

# Non-Target-Analytik mit toxikologischer Bewertung

## Die neue Dimension der proaktiven Rohwasserüberwachung



07/2016

### Projekt

Non-Target-Spurenmonitoring für verschiedene Wasserarten, verbunden mit Effekt-dirigierter Analytik (EDA), zur Risikoabschätzung und zum Aufbau von Managementkonzepten.

### Auftraggeber

Diverse Gesellschafter des IWW als Projektkonsortium.

### Projektbeschreibung

Ziel des Projekts ist der Aufbau einer schnellen, robusten und routinetauglichen Non-Target-Analytik (NT-Analytik) für organische Mikroschadstoffe in Rohwässern (Oberflächen- und Grundwasser), die zur Trinkwassergewinnung genutzt werden.

In dem Kontext wird auch ein neues Konzept für ein zeitnahe Monitoring als vorsorgende Rohwasserüberwachung in Verbindung mit einer toxikologischen Risikobewertung aufgebaut, das weit über die bisher üblichen, Target-basierten, regionalen Überwachungsprogramme auf Pestizide, Pharmaka, Diagnostika und Industrie-Chemikalien hinaus geht. Hier gehen auch Studien zu Anpassungsmöglichkeiten der Elimination von unbekanntem Stoffen bei der Wasseraufbereitung mit ein.

Anhand typisierter Rohwassersituationen wird schließlich ein proaktives Risikomanagement mit dem Projektkonsortium erar-



beitet. Das Novum stellt dabei die Etablierung der Symbiose zwischen NT und Effekt-dirigierter-Analytik dar.

Im Bereich der komplexen Stoffidentifizierung werden Daten ähnlicher Chemikalien („read-across“) oder Ergebnisse von Struktur-Wirkungsmodellen („QSAR“) herangezogen. Zudem wird eine umfassende Datenbank aufgebaut, mit deren Hilfe auch eine retrospektive Auswertung von Gewässer-Verunreinigungen möglich ist. Um die riesigen Datenmengen optimal zu nutzen, bedarf es intelligenter Auswerteprogramme. Die vorhandenen Software-Tools müssen hierzu aber noch verbessert werden.

### Weitere Projektpartner

Die Firma WATERS bringt in das Projekt als Leihgabe ihr neues Flugzeit-Massenspektrometer Vion IMS QToF ein. Es ist das einzige Gerät, das derzeit in der Lage ist, CCS-Daten zu generieren, die zur Befundabsicherung genutzt werden können. Durch die Mitarbeit in nationalen und internationalen Arbeitskreisen fließt aktuelles Know-How in die Projektarbeit mit ein.

### Projektdauer

Das Projekt mit dem Anwenderkonsortium ist zunächst auf 2 Jahre angelegt.

### Ansprechpartner bei IWW

Dr. Peter Balsaa, Dr. Anne Simon