

Estado de conocimiento sobre los procesos de sorción de PPCPs en barros activados

State of knowledge about PPCPs sorption processes in activated sludge

Enrique A Campanella*¹, Guillermo Alejandro Ontiveros²

Palabras clave:
Productos farmacéuticos y de cuidado personal, sorción, barros activados
Keywords:
pharmaceutical and personal care products, sorption, activated sludge

ABSTRACT

Pharmaceutical and personal care products (PPCPs) belong to the group of emerging contaminants whose environment risk had not been detected until a decade ago. Recently, these compounds have been reported to cause adverse effects on wildlife and humans. In addition, most of these compounds ended in wastewater treatment plants where they undergo biodegradation processes, sorption on biomass or stripping. Several researches have been carried out to study PPCP biodegradation. However, scant information about their sorption process is available. Therefore, the aim of this work is to summarize the knowledge about this topic in order to identify the current state of art and possible research directions.

An analysis of literature yields positive results as to the understanding of the involved sorption process mechanisms. Nevertheless, it has been determined that the sorption of many PPCPs on biomass is not ideal. On the contrary, it is a complex process. Consequently, simple models cannot achieve a complete description. Moreover, prediction of environmental partitioning is not precise enough for some cases.

Information on PPCP sorption, its metabolites and their competition is not enough yet to be included in the literature models. More detailed studies of the adsorption process of PPCPs in activated sludge are necessary to improve the modeling and to optimize the prediction of partitioning.

RESUMEN

Los productos farmacéuticos y de cuidado personal (PPCPs) pertenecen al grupo de contaminantes emergentes, cuyo riesgo ambiental ha sido detectado en la última década. En la literatura reciente se han informado los posibles efectos adversos que causan sobre la vida silvestre y humana. La mayoría de esos compuestos terminan en las plantas de tratamiento de aguas residuales, donde sufren procesos de biodegradación, sorción en biomasa o arrastre.

A pesar de que muchas investigaciones relevantes han sido realizadas para estudiar la degradación de PPCPs, la información sobre el proceso de sorción es limitada. Por lo tanto, es objetivo de este trabajo resumir el estado de conocimiento sobre el tema, a los efectos de establecer su estado actual y direccionar futuras investigaciones.

El análisis de los trabajos publicados arroja resultados positivos relacionados al entendimiento de los mecanismos involucrados en el proceso de sorción. Sin embargo, se ha determinado que la sorción de muchos PPCPs en la biomasa no es un proceso ideal, siendo por el contrario de una determinada complejidad. Luego, los modelos simplificados propuestos no logran una descripción completa, más aún, la predicción del particionado ambiental no es lo suficientemente precisa en algunos casos.

La información de la sorción de PPCP, sus metabolitos y la competencia entre ellos, no es suficiente para ser incorporada en los modelos propuestos en la literatura. Estudios más detallados del proceso de adsorción de PPCPs en barros activados son necesarios para mejorar el modelado y optimizar la predicción del particionado.

¹ Universidad Nacional del Litoral, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Santa Fe, Argentina, tquique@santafe-conicet.gov.ar

² Universidad Nacional del Litoral, Termodinámica y Procesos de Ingeniería Ambiental, INTEC, Santa Fe, Argentina, gontiveros@intec.unl.edu.ar

*Autor para correspondencia: tquique@santafe-conicet.gov.ar

INTRODUCCIÓN

El término contaminante emergente ha tomado relevancia en los últimos años y hace referencia a aquellos contaminantes previamente desconocidos o no reconocidos como tales, cuya presencia en el medio ambiente no es necesariamente nueva pero si lo es la preocupación por sus efectos (Wells *et al.*, 2007). Dentro del grupo de contaminantes emergente se encuentran los PPCPs, productos farmacéuticos y de cuidado personal, habitualmente no legislados y de los cuales tampoco abundan datos, dada su presencia a muy bajas concentraciones y la dificultad analítica de medirlos. El término PPCPs (en inglés Pharmaceuticals and Personal Care Products) denota a un grupo de productos utilizados en el cuidado estético, de la salud y el bienestar personal o, también, por la agroindustria para la mejora de la salud y del crecimiento del ganado. Está constituido por miles de sustancias químicas, incluyendo medicamentos terapéuticos, veterinarios, fragancias y cosméticos (EPA, 2010).

Como consecuencia del uso cotidiano que se hace de los productos farmacéuticos y similares, es un hecho concreto que las aguas residuales municipales contengan cantidades significativas de estos compuestos perjudiciales. Parte de estos compuestos también puede atravesar las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR), haciendo que su posterior descarga sea factible de contaminar fuentes de agua de consumo (aguas superficiales, aguas subterráneas) y/o suelos (aplicación de lodos en suelos) (EU, 2001). Investigación adicional sugiere que algunos de estos PPCPs pueden causar daño ecológico y, al no ser legislados, surge la importancia de estudiar su comportamiento. En una PTAR el análisis de la degradación de PPCPs y su sorción en barros es fundamental. Muchas investigaciones relevantes

han sido realizadas para el estudio del comportamiento de los PPCPs en PTARs ubicadas en diferentes países europeos (EU, 2001). Sin embargo, la mayoría de estos estudios han hecho mayor hincapié en el proceso de degradación, consecuentemente, la información sobre el proceso de sorción es limitada. Por otro lado, se han efectuado simulaciones de procesos biológicos para la remoción de PPCPs (Ontiveros *et al.*, 2008), en la cual se utilizaron modelos simplificados que describen el proceso de sorción de una manera sencilla. Surge entonces, la necesidad de buscar un mayor entendimiento de los procesos vinculados a la sorción de estos compuestos orgánicos. A tales efectos se efectuó una revisión bibliográfica de los trabajos publicados sobre el tema con los fines de establecer el estado actual, avances más importantes y aclarar necesidades en materia de investigación.

DISCUSIÓN

Mecanismos involucrados

La inspección del material disponible donde se ha estudiado la sorción de PPCPs muestra que existe un entendimiento del proceso. Larsen *et al.* (2004) afirman que el proceso de sorción, dentro de las plantas de tratamiento, depende de dos mecanismos principales: la absorción y la adsorción (Figura 1). La absorción se produce por las interacciones hidrofóbicas de los grupos aromáticos y/o alifáticos con la membrana celular lipofílica y con la fracción lipídica del barro. La molécula absorbida penetra dentro de la matriz realizando un movimiento tridimensional (Figura 1). Por otro lado, Schwarzenbach *et al.* (2003) afirman que la adsorción depende de las interacciones electrostáticas de los grupos cargados

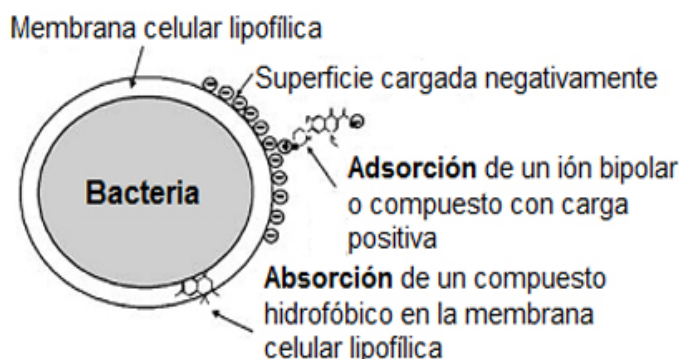


Figura 1. Mecanismos presentes en la sorción de compuestos químicos en una bacteria.

Figure 1. Sorption mechanisms of chemical compounds in a bacterium.

positivamente presentes en los PPCPs con la superficie de la biomasa cargada negativamente. En este caso, la molécula adsorbida se adhiere a una superficie sin penetrar en la biomasa y el resultado es un movimiento bidimensional (Figura 1).

Además, Ternes *et al.* (2004) cita que, debido a que el pH del medio en interés puede afectar el comportamiento eléctrico de algunos compuestos, la especiación de los mismos es un factor que debe considerarse en el mecanismo de adsorción.

Modelos de Sorción y predicción de valores de $K_{d,i}$

El modelo propuesto por la mayoría de los autores que abordaron el modelado de la sorción de PPCPs es una correlación lineal. Larsen *et al.* (2004) y Ternes *et al.* (2004) plantearon en ambos trabajos una relación entre la concentración en la fase acuosa S_i ($\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) y la sorbida X_i ($\text{g}\cdot\text{Kg}^{-1}$):

$$X_i = K_{d,i} \cdot S_i \quad (\text{Ecuación 1})$$

$K_{d,i}$ es el coeficiente de sorción (o coeficiente de distribución agua-lodo) activado para cada compuesto "i" analizado ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$).

Si se busca estimar la cantidad de compuesto sorbido en un lodo secundario dentro de una planta de tratamiento, la

concentración total de barros (X_{ss}) no es la que realmente interesa, sino que es aquella nueva cantidad generada dentro del mismo. Debido a que el tiempo de retención de barros es más alto que el hidráulico, el barro recirculado durante el tratamiento puede considerarse en equilibrio con los compuestos disueltos en la fase acuosa. Por lo tanto solo el nuevo barro activado generado está disponible para la sorción. La proporción PPCP sorbido en el barro activado puede predecirse aproximadamente con la Ecuación 2 propuesta por Ternes *et al.* (2004):

$$\frac{X_i}{X_i + S_i} = \frac{K_{d,i} \cdot X_{ss}}{1 + K_{d,i} \cdot X_{ss}} \quad (\text{Ecuación 2})$$

Los cálculos efectuados a través de la Ecuación 2 se representaron en la Figura 2, en la cual se observa la dependencia del porcentaje sorbido de cuatro PPCPs diferentes en barros activados secundarios contra dos factores importantes a considerar en el estudio de este proceso: la producción de barros y el coeficiente de sorción ($K_{d,i}$).

Los resultados muestran una alta dependencia con la magnitud del coeficiente de sorción; siendo las fragancias, galaxolida (HHCB) y tonalida (AHTN), aquellas que presentan un valor más alto en dicho parámetro y un porcentaje mayor de compuesto sorbido. Contrariamente, el

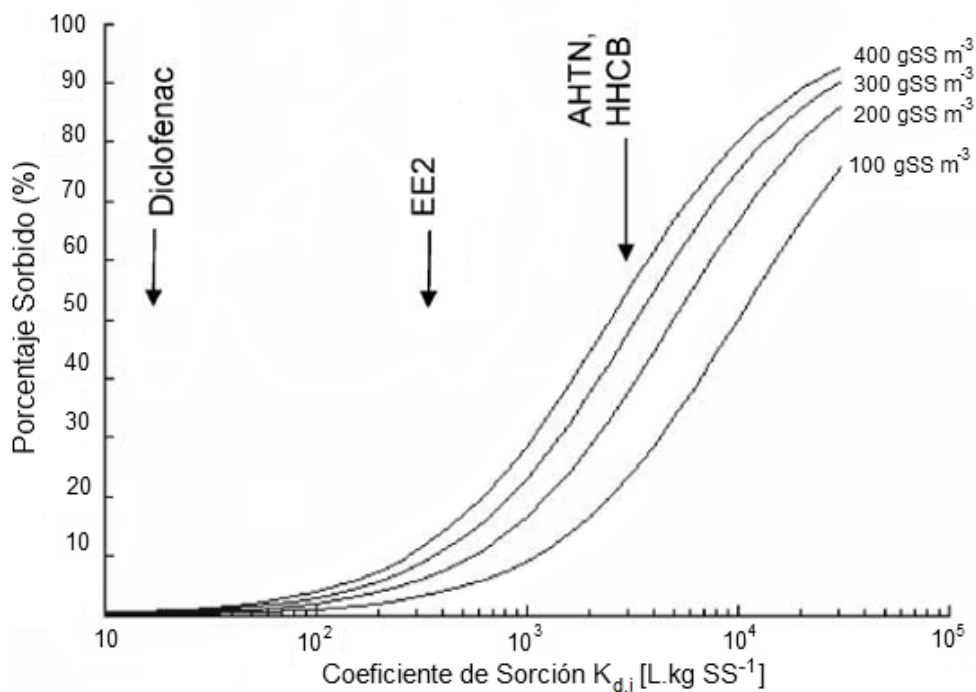


Figura 2. Porcentaje de sorción para 4 compuestos diferentes en función de la producción de barros (100, 200, 300 y 400gSSm⁻³) y el valor de la constante de partición (fuente: Ternes *et al.*, 2004). Compuestos: Galaxolida (HHCB), tonalida (AHTN), 17a-etinilestradiol (EE2) y diclofenac (DCF).

Figure 2. Sorption percent of 4 different compounds as a function of sludge production (100, 200, 300 and 400gSSm⁻³) and the partition constant value (source: Ternes *et al.*, 2004). Compounds: Galaxolide (HHCB), tonalide (AHTN), 17a-ethynylestradiol (EE2) and diclofenac (DCF)

diclofenac (DCF) presenta un valor muy bajo en su constante y un porcentaje sorbido relativamente nulo. Por último, el 17a-etinilestradiol (EE2) presenta una sorción relativamente baja dado que su constante es un orden de magnitud menor respecto al valor de las fragancias. Consecuentemente, si se considera esta alta dependencia del proceso de sorción respecto del valor de la constante de partición, y si además, se contempla el hecho de que para este tipo de compuestos los datos obtenidos por experimentación son escasos, la predicción de constantes de partición se convierte en una herramienta fundamental.

Como se ha mencionado anteriormente los mecanismos que permiten la sorción de compuestos sobre la biomasa están relacionados con dos instancias diferentes: interacciones hidrofóbicas y/o

electrostáticas. En aquellos casos dominados por las interacciones hidrofóbicas, las estimaciones pueden efectuarse a partir de los valores de K_{ow} (coeficiente de partición octanol-agua). Es frecuente el uso de K_{oc} (coeficiente de partición referenciado al carbono orgánico) en lugar de K_{d,i'}, el cual se calcula utilizando la Ecuación 3, que considera la fracción orgánica presente en el barro (*f_{oc}*) y permite uniformizar los valores sin importar la composición característica de cada lodo.

$$K_{d,i} = f_{oc} \cdot K_{oc} \quad (\text{Ecuación 3})$$

Un ejemplo en esta materia son los resultados obtenidos por Carballa *et al.* (2008), que presentaron las siguientes ecuaciones como resultado de su investigación. En las mismas se ha utilizando

el coeficiente de partición octanol-agua dependiente del pH (D_{ow}):

$$\log K_{oc} = 0.74 \cdot \log D_{ow} + 0.15 \quad (\text{Ecuación 4})$$

Para moléculas neutras D_{ow} se obtiene a partir de:

$$\log D_{ow} = \log K_{ow} \quad (\text{Ecuación 5})$$

Para moléculas con grupos funcionales ácidos (como ser OH, COOH):

$$\log D_{ow} = \log K_{ow} + \log \frac{1}{1 + 10^{pH - pK_a}} \quad (\text{Ecuación 6})$$

Para moléculas con grupos funcionales básicos (por ejemplo RNH_2 , R_2NH , RH_3):

$$\log D_{ow} = \log K_{ow} + \log \frac{1}{1 + 10^{pK_a - pH}}$$

(Ecuación 7)

Un hecho interesante, estudiado por Stevens-Garmon *et al.* (2011), es la de aquellos compuestos aromáticos cargados positivamente como la amitriptilina, clozapina, verapamil, risperidona o hidroxicina que presentan altos valores de $K_{d,j}$, ver Tabla 1. Por otro lado, compuestos eléctricamente neutros, como los estrógenos y sus derivados sintéticos (estrona, estradiol y etinilestradiol) también presentan valores relativamente importantes de $K_{d,i}$ y dada su naturaleza eléctrica representan un claro

Compuesto	Barros activados de Denver Metro			Barros activados de Mines Park			Carga a pH 7	$(pK_{a1}, pK_{a2} / \alpha_1, \alpha_2)$
	$K_{d,j}$ (LkgSS ⁻¹)	$\log K_{oc}$		$K_{d,i}$ (LkgSS ⁻¹)	$\log K_{oc}$			
Amitriptilina	4555	±386	4.01	2686	±506	3.78	Positivo	(9.76/99.8)
Clozapina	1642	±180	3.56	1153	±160	3.41	Pos/Neut	(7.35/69.1)
Verapamil	1501	±77	3.52	1232	±149	3.44	Positivo	(9.68/99.8)
Risperidona	861	±119	3.28	669	±70	3.17	Positivo	(8.76/98.3)
Hidroxicina	819	±125	3.26	808	±171	3.25	Pos/Neut	(2.09, 7.82 / 19.65, 67.1)
Etinilestradiol	1550	±223	3.54	1103	±76	3.39	Neutro	(10.3/99.9)
Estrona	645	±87	3.16	607	±48	3.13	Neutro	(10.33/100)
Estradiol	771	±108	3.23	533	±34	3.07	Neutro	(10.33/100)
Gemfibrozilo	45		2	30		1.82	Negativo	(4.42/0.26)
Ibuprofeno	<30			<30			Negativo	(4.88/0.71)
Diclofenac	<31			<31			Negativo	(4.00/0.1)
Naproxeno	<32			<32			Negativo	(4.19/0.15)
Sulfametoxazol	<33			<33			Neut/Neg	(6.16/12.6)

Tabla 1. Valores de $K_{d,i}$ y K_{oc} obtenidos por Stevens-Garmon *et al.* (2011), para diferentes compuestos en barros activados pertenecientes a dos plantas de tratamiento diferentes.

Figure 3. $K_{d,i}$ and K_{oc} values obtained by Stevens-Garmon *et al.* (2011) for different compounds in activated sludge from 2 different treatment plants

caso de sorción por hidrofobicidad.

Los números de la Tabla 1 muestran que compuestos con cargas positivas se sorben a la superficie sólida de lodo activado mediante una interacción electrostática. Dado que los microorganismos presentan cargas negativas en su superficie, los mismos funcionan como intercambiadores catiónicos atrapando compuestos con cargas positivas. Por lo tanto, es de esperarse una mayor ligazón si se compara con el caso de un compuesto

neutro. A diferencia de la de los compuestos hidrofóbicos, donde la contribución por interacciones electrostáticas es importante, los compuestos con cargas positivas no poseen un método de estimación precisa para la constante de sorción, y el valor de $K_{d,i}$ o K_{oc} debe ser encontrado empíricamente. La diferencia entre las magnitudes para los diferentes casos puede observarse en la Figura 3, donde Stevens-Garmon *et al.* (2011) presentan los valores de Dow calculados versus los valores medidos de K_{oc}

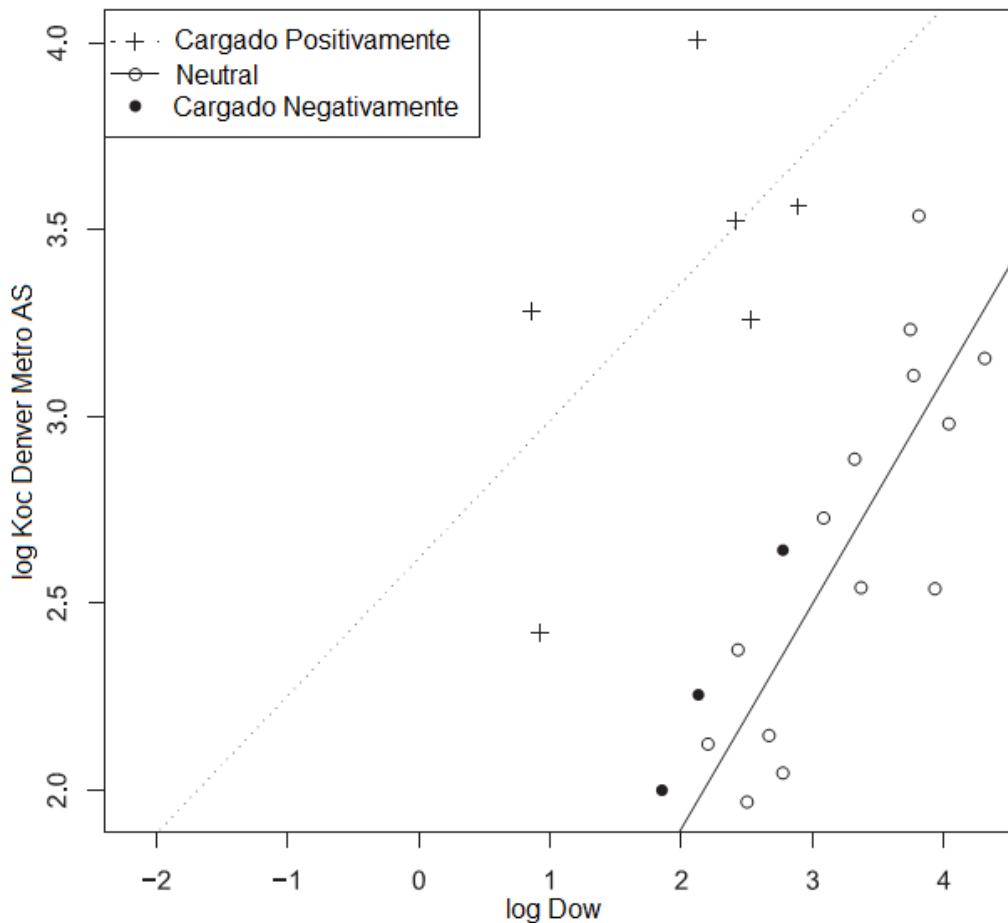


Figura 3 Valores de $\log K_{oc}$ versus $\log D_{ow}$ en una planta en Denver para compuestos con diferente tipo de carga (fuente: Stevens-Garmon *et al.*, 2011).

Figure 3. $\log K_{oc}$ versus $\log D_{ow}$ values for compounds with different charge type from a plant in Denver (source: Stevens-Garmon *et al.*, 2011)

en una planta en Denver para compuestos con diferente tipo de cargas.

Como puede apreciarse en la Figura 3 los compuestos neutros o negativamente cargados se ajustan ordenadamente estableciendo una relación lineal. Por otro lado, los compuestos con carga positiva se ven aislados en la gráfica, con una correlación observada débil ($R^2 = 0.61$, $n = 6$), sugiriendo que parte de la sorción de este tipo de compuestos está relacionada con interacciones hidrofóbicas. Sin embargo, debido a que el valor de $\log K_{oc}$ es superior al de compuestos no iónicos o cargados negativamente (con similares valores de $\log K_{ow}$) se manifiesta la presencia de otros tipos de mecanismos adicionales de sorción (interacciones electrostáticas) que alteran el valor de $K_{d,i}$ y el supuesto comportamiento lineal encontrado, existiendo una diferencia más marcada si es que esos mecanismos adicionales son dominantes en el proceso.

Evaluación de LFERs

Las relaciones lineales de energía libre (LFERs) son habitualmente muy utilizadas en el campo de la predicción de valores para las constantes de partición ($\log K_{oc}$), normalmente se escriben en función de otra constante más conocida o fácil de medir ($\log K_{ow}$). A partir de tres modelos existentes basados en sistemas con suelos, ecuaciones 8, 9 y 10; Stevens-Garmon *et al.* (2011) compararon la bondad de cada ecuación, para un grupo compuestos no iónicos cuyos valores se midieron en una planta de barros activados en Denver.

$$\log K_{oc} = 0.52 \cdot \log K_{ow} + 1.02 \quad (\text{Sablic } et al., 1995) \\ (n = 390, R^2 = 0.83)$$

(Ecuación 8)

$$\log K_{oc} = 0.679 \cdot \log K_{ow} + 0.663 \quad (\text{Gerstl, 1990}) \\ (n = 419, R^2 = 0.83)$$

(Ecuación 9)

$$\log K_{oc} = 0.6 \cdot \log K_{ow} + 0.84 \quad (\text{Huuskonen, 2003}) \\ (n = 403, R^2 = 0.79)$$

(Ecuación 10)

Como resultado del estudio los autores obtuvieron que el modelo propuesto por Sablic *et al.* (1995) es el que se ajustó a los datos con mayor precisión (Figura 4), presentado un valor de RECM = 0.296 (raíz del error cuadrático medio). Por lo tanto, a pesar de que el modelo está basado en un sistema con suelo, puede resultar útil para predecir posibles valores de K_{oc} en barros activados.

Por otro lado, las mismas mediciones efectuadas por los autores permitieron obtener otra correlación basada en un sistema con barros activados en lugar de uno basado en suelos:

$$\log K_{oc} = 0.602 \cdot \log K_{ow} + 0.695 \quad (\text{Stevens-Garmon } et al., 2011) \\ RECM = 0.285$$

(Ecuación 11)

Carballa *et al.* (2008) propusieron otro modelo (Ecuación 12) para la sorción de PPCPs en un sistema de barros activados en su etapa de digestión (tratamiento terciario), que analizaría la respuesta del proceso al cambio de las condiciones de operación:

$$\log K_{oc} = 0.602 \cdot \log K_{ow} + 0.695 \quad (\text{Carballa } et al., 2008)$$

(Ecuación 12)

Los resultados obtenidos por Carballa *et al.* (2008) confirman que la sorción de PPCPs, bajo estas condiciones, no difieren de los valores obtenidos en estudios anteriores realizados con lodos primarios y secundarios; es decir, que bajo diferentes condiciones de operación (temperatura) y diferentes propiedades de barros, las propiedades de sorción de los compuestos traza no se ven afectadas. Al igual que otros autores (Hyland *et al.*, 2012; Hörsing *et al.*, 2011), los

valores estimados a través de una ecuación LFER resultan aceptables para compuestos que interactúan hidrofólicamente, fallando en la predicción del comportamiento de compuestos iónicos o polares.

Otro aspecto observado por Urase & Kikuta (2005) es la dependencia del proceso de sorción bajo diferentes condiciones de pH. La Figura 5a muestra los resultados obtenidos a pH = 6.7, mientras que la Figura 5b lo hace para pH = 5.6. En condiciones neutras, la relación entre $\log(K_{d,i})$ y $\log(K_{ow})$ es lineal para compuestos neutros como 17 b-estradiol (E2), 17a-etinilestradiol (EE2), bisfenol A (BPA), estrona (E1), benzofenona

(BZP), propifenazona (PPZ) y carbamazepina (CBZ), los cuales no presentan grupos carboxilos hidrofílicos (Figura 5a). Por otro lado, la relación encontrada no fue lineal para compuestos como gemfibrozilo (GFZ), ácido clofbrico (CA), ibuprofeno (IBP), fenoprofeno (FEP), ketoprofeno (KEP), naproxeno (NPX), diclofenac (DCF) e indometacina (IDM), esto se debe a que estos fármacos son iones en condiciones neutras de pH (Figura 5a). Sin embargo, bajo condiciones ácidas de pH, estos compuestos se encuentran eléctricamente neutros y la sorción es dominada completamente por interacciones hidrofólicas, presentando una relación lineal entre $\log(K_{d,i})$ y $\log(K_{ow})$ (Figura 5b).

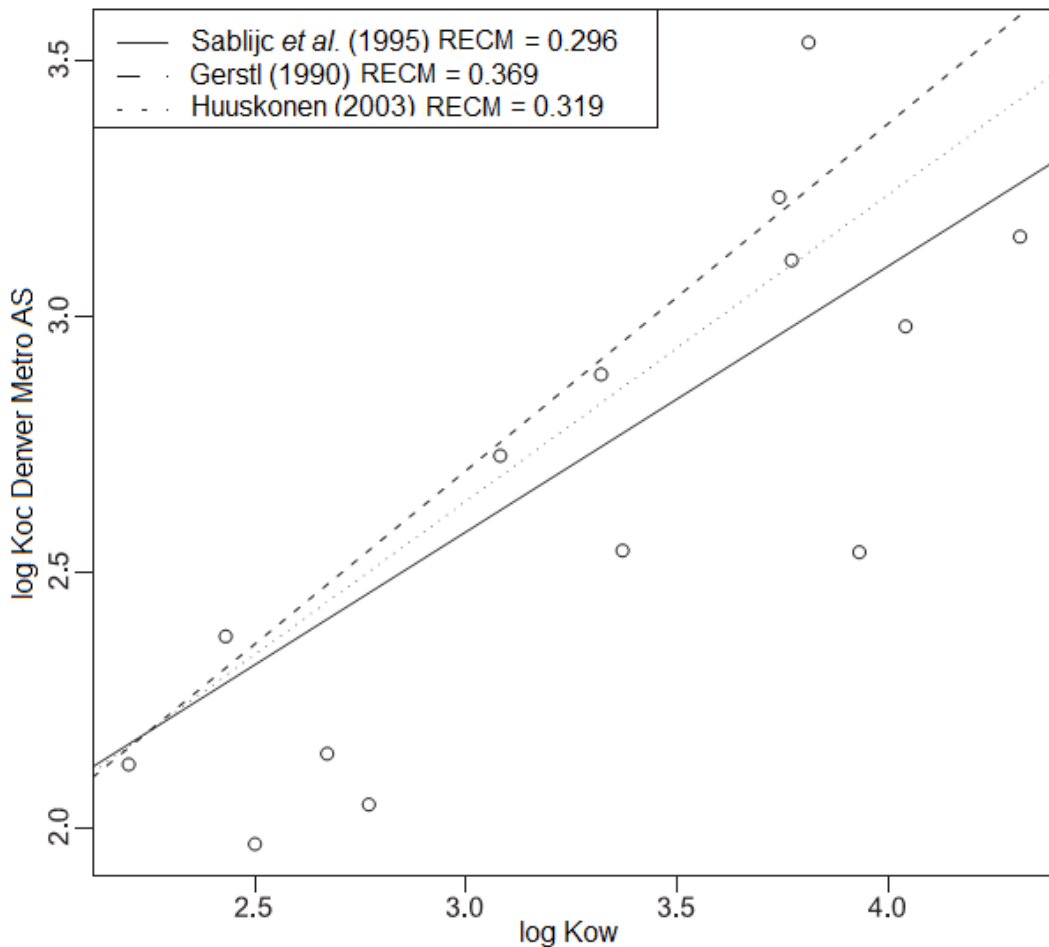


Figura 4 Ajuste de modelos previamente publicados a los valores obtenidos de K_{oc} en la planta de tratamiento Denver Metro (fuente: Stevens-Garmon et al., 2011).

Figure 4. Adjustment of previously published models to K_{oc} values obtained at Denver Metro treatment plant (source: Stevens-Garmon et al., 2011)

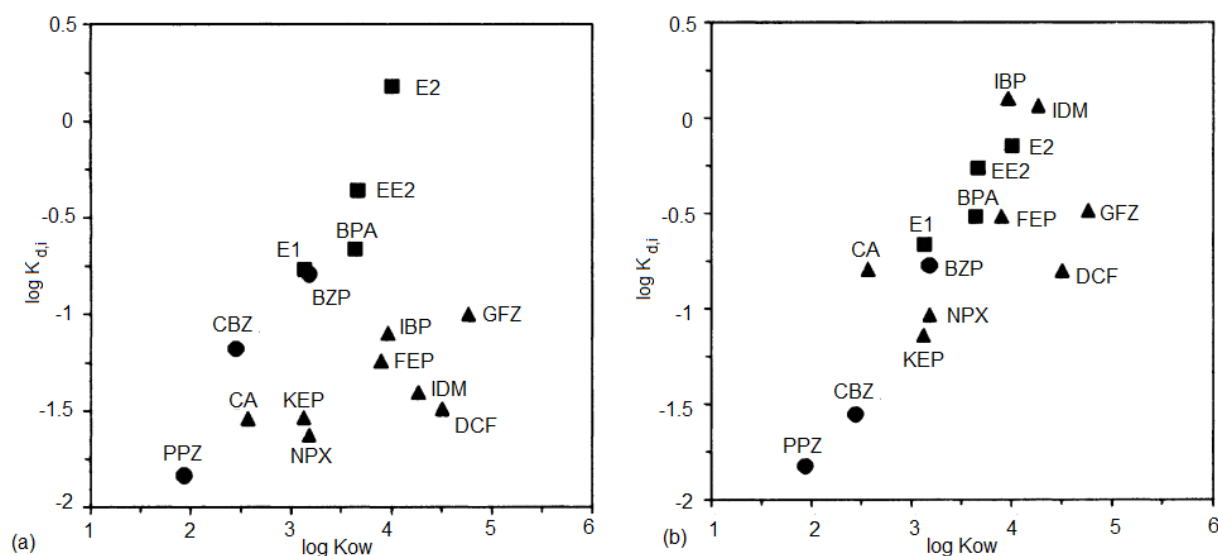


Figura 5. Valores de $\log K_{di}$ versus $\log K_{ow}$ para compuestos con diferente tipo de cargas y para diferentes condiciones: (a) pH=6.7, (b) pH=5.6 (fuente: Urase & Kikuta, 2005). Compuestos: 17 b-estradiol (E2), 17a-etinilestradiol (EE2), bisphenol A (BPA), estrona (E1), benzofenona (BZP), propifenazona (PPZ) y carbamazepina (CBZ), gemfibrozilo (GFZ), ácido clofibrico (CA), ibuprofeno (IBP), fenoprofeno (FEP), ketoprofeno (KEP), naproxeno (NPX), diclofenac (DCF) e indometacina (IDM).

Figure 5. Values of $\log K_{di}$ versus $\log K_{ow}$ for compounds with different charge types and different conditions: (a) pH=6.7, (b) pH=5.6 (source: Urase & Kikuta, 2005). Compounds: 17 b-estradiol (E2), 17a-ethynylestradiol (EE2), bisphenol A (BPA), estrone (E1), benzophenone (BZP), propyphenazone (PPZ) y carbamazepine (CBZ), gemfibrozil (GFZ), clorifibric acid (CA), ibuprofen (IBP), fenoprofen (FEP), ketoprofen (KEP), naproxen (NPX), diclofenac (DCF) and indomethacin (IDM)

Finalmente, conviene destacar la aplicación reciente de métodos multiparamétricos (ppLFR) del tipo propuesto por Nguyen *et al.* (2005) o la estimación de K_{oc} en la sorción de pesticidas y otros compuestos orgánicos multifuncionales en suelos (Bonner & Goss, 2011a, b). Si bien, los resultados obtenidos por Card *et al.* (2012) para la sorción de hormonas naturales han demostrado un mejor ajuste empleando una LFER en lugar de utilizar relaciones multiparamétricas, esta diferencia podría explicarse por las limitaciones en la estimación de los predictores usados en la regresión y a la incertidumbre vinculada a este tipo de compuestos escasamente estudiados.

CONCLUSIÓN

Los estudios efectuados han determinado que la sorción de muchos PPCPs en la biomasa no es ideal sino un proceso relativamente complejo, principalmente para aquellos compuestos que presentan cargas positivas. Los compuestos cuya sorción depende sólo de interacciones hidrofóbicas (eléctricamente neutros o negativos), donde no intervienen interacciones electrostáticas entre la molécula y la superficie de la biomasa, han mostrado un comportamiento más

simple. Consecuentemente, los modelos tipo LFERs propuestos por los diferentes autores logran una descripción adecuada para los compuestos neutros y cargados negativamente, pero deficiente para compuestos que presentan cargas positivas. Las futuras investigaciones deben apuntar a incluir el factor electrostático dentro del modelado del proceso de sorción, e incluir esa propiedad dentro de los predictores en una relación de energía libre multiparamétrica (ppLFER). Para hacer esto posible es necesaria mayor información sobre la sorción de los PPCPs y sus metabolitos.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue realizado gracias al apoyo económico de la Universidad Nacional del Litoral (UNL) y el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET).

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Bronner G & Goss K. 2011. Predicting sorption of pesticides and other multifunctional organic chemicals to soil organic carbon. *Environmental Science Technology*, 45: 1307–1312
- Bronner G & Goss K. 2011. Sorption of organic chemicals to soil organic matter: Influence of soil variability and pH dependence. *Environmental Science Technology*, 45: 1313–1319
- Carballa M, Fink G, Omil F, Lema JM & Ternes T. 2007. Determination of the solid–water distribution coefficient (Kd) for pharmaceuticals, estrogens and musk fragrances in digested sludge. *Water Research*, 42: 287–295
- Card M, Chin YP, Lee L & Khan B. 2012. Prediction and experimental evaluation of soil sorption by natural hormones and hormone mimics. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 60: 1480–1487
- EPA (Environmental Protection Agency). 2010. PPCPs: Basic Information. <http://www.epa.gov/ppcp/basic2.html>
- EU (European Union). 2001. Project POSEIDON <http://poseidon.bafg.de/servlet/is/2884/>
- Gerstl Z. 1990. Estimation of organic chemical sorption by soils. *Journal of Contaminant Hydrology*, 6: 357–375
- Hörsing M, Ledin A, Grabic R, Fick J, Tysklind M, Jansen JC & Andersen H. 2011. Determination of sorption of seventy-five pharmaceuticals in sewage sludge. *Water Research*, 45: 4470–4482
- Huuskonen J. 2003. Prediction of soil sorption coefficient of diverse organic chemicals from molecular structure. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 43: 1457–1462
- Hyland K, Dickenson E, Drewes J & Higgins C. 2012. Sorption of ionized and neutral emerging trace organic compounds onto activated sludge from different wastewater treatment configurations. *Water Research*, 46: 1958–1968
- Larsen TA, Lienert J, Joss A & Siegrist H. 2004. How to avoid pharmaceuticals in the aquatic environment. *Journal of Biotechnology*, 113: 295–304

- Nguyen T, Goss K & Ball W. 2005. Polyparameter linear free energy relationships for estimating the equilibrium partition of organic compounds between water and the natural organic matter in soils and sediments. *Environmental Science & Technology*, 39 (4): 913–924
- Ontiveros GA, Alberto LR & Campanella EA. 2008. Evaluación del comportamiento de PPCPs en dos procesos: Ludzack-Ettinger y Ludzack-Ettinger modificado. *VI Congreso de Medio Ambiente, AUGM. UFSC, São Carlos, Brasil*: A2–085
- Sabljic A, Güsten H, Verhaar H & Hermens J. 1995. QSAR modeling of soil sorption. Improvements and systematics of log K_{oc} vs. log K_{ow} correlations. *Chemosphere*, 31: 4489–4514
- Schwarzenbach RP, Gschwend PM & Imboden DM. 2003. Sorption I: General introduction and sorption processes involving organic matter. P 275-330 En: Wiley Interscience (ed.) *Environmental Organic Chemistry 2^{ed.}*. Hoboken, New Jersey, USA
- Stevens-Garmon J, Drewes JE, Khan SJ, McDonald JA & Dickenson ERV. 2011. Sorption of emerging trace organic compounds onto wastewater sludge solids. *Water Research*, 45: 3417–3426
- Ternes TA, Herrmann N, Bonerz M, Knacker T, Siegrist H & Joss A. 2004. A rapid method to measure the solid–water distribution coefficient (K_d) for pharmaceuticals and musk fragrances in sewage sludge. *Water Research*, 38: 4075–4084
- Urase T & Kikuta T. 2005. Separate estimation of adsorption and degradation of pharmaceutical substances and estrogens in the activated sludge process. *Water Research*, 39: 1289–1300
- Wells MJM, Fono LJ & Pellegrin ML. 2007. Emerging Pollutants. *Water Environment Research*, 79 (10): 2192-2209