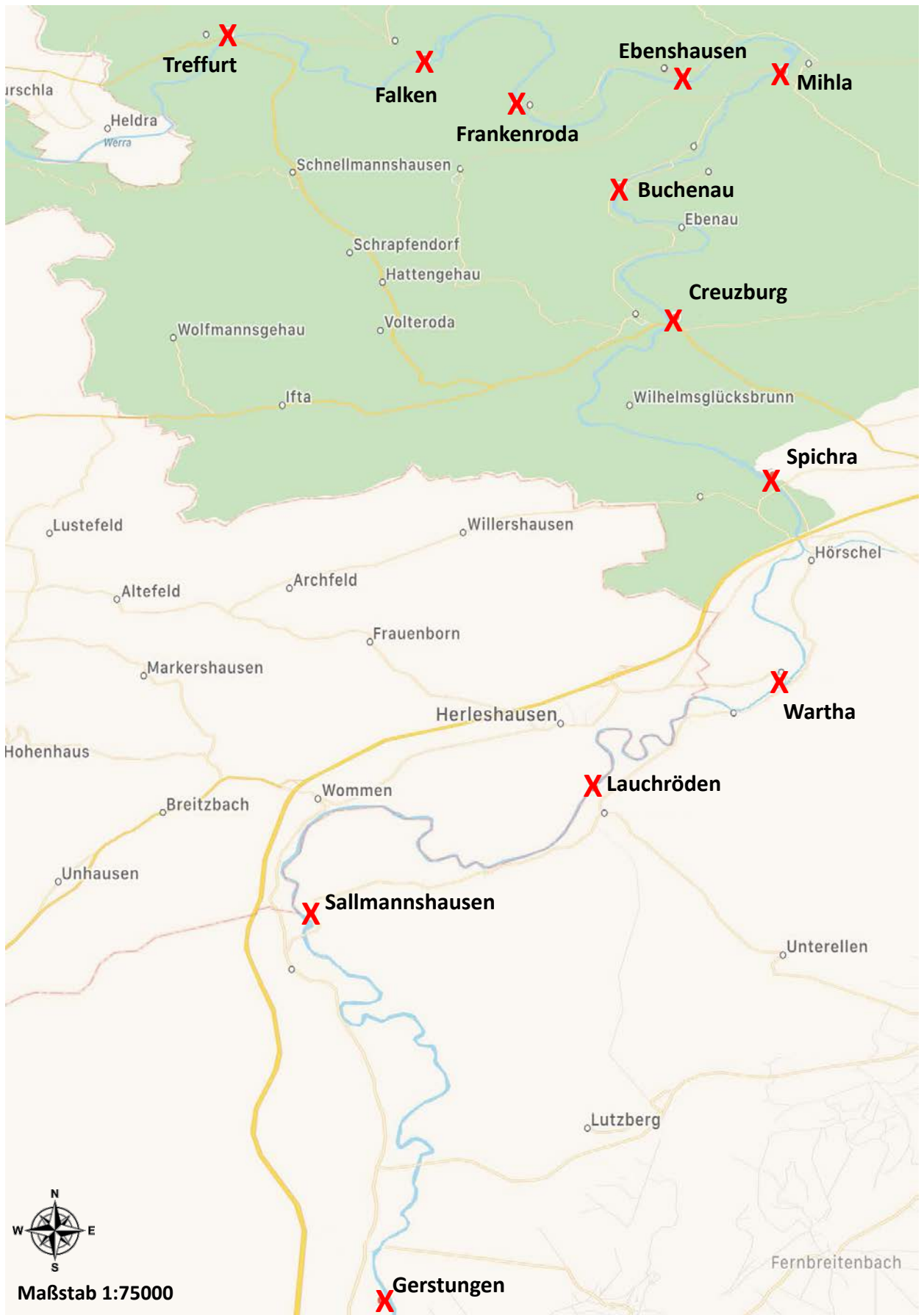


Abbildung A 22: Karte erweiterte Probenahme [94]

**Tabelle A 72: Salicylsäure-Konzentrationen der erweiterten Probenahmen in der Werra**

(BG = 0,5 µg/L)

Entfernung zur Einleitung Wintershall [km]	Probenahmestelle	21.03.2019		28.11.2019		12.12.2019	
		c [µg/L]	[c <sub>0</sub> ]/[c]	c [µg/L]	[c <sub>0</sub> ]/[c]	c [µg/L]	[c <sub>0</sub> ]/[c]
1,8	Widdershausen	35,9	1,00	44,4	1,00	84,9	1,00
3,2	Dankmarshausen	30,3	0,84	22,6	0,51	72,6	0,86
5,8	Dippach	24,9	0,69	15,6	0,35	63,6	0,75
7,3	Berka/ Werra	24,6	0,69	8,5	0,19	57,6	0,68
9,0	Gerstungen (Baggerloch)	24,1	0,67	1,6	0,04	48,3	0,57
10,5	Gerstungen	22,9	0,64	1	0,02	41,7	0,49
18,7	Sallmannshausen	7,1	0,20	< BG	0,00	25,7	0,30
25,7	Lauchröden	1,5	0,04	< BG	0,00	3,2	0,04
31,1	Wartha	< BG	0,01	< BG	0,00	3,3	0,04
35,6	Spichra	< BG	0,00	< BG	0,00	2,3	0,03
41,4	Creuzburg	k. P.	-	k. P.	-	< BG	0,00
46,7	Buchenau	k. P.	-	k. P.	-	< BG	0,00
50,8	Mihla	k. P.	-	k. P.	-	< BG	0,00
54,1	Ebenshausen	k. P.	-	k. P.	-	< BG	0,00
58,3	Frankenroda	k. P.	-	k. P.	-	< BG	0,00
63,3	Falken	k. P.	-	k. P.	-	< BG	0,00
67,8	Treffurt	k. P.	-	k. P.	-	< BG	0,00

k. P.: keine Probenahme

**Tabelle A 73: 4-Chlorbenzoesäure-Konzentrationen der erweiterten Probenahmen in der Werra**

(BG = 0,5 µg/L)

Entfernung zur Einleitung Wintershall [km]	Probenahmestelle	21.03.2019		28.11.2019		12.12.2019	
		c [µg/L]	[c <sub>0</sub> ]/[c]	c [µg/L]	[c <sub>0</sub> ]/[c]	c [µg/L]	[c <sub>0</sub> ]/[c]
1,8	Widdershausen	0,6	1,00	5,2	1,00	14,4	1,00
3,2	Dankmarshausen	0,6	1,00	4,6	0,88	14,4	1,00
5,8	Dippach	0,7	1,17	3,9	0,75	14,0	0,97
7,3	Berka/ Werra	0,6	1,00	3,7	0,71	11,9	0,83
9,0	Gerstungen (Baggerloch)	0,7	1,17	3,2	0,62	10,3	0,72
10,5	Gerstungen	0,7	1,17	3,1	0,60	10,1	0,70

## Fortsetzung Tabelle A 73:

Entfernung zur Einleitung Wintershall [km]	Probenahmestelle	21.03.2019		28.11.2019		12.12.2019	
		c [ $\mu\text{g/L}$ ]	[co]/[c]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	[co]/[c]	c [ $\mu\text{g/L}$ ]	[co]/[c]
18,7	Sallmannshausen	< BG	0,00	2,1	0,40	8,8	0,61
25,7	Lauchröden	< BG	0,00	1,7	0,33	3,5	0,24
31,1	Wartha	< BG	0,00	1,5	0,29	4,0	0,28
35,6	Spichra	< BG	0,00	1	0,19	5,8	0,40
41,4	Creuzburg	k. P.	-	k. P.	-	5,0	0,35
46,7	Buchenau	k. P.	-	k. P.	-	4,4	0,31
50,8	Mihla	k. P.	-	k. P.	-	4,2	0,29
54,1	Ebenshausen	k. P.	-	k. P.	-	4,1	0,28
58,3	Frankenroda	k. P.	-	k. P.	-	3,4	0,24
63,3	Falken	k. P.	-	k. P.	-	2,8	0,19
67,8	Treffurt	k. P.	-	k. P.	-	2,4	0,17

k. P.: keine Probenahme

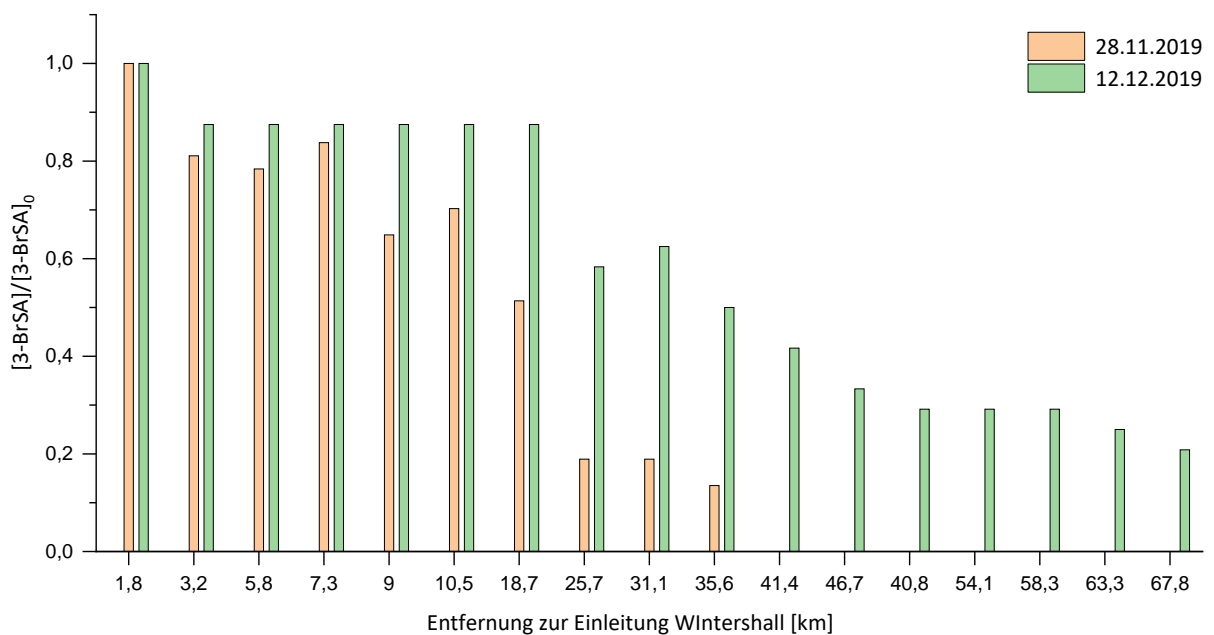
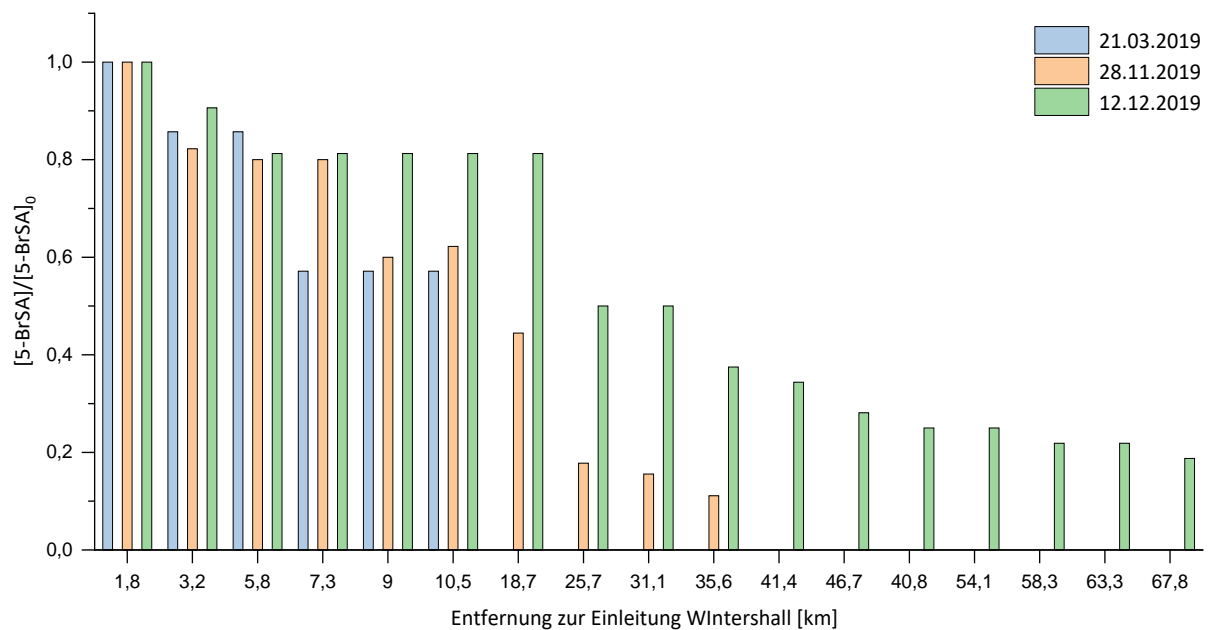


Abbildung A 23: Normierte 3-Bromsalicylsäure-Werte der erweiterten Probenahme in der Werra

**Tabelle A 74: 3-Bromsalicylsäure-Konzentrationen der erweiterten Probenahmen in der Werra**  
(BG = 0,5 µg/L)

Entfernung zur Einleitung Wintershall [km]	Probenahmestelle	21.03.2019		28.11.2019		12.12.2019	
		c [µg/L]	[co]/[c]	c [µg/L]	[co]/[c]	c [µg/L]	[co]/[c]
1,8	Widdershausen	< BG	-	3,7	1,00	2,4	1,00
3,2	Dankmarshausen	< BG	-	3	0,81	2,1	0,88
5,8	Dippach	< BG	-	2,9	0,78	2,1	0,88
7,3	Berka/Werra	< BG	-	3,1	0,84	2,1	0,88
9,0	Gerstungen (Baggerloch)	< BG	-	2,4	0,65	2,1	0,88
10,5	Gerstungen	< BG	-	2,6	0,70	2,1	0,88
18,7	Sallmannshausen	< BG	-	1,9	0,51	2,1	0,88
25,7	Lauchröden	< BG	-	0,7	0,19	1,4	0,58
31,1	Wartha	< BG	-	0,7	0,19	1,5	0,63
35,6	Spichra	< BG	-	0,5	0,14	1,2	0,50
41,4	Creuzburg	k. P.	-	k. P.	-	1,0	0,42
46,7	Buchenau	k. P.	-	k. P.	-	0,8	0,33
50,8	Mihla	k. P.	-	k. P.	-	0,7	0,29
54,1	Ebenshausen	k. P.	-	k. P.	-	0,7	0,29
58,3	Frankenroda	k. P.	-	k. P.	-	0,7	0,29
63,3	Falken	k. P.	-	k. P.	-	0,6	0,25
67,8	Treffurt	k. P.	-	k. P.	-	0,5	0,21

k. P.: keine Probenahme



**Abbildung A 24: Normierte 5-Bromsalicylsäure-Werte der erweiterten Probenahme in der Werra**

**Tabelle A 75: 5-Bromsalicylsäure-Konzentrationen der erweiterten Probenahmen in der Werra**  
(BG = 0,5 µg/L)

Entfernung zur Einleitung Wintershall [km]	Probenahmestelle	21.03.2019		28.11.2019		12.12.2019	
		c [µg/L]	[c <sub>0</sub> ]/[c]	c [µg/L]	[c <sub>0</sub> ]/[c]	c [µg/L]	[c <sub>0</sub> ]/[c]
1,8	Widdershausen	0,7	1,00	4,5	1,00	3,2	1,00
3,2	Dankmarshausen	0,6	0,86	3,7	0,82	2,9	0,91
5,8	Dippach	0,6	0,86	3,6	0,80	2,6	0,81
7,3	Berka/ Werra	< BG	0,57	3,6	0,80	2,6	0,81
9,0	Gerstungen (Baggerloch)	< BG	0,57	2,7	0,60	2,6	0,81
10,5	Gerstungen	< BG	0,57	2,8	0,62	2,6	0,81
18,7	Sallmannshausen	< BG	0,00	2,0	0,44	2,6	0,81
25,7	Lauchröden	< BG	0,00	0,8	0,18	1,6	0,50
31,1	Wartha	< BG	0,00	0,7	0,16	1,6	0,50
35,6	Spichra	< BG	0,00	0,5	0,11	1,2	0,38
41,4	Creuzburg	k. P.		k. P.		1,1	0,34
46,7	Buchenau	k. P.		k. P.		0,9	0,28
50,8	Mihla	k. P.		k. P.		0,8	0,25
54,1	Ebenshausen	k. P.		k. P.		0,8	0,25
58,3	Frankenroda	k. P.		k. P.		0,7	0,22
63,3	Falken	k. P.		k. P.		0,7	0,22
67,8	Treffurt	k. P.		k. P.		0,6	0,19

k. P.: keine Probenahme

**Tabelle A 76: Normierte Salicylsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%]**  
– Abschnitt Hattorf

Entfernung zur Einleitung [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
2,2	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
2,9	1,22	0,97	0,96	1,02	1,02	0,90	0,98	0,95	0,97
3,7	1,21	0,91	0,93	0,96	1,00	0,87	0,95	0,89	0,92
4,5	1,11	0,85	0,89	0,86	0,90	0,86	0,90	0,80	0,80
5,1	1,12	0,76	0,88	0,83	0,76	0,81	0,85	0,79	0,73
6,1	1,16	0,76	0,85	0,80	0,79	0,77	0,82	0,77	0,67
10,4	0,82	0,86	0,66	0,52	0,48	0,61	0,57	0,45	0,17
%	18,0	13,9	33,7	48,3	52,1	38,8	42,8	55,1	83,4



Fortsetzung Tabelle A 76:

Entfernung zur Einleitung [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019
2,2	1,00	1,00	-	-	-	1,00	1,00	1,00
2,9	1,00	0,94	-	-	-	0,93	0,98	0,93
3,7	0,94	0,85	-	-	-	0,71	0,94	0,88
4,5	0,91	0,69	-	-	-	0,48	0,92	0,81
5,1	0,86	0,57	-	-	-	0,35	0,90	0,77
6,1	0,84	0,47	-	-	-	0,13	0,79	0,75
10,4	0,62	0,05	-	-	-	0,00	0,56	0,54
%	37,8	95,3	-	-	-	99,9	44,1	46,0

Tabelle A 77: Normierte Salicylsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%]

– Abschnitt Wintershall

Entfernung zur Einleitung [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
1,8	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
3,2	0,86	0,99	0,92	0,94	0,88	0,84	0,83	0,69	0,61
5,8	0,74	0,84	0,77	0,78	0,74	0,69	0,63	0,37	0,00
7,3	0,56	0,67	0,67	0,65	0,69	0,69	0,49	0,22	0,00
9,0	0,50	0,66	0,63	0,58	0,60	0,67	0,35	0,10	0,00
10,5	0,41	0,65	0,54	0,56	0,54	0,64	0,28	0,09	0,00
%	58,6	35,0	45,9	44,1	46,4	36,2	71,6	90,8	100,0
Entfernung zur Einleitung [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	28.11. 2019	12.12. 2019
1,8	1,00	-	-	-	-	-	1,00	1,00	1,00
3,2	0,83	-	-	-	-	-	0,74	0,51	0,86
5,8	0,79	-	-	-	-	-	0,57	0,35	0,75
7,3	0,76	-	-	-	-	-	0,49	0,19	0,68
9,0	0,67	-	-	-	-	-	0,34	0,04	0,57
10,5	0,61	-	-	-	-	-	0,31	0,02	0,49
%	38,9	-	-	-	-	-	69,1	97,8	50,9

**Tabelle A 78: Normierte 3-Bromsalicylsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%]**  
**– Abschnitt Hattorf**

Entfernung zur Einleitung [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
2,2	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	-	1,00	-	1,00
2,9	1,08	1,16	0,97	0,95	1,10	-	0,95	-	0,64
3,7	1,08	1,00	0,87	0,79	1,00	-	0,89	-	0,45
4,5	1,08	0,92	0,87	0,68	1,00	-	0,84	-	0,18
5,1	1,17	0,92	0,83	0,58	0,90	-	0,84	-	0,07
6,1	1,08	0,84	0,80	0,53	0,80	-	0,84	-	0,27
10,4	0,92	0,72	0,70	0,26	0,50	-	0,63	-	0,09
%	8,3	28,0	30,0	73,7	50,0	-	36,8	-	90,9
Entfernung zur Einleitung [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019	
2,2	1,00	1,00	-	-	-	1,00	1,00	1,00	
2,9	1,00	0,87	-	-	-	1,00	0,91	1,00	
3,7	0,85	0,73	-	-	-	0,87	0,83	0,89	
4,5	0,85	0,67	-	-	-	0,80	0,74	0,89	
5,1	0,69	0,53	-	-	-	0,80	0,60	0,89	
6,1	0,69	0,53	-	-	-	0,80	0,51	1,00	
10,4	0,54	0,53	-	-	-	0,73	0,40	0,78	
%	46,2	46,7	-	-	-	26,7	60,0	22,2	

**Tabelle A 79: Normierte 3-Bromsalicylsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%]**  
**– Abschnitt Wintershall**

Entfernung zur Einleitung [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
1,8	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	-	1,00	-	1,00
3,2	0,89	1,00	0,90	0,82	0,87	-	0,95	-	0,17
5,8	0,78	0,88	0,83	0,55	0,53	-	0,65	-	0,00
7,3	0,59	0,77	0,77	0,45	0,40	-	0,45	-	0,00
9,0	0,63	0,77	0,70	0,45	0,33	-	0,40	-	0,00
10,5	0,63	0,73	0,67	0,45	0,33	-	0,35	-	0,00
%	37,0	26,9	33,3	54,5	66,7	-	65,0	-	100,0

## Fortsetzung Tabelle A 79:

Entfernung zur Einleitung [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	28.11. 2019	12.12. 2019
1,8	1,00	1,00	-	-	-	1,00	1,00	1,00	1,00
3,2	0,83	0,47	-	-	-	0,62	0,69	0,81	0,88
5,8	0,83	0,33	-	-	-	0,46	0,46	0,78	0,88
7,3	0,75	0,20	-	-	-	0,46	0,46	0,84	0,88
9,0	0,67	0,13	-	-	-	0,38	0,42	0,65	0,88
10,5	0,50	0,20	-	-	-	0,38	0,38	0,70	0,88
%	50,0	80,0	-	-	-	61,5	61,5	29,7	12,5

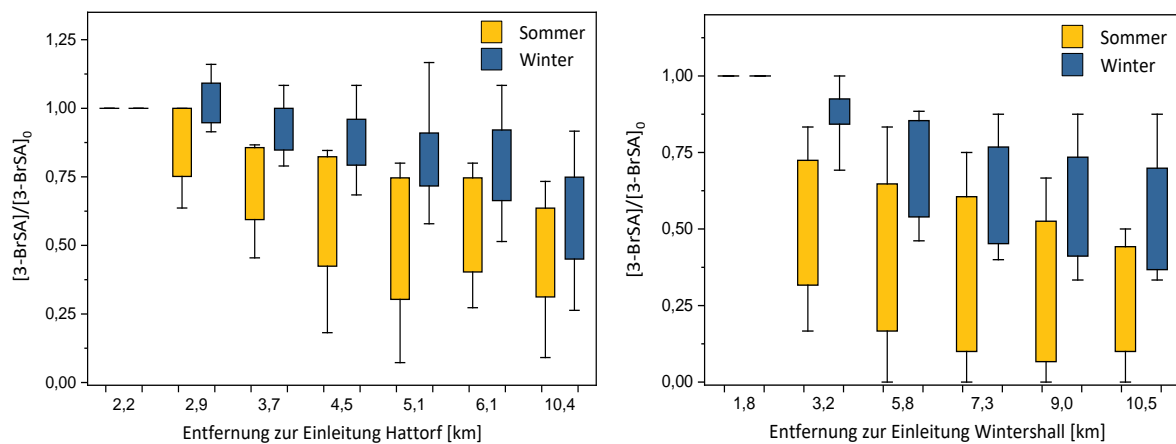


Abbildung A 25: Konzentrationsänderung Sommer/ Winter von 3-Bromsalicylsäure

Tabelle A 80: Normierte 5-Bromsalicylsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%] – Abschnitt Hattorf

Entfernung zur Einleitung [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
2,2	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
2,9	1,06	1,13	0,97	0,96	1,00	1,00	1,00	0,71	0,65
3,7	1,00	1,03	0,89	0,80	0,82	1,00	0,96	0,57	0,41
4,5	1,06	0,97	0,86	0,68	0,88	1,00	0,88	0,29	0,24
5,1	1,06	0,90	0,84	0,56	0,76	0,86	0,84	0,29	0,12
6,1	1,06	0,94	0,78	0,52	0,71	0,86	0,84	0,29	0,24
10,4	0,88	0,74	0,68	0,32	0,41	0,57	0,60	0,04	0,12
%	11,8	25,8	32,4	68,0	58,8	42,9	40,0	95,7	88,2

Fortsetzung Tabelle A 80:

Entfernung zur Einleitung [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	12.12. 2019
2,2	1,00	1,00	-	-	-	1,00	1,00	1,00
2,9	1,00	0,86	-	-	-	0,86	0,98	0,92
3,7	0,82	0,71	-	-	-	0,73	0,91	0,92
4,5	0,88	0,57	-	-	-	0,68	0,80	0,92
5,1	0,71	0,43	-	-	-	0,68	0,64	0,92
6,1	0,71	0,48	-	-	-	0,68	0,60	0,92
10,4	0,59	0,43	-	-	-	0,55	0,38	0,77
%	41,2	57,1	-	-	-	45,5	62,2	23,1

Tabelle A 81: Normierte 5-Bromsalicylsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%]  
– Abschnitt Wintershall

Entfernung zur Einleitung [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
1,8	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	-	1,00
3,2	0,89	0,97	0,91	0,79	0,77	0,86	0,85	-	0,29
5,8	0,81	0,84	0,79	0,57	0,55	0,86	0,62	-	0,00
7,3	0,56	0,75	0,74	0,50	0,45	0,57	0,42	-	0,00
9,0	0,61	0,75	0,68	0,43	0,36	0,57	0,38	-	0,00
10,5	0,61	0,72	0,62	0,43	0,36	0,57	0,31	-	0,00
%	38,9	28,1	38,2	57,1	63,6	42,9	69,2	-	100,0
Entfernung zur Einleitung [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	28.11. 2019	12.12. 2019
1,8	1,00	1,00	-	-	-	1,00	1,00	1,00	1,00
3,2	0,71	0,50	-	-	-	0,67	0,72	0,82	0,91
5,8	0,71	0,36	-	-	-	0,40	0,50	0,80	0,81
7,3	0,65	0,21	-	-	-	0,40	0,47	0,80	0,81
9,0	0,59	0,14	-	-	-	0,33	0,44	0,60	0,81
10,5	0,41	0,14	-	-	-	0,27	0,41	0,62	0,81
%	58,8	85,7	-	-	-	73,3	59,4	37,8	18,8

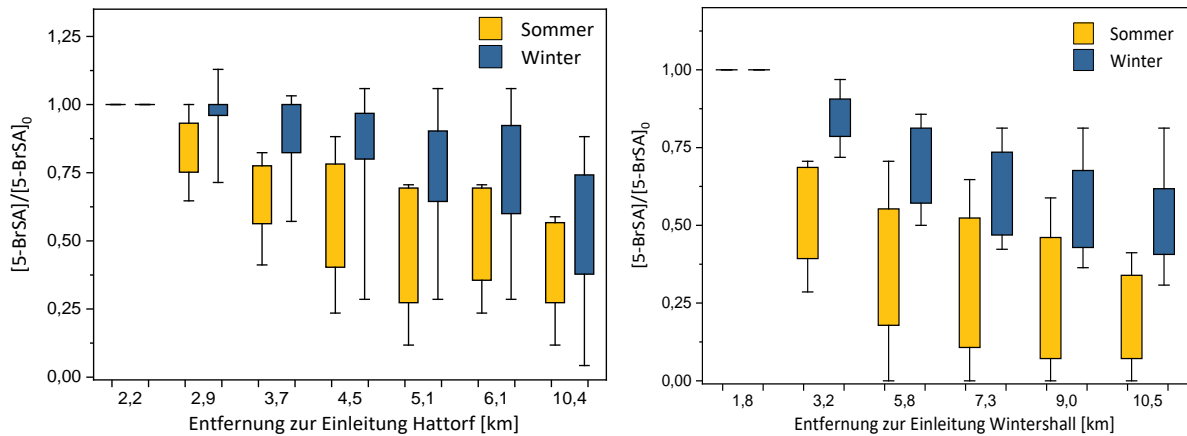


Abbildung A 26: Konzentrationsänderung Sommer/ Winter von 5-Bromsalicylsäure

Tabelle A 82: Normierte 4-Chlorbenzoesäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%] – Abschnitt Wintershall

Entfernung zur Einleitung [km]	10.01. 2019	24.01. 2019	07.02. 2019	21.02. 2019	07.03. 2019	21.03. 2019	04.04. 2019	11.04. 2019	09.05. 2019
1,8	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
3,2	0,96	1,00	0,96	1,00	0,98	1,00	1,00	1,07	0,88
5,8	1,00	0,94	0,71	0,97	0,78	1,17	1,00	0,85	0,81
7,3	1,00	0,82	0,63	0,94	0,79	1,00	1,00	1,00	0,69
9,0	1,07	0,76	0,58	0,90	0,77	1,17	0,92	1,00	0,62
10,5	1,14	0,71	0,54	0,90	0,74	1,17	0,83	0,89	0,58
%	-14,3	29,4	45,8	9,7	25,6	-16,7	16,7	11,1	42,3
Entfernung zur Einleitung [km]	23.05. 2019	13.06. 2019	25.07. 2019	29.08. 2019	19.09. 2019	24.10. 2019	14.11. 2019	28.11. 2019	12.12. 2019
1,8	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
3,2	0,81	0,77	0,79	0,80	1,00	0,91	0,96	0,88	1,00
5,8	0,92	0,53	0,29	1,00	1,00	1,04	0,82	0,75	0,97
7,3	1,02	0,60	0,14	1,20	0,60	0,96	0,75	0,71	0,83
9,0	1,04	0,73	0,07	1,00	0,30	0,78	0,71	0,62	0,72
10,5	1,02	0,73	0,06	1,00	0,30	0,74	0,68	0,60	0,70
%	-1,9	26,7	93,6	0,0	70,0	26,1	32,1	40,4	29,9

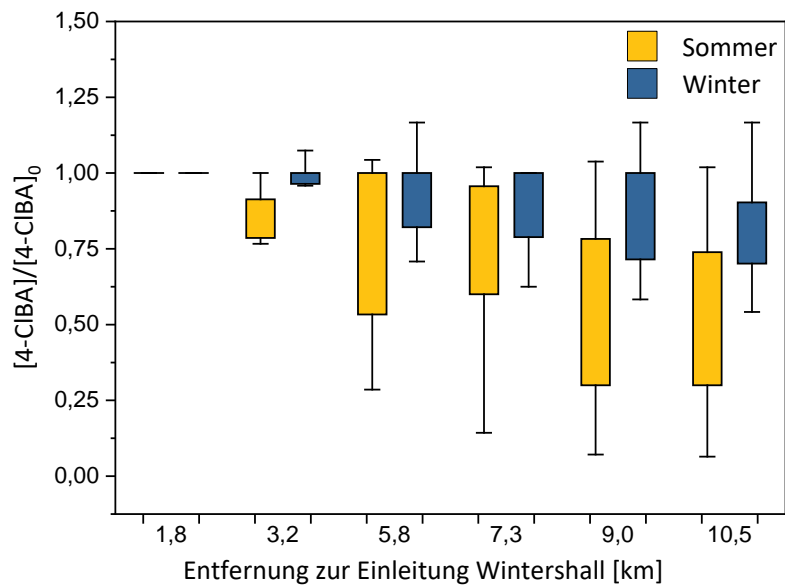


Abbildung A 27: Konzentrationsänderung Sommer/ Winter von 4-Chlorbenzoesäure

Tabelle A 83: Normierte trans-Zimtsäure-Werte mit zugehörigen Konzentrationsabnahmen [%]  
– Abschnitt Hattorf

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	14.11. 2019	12.12. 2019
2,2	1,00	1,00
2,9	0,91	0,89
3,7	0,83	0,75
4,5	0,74	0,93
5,1	0,60	1,07
6,1	0,51	0,79
10,4	0,40	0,46
%	60,0	53,6

Entfernung zur Einleitung Hattorf [km]	14.11. 2019	12.12. 2019
13,7	0,43	0,57
15,1	0,37	0,57
17,7	0,31	0,64
19,2	0,31	0,68
20,9	0,29	0,68
22,4	0,26	0,68
%	74,3	32,1

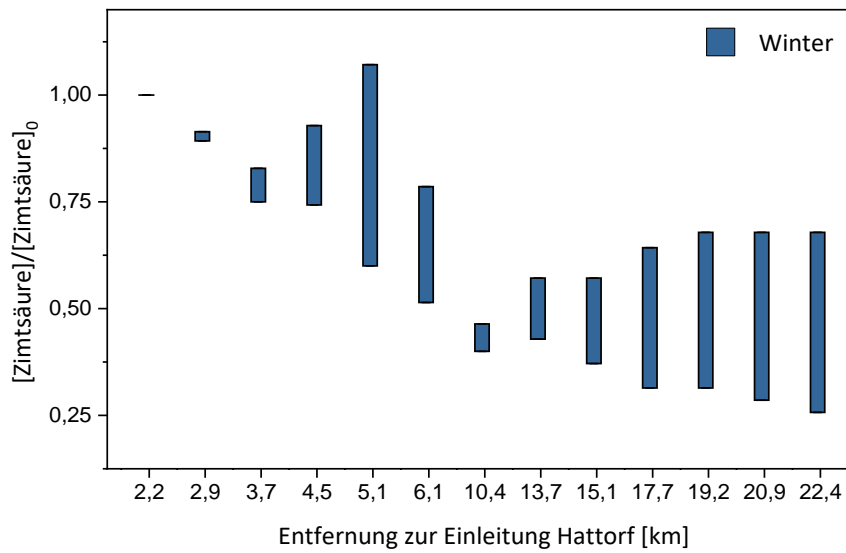


Abbildung A 28: Konzentrationsänderung Winter von trans-Zimtsäure

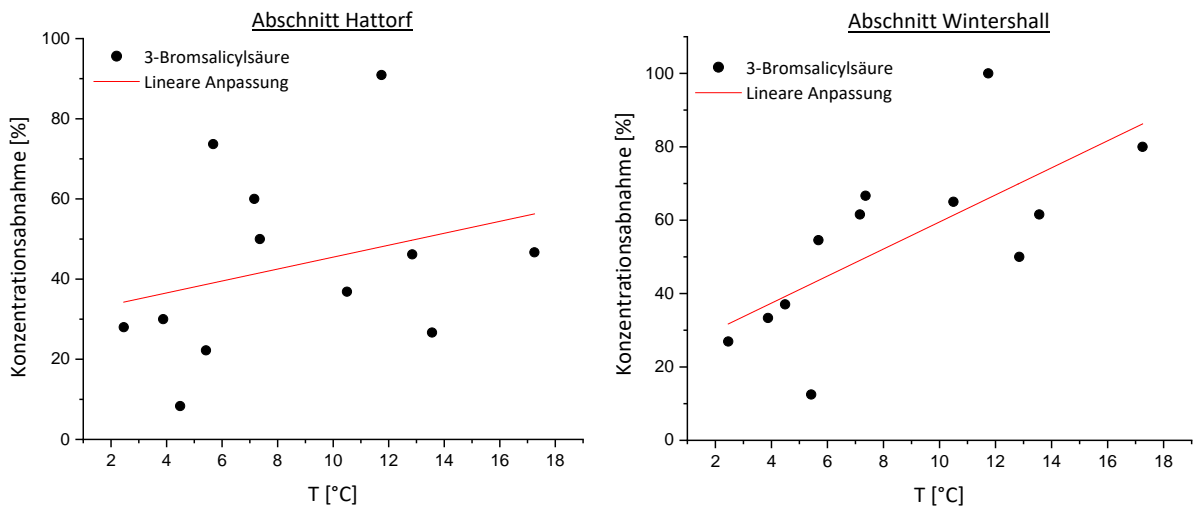


Abbildung A 29: Korrelation Konzentrationsabnahme [%] und Temperatur – 3-Bromsalicylsäure

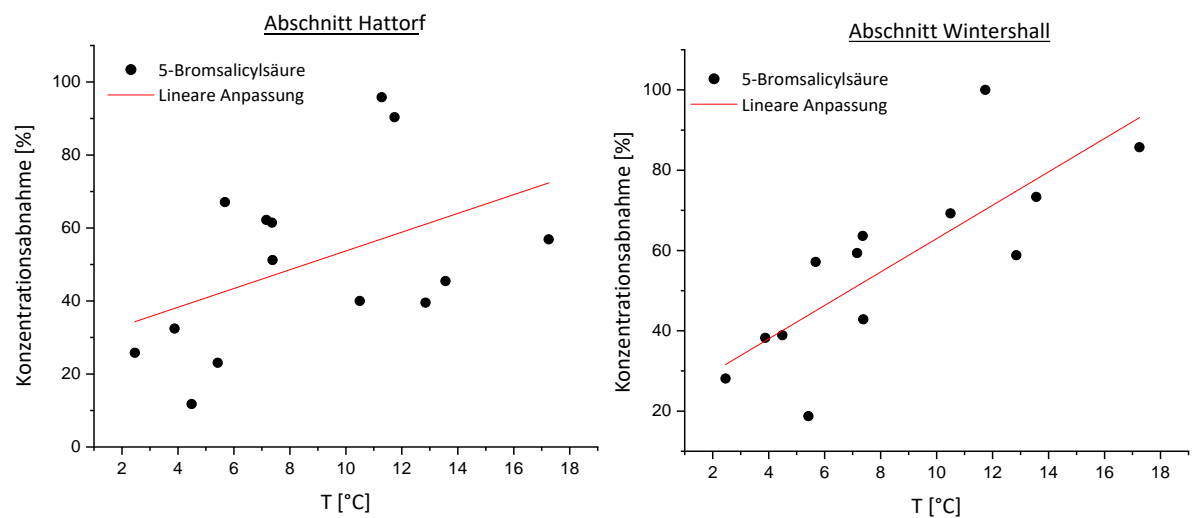


Abbildung A 30: Korrelation Konzentrationsabnahme [%] und Temperatur – 5-Bromsalicylsäure

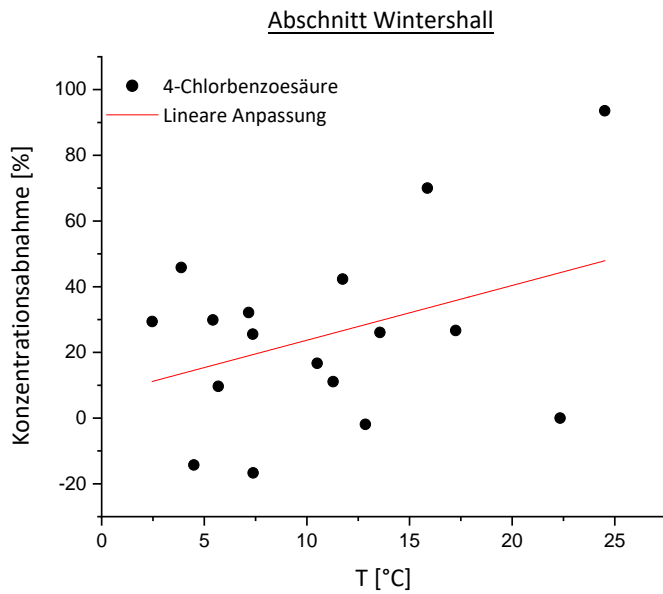


Abbildung A 31: Korrelation Konzentrationsabnahme [%] und Temperatur – 4-Chlorbenzoesäure

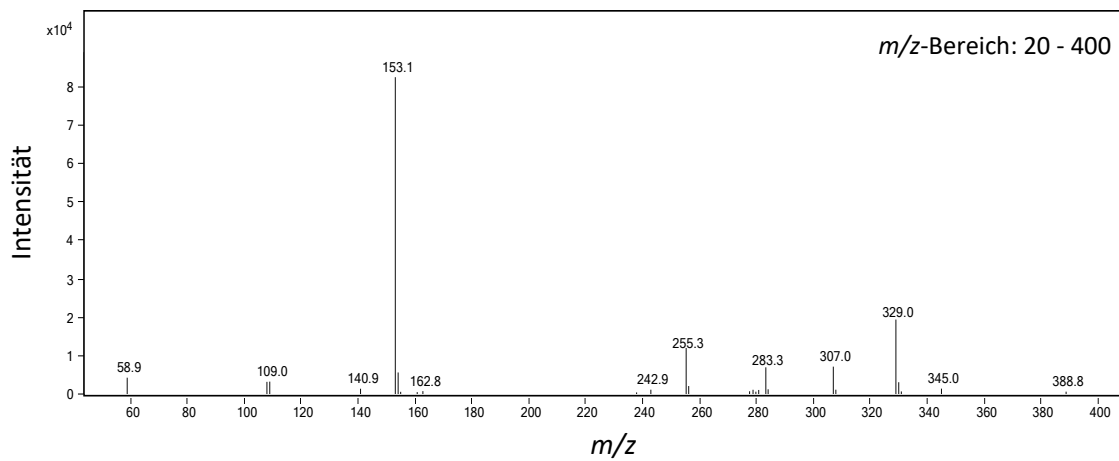


Abbildung A 32: Fullscan Dihydroxybenzoesäuren (negative Ionisation)

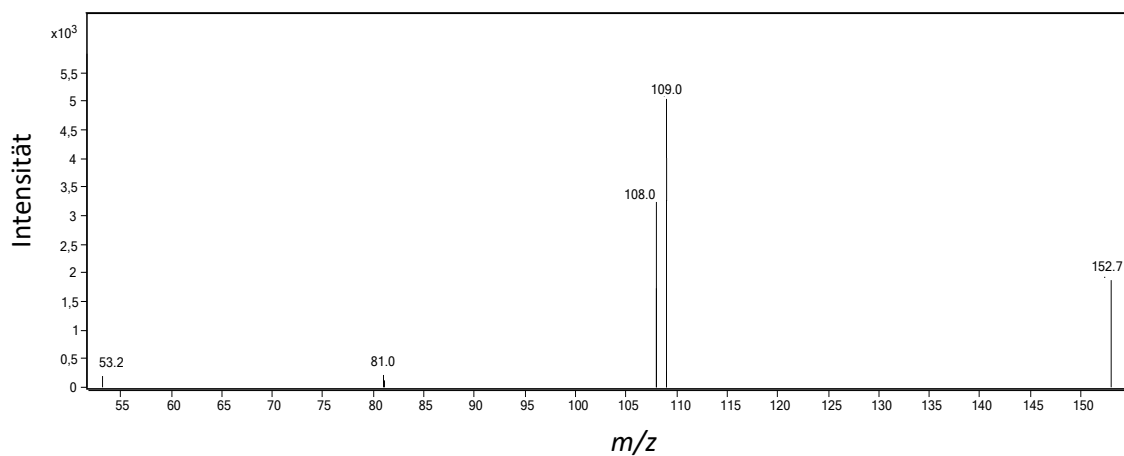


Abbildung A 33: Fragmentmuster Dihydroxybenzoesäuren (negative Ionisation)



**Tabelle A 84: Berechnete RCR-Verhältnisse von der Probenahmestelle in Gerstungen**

RCR Datum	Salicyl- säure	3-Bromsa- licylsäure	5-Bromsa- licylsäure	4-Chlor- benzoe- säure	trans- Zimt- säure	3-Chlor- salicyl- säure	5-Chlor- salicyl- säure
10.01.2019	0,43	0,07	0,10	0,07	-	-	-
24.01.2019	1,49	0,08	0,10	0,03	-	-	-
07.02.2019	0,80	0,09	0,09	0,03	-	0,02	0,03
21.02.2019	0,47	-	0,03	0,06	-	-	-
07.03.2019	0,64	0,02	0,03	0,15	-	-	-
21.03.2019	0,20	0,01	0,02	0,02	-	-	-
04.04.2019	0,28	0,03	0,03	0,02	-	-	-
11.04.2019	0,06	-	-	0,05	-	-	-
09.05.2019	0,00	0,00	0,00	0,03	-	-	-
23.05.2019	0,56	0,03	0,03	0,12	-	-	-
13.06.2019	-	0,01	0,01	0,05	-	-	-
25.07.2019	-	-	-	0,00	-	-	-
29.08.2019	-	-	-	0,01	-	-	-
19.09.2019	-	-	-	0,01	-	-	-
24.10.2019	-	0,02	0,02	0,04	-	-	-
14.11.2019	0,19	0,04	0,06	0,04	0,06	0,02	0,04
12.12.2019	0,37	0,09	0,11	0,22	0,13	-	-

**13. Eidesstattliche Erklärung**

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass die vorliegende Dissertation in allen Teilen von mir selbständig angefertigt wurde und die benutzten Hilfsmittel vollständig angegeben worden sind.

Juliane Apelt

## 14. Lebenslauf

### Juliane Apelt

Geburtsdatum: 23. Dezember 1990 in Eisenach  
Familienstand: ledig  
Staatsangehörigkeit: deutsch

### Schulausbildung

1997 – 2001 Grundschule Herda  
2001 – 2007 Realschule Gerstungen/ Berka/Werra  
2007 – 2011 Abitur und Ausbildung zur Chemisch-Technische-Assistentin

### Akademischer Werdegang

10/2011 – 03/2014 Bachelor of Science (B. Sc.) Chemie an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg  
Bachelor-Thesis: „Bestimmung des Gesamtkohlenstoff-Gehaltes von Industrieabwässern“, FB Umweltchemie

04/2014 – 10/2016 Master of Science (M. Sc.) Chemie an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg  
Master-Thesis: „Entwicklung und Validierung einer LC-MS/MS-Methode zur Bestimmung von ausgewählten Carbonsäuren in salinaren Lösungen“, K+S Analytik- und Forschungszentrum

03/2017 – dato wissenschaftliche Mitarbeiterin im Arbeitskreis Lebensmittelchemie und Umweltchemie an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg mit Dissertation zum Thema: „Austrag und Abbau von Aufbereitungshilfsstoffen aus den Prozessen der Kaliohsalzaufbereitung im Werk Werra am Beispiel ausgewählter Carbonsäuren“, K+S Analytik- und Forschungszentrum