



---

7<sup>mo</sup>  
Congreso de  
Medio Ambiente

Actas 7mo Congreso de Medio Ambiente AUGM  
22 al 24 de mayo de 2012. UNLP. La Plata Argentina

---

## ESTADO DE CONOCIMIENTO SOBRE LOS PROCESOS DE SORCIÓN DE PPCPS EN BARROS ACTIVADOS

State of knowledge about PPCP's sorption processes in activated sludge

Guillermo Alejandro Ontiveros <sup>a\*</sup>, Enrique Ángel Campanella <sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Termodinámica y Procesos de Ingeniería Ambiental. INTEC, Güemes 3450, Santa Fe,  
Argentina.

<sup>b</sup> Universidad Nacional del Litoral, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Santa Fe,  
Argentina.

\* Autor para correspondencia: [gontiveros@intec.unl.edu.ar](mailto:gontiveros@intec.unl.edu.ar)

---

*Palabras clave: Fármacos y productos de cuidado personal, sorción, barros activados*

*Keywords: Pharmaceutical and Personal Care Products, sorption, activated sludge*

*Título abreviado: Sorción de PPCPs*

## **ABSTRACT**

The 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 human. In addition, the majority of these compounds finish in wastewater treatment plants, where it may suffer biodegradation processes, sorption on biomass or stripping.

Many relevant researches have been carried out for study PPCPs biodegradation; however, scant information about their sorption process is available. Therefore, the objective of this work is summarized the knowledge about this topic in order to identify the current state of art and to clarify possible research directions.

An inspection of existing material yields to positive results related with the understanding of the involved mechanisms. Nevertheless, has been determined that the sorption of many PPCPs in biomass is not ideal, quite the opposite is a complex process. As a result of this complexity simplified models proposed cannot achieve a complete description, even more; the prediction of environmental partitioning is not precise enough for some cases.

A more detailed study of the adsorption process of PPCPS in activated sludge is necessary to improve the models proposed and to optimize the prediction of partitioning. Information on the sorption of PPCP, its metabolites, and competition between them is not enough yet to be incorporated into these models.

## **RESUMEN**

Los farmacéuticos y productos de cuidado personal (PPCPs) pertenecen al grupo contaminantes emergentes, su riesgo ambiental no se había detectado hasta hace una década. Recientemente, han sido reportados de causar efectos adversos sobre la vida silvestre y humana. Además, la mayoría de estos compuestos derivan en plantas de tratamiento de aguas residuales, donde pueden sufrir procesos de biodegradación, sorción en biomasa o *stripping*.

Muchas investigaciones relevantes han sido realizadas para el estudio de la degradación de PPCPs, no obstante, 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 aclarar necesidades en materia de investigación y direcciones.

La inspección del material disponible arroja resultados positivos relacionados al entendimiento de los mecanismos involucrados. Sin embargo, se ha determinado que la sorción de muchos PPCPs en la biomasa no es ideal, sino un proceso relativamente complejo. Como resultado de esta complejidad los modelos simplificados propuestos no logran una descripción completa, más aún, la predicción del particionado ambiental no es suficientemente precisa en algunos casos.

Un estudio más detallado del proceso de adsorción de PPCP en barros activados es necesario para mejorar los modelos propuestos en diversos trabajos y optimizar la predicción del particionado. La información de la sorción de PPCP, sus metabolitos, y la competencia entre ellos, aún no es suficiente para ser incorporada en dichos modelos.

## **INTRODUCCIÓN**

El término contaminante emergente ha tomado mucha importancia en los últimos años y hace referencia a los contaminantes previamente desconocidos o no reconocidos como tales cuya presencia en el medio ambiente no es necesariamente nueva pero si la preocupación por sus posibles efectos (Wells *et al.*, 2007). Estos contaminantes son escasamente estudiados debido a la escasez de información y/o a la dificultad analítica de medirlos. Dentro de este grupo se encuentran los PPCPs, que habitualmente no son legislados y de los cuales también no abundan datos debido a que se presentan en muy bajas concentraciones. El término PPCPs (en inglés Pharmaceuticals and Personal Care Products) hace referencia a un grupo de productos

utilizados en el cuidado estético, del bienestar personal o por la agroindustria para la mejora de la salud y del crecimiento del ganado. Constituido por miles de sustancias químicas, este grupo incluye medicamentos terapéuticos, veterinarios, fragancias y cosméticos (EPA, 2010).

Por otro lado, se sabe que las aguas residuales municipales contienen una gran cantidad de fármacos y productos similares, esto es consecuencia del uso cotidiano de diferentes productos en poblaciones de todo el mundo. Alguna proporción de estos compuestos pueden atravesar las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR), luego su posterior descarga es factible decontaminar fuentes de agua de consumo (aguas superficiales, aguas subterráneas) y/o suelos (aplicación de lodos en suelos) (EU, 2001).

La investigación adicional sugiere que algunos de estos PPCPs pueden causar daño ecológico y al no ser legislados, surge la importancia de analizar su comportamiento. Además, si se tiene en cuenta que una PTAR es una fuente habitual de PPCPs el análisis de la degradación y de la sorción en barros resulta 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, por lo tanto la información sobre el proceso de sorción es limitada.

## **METODOLOGÍA**

En trabajos anteriores se han efectuado simulaciones de procesos biológicos para la remoción de PPCPs (Ontiveros *et al.*, 2008), en la cual se utilizaron modelos

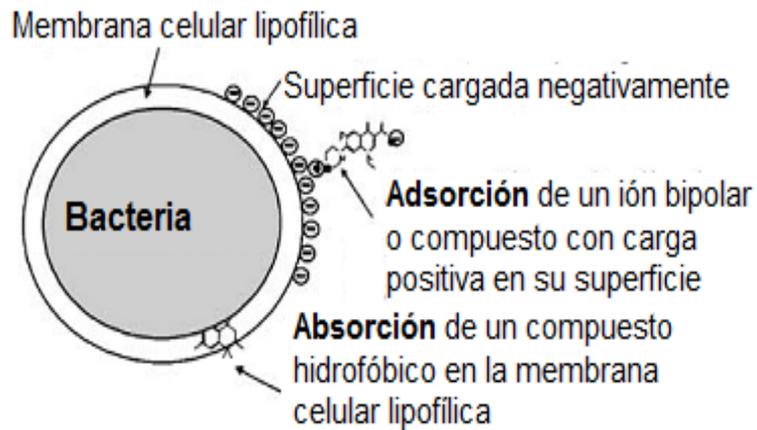
simplificados que describen el proceso de sorción de una manera sencilla. Surge entonces la necesidad de buscar un mayor entendimiento de los procesos vinculados a la sorción de estos compuestos orgánicos. A tales efectos se efectuó una revisión bibliográfica de los trabajos disponibles con los fines de establecer el estado actual, avances más importantes y aclarar necesidades en materia de investigación.

## **RESULTADOS**

### **Mecanismos involucrados**

La inspección del material disponible donde se ha estudiado la sorción de PPCPs ha arrojado resultados positivos relacionados al 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.

Como se observa en la 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, espacialmente la molécula absorbida penetra dentro de una matriz realizando un movimiento tridimensional. Por otro lado, Schwarzenbach *et al.* (2003) afirman que la adsorción depende de las interacciones electrostáticas de los grupos cargados positivamente presentes en los PPCPs con la superficie de biomasa cargada negativamente, en este caso, la molécula se adhiere a una superficie sin penetrar en la biomasa y el resultado es un movimiento de dos dimensiones.



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

**Figure 1.** Mechanisms involved in chemical compounds sorption in bacteria or biomass.

Finalmente, 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 aproximadamente 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  $X_i$  ( $\text{g}\cdot\text{Kg}^{-1}$ ):

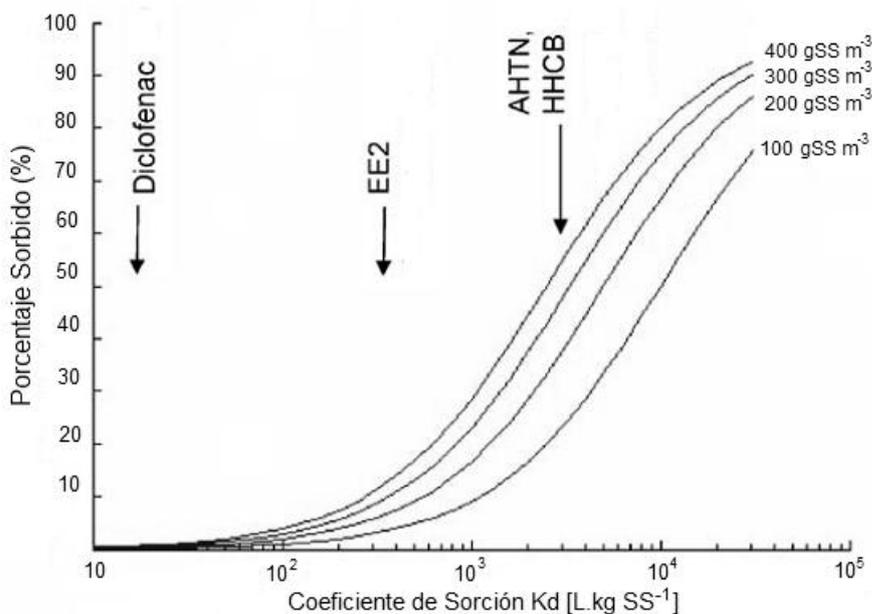
$$X_i = K_{D,i} \cdot S_i \quad (1)$$

$K_{D,i}$  es coeficiente de distribución agua-lodo activado para cada compuesto “i” analizado ( $L.kg^{-1}$ ). 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 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 cantidad proporción sorbida en el barro activado puede predecirse aproximadamente a través de la siguiente ecuación propuesta por Ternes *et al.* (2004):

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

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 diferentes PPCPs en barros activados secundarios *versus* dos factores importantes a considerar en el estudio de este proceso: la producción de barros y el coeficiente de partición ( $K_{d,i}$ ).



**Figura 2.** Porcentaje de sorción para 4 compuestos diferentes en función de la producción de barros 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 and the partition constant value (source: Ternes *et al.*, 2004). Compounds: galaxolide (HHCB), tonalide (AHTN), 17a-ethynylestradiol (EE2) and diclofenac (DCF).

Los resultados muestran una alta dependencia con la magnitud de la constante de sorción, siendo las fragancias, galaxolida (HHCB) y tonalida (AHTN), aquellas que presentan valores más altos en la misma y porcentaje más grandes de sorción. Contrariamente, el diclofenac (DCF) presenta un valor muy bajo en su constante y un porcentaje sorbido relativamente nulo, mientras que el 17a-etinilestradiol (EE2) presenta 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, además, si 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) o mejor aun utilizando  $K_{oc}$  (coeficiente de partición referenciado al carbono orgánico). 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 que han utilizado el coeficiente de distribución octanol-agua dependiente del pH ( $D_{ow}$ ):

$$\log K_{oc} = 0.74 \cdot \log D_{ow} + 0.15 \quad (3)$$

Para moléculas neutras:

$$\log D_{ow} = \log K_{ow} \quad (4)$$

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

$$\log D_{ow} = \log K_{ow} + \log \frac{1}{1 + 10^{pH - pKa}} \quad (5)$$

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

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

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  $K_d$  (Tabla 1). Por otro lado, compuestos eléctricamente neutros, como los estrógenos y sus derivados sintéticos (estrone, estradiol y etinilestradiol) también presentan valores relativamente importantes de  $K_d$  y dada su naturaleza eléctrica representan un caso claro de sorción por hidrofobicidad.

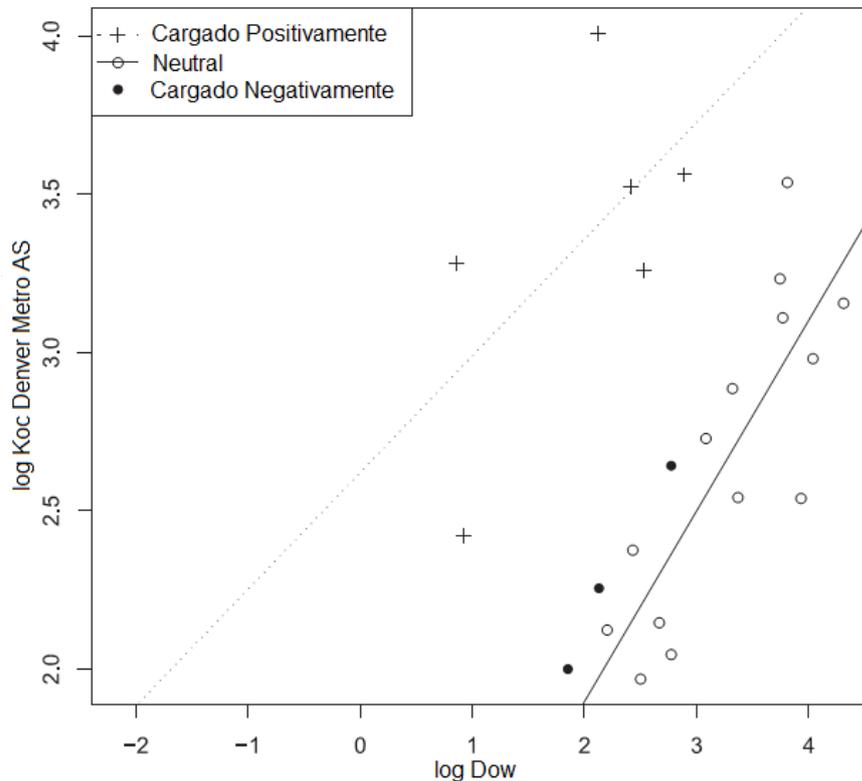
**Tabla 1.** Valores de  $K_d$  y  $K_{oc}$  obtenidos por Stevens-Garmon *et al.* (2011), para diferentes compuestos en barros activados pertenecientes a dos plantas de tratamiento diferentes.

**Table 1.**  $K_d$  and  $K_{oc}$  values obtained by Stevens-Garmon *et al.* (2011), for different compounds in activated sludge corresponding to 2 different treatment plants.

Compuesto	Barros activados de Denver Metro			Barros activados de Mines Park			Carga a pH 7	$(pK_{a1}, pK_{a2}/\alpha_1, \alpha_2)$
	$K_d$ (L.kgSS <sup>-1</sup> )	$\log K_{oc}$		$K_d$ (L.kgSS <sup>-1</sup> )	$\log K_{oc}$			
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)
Hidroxizina	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	(10.33 / 99.9)
Estrone	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	( 6.16/12.65)

Esto demuestra 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 intercambiador

catiónicos, atrapando los compuestos con cargas positivas y con lo que se espera una mayor ligazón si se compara con el caso de un compuesto neutro. A diferencia de la sorción de éste último (compuestos hidrofóbicos), cuando la contribución por interacciones electrostáticas es importante, no existe un método de estimación precisa y el valor de  $K_d$  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) representa los valores de  $D_{ow}$ , calculados a través de Marvin (Chem Axon, 2010), versus los valores medidos de  $K_{oc}$  en una planta en Denver para compuestos con diferente tipo de cargas:



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

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

Como puede apreciarse 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, si bien su correlación fue observada ( $R^2=0.61$ ,  $n = 6$ ) se sugiere 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 cargadas negativamente (aún con similar  $\log K_{ow}$  valores), indicando que es necesaria la presencia de otros tipos de mecanismos adicionales de sorción (interacciones electrostáticas) que alteren el valor de  $K_d$  y el supuesto comportamiento lineal encontrado, existiendo una diferencia más marcada si es que esos otros mecanismos 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 ( $\log K_{oc}$ ), 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 7,8 y 9; Stevens-Garmon *et al.* (2011) comparó la bondad de cada aproximación, para un grupo compuestos no iónicos cuyos valores se midieron en una planta de barros activados en Denver.

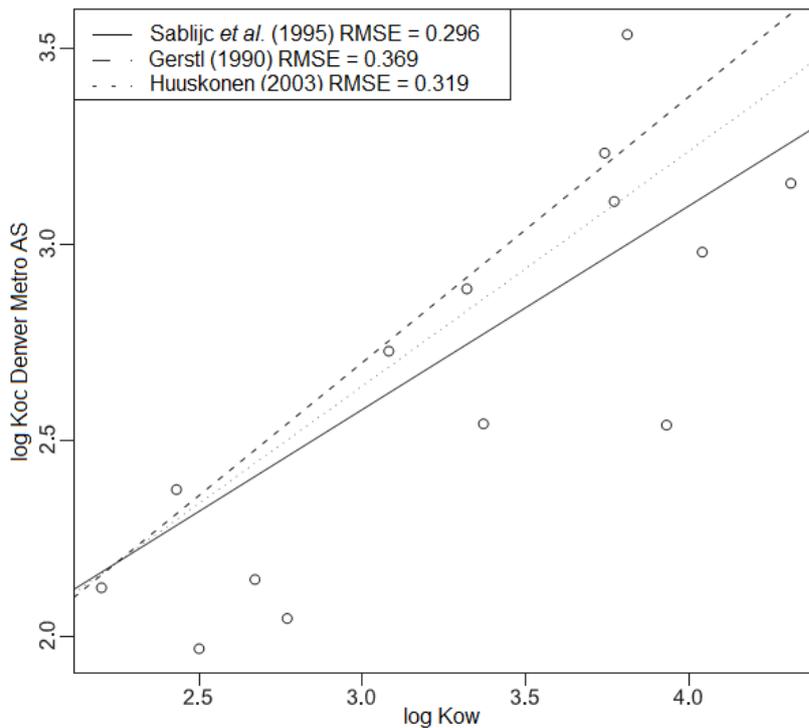
$$\begin{aligned} \log K_{oc} &= 0.52 \cdot \log K_{ow} + 1.02 \quad \text{Sabolic } et al., 1995 \\ n &= 390, R^2 = 0.83 \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \log K_{oc} &= 0.679 \cdot \log K_{ow} + 0.663 \quad \text{Gerstl, 1990} \\ n &= 419, R^2 = 0.83 \end{aligned} \quad (8)$$

$$\log K_{oc} = 0.6 \cdot \log K_{ow} + 0.84 \quad \text{Huuskonen, 2003} \quad (9)$$

$$n = 403, R^2 = 0.79$$

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



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

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:

$$\log K_{oc} = 0.602 \cdot \log K_{ow} + 0.695 \quad \text{Stevens-Garmon } et al., 2011 \quad (10)$$

$$RECM = 0.285$$

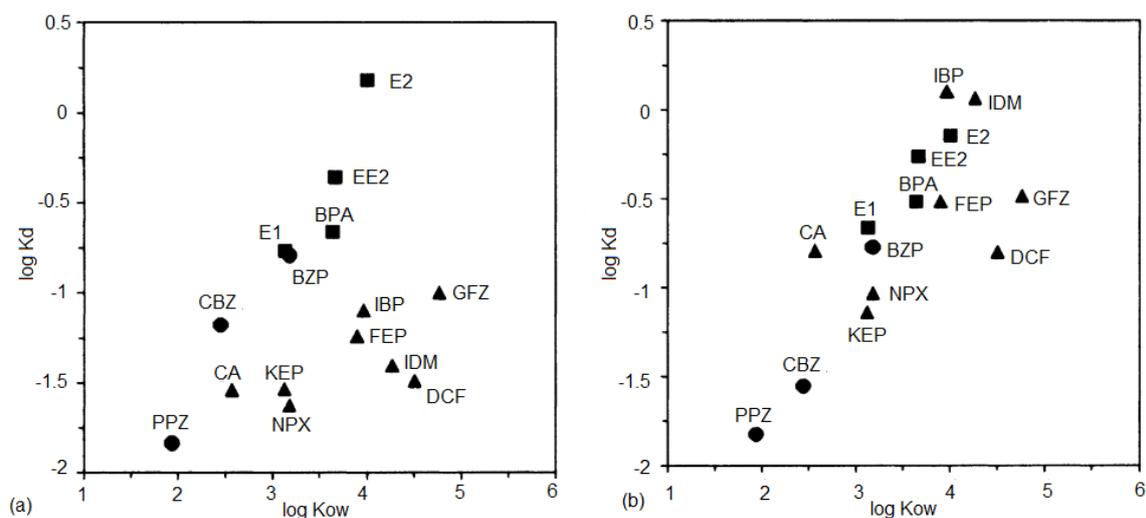
Otro aspecto analizado fue las respuesta del proceso al cambio de las condiciones de operación, Carballa *et al.* (2008) propusieron otro modelo para la sorción de PPCPs en un sistema de barros activados en su etapa de digestión (tratamiento terciario):

$$\log K_{oc} = 0.602 \cdot \log K_{ow} + 0.695 \quad \text{Carballa } et al., 2008 \quad (11)$$

Los resultados obtenidos en este trabajo confirman que la sorción de PPCPs, bajo estas condiciones, no difiere en magnitud de los valores obtenidos en estudios anteriores realizados con lodos primarios y secundarios; es decir, que bajo diferentes condiciones de operación (temperatura) las propiedades sortivas de los compuestos traza no se ven afectadas. Al igual que otros autores, los valores estimados a través de la LFER obtenida resultan aceptables para compuestos que interactúan hidrofóbicamente, fallando en la predicción del comportamiento en compuestos iónicos o polares.

La última faceta observada por Urase & Kikuta (2005) fue la dependencia del proceso de sorción bajo diferentes condiciones de pH. La Figura 5a muestran 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 ( $K_d$ ) 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 clofíbrico (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 (fármacos ácidos), Figura 5a. Sin embargo, bajo condiciones

ácidas de pH, estos compuestos se encuentran eléctricamente neutros y la sorción es dominada completamente por interacciones hidrofóbicas, presentando una relación lineal entre  $\log(K_d)$  y  $\log(K_{ow})$  (Figura 5b).



**Figura 5.** Valores de  $\log K_{oc}$  versus  $\log D_{ow}$  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 clofíbrico (CA), ibuprofeno (IBP), fenoprofeno (FEP), ketoprofeno (KEP), naproxeno (NPX), diclofenac (DCF) e indometacina (IDM).

**Figura 5.** Values of  $\log K_{oc}$  versus  $\log D_{ow}$  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) and carbamazepine (CBZ), gemfibrozil (GFZ), clorifibric acid (CA), ibuprofen (IBP), fenoprofen (FEP), ketoprofen (KEP), naproxen (NPX), diclofenac (DCF) and indomethacin (IDM).

## CONCLUSIÓN

Los estudios efectuados han determinado que la sorción de muchos PPCPs en la biomasa no es ideal sino un proceso relativamente complejo, mas aún para aquellos compuestos que presentan cargas positivas. Sin embargo, 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 y ampliamente estudiado. Consecuentemente, los modelos simplificados (LFERs) propuestos por los diferentes autores logran una descripción adecuada para este tipo de compuestos, pero deficiente aún para compuestos que presentan cargas positivas, haciendo la predicción del particionado algo imprecisa. Teniendo en cuenta las consideraciones efectuadas, las futuras investigaciones deberían apuntar a incluir este factor electrostático dentro del modelado del proceso de sorción, posteriormente incluir esta propiedad dentro de los predictores en una posible relación de energía libre multiparamétrica (pLFER).

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Carballa M, Fink G, Omil F, Lema JM & Ternes T. 2007. Determination of the solid–water distribution coefficient ( $K_d$ ) for pharmaceuticals, estrogens and musk fragrances in digested sludge. *Water Research*, 42: 287– 295
- 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

- 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
- Larsen TA, Lienert J, Joss A & Siegrist H. 2004. How to avoid pharmaceuticals in the aquatic environment. *Journal of Biotechnology*, 113: 295– 304
- 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, Sao Carlos, Brasil: A2– 085
- Sabljic A, Güsten H, Verhaar H & Hermens J. 1995. QSAR modelling 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