

# Fraunhofer IME-AE - Ableitung der konzentrations- abhängigen Messunsicherheit bei Bodenelutionsverfahren

Steffen Uhlig

Henning Baldauf



**Berichterstellung durch**

QuoData GmbH

Quality & Statistics!

Prellerstr. 14

01309 Dresden

Telefon: 0 351 40 28867 0

Fax: 0 351 40 28867 19

E-Mail: [info@quodata.de](mailto:info@quodata.de)

Web: [www.quodata.de](http://www.quodata.de)

**Autoren**

PD Dr. habil. Steffen Uhlig

Dipl.-Math. Henning Baldauf

**Juli 2015**



\*QUALITY & STATISTICS!

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b> .....	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Datengrundlage</b> .....	<b>5</b>
2.1	Probenmaterial .....	5
2.2	Analyten .....	5
2.3	Messwiederholungen .....	5
2.4	Statistische Ergebnisse .....	6
2.4.1	Acenaphthen .....	8
2.4.2	Benz[a]anthracen .....	9
2.4.3	Benzo[a]pyren .....	10
2.4.4	Benzo[b]fluoranthen .....	11
2.4.5	Benzo[ghi]perylen .....	12
2.4.6	Benzo[k]fluoranthen .....	13
2.4.7	Chrysen .....	14
2.4.8	Fluoranthen .....	15
2.4.9	Fluoren .....	16
2.4.10	Indeno[1,2,3-cd]pyren .....	17
2.4.11	Phenanthren .....	18
2.4.12	Pyren .....	19
2.4.13	Summe PAK (16 EPA-PAK außer Acenaphtylen, Anthracen und Dibenzo[ah]anthracen) .....	20
<b>3</b>	<b>Zusammenfassung</b> .....	<b>21</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b> .....	<b>22</b>
A.1	Rohdaten .....	22

## 1 Einleitung

Im Rahmen des Projektes „Messunsicherheit für Verfahren zum Vollzug und zur Weiterentwicklung der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung, Teil III“ hat PD Dr. Uhlig (QuoData) im Auftrag des Umweltbundesamt (UBA) ein effektives Verfahren zur Ermittlung statistisch abgesicherter Messunsicherheiten entwickelt.

Dieses Verfahren ist ausführlich in folgendem Bericht dargelegt:

K. Terytze<sup>1</sup>, S. Uhlig<sup>2</sup>, H. Baldauf<sup>3</sup>: Messunsicherheit für Verfahren zum Vollzug und zur Weiterentwicklung der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung, März 2014

Das Verfahren basiert auf der konzentrationsabhängigen Zerlegung der Präzision unter Wiederhol- und Vergleichbedingungen in einen konstanten und einen proportionalen Fehleranteil. Anschließend findet zur Ableitung der Messunsicherheit ein mehrstufiger, auf einem Ampelkonzept basierendes, Konfidenzansatz mit schrittweise reduzierten Vertrauenswahrscheinlichkeiten Anwendung.

Eine Überprüfung dieses Verfahrens zur Ermittlung der Messunsicherheit erfolgte anhand von Messdaten, die zum Zweck der Validierung von E DIN 19527 (FKZ: 3709 74 223 und FKZ: 3710 74 208) für die Stoffgruppen PAK, MKW, PCB und Phenole erhoben wurden.

Für eine weitere Überprüfung wurde eine Messstudie gemäß E DIN 19527 vom Fraunhofer IME-AE durchgeführt. Die Ergebnisse der statistischen Auswertung dieser Messdaten sind in diesem Bericht aufgeführt.

Zu erwähnen ist, dass die Ergebnisse auf denjenigen Messdaten basieren, die uns am 09.04.2014 von Herrn Dr. Hennecke als Excel-Datei zugeschickt wurden. Diese Messdaten unterscheiden sich teils erheblich von jenen, die auf der 31. Sitzung des FBU am 27./28.02.2014 präsentiert worden sind.

---

<sup>1</sup> Vorsitzender Fachbeirat Bodenuntersuchung (FBU)

<sup>2</sup> QuoData GmbH

<sup>3</sup> QuoData GmbH

## 2 Datengrundlage

### 2.1 Probenmaterial

Ein geeigneter PAK-Altlastboden wurde mit unterschiedlichen Mengen eines unbelasteten Standardboden gemischt. Die Gemische weisen damit weitgehend gleiche Bodeneigenschaften auf, unterscheiden sich aber in den PAK-Belastungen. Insgesamt wurden die folgenden fünf Mischungsverhältnisse festgelegt:

**Tabelle 1: Verwendete Bodengemische**

Mischungen	PAK 1	PAK 5	PAK 10	PAK 50	PAK 90
PAK-Altlastboden	1%	5%	10%	50%	90%
Unbelasteter Standardboden IME 01-A	99%	95%	90%	50%	10%

### 2.2 Analyten

Für die gemäß E DIN 19527 eluierten Bodengemische erfolgte mittels HPLC-Fluoreszenz eine Bestimmung der Konzentrationen der 16 EPA PAK.

Aufgrund der analytischen Unsicherheit von Acenaphtylen, Anthracen und Dibenzo[ah]anthracen wurden uns diese Substanzen nicht für die Auswertung zur Verfügung gestellt. Da Naphtalin im Altlastboden nicht nachgewiesen werden konnte, blieb auch diese Substanz in der statistischen Auswertung unberücksichtigt.

Die Auswertung wurde daher für die folgenden 12 PAK durchgeführt:

- Acenaphthen, Benz[a]anthracen, Benzo[a]pyren, Benzo[b]fluoranthren, Benzo[ghi]perylen, Benzo[k]fluoranthren, Chrysen, Fluoranthren, Fluoren, Indeno[1,2,3-cd]pyren, Phenanthren und Pyren

Durchgeführt wurde die Auswertung außerdem über die Summe dieser 12 PAK.

### 2.3 Messwiederholungen

Alle Proben wurden in 6 Ansätzen vom Fraunhofer IME-AE analysiert. Der sechste Ansatz wurde dabei mit einer zweiten Kalibrierung nachgezogen.

## 2.4 Statistische Ergebnisse

Im Folgenden sind für die untersuchten Parameter die Ergebnisse der Präzisions- und Messunsicherheitsbestimmung in Form von Datenblättern einzeln aufgeführt.

Die konstanten und proportionalen Fehleranteile wurden mittels der Maximum-Likelihood-Methode berechnet unter Berücksichtigung der zuvor nach DIN 38402-45 robust ermittelten, probenspezifischen Mittelwerte und Wiederholstandardabweichungen.

Die Abgrenzung eines vierstufigen Konfidenzbereichs basiert auf dem Verhältnis der relativen Ober- und Untergrenze des Messunsicherheitsbereichs und ist in folgender Tabelle 2 zusammengefasst.

**Tabelle 2: Verwendete Konfidenzbereiche (Ampelkonzept) zur Ermittlung asymmetrischer Messunsicherheitsintervalle; abgegrenzt auf Basis des Verhältnisses der oberen zur unteren Messunsicherheitsgrenze**

Konfidenzbereich	Konfidenzniveau (zweiseitiges Konfidenzintervall)	Erweiterungs- faktor	Verhältnis der oberen zur unteren MU-Grenze (abhängig vom Konfidenzniveau)
Grün	95 %	$k = 2,00$	$\leq 5$
Gelb	90 %	$k = 1,65$	$\leq 20$
Rot	80 %	$k = 1,28$	$\leq 50$
Grau	80 %	$k = 1,28$	$> 50$

Jedes Datenblatt besteht aus 3 Teilen:

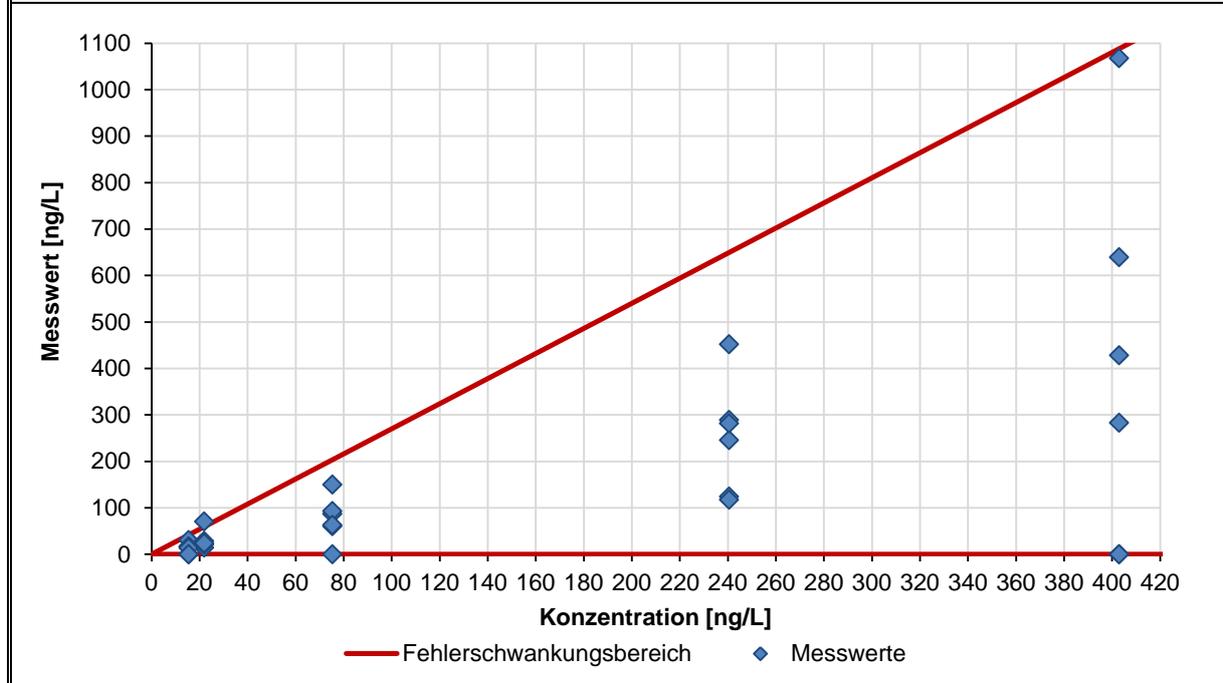
- (1) Zuerst werden in tabellarischer Form probenspezifisch der Mittelwert sowie die relative Wiederholstandardabweichung angegeben. Für die Präzisionsdaten werden sowohl die Werte gemäß der Berechnung nach DIN 38402-45 als auch gemäß der Berechnung des additiven Varianzmodells mit konstantem und proportionalen Fehleranteil aufgelistet. Angegeben sind zudem die geschätzten Parameterwerte des konstanten und proportionalen Fehleranteils.
- (2) Im mittleren Teil werden die robusten Mittelwerte für die 5 Bodengemische auf der x-Achse den 6 Messwerten der hergestellten Eluatproben auf der y-Achse gegenübergestellt. Die Grenzen des Fehlerschwankungsbereiches sind gemäß dem additiven Varianzmodell und für ein Konfidenzniveau von 95 % als rote Linien eingezeichnet.  
Für einige PAK wird zur besseren Unterscheidbarkeit der Messwerte zusätzlich eine weitere Abbildung mit eingeschränktem Konzentrationsbereich angeführt.  
Es bleibt zu erwähnen, dass sich die Darstellung auf den Konzentrationsbereich beschränkt und somit keine Extrapolation erfolgt.
- (3) Letztlich sind im unteren Teil die ermittelten Messunsicherheiten als absolute Größen (linke Abbildung) und relative Größen (rechte Abbildung) in Abhängigkeit des Messwertes dargestellt. Die Unter- und Obergrenzen des Messunsicherheitsintervalls sind entsprechend des Ampelkonzepts farblich entweder grün (95 % Niveau), gelb (90 % Niveau) oder rot (80 %) hervorgehoben. Die Bereichsgrenzen sind zudem als farbliche vertikale Linien eingezeichnet.

Für eine Darstellung der Messunsicherheit außerhalb der 3 Bereiche wurde ein 80 % Konfidenzintervall unterstellt und die entsprechenden Intervallgrenzen in grau eingezeichnet. Zum Teil wird eine eigentlich unzulässige Extrapolation vorgenommen, wenn die Obergrenze des Messunsicherheitsintervalls außerhalb des Konzentrationsbereiches liegt. Gleichwohl erfolgt auch in diesen Fällen - mit einem Vermerk - eine Messunsicherheitsabschätzung.

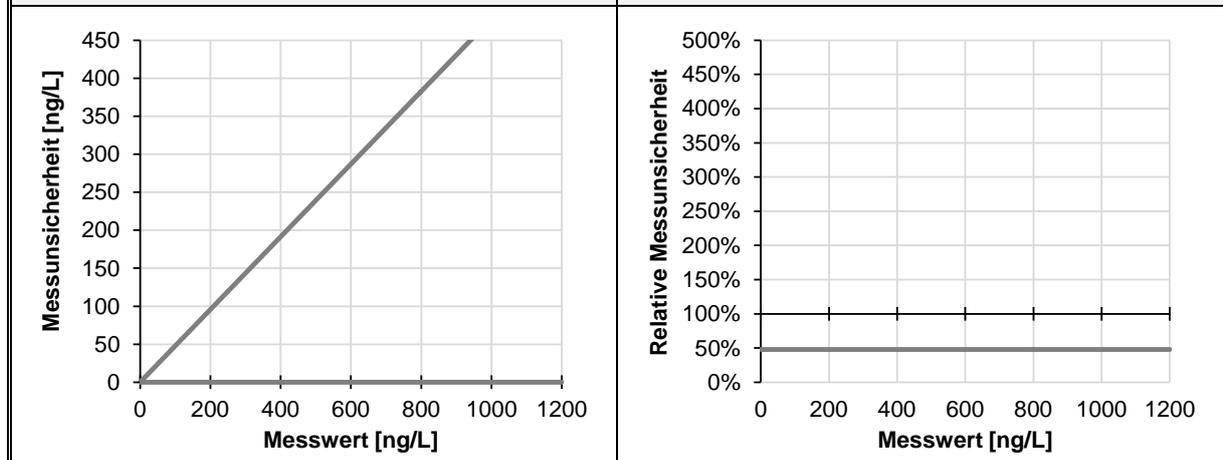
### 2.4.1 Acenaphthen

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [ng/L]	Relative Wiederholstabwe.	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	15,5	45,4%	85,0%
PAK 5	22,1	47,5%	85,0%
PAK 10	240,6	40,3%	85,0%
PAK 50	75,4	76,7%	85,0%
PAK 90	403,0	156,0%	85,0%
Fehleranteil	konstant		0,00
	proportional		0,85

#### Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben



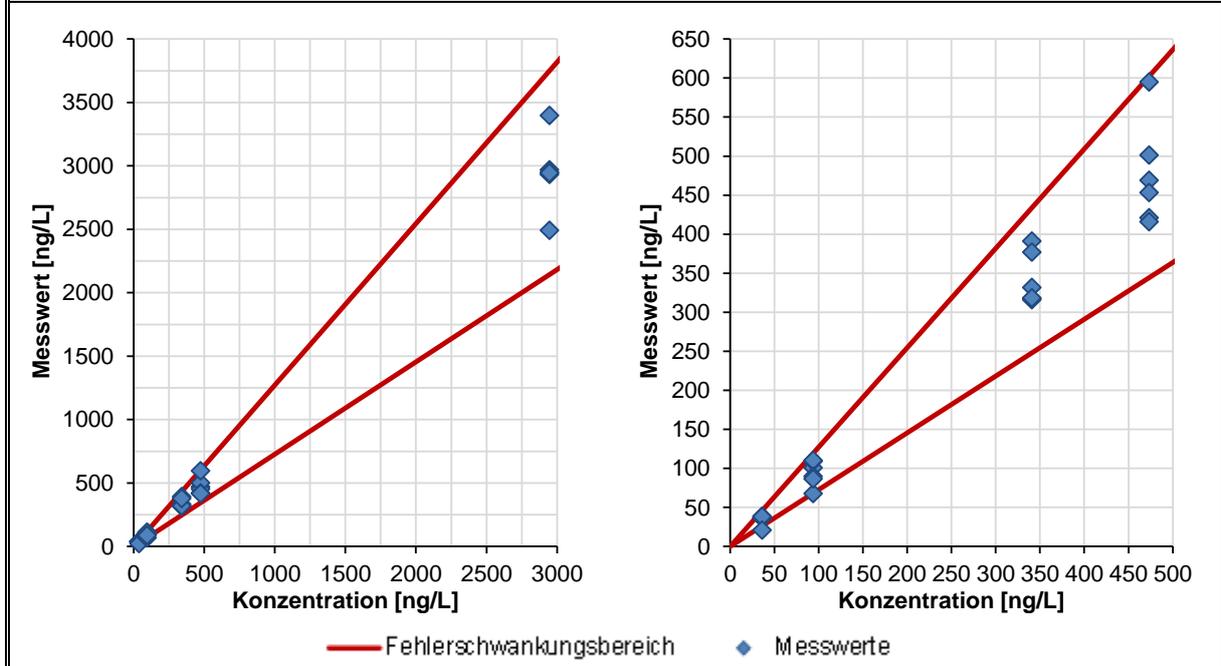
Absolute Messunsicherheitsintervalle	Relative Messunsicherheitsintervalle
--------------------------------------	--------------------------------------



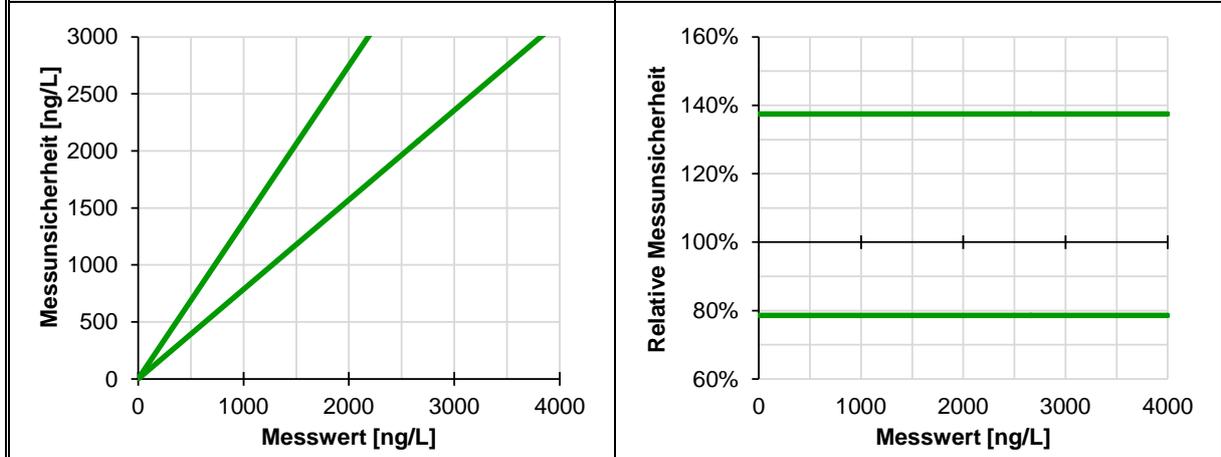
2.4.2 Benz[a]anthracen

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [ng/L]	Relative Wiederholstdabw.	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	36,4	11,3%	13,6%
PAK 5	94,0	22,2%	13,6%
PAK 10	340,9	8,7%	13,6%
PAK 50	473,6	15,2%	13,6%
PAK 90	2947,8	1,4%	13,6%
Fehleranteil	konstant		0,00
	proportional		0,14

Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben



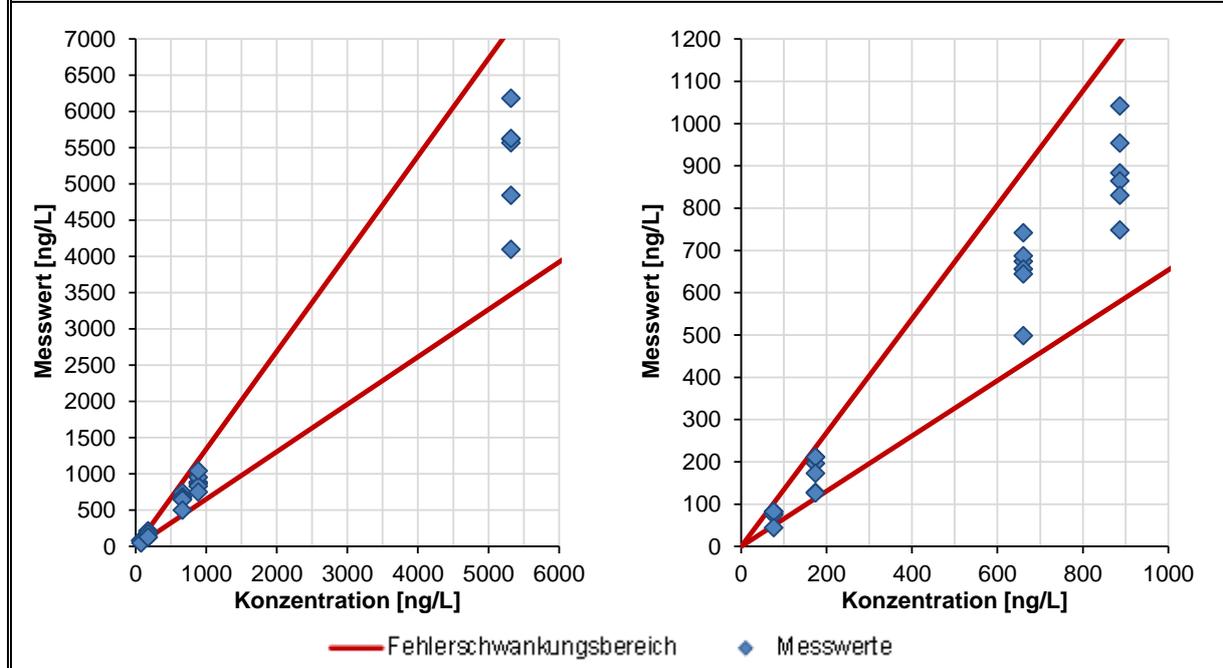
Absolute Messunsicherheitsintervalle      Relative Messunsicherheitsintervalle



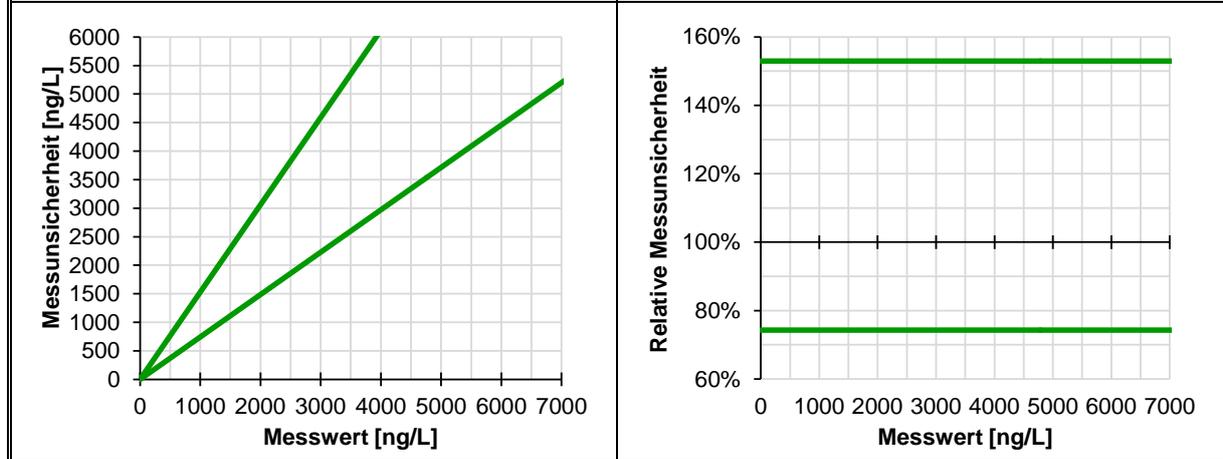
2.4.3 Benzo[a]pyren

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [ng/L]	Relative Wiederholstabwe.	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	76,4	12,5%	17,3%
PAK 5	174,3	19,6%	17,3%
PAK 10	660,6	10,1%	17,3%
PAK 50	886,8	17,7%	17,3%
PAK 90	5322,2	23,2%	17,3%
Fehleranteil	konstant		0,00
	proportional		0,17

Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben



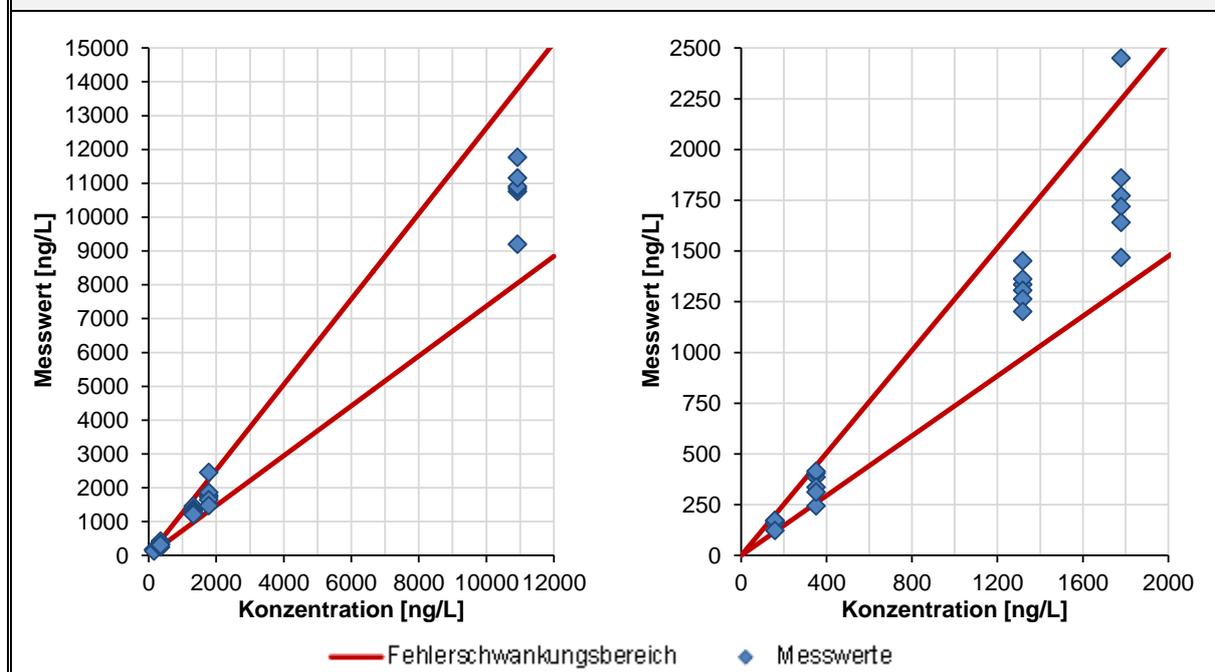
Absolute Messunsicherheitsintervalle      Relative Messunsicherheitsintervalle



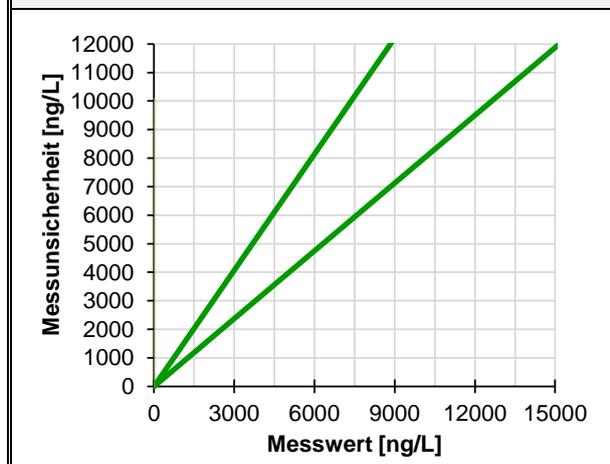
2.4.4 Benzo[b]fluoranthen

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [ng/L]	Relative Wiederholstdabw.	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	159,2	10,9%	13,2%
PAK 5	350,6	18,9%	13,2%
PAK 10	1319,5	9,4%	13,2%
PAK 50	1779,9	16,5%	13,2%
PAK 90	10924,9	5,1%	13,2%
Fehleranteil	konstant		0,00
	proportional		0,13

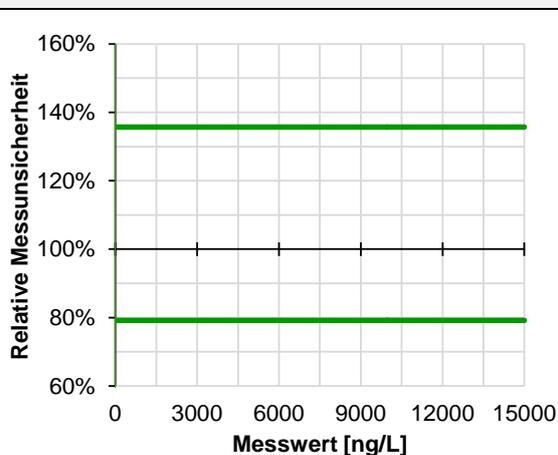
Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben



Absolute Messunsicherheitsintervalle



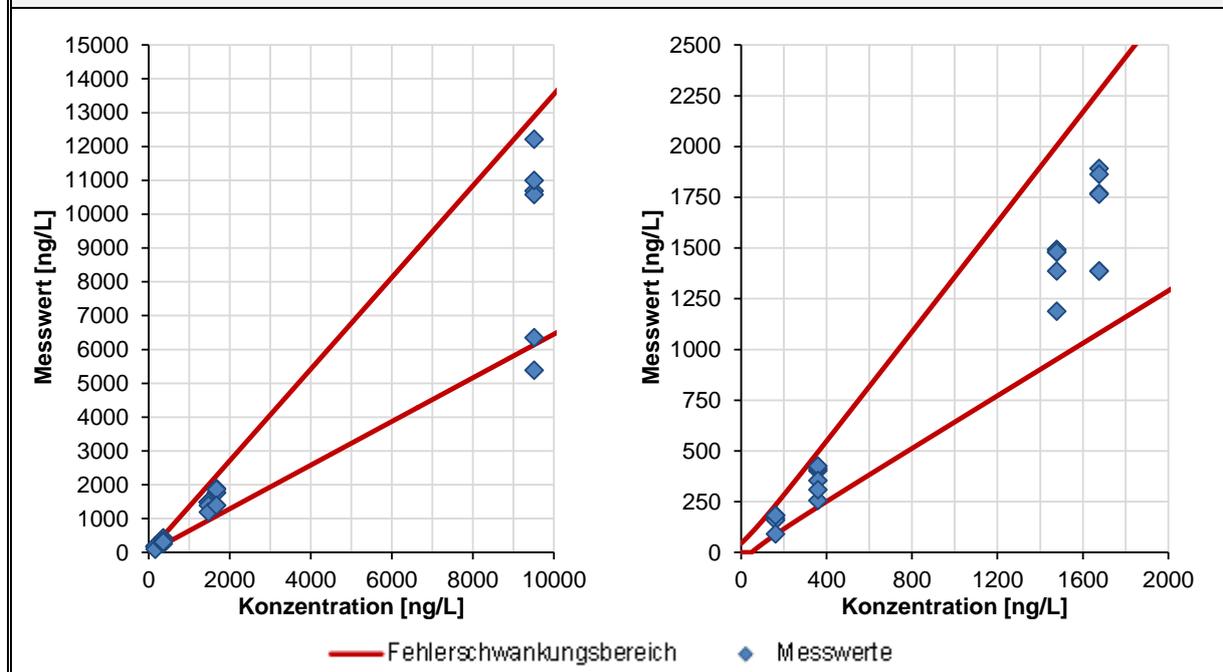
Relative Messunsicherheitsintervalle



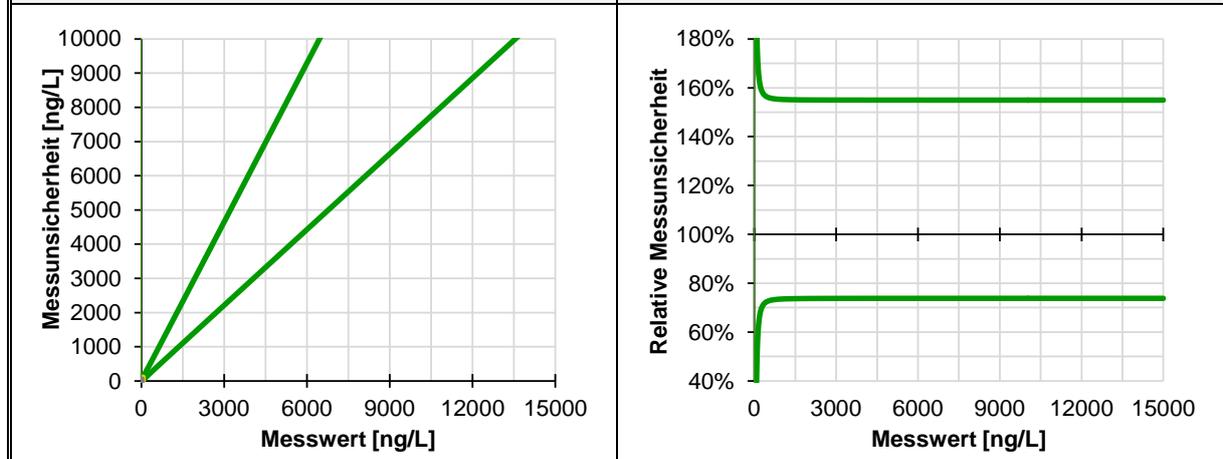
### 2.4.5 Benzo[ghi]perylen

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [ng/L]	Relative Wiederholstdabw.	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	161,6	18,5%	22,6%
PAK 5	359,6	28,0%	18,8%
PAK 10	1477,9	1,8%	17,8%
PAK 50	1676,6	12,6%	17,8%
PAK 90	9519,5	22,5%	17,7%
Fehleranteil	konstant		22,52
	proportional		0,18

#### Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben



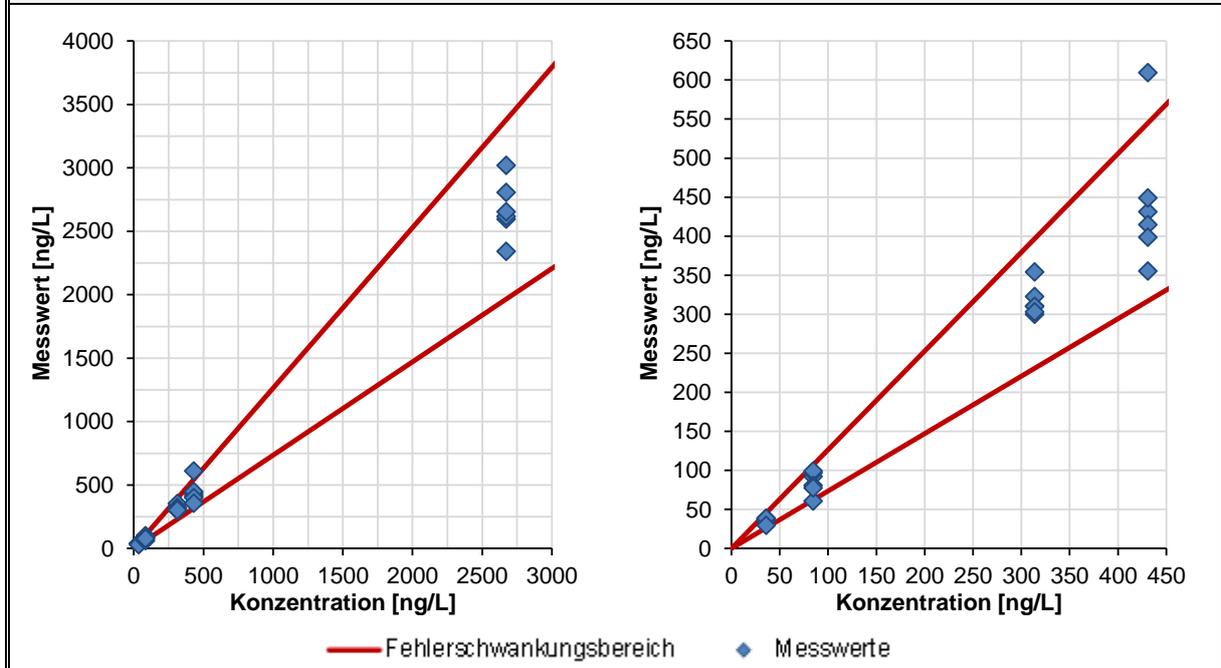
#### Absolute Messunsicherheitsintervalle      Relative Messunsicherheitsintervalle



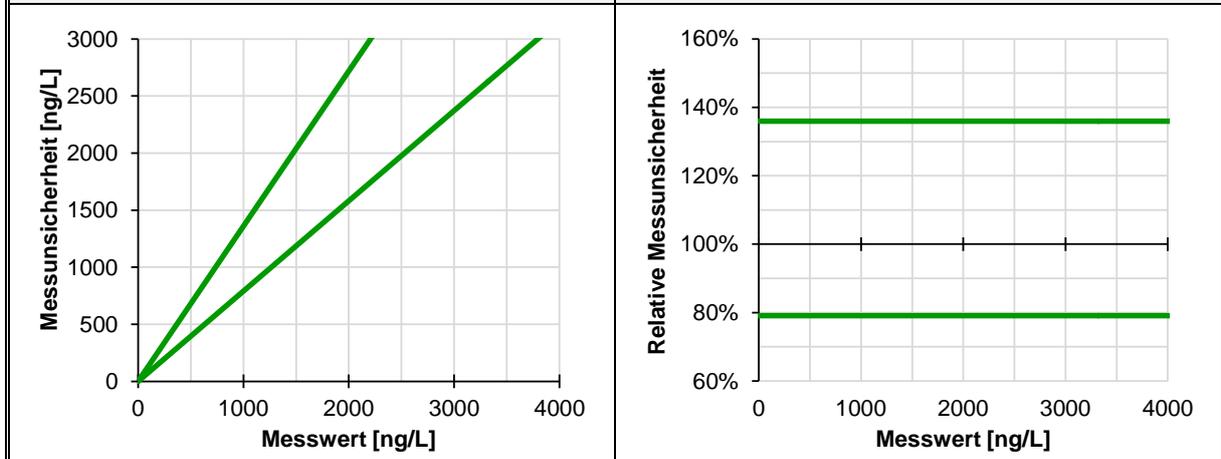
2.4.6 Benzo[k]fluoranthen

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [ng/L]	Relative Wiederholstdabw.	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	36,0	9,7%	13,2%
PAK 5	84,6	17,7%	13,2%
PAK 10	314,0	5,3%	13,2%
PAK 50	431,1	16,7%	13,2%
PAK 90	2672,2	12,7%	13,2%
Fehleranteil	konstant		0,00
	proportional		0,13

Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben



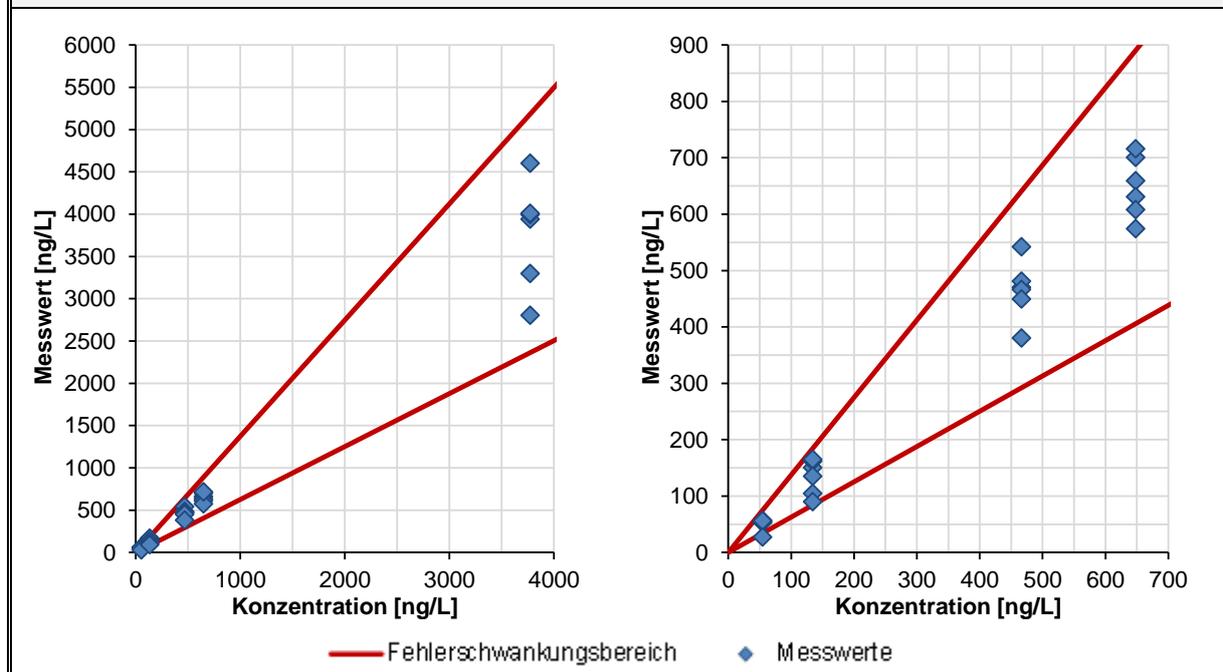
Absolute Messunsicherheitsintervalle      Relative Messunsicherheitsintervalle



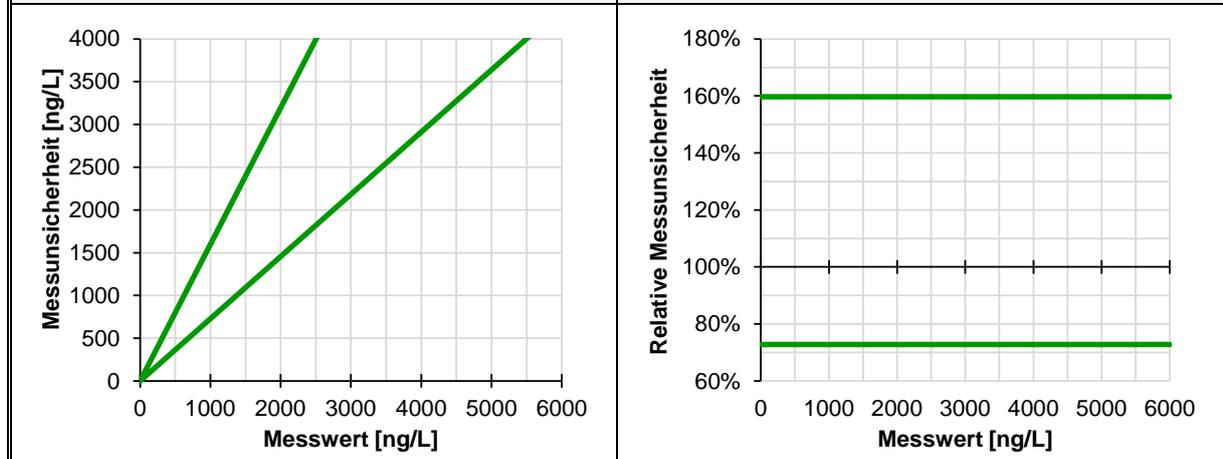
### 2.4.7 Chrysen

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [ng/L]	Relative Wiederholstabweichung	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	54,8	9,6%	18,7%
PAK 5	134,3	24,7%	18,7%
PAK 10	466,6	8,2%	18,7%
PAK 50	648,1	11,7%	18,7%
PAK 90	3774,1	29,1%	18,7%
Fehleranteil	konstant		0,00
	proportional		0,19

**Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben**



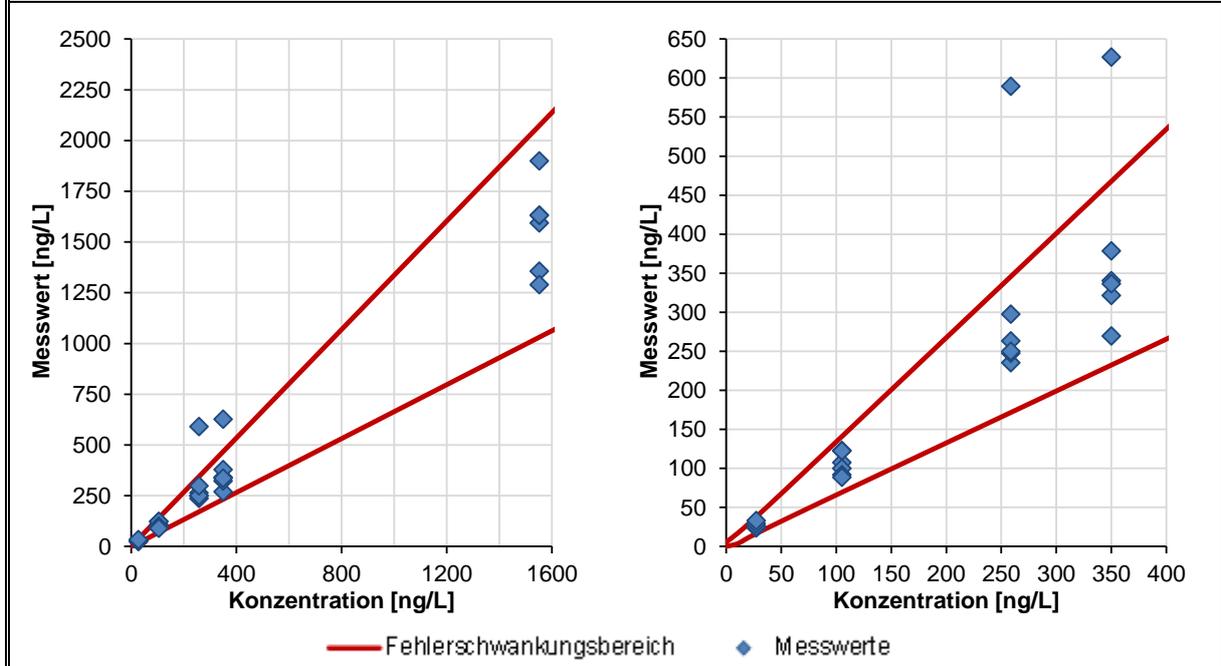
**Absolute Messunsicherheitsintervalle**      **Relative Messunsicherheitsintervalle**



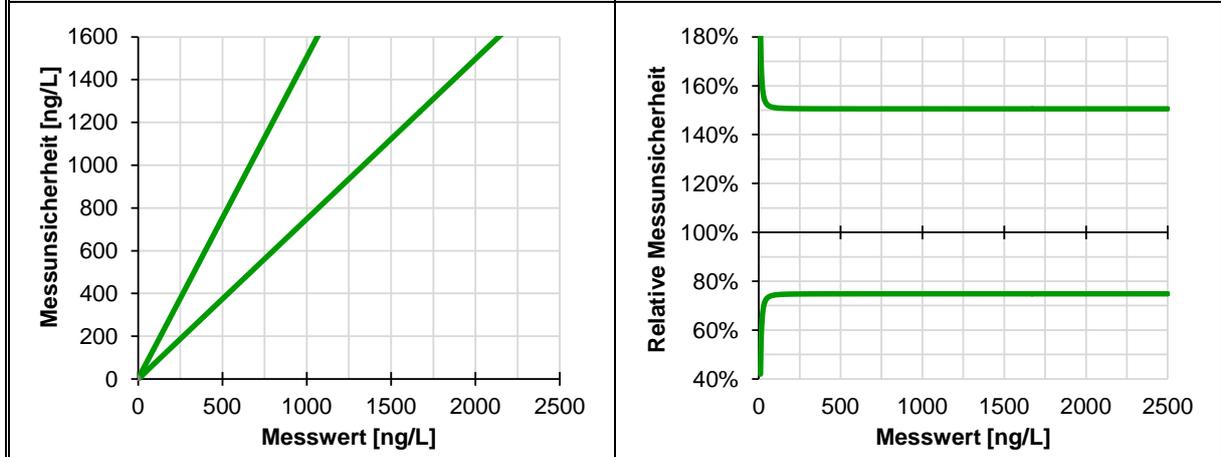
2.4.8 Fluoranthen

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [ng/L]	Relative Wiederholstdabw.	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	27,3	19,6%	19,7%
PAK 5	105,3	17,4%	17,0%
PAK 10	258,7	12,5%	16,8%
PAK 50	350,1	24,2%	16,8%
PAK 90	1553,0	9,6%	16,8%
Fehleranteil	konstant		2,81
	proportional		0,17

Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben



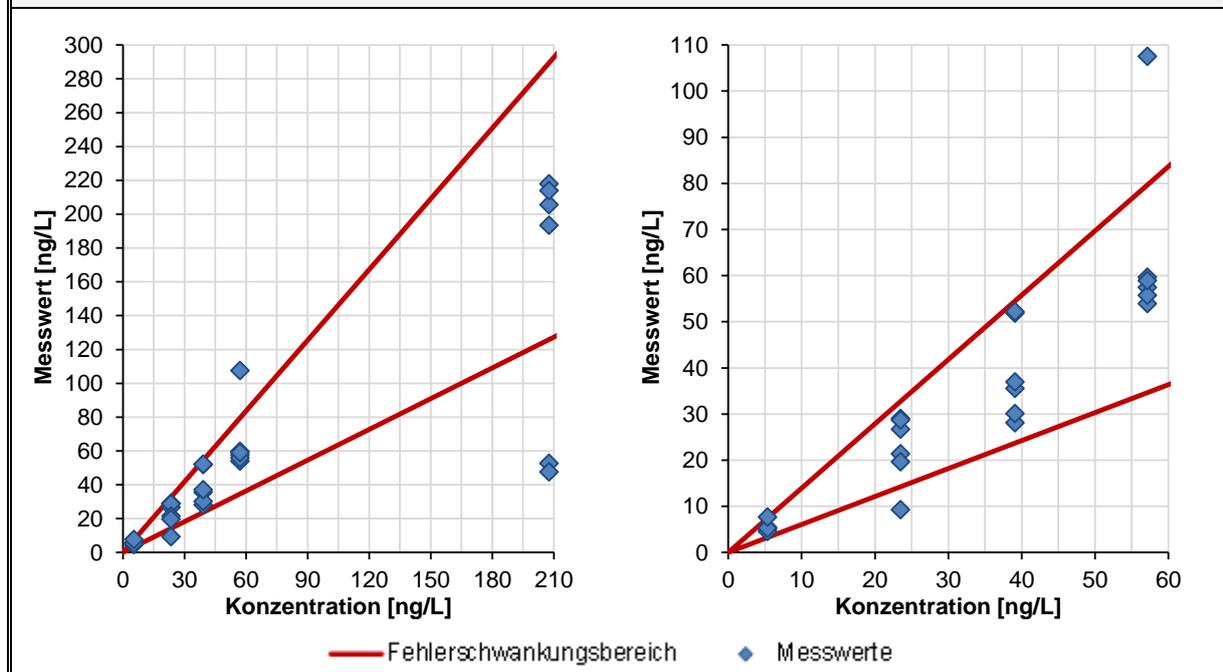
Absolute Messunsicherheitsintervalle      Relative Messunsicherheitsintervalle



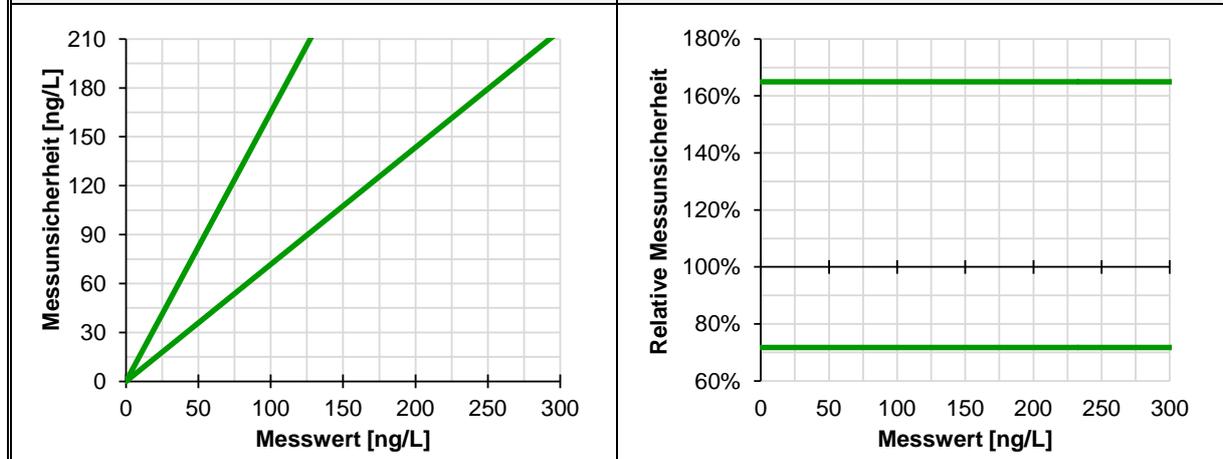
### 2.4.9 Fluoren

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [ng/L]	Relative Wiederholstdabw.	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	5,4	16,1%	19,7%
PAK 5	23,5	22,5%	19,7%
PAK 10	39,1	31,0%	19,7%
PAK 50	57,1	6,9%	19,7%
PAK 90	207,6	12,9%	19,7%
Fehleranteil	konstant		0,00
	proportional		0,20

#### Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben



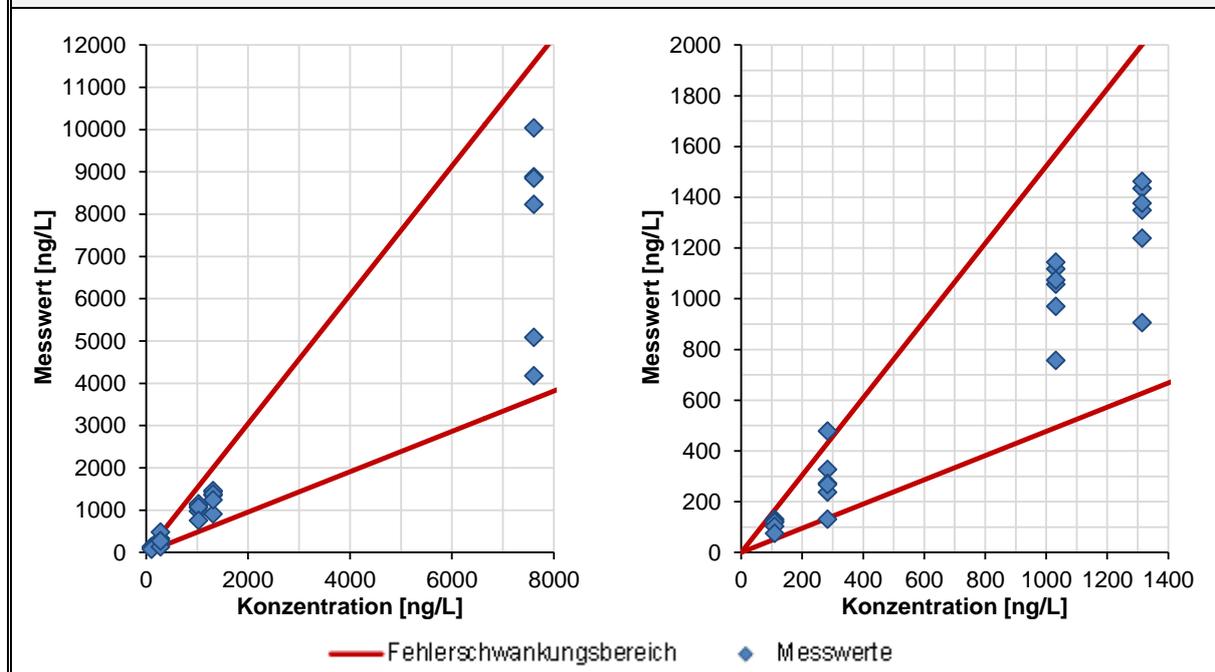
#### Absolute Messunsicherheitsintervalle      Relative Messunsicherheitsintervalle



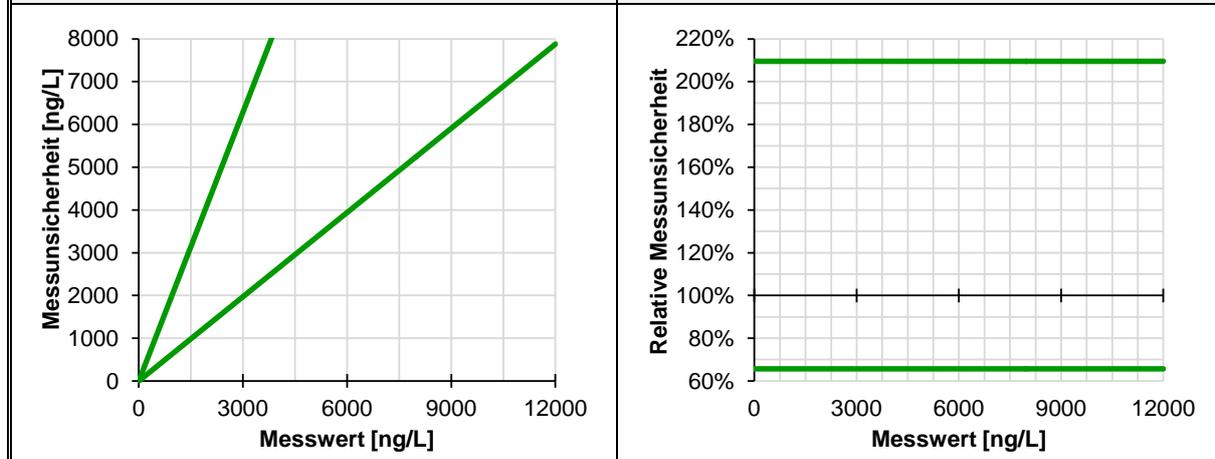
2.4.10 Indeno[1,2,3-cd]pyren

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [ng/L]	Relative Wiederholstdabw.	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	110,0	22,7%	26,1%
PAK 5	283,0	42,7%	26,1%
PAK 10	1031,9	13,0%	26,1%
PAK 50	1315,0	14,4%	26,1%
PAK 90	7610,2	26,5%	26,1%
Fehleranteil	konstant		0,00
	proportional		0,26

Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben



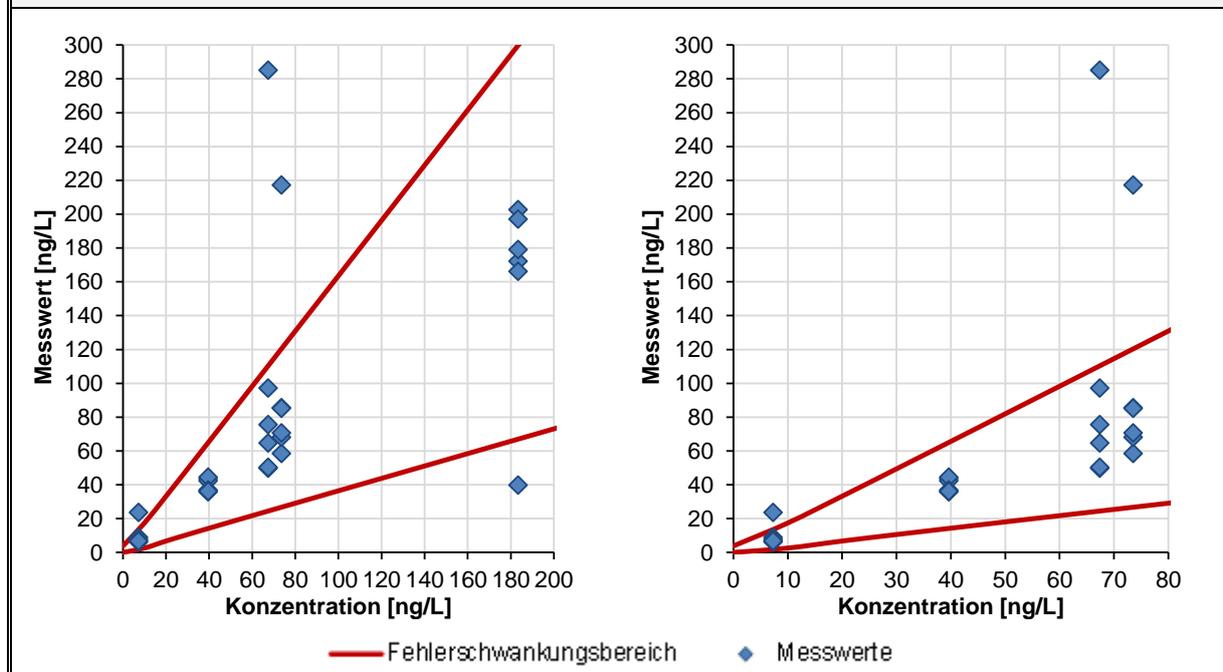
Absolute Messunsicherheitsintervalle      Relative Messunsicherheitsintervalle



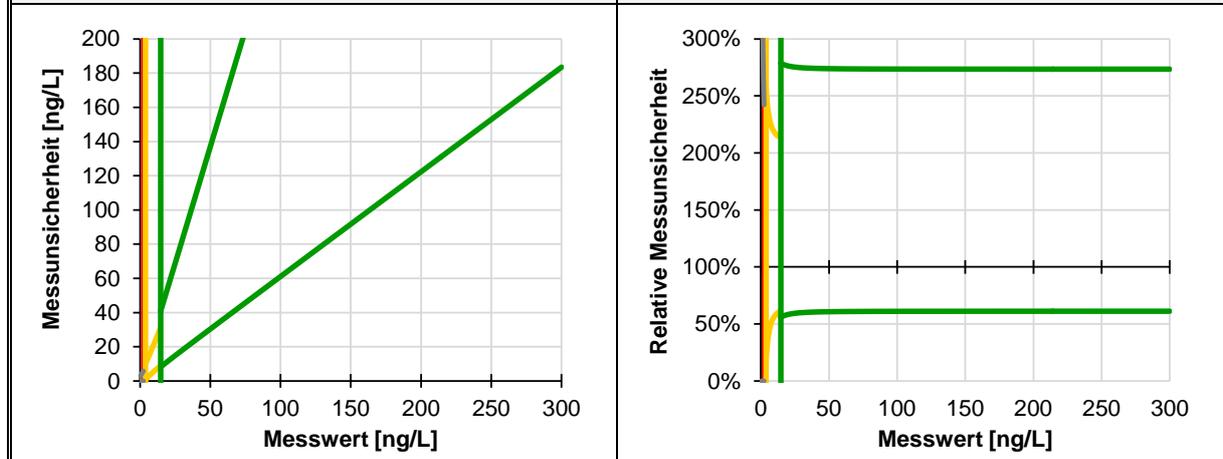
### 2.4.11 Phenanthren

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [ng/L]	Relative Wiederholstabwe.	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	7,3	41,6%	41,1%
PAK 5	39,6	6,1%	32,1%
PAK 10	67,4	49,1%	31,8%
PAK 50	73,6	36,7%	31,8%
PAK 90	183,4	15,5%	31,7%
Fehleranteil	konstant		1,92
	proportional		0,32

#### Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben



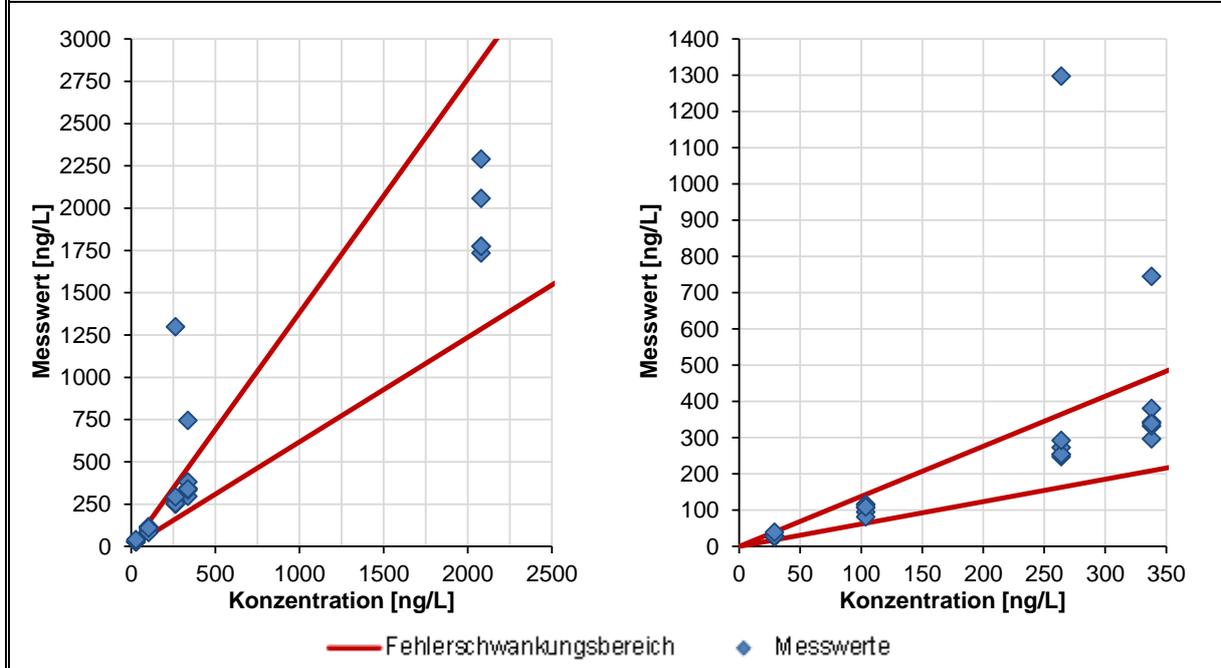
#### Absolute Messunsicherheitsintervalle      Relative Messunsicherheitsintervalle



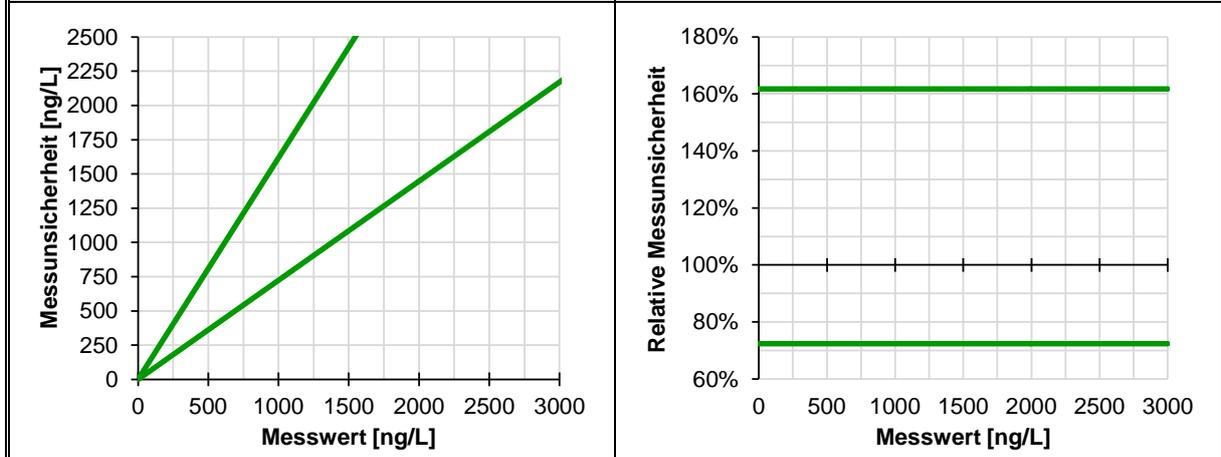
2.4.12 Pyren

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [ng/L]	Relative Wiederholstabwe.	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	29,1	13,4%	19,1%
PAK 5	103,8	15,4%	19,1%
PAK 10	264,1	15,5%	19,1%
PAK 50	338,0	23,5%	19,1%
PAK 90	2080,0	24,7%	19,1%
Fehleranteil	konstant		0,00
	proportional		0,19

Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben



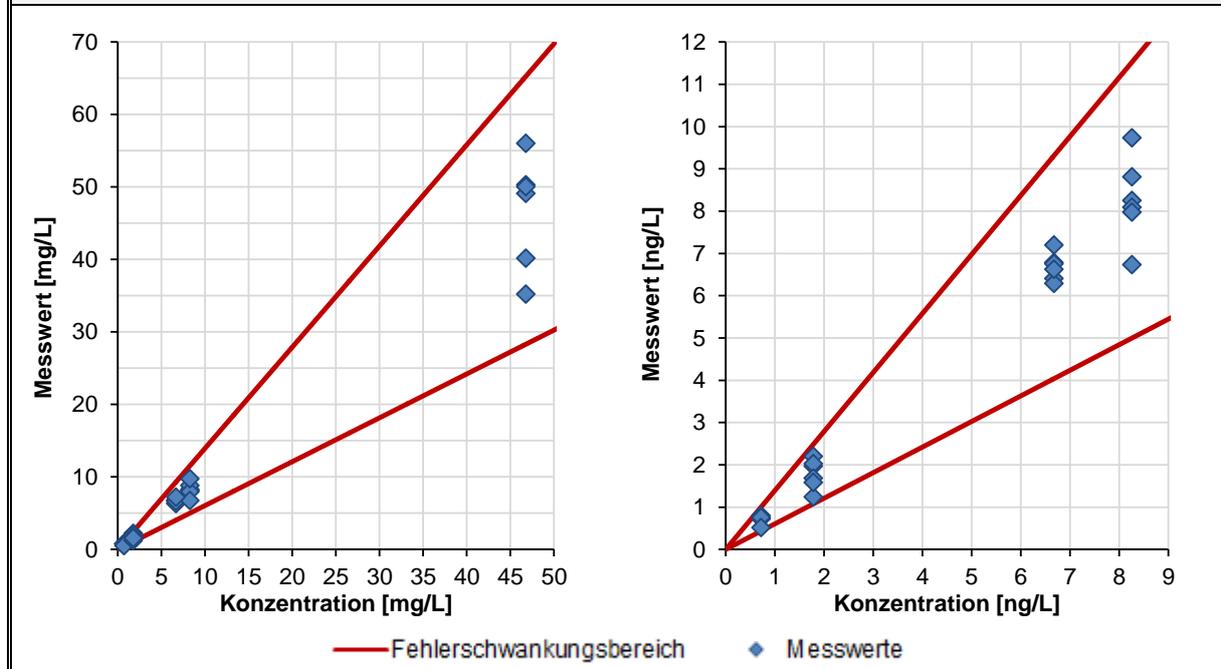
Absolute Messunsicherheitsintervalle      Relative Messunsicherheitsintervalle



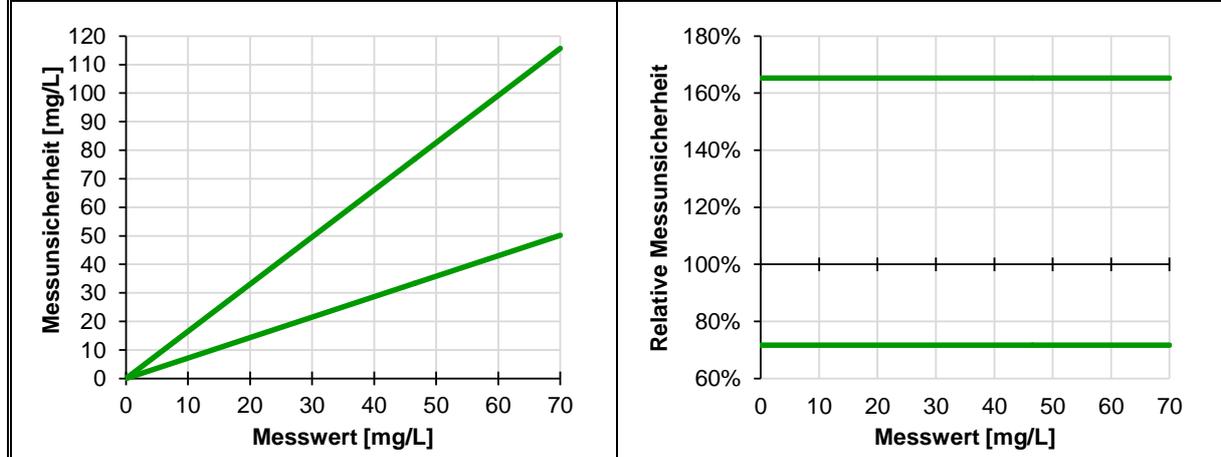
2.4.13 Summe PAK (16 EPA-PAK außer Acenaphtylen, Anthracen und Dibenzo[ah]anthracen)

Bodengemisch	Robuster Mittelwert [mg/L]	Relative Wiederholstdabw.	
		gemäß DIN 38402-45	gemäß Modellansatz
PAK 1	0,720	11,4%	19,7%
PAK 5	1,783	30,3%	19,7%
PAK 10	6,676	5,7%	19,7%
PAK 50	8,266	16,2%	19,7%
PAK 90	46,799	24,4%	19,7%
Fehleranteil	konstant		0,00
	proportional		0,20

Messwerte und Fehlerschwankungsbereich der hergestellten Eluatproben



Absolute Messunsicherheitsintervalle      Relative Messunsicherheitsintervalle



### 3 Zusammenfassung

Die Berechnung der Wiederholpräzision liefert für die vorliegenden Messergebnisse eine gute Anpassung. Die Wiederholstandardabweichung liegt gemäß dem Verfahrensansatz für alle untersuchten PAK bis auf Acenaphten und Phenanthren zwischen 13% und 26%.

Alle PAK außer Acenaphten und Phenanthren gewährleisteten im untersuchten Konzentrationsbereich die Anwendung des grünen Konfidenzbereiches (95 % Konfidenzniveau). Demzufolge ist das Verhältnis von oberer zu unterer Messunsicherheitsgrenze stets kleiner als 5.

Ausnahmen bilden, wie bereits erwähnt, Acenaphten und Phenanthren. Aufgrund der relativ hohen Wiederholstandardabweichung von 41 % für die gemessene Phenanthren-Konzentration im Bodengemisch PAK 1 kann der grüne Konfidenzbereich erst oberhalb 14 ng/l Anwendung finden. Für Acenaphten kann über den ganzen Untersuchungsbereich nur der graue Konfidenzbereich angewandt werden. Die hohe Wiederholstandardabweichung von 85 % führt dazu, dass der Messunsicherheitsbereich immer 0 ng/l einschließt. Ferner muss darauf hingewiesen werden, dass die mittlere Acenaphten-Konzentration für das Gemisch PAK 10 mehr als dreimal höher ausfällt als für das Gemisch PAK 50. Im Gegensatz dazu weisen die übrigen PAK niedrigere Mittelwerte für das Gemisch PAK 10 verglichen zu PAK 50 auf.

Es ist zu erwähnen, dass ohne die Ansätze 5 und 6 die PAK-spezifischen Wiederholstandardabweichungen deutlich niedriger ausfallen (maximal 16 % bis auf Acenaphten mit 42 %). Insbesondere für die Gemische PAK 1 und PAK 90 sind in Bezug auf die gemessenen Konzentrationen deutliche Unterschiede zwischen den ersten vier und den letzten beiden Ansätzen festzuhalten.

## A Anhang

### A.1 Rohdaten

PAK	Mischung	Messwert in ng/L für Ansatz					
		I	II	III	IV	V	VI
Acenaphthen	PAK 1	30,2	16,8	16,2	13,6	0,0	
	PAK 5	28,2	14,3	21,2	23,2	23,5	70,5
	PAK 10	124,0	245,4	289,2	117,4	452,2	281,7
	PAK 50	149,7	86,5	92,5	60,5	63,1	0,0
	PAK 90	639,2	1067,5	283,1	428,2	0,0	0,0
Benz[a]anthracen	PAK 1	38,4	36,2	36,0	38,0	21,0	
	PAK 5	100,6	109,0	110,0	89,8	67,7	86,7
	PAK 10	391,1	317,7	331,5	315,8	318,1	377,1
	PAK 50	469,0	453,3	501,1	420,9	415,7	594,9
	PAK 90	2932,7	2967,2	2948,5	3395,6	2490,7	2942,7
Benzo[a]pyren	PAK 1	82,6	77,4	74,9	81,7	44,4	
	PAK 5	196,0	211,4	211,3	173,0	127,6	126,4
	PAK 10	741,7	674,2	687,3	655,8	644,1	497,9
	PAK 50	882,9	864,3	953,8	830,0	748,1	1041,6
	PAK 90	5619,4	5565,6	5627,1	6183,3	4095,3	4842,3
Benzo[b]fluoranthen	PAK 1	170,8	162,9	157,7	171,6	122,4	
	PAK 5	385,0	405,3	414,9	336,2	242,8	311,0
	PAK 10	1450,6	1334,2	1361,2	1305,5	1263,9	1201,8
	PAK 50	1772,4	1719,6	1858,9	1639,9	1467,7	2450,1
	PAK 90	10756,6	10841,5	10905,0	11768,3	9198,9	11158,4
Benzo[ghi]perylen	PAK 1	182,5	168,0	159,0	181,5	90,4	
	PAK 5	402,5	412,4	424,7	353,6	256,0	308,3
	PAK 10	1477,6	1490,5	1491,2	1479,3	1386,3	1187,8
	PAK 50	1768,2	1764,6	1891,4	1863,1	1385,5	1386,7
	PAK 90	10683,6	10580,8	10990,6	12206,8	5380,7	6344,3
Benzo[k]fluoranthen	PAK 1	38,5	36,9	35,5	38,5	29,5	
	PAK 5	92,2	96,9	98,9	80,5	60,3	77,3
	PAK 10	354,0	310,3	322,4	310,1	299,6	302,8
	PAK 50	431,0	414,5	448,7	398,7	355,1	609,6
	PAK 90	2594,7	2617,5	2654,2	3019,9	2340,2	2806,8
Chrysen	PAK 1	56,6	53,8	52,7	56,2	27,2	
	PAK 5	150,2	162,0	164,8	134,9	104,5	89,6
	PAK 10	541,8	470,1	480,8	466,3	449,1	380,3
	PAK 50	659,3	630,7	700,7	608,1	574,0	716,0
	PAK 90	3938,6	3995,9	4008,2	4601,7	2803,0	3297,2

PAK	Mischung	Messwert in ng/L für Ansatz					
		I	II	III	IV	V	VI
Fluoranthren	PAK 1	23,7	26,1	24,9	29,1	32,9	
	PAK 5	107,3	122,9	122,1	99,7	91,4	88,5
	PAK 10	235,2	247,5	263,3	249,8	297,5	589,2
	PAK 50	269,3	340,3	378,5	321,4	336,5	626,8
	PAK 90	1592,9	1631,5	1631,6	1899,4	1355,9	1288,6
Fluoren	PAK 1	5,4	5,0	4,5	5,2	7,7	
	PAK 5	29,0	26,7	28,7	21,4	19,6	9,2
	PAK 10	51,8	28,1	35,6	30,1	52,2	36,9
	PAK 50	57,5	53,9	59,7	55,7	58,9	107,6
	PAK 90	193,5	217,8	205,5	213,8	52,6	47,6
Indeno[1,2,3-cd]pyren	PAK 1	130,2	124,4	119,0	102,3	74,3	
	PAK 5	326,8	477,6	272,4	237,3	130,5	266,9
	PAK 10	1116,8	969,5	1144,4	1056,3	1074,0	757,0
	PAK 50	1434,4	1348,8	1462,4	1376,3	905,5	1237,7
	PAK 90	8226,1	8879,2	8846,8	10036,0	4177,1	5084,5
Phenanthren	PAK 1	8,9	6,1	7,6	6,7	23,5	
	PAK 5	43,5	42,4	44,5	36,8	35,7	36,1
	PAK 10	49,7	64,5	75,5	50,2	97,1	285,1
	PAK 50	58,5	68,0	85,4	70,6	85,2	217,1
	PAK 90	172,1	166,1	178,9	202,7	197,0	39,8
Pyren	PAK 1	29,3	25,7	27,5	28,0	39,2	
	PAK 5	106,9	116,0	115,1	94,8	81,6	108,8
	PAK 10	247,7	253,6	272,8	254,4	292,0	1297,6
	PAK 50	296,2	342,9	380,3	332,1	338,8	745,1
	PAK 90	1734,1	1773,4	1773,6	2057,8	3105,9	2289,5