

# MWAS 2018

## Mülheimer Wasseranalytisches Seminar

12.-13. September 2018 // Stadthalle Mülheim // Weitere Informationen unter [www.iww-online.de](http://www.iww-online.de)



IWW RHEINISCH-WESTFÄLISCHES INSTITUT FÜR  
WASSERFORSCHUNG GEMEINNÜTZIGE GMBH

UNIVERSITÄT  
DUISBURG  
ESSEN

Offen im Denken



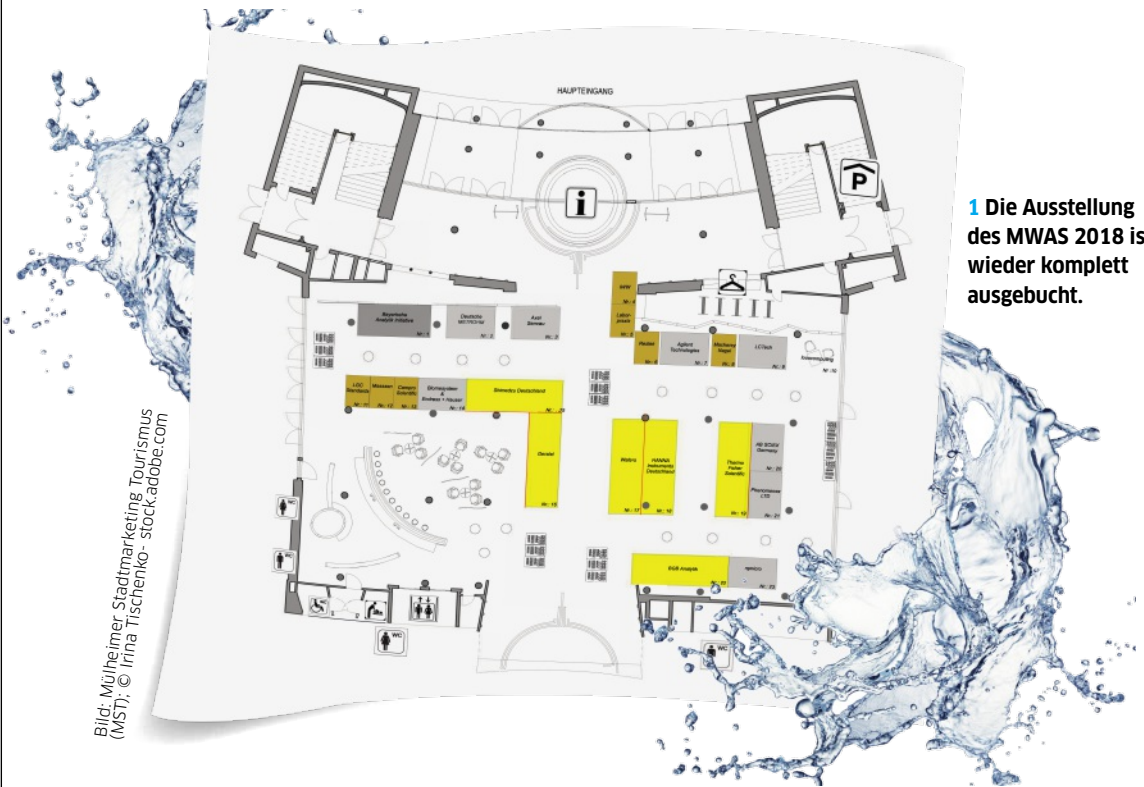
- // Produkt-Highlights
- // Hallenplan
- // Themenschwerpunkte

Powered by



# Die Analytik zu Gast in Mülheim

**Zwei Tage an der Ruhr im Zeichen des Wassers** // Das IWW Zentrum Wasser lädt in diesem Jahr zum dritten Mal zum Mülheimer Wasseranalytischen Seminar ein. Das zweitägige Seminar wird begleitet von einer Fachausstellung zahlreicher Firmen. Die Veranstalter erwarten eine Tagung mit deutlich mehr als 200 Teilnehmern aus den Bereichen Labor, Hochschule, Industrie und Behörden.



**1 Die Ausstellung des MWAS 2018 ist wieder komplett ausgebucht.**

Bild: Mülheimer Stadtmarketing Tourismus (MST); © Irina Tischenko - stock.adobe.com

## TORSTEN C. SCHMIDT UND ULRICH BORCHERS\*

Am 12. und 13. September 2018 veranstaltet das IWW Zentrum Wasser das dritte Mülheimer Wasseranalytische Seminar (MWAS 2018). Als Veranstaltungsort hat sich aus Sicht der Veranstalter die Stadthalle in Mülheim an der Ruhr bestens bewährt. Sie hat sich bereits bei den vorangegangenen Seminaren als angenehmer und genau passender Rahmen bewiesen für die Kombination von Fachtagung und interaktiver Ausstellung. Sie ist zentral gelegen, verkehrstechnisch

günstig angebunden und befindet sich unmittelbar am Ufer der Ruhr, die Namensgeber für die ganze Region ist. Die Ruhr sichert mit ihrem Wasser aus dem niederschlagsreichen Sauerland und Rothaargebirge die Wasserversorgung von Millionen Menschen und der verarbeitenden Industrie in der Umgebung.

Gleichzeitig ist sie in einem stark industrialisierten und dicht bevölkerten Gebiet aber auch wichtig als Vorfluter für zahlreiche kommunale und industrielle Kläranlagen. Nachdem das Programm „Reine Ruhr“ der Landesregierung von NRW in den letzten Jahren exemplarisch für an-

dere vielfach genutzte Flüsse in urbanen Räumen Impulse für einen nachhaltigen Ressourcenschutz gegeben hat, werden aktuell Projekte gefördert und vom IWW Zentrum Wasser bearbeitet, die das Baden und Schwimmen in der Ruhr wieder möglich machen sollen. Dies ist ein wichtiger Beitrag zur Lebensqualität

\*Prof. Dr. T. C. Schmidt  
Universität Duisburg-Essen, 45141 Essen und IWW Zentrum Wasser, 45476 Mülheim an der Ruhr, Tel. +49-201-183-6774

\*\*Dr. U. Borchers  
IWW Zentrum Wasser, 45476 Mülheim an der Ruhr, Tel. +49-208-40303-210



vieler Menschen, aber auch für das Image dieser wichtigen Lebensader des Ruhrgebiets.

In diesem Kontext kommt der Kontrolle der Wasserqualität weiterhin eine herausragende Rolle zu. Dies erfordert eine effiziente Wasserqualitätsüberwachung, verbunden mit einer modernen und leistungsstarken Wasseranalytik, die den vielfältigen Aufgaben und sich wandelnden Anforderungen gewachsen ist. Neben den klassischen chemischen Ansätzen werden auch die molekularbiologischen, wirkungsbezogenen und stärker investigativen Techniken wie die Non-Target-Analytik immer wichtiger und stehen vermehrt im Fokus der Diskussion.

Das IWW Zentrum Wasser zählt zu den führenden Instituten in Deutschland für Forschung, Beratung und Weiterbildung in der Wasserversorgung und ist ein An-Institut der Universität Duisburg-Essen (UDE). Die Leistungen seiner sechs Geschäftsbereiche Wasserressourcen-Management, Wassertechnologie, Wassernetze, Wasserqualität, Angewandte Mikrobiologie und Wasserökonomie & Management werden z. B. von Versorgungsunternehmen, Industrie, Abwasserverbänden, öffentlichen Einrichtungen und Behörden in Anspruch genommen. Ein wichtiger Pfeiler der Geschäftstätigkeit ist die Analytik. Die IWW Wasseranalytik verfügt über international anerkannte Analytiker, die mit erfahrenen Teams und moderner instrumenteller Ausstat-

tung ein breites Spektrum an zuverlässiger Analytik anbieten.

### Suspect-Screening, Big Data und Hot-Targets

Auch in den letzten beiden Jahren zwischen dem MWAS 2016 und der diesjährigen Veranstaltung hat die Wasseranalytik von vielen Innovationen in der Gerätetechnik profitiert. Neue Methoden erweitern das Stoffspektrum, vor allem im Bereich der polaren Substanzen und ermöglichen bislang unerreichbare Nachweisgrenzen. Gleichzeitig sind die Anforderungen an die Leistungsfähigkeit wasseranalytischer Verfahren z. B. durch erweiterte regulatorische Vorgaben erneut erheblich gestiegen, sodass weiterhin Bedarf für innovative Entwicklungen besteht. In diesem Kontext berichten an beiden Veranstaltungstagen namhafte Wissenschaftler, Anwender und Hersteller aus Deutschland und der Schweiz zu aktuellen Fragestellungen der Wasseranalytik sowie aus ihren Arbeitsgebieten. Beispielfolgend sollen hier drei Themen des Seminars dargestellt werden:

- Ein Schwerpunkt des zweiten Tages liegt auf der hochauflösenden Massenspektrometrie. Die spannenden Möglichkeiten des Suspect-Screenings und der Non-Target-Analytik sind als Ergänzung zur oft gesetzlich geregelten Strategie der Abarbeitung von langen Listen an Zielanalyten (Targets) eine zukunftsweisende neue Alternative (s. auch Beitrag



Bild: Mülheimer Stadtmarketing Tourismus (MST)

### 2 Die Stadthalle Mülheim ist auch diesmal Veranstaltungsort des Mülheimer Wasseranalytischen Seminars.

„Organischen Substanzen auf der Spur“ ab Seite 4).

- Daneben wird es Beiträge mit einem starken Trinkwasserbezug geben, die sich um die so genannten „Hot-Targets“ drehen sowie um die persistenten und hochmobilen organischen Stoffe (PMOC).
- Daneben ist auch in der Wasseranalytik die Datenthematik entscheidend. So widmen sich einige Vorträge der Beantwortung der Frage zu „Big Data“ in der Wasseranalytik. Mit den neuen Techniken der Non-Target-Analytik kommt es zu bisher ungeahnt großen Datenmengen, die rein technisch und vor allem analytisch gemanagt werden müssen.

Begleitend zu den Vorträgen des Hauptprogramms gibt es wieder einen umfangreichen Ausstellungsbe- reich, der von mehr als 20 Firmen zur Vorführung ihrer neuesten Entwicklungen analytischer Geräte, Applikationen und Ausrüstungen genutzt wird. Das Tagungsprogramm sieht hierzu an beiden Tagen großzügig bemessene Zeitfenster vor, die für Workshops und Präsentationen der ausstellenden Firmen genutzt werden. Hier besteht für die Teilnehmer an der Veranstaltung die Möglichkeit einer umfassenden Information und Diskussion mit Firmenexperten.

Nicht zuletzt wird wie erstmals vor zwei Jahren eine ergänzende Ausstellung wissenschaftlicher Poster angeboten. Dies soll ausführliche Diskussionen wichtiger Themen fördern und den Autoren die Möglichkeit geben, ihre Forschungs- oder Projekt-Ergebnisse mit anderen Teilnehmern zu teilen. ■



**LP Info**

Marc Platthaus, Chefredakteur

### WATER AWARD

In diesem Jahr wird auf dem MWAS auch wieder der **Mülheim Water Award (MWA)** verliehen. Überreicht und präsentiert wird er im Rahmen des Konferenzdiners am 12. September. Dieser Preis richtet sich an europäische Bewerber und steht 2018 unter dem Motto **„Innovationen für Wassersysteme und Wasseranalytik für eine nachhaltige Wasserwirtschaft und sichere Trinkwasserversorgung“**. Der Preis ist mit einer Summe von 10 000 Euro dotiert. Die Preisträger werden am zweiten Tag des MWAS 2018 Gelegenheit haben, ihre innovativen Arbeiten im Tagungsprogramm vorzustellen.

**LP Tipp+**

mehr zum Thema:

- Mehr zum Mülheimer Wasseranalytischen Seminar 2018 finden Sie auf der Webseite [www.iww-online.de](http://www.iww-online.de) unter der Rubrik Veranstaltungen.
- Mehr zum Thema **Wasser- und Umweltanalytik** gibt es auch auf [www.laborpraxis.de](http://www.laborpraxis.de) in der entsprechenden Rubrik.

**1** In einem Ringversuch wurde ein Suspect-Screening mit 39 Substanzen in fünf Wasserproben mit unterschiedlicher Matrix durchgeführt.



# Organischen Substanzen auf der Spur

**Suspect-Screening verschiedener wässriger Matrices mittels LC-IM-HRMS** // Durch die Kopplung der hochauflösenden Massenspektrometrie mit der Ionenmobilitätsspektrometrie können CCS-Werte von Ionen in der Gasphase bestimmt werden. Diese können als zusätzliches Identifizierungskriterium herangezogen werden – besonders für das Suspect-Screening, wenn Referenzstandards nicht vorhanden sind oder Informationen zu Fragmentbildungen fehlen.

VANESSA HINNENKAMP\*  
\*\*, TORSTEN C. SCHMIDT\*  
\*\*, PETER BALSAA\*\*

Der Einsatz der hochauflösenden Massenspektrometrie ermöglicht es, Screening-Methoden durchzuführen, um Substanzen in Proben zu erkennen, ohne Referenzstandards zur Verfügung zu haben. Dabei wird durch die Vorgabe der Summenformel nach der exakten Masse unter Berücksichtigung der Adduktbildung in der Elektrosprayionisation (ESI) gesucht. Über die Summenformel kann das theoretische Isotopenverhältnis berechnet und mit dem experimentellen abgeglichen werden. Als weiteres Identifizierungskriterium können Fragmentspektren herangezogen werden.

Seit wenigen Jahren werden auch zunehmend Kopplungen der Ionenmobilitätsspektrometrie mit der Massenspektrometrie (IM-MS) eingesetzt, um eine zusätzliche, orthogonale Trenndimension zu erhalten. In der Ionenmobilitätsspektrometrie werden Ionen in der Gasphase durch Anlegen eines elektrischen Feldes getrennt. Durch das Einleiten eines inerten Driftgases werden die Ionen durch Kollisionen mit dem Driftgas abgebremst. Größere Ionen kollidieren dabei stärker mit den Driftgasmolekülen als kleinere Ionen, was dazu führt, dass sich die Aufenthaltszeit in der IM-Zelle (Driftzeit) verlängert [1]. Aus den charakteristischen Driftzeiten der Ionen kann der Kollisionsquerschnitt (engl. collision cross section, CCS) abhängig vom Instrumenttyp entweder über die Mason-Schamp-

Gleichung oder über eine Kalibration analytähnlicher Standards berechnet werden [2, 3].

## Ziele der Arbeit

Im Rahmen eines nationalen Forschungsprojekts zur Non-Target-Analytik erfolgte die Teilnahme an einem internationalen Ringversuch, welcher vom KWR Watercycle Research Institute (Niederlande) angesetzt wurde. Im Juni 2017 wurden acht Proben an insgesamt 16 Teilnehmer verschickt. Neben der Non-Target-Analytik sollte mit fünf Pro-

\*V. Hinnenkamp, Prof. Dr. T. C. Schmidt, Universität Duisburg-Essen, Instrumentelle Analytische Chemie und Zentrum für Wasser- und Umweltforschung, 45141 Essen, Tel. +49-201-183-6772  
\*\*Dr. P. Balsaa, IWW Zentrum Wasser, 45476 Mülheim an der Ruhr

ben ein Suspect-Screening durchgeführt werden. Diese fünf Wasserproben waren mit 39 Substanzen in unterschiedlichen Konzentrationsniveaus dotiert, die den Teilnehmern mitgeteilt wurden. Es handelte sich dabei um drei Trinkwässer (TW), (Konzentrationsniveau 0,025 µg/L, 0,25 µg/L und 2,5 µg/L), sowie ein Grundwasser (GW) und ein Oberflächenwasser (OW) (Konzentrationsniveau 1 µg/L). Obwohl im Ringversuch nicht gefordert, wurde der Einsatz von CCS-Werten als zusätzliches Identifizierungskriterium näher betrachtet. Ziel war es, mithilfe verschiedener Datenbanken die CCS-Werte der 39 Substanzen abzugleichen. Darüber hinaus sollte geprüft werden, ob CCS-Werte Konzentrations- und Matrixabhängigkeiten aufweisen.

## Methode

Die Messungen erfolgten mit einer Acquity-I-Class-UPLC-Anlage und einem Vion-IMS-QToF-System (Waters). Als Säule wurde eine HSS T3 (2,1 x 100 mm) 1,8 µm und eine BEH-Amid-Vorsäule (2,1 x 5 mm) 1,7 µm verwendet. Die Elution erfolgte mit Wasser und Methanol mit je 0,1% Ameisensäure. Alle Proben wurden in Triplikaten gemessen.

Dabei wurde ein Probevolumen von 100 µL injiziert. Zu Beginn war der Eluent 100% wässrig (1 min). Der organische Anteil stieg von 0% auf 99,0 % innerhalb von 14 min und wurde für 2 min gehalten. Anschließend wurde der Eluent wieder auf 100% Wasser eingestellt. Die Datenaufnahme betrug 22 min. Alle Messungen erfolgten in einem Massenbereich von 100 bis 1000 Da und im HDMSE-Aquisitionsmodus. Dabei wurden Low-energy-Spektren bei 4 eV und High-energy-Spektren im Bereich von 15 bis 40 eV aufgenommen. Die CCS-Werte der Analyten wurden über eine Kalibration mit analytähnlichen Standards bestimmt und messtäglich mit einem Qualitätskontrollstandard überprüft. Vom Gerätehersteller wird eine maximale Abweichung der CCS-Werte über mehrere Messungen von 2% als Erfahrungswert angegeben.

## Ergebnisse

Für das Suspect-Screening wurden die Summenformeln der Zielsubstanzen in die Unifi-Software von Waters übertragen. Die Berechnungen des m/z und des theoretischen Isotopenverhältnisses erfolgte automatisch. Für das Suspect-Screening wurde eine maximale Abweichung

des m/z von ±2 Da und eine Abweichung des Isotopenverhältnisses von <30% zugelassen. Für 21 der 39 Substanzen waren bereits Einträge zu Retentionszeit und Fragmenten in der eigenen Datenbank vorhanden. Diese wurden als zusätzliches Identifizierungskriterium mit einer Abweichung der Retentionszeit von maximal ±0,5 min und dem Vorhandensein von mindestens einem Fragment herangezogen. Für die Auswertung der einzelnen Substanzen wurde der ESI-Modus ausgewählt, der die höheren Peakflächen generierte. Anschließend wurden im positiven ESI Modus [M+H]<sup>+</sup>- und [M+Na]<sup>+</sup>-Addukte betrachtet und das Addukt, das die größeren Peakflächen produzierte, ausgewertet. In Tabelle 1 sind die Ergebnisse des Suspect-Screenings für 38 Substanzen dargestellt.

Im Trinkwasser konnten 27 der 39 dotierten Substanzen in der kleinsten Konzentration (0,025 µg/L) detektiert werden. In der mittleren Konzentration waren es bereits 37 und im Konzentrationsniveau 2,5 µg/L 38 Stoffe. Pyrazol (68 Da) wurde in keiner der Proben nachgewiesen, da gerätetechnisch Substanzen mit einer Masse <100 Da nicht zu detektieren sind. Die RSD der ermittelten CCS-Werte liegen zwischen 0,07% und 0,42%. Damit liegen diese deutlich unterhalb der vom Gerätehersteller angegebenen maximalen Abweichung von 2%. Um zu prüfen, ob CCS-Werte Matrix- und Konzentrationsabhängigkeiten aufweisen, wurden die Werte aus den fünf Proben einzeln betrachtet. Abbildung 2 zeigt für ausgewählte Substanzen (2,4 Dinitrophenol, Carbofuran, Etrimpfos, Fenofibrat und Saccharin) die in der jeweiligen Konzentration und Matrix gemessenen CCS-Werte als Mittelwerte der Triplikate und die Standardabweichung. Diese Auswertung ergab, dass die CCS-Werte für die exemplarisch dargestellten Substanzen bei unterschiedlichen Konzentrationen und Matrices nur sehr geringe Abweichungen aufweisen. Insgesamt wurden für alle Substanzen relative Standardabweichungen der CCS-Werte von bis zu 0,4% innerhalb aller Messungen berechnet. Folglich können CCS-Werte als matrix- und konzentrationsunabhängig angesehen werden. Die Werte wurden an-

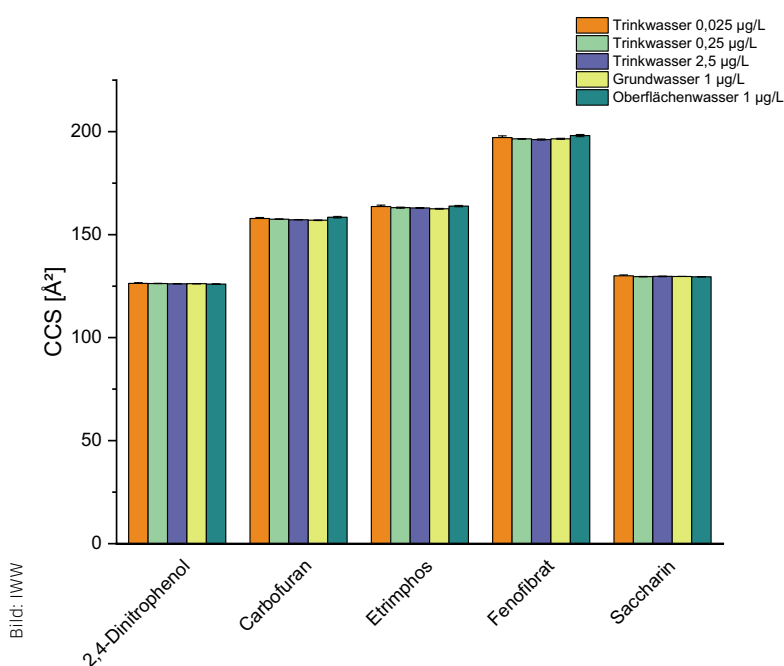


Bild: IWW

**2 Darstellung der gemessenen CCS-Werte am Beispiel ausgewählter Substanzen in den verschiedenen Matrices und Dotierungen.**

**LP Tipp+**  
mehr zum Thema:

- Die Literaturstellen zum Beitrag finden Sie unter dem Suchbegriff „Organische Substanzen IWW“ auf [www.laborpraxis.de](http://www.laborpraxis.de).
- Besuchen Sie das **3. Müllheimer Wasseranalytische Seminar** am 12. und 13. September (Mehr Informationen unter [www.iww-online.de](http://www.iww-online.de)).



**Tabelle 1: Auflistung der 38 detektierten Komponenten mit ihrer Masse, dem Ionisationsmodus, in dem diese ausgewertet wurden und dem betrachteten Addukt. Die Proben, in denen die jeweiligen Substanzen detektiert werden konnten sind mit x gekennzeichnet. Die angegebenen CCS-Werte sind als Mittelwert aller vorhandenen Werte inklusive der relativen Standardabweichung (RSD) angegeben.**

Substanz	Masse [Da]	ESI Modus	Addukt	TW 0,025 µg/L	TW 0,25 µg/L	TW 2,5 µg/L	GW 1,0 µg/L	OW 1,0 µg/L	CCS [Å <sup>2</sup> ]	RSD [%]
1,3-Diphenylguanidin	211,1109	Positiv	[M+H] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	151,0	0,38
1H Benzotriazol	119,0483	Positiv	[M+H] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	122,2	0,22
2,4-Dinitrophenol	184,0120	Negativ	[M-H] <sup>-</sup>	x	x	x	x	x	126,2	0,14
5-Chloro-1H-benzotriazol	153,0094	Negativ	[M-H] <sup>-</sup>	-	x	x	x	x	123,0	0,07
Aldicarb	190,0776	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	147,3	0,40
Aldicarb-sulfoxid	206,0725	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	146,0	0,38
Amidosulfuron	369,0413	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	181,1	0,42
Bezafibrat	361,1081	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	189,6	0,41
Brodifancoum-A	522,0831	Negativ	[M-H] <sup>-</sup>	x	x	x	x	x	235,1	0,21
Bromoxynil	274,8581	Negativ	[M-H] <sup>-</sup>	x	x	x	x	x	128,5	0,14
Butocarboxim-sulfoxid	206,0725	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	147,2	0,34
Carbofuran	221,1052	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	157,6	0,37
Clofibrinsäure	214,0397	Negativ	[M-H] <sup>-</sup>	-	x	x	x	x	164,9	0,38
Di-glyme	134,0943	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	-	x	x	x	x	131,5	0,39
Dinoseb	240,0746	Negativ	[M-H] <sup>-</sup>	x	x	x	x	x	151,2	0,16
Dinoterb	240,0746	Negativ	[M-H] <sup>-</sup>	x	x	x	x	x	151,2	0,14
Etrimfos	292,0647	Positiv	[M+H] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	163,0	0,23
Fenofibrat	360,1128	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	196,4	0,30
Flonicamid	229,0463	Positiv	[M+H] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	147,8	0,20
Foramsulfuron	452,1114	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	201,2	0,34
Furosemid	330,0077	Negativ	[M-H] <sup>-</sup>	x	x	x	x	x	172,5	0,19
Gabapentin	171,1259	Positiv	[M+H] <sup>+</sup>	-	x	x	x	x	140,8	0,21
Gemfibrozil	250,1569	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	-	x	x	x	x	168,8	0,22
Indoxacarb	527,0707	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	220,4	0,18
Iohexol	820,8803	Positiv	[M+H] <sup>+</sup>	-	x	x	x	x	232,1	0,25
Ioxynil	370,8304	Negativ	[M-H] <sup>-</sup>	x	x	x	x	x	132,7	0,19
Mecoprop	214,0397	Negativ	[M-H] <sup>-</sup>	-	x	x	x	x	149,3	0,35
Methomyl	162,0463	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	-	-	x	x	x	186,1	0,17
Metrafenon	408,0572	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	195,1	0,22
Pipamperone	375,2322	Positiv	[M+H] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	195,7	0,26
Propazin	229,1094	Positiv	[M+H] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	156,4	0,21
Propiconazol	341,0698	Positiv	[M+H] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	178,6	0,34
Saccharin	182,9990	Negativ	[M-H] <sup>-</sup>	x	x	x	x	x	129,7	0,19
Spinosyn A	731,4609	Positiv	[M+H] <sup>+</sup>	-	x	x	x	x	274,3	0,22
Spinosyn D	745,4765	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	-	x	x	x	x	278,4	0,23
Tembotrion	440,0308	Positiv	[M+Na] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	183,6	0,24
Triphenylphosphinoxid	278,0861	Positiv	[M+H] <sup>+</sup>	x	x	x	x	x	162,2	0,27
Tylosin	915,5192	Positiv	[M+H] <sup>+</sup>	-	x	x	x	x	321,4	0,29

schließend mit Einträgen zum einen aus einer eigenen CCS-Datenbank (CCS-Datenbank IWW, 217 Einträge) und zum anderen mit der Pestizid-CCS-Datenbank von Waters (CCS-Datenbank Waters, 608 Einträge) verglichen. Zur Erstellung der eigenen Datenbank wurden zuvor CCS-Werte der Substanzen durch mindestens drei Messläufe Injektion und nach zuvor durchgeführter Kalibration bestimmt. Für 15 Substanzen waren Einträge in der eigenen und für acht Substanzen in der Pestizid-Datenbank vorhanden, die mit denen der Proben verglichen werden konnten. Mittels der eigenen Datenbank wurden Abweichungen zwischen -1,9% und 1,2% und auf der Basis der CCS-Datenbank von Waters Abweichungen von -0,6% bis 0,6% berechnet. Schlussfolgernd können real gemessene CCS-Werte durch den Abgleich mit Werten aus CCS-Datenbanken überprüft werden. Beträgt die Abweichung <2% kann eine Übereinstimmung als gesichert gelten. Der CCS-Wert stellt somit eine zusätzliche Möglichkeit der Identifizierung in der Target-Analytik als auch im Suspect-Screening dar. Dies gilt insbesondere dann, wenn Referenzstandards nicht kommerziell verfügbar sind oder Informationen zur Fragmentbildung fehlen. Als wichtiges Element der Ergebnisabsicherung sollten die CCS-Werte zukünftig unbedingt stärker genutzt werden und somit auch Eingang in Open-Source-Datenbanken finden. ■



**LP Info**

**Marc Platthaus, Chefredakteur**

### CCS-WERT

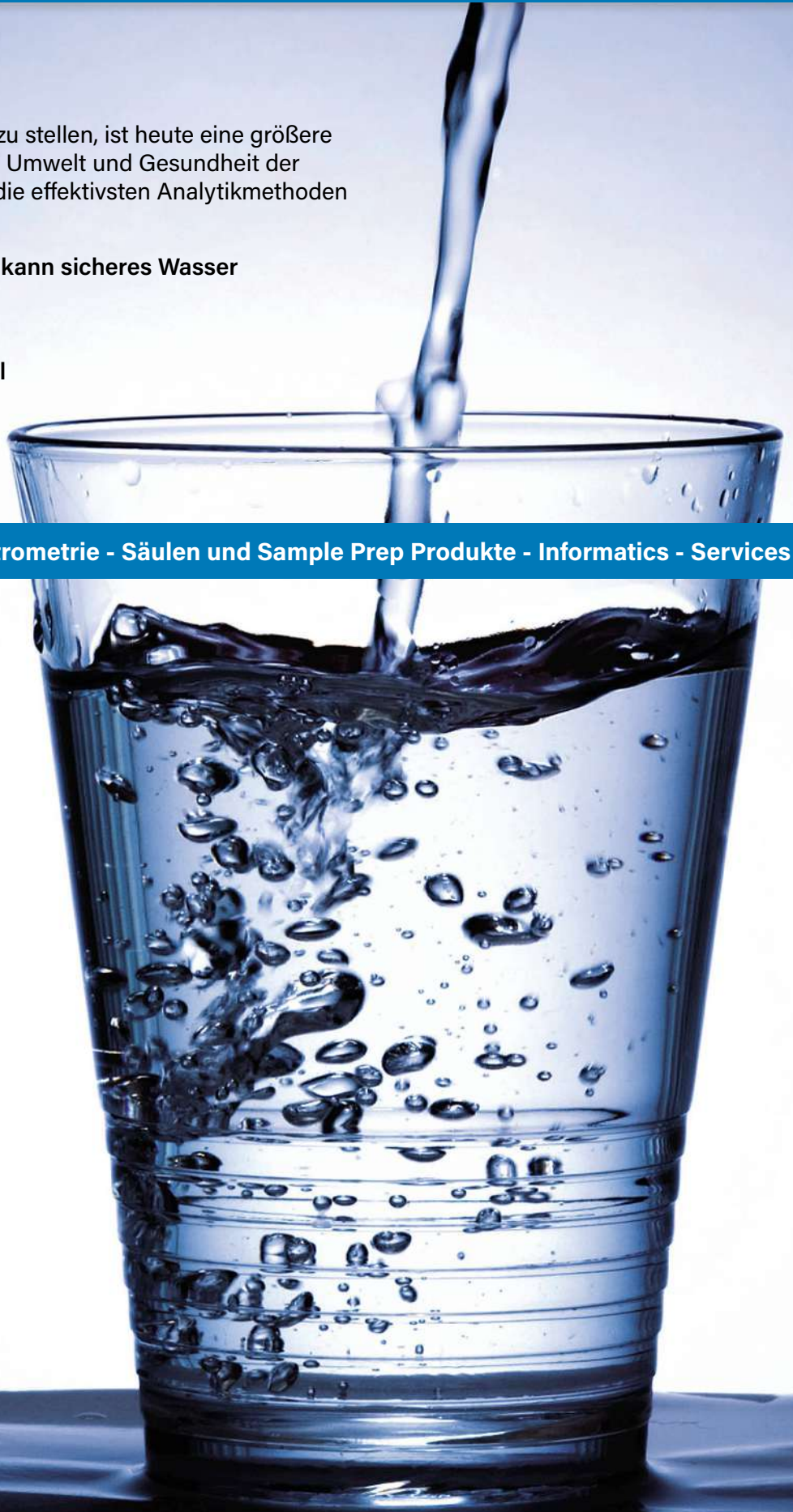
Der CCS-Wert ist abhängig von der **Größe, Ladung** und **Anordnung der Atome** (Struktur) des Moleküliions. Zur Identifizierung einer Substanz kann dieser als zusätzliches Identifizierungskriterium herangezogen werden. Allerdings sind bislang nur wenige CCS-Datenbanken frei verfügbar.

Sauberes Wasser zur Verfügung zu stellen, ist heute eine größere Herausforderung als je zuvor. Um Umwelt und Gesundheit der Menschen zu schützen, müssen die effektivsten Analytikmethoden eingesetzt werden.

**Nur mit der besten Technologie kann sicheres Wasser gewährleistet werden.**

[www.waters.com/environmental](http://www.waters.com/environmental)

**Chromatographie - Massenspektrometrie - Säulen und Sample Prep Produkte - Informatics - Services**



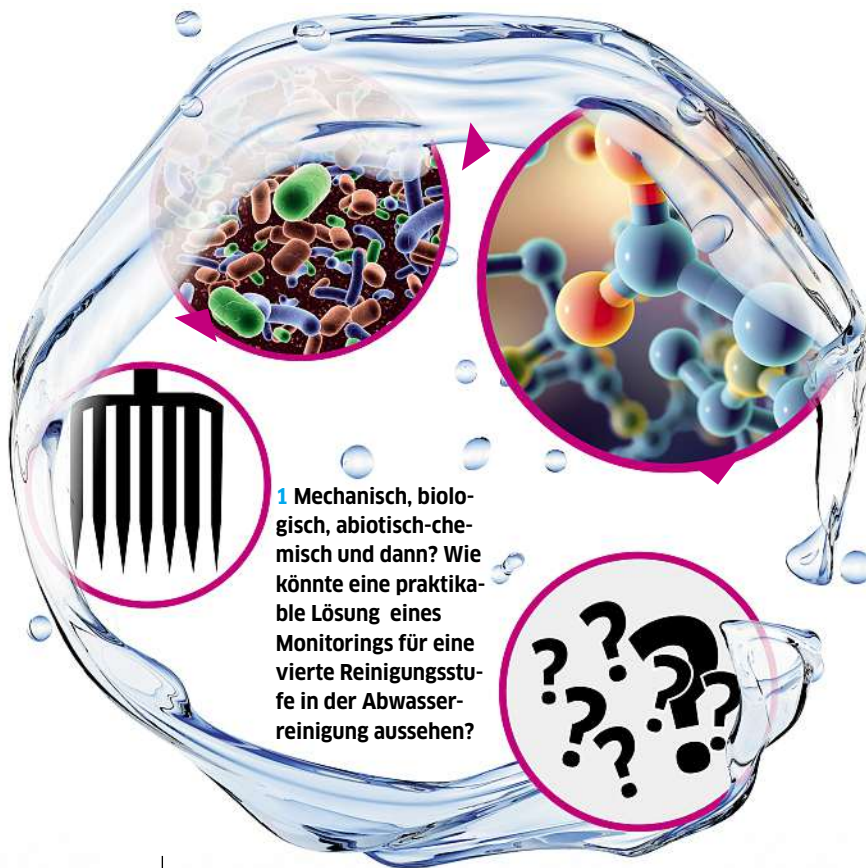


# Vier Schritte vorwärts

## Biotests zum Monitoring der Spurenstoffadsorption mit granulierter Aktivkohle //

Aktivkohle gilt als vielversprechend für die Abwasserreinigung im Rahmen einer vierten Reinigungsstufe. Doch wie könnte eine praxistaugliche Lösung zur Bewertung der Spurenstoffadsorption an Aktivkohle aussehen und was ist mit dem Kosten-Nutzen-Verhältnis? Per wirkungsbezogener Analytik könnte ein ganzheitlicher Ansatz nach dem Vorsorgeprinzip entstehen.

Bild: ©radiorio, © Kateryna Kon, © sergey makarenko maxrosortig, ©- stock.adobe.com



**1 Mechanisch, biologisch, abiotisch-chemisch und dann? Wie könnte eine praktische Lösung eines Monitorings für eine vierte Reinigungsstufe in der Abwasserreinigung aussehen?**

**ANNE SIMON UND ELKE DOPP\***

Spurenstoffe wie Medikamentenrückstände stellen Kläranlagen vor große Herausforderungen. Die typischen drei Reinigungsstufen – mechanisch, biologisch und abiotisch-chemisch – sind nicht in der Lage diese vollständig aus den Abwässern zu entfernen. Derzeit viel diskutiertes Thema ist

daher eine vierte Reinigungsstufe. Aktivkohle wird dabei als vielversprechendes Filtermaterial gehandelt. Doch wie kann eine praktikable Lösung hierfür aussehen?

Zurzeit erfolgt die routinemäßige Überprüfung der Reinigungsleistung der vierten Reinigungsstufe, im speziellen Adsorptionsverfahren mit Aktivkohle, über die chemische Einzelstoffanalytik. Die Betrachtung der gesamten Wasserprobe im Sinne

einer wirkungsbezogenen Analytik (analog zu einem Summenparameter) erfolgt hingegen nicht. Dabei ist nicht auszuschließen, dass sich das toxikologische Potenzial des gereinigten Wassers mit steigender Laufzeit nachteilig verändern kann, wenn Verdrängungseffekte zwischen organischen Einzelstoffen auftreten und nicht erkannt werden, bzw. wenn die Aktivkohle nicht rechtzeitig ausgetauscht oder reaktiviert wird. Aus diesem Grund lag der Fokus in dem vom Ministerium geförderten Forschungsvorhaben (Az.: 17-04.02.01-04b/201) ausschließlich auf der Effektivität und Filtratqualität granulierter Aktivkohle (GAK)-Festbettadsorber von drei verschiedenen Kläranlagen. Durch den Einsatz einer Biotestbatterie als Monitoringinstrument ergab sich neben der rein chemischen Analytik organischer Einzelstoffe die Möglichkeit einer ganzheitlichen Betrachtung der Wasserqualität.

Ziel des Projektes war es, bei der weitergehenden Abwasserreinigung nachzuweisen oder auszuschließen, dass neben dem zeitlich voranschreitenden Durchbruch einzelner organischer Spurenstoffe durch Aktivkohlefilter weitere Stoffe unentdeckt durchbrechen. Dadurch sollte eine schnelle Aussage über das toxische Verhalten des Filtrats möglich sein, sodass zeitnah auf Veränderungen der Wasserqualität im Ablauf der vierten Reinigungsstufe reagiert werden kann. Eine abschließende Wirtschaftlichkeitsberechnung

\* Dr. A. Simon, Prof. Dr. Elke Dopp  
IWW Rheinisch-Westfälisches Institut für Wasser, 45476 Mülheim an der Ruhr, Tel. +49-208-40303-0



nung umfasste sowohl den unterschiedlichen Betriebsablauf der Kläranlagen sowie die Effektivität des Einsatzes der Biotestbatterie. Zudem wurde mit statistischen Methoden ermittelt, inwiefern die Ergebnisse der chemischen und biologischen Analytik Auswirkung auf die maximale Lauf- bzw. Standzeit von GAK-Chargen in Filtern haben und somit Rückwirkung auf die Kosten der Verfahrensstufen haben.

### Versuchsaufbau & Methoden

Drei Kläranlagen (KA) wurden in die Untersuchungen einbezogen:

- KA Rodenkirchen mit 88 000 EW und zwei parallel betriebenen Adsorbern, die mit unterschiedlichen GAK (Aquasorb 5000 und Hydriffin AR) bestückt waren.
- KA des ostwestfälischen Abwasserverbands Obere Lutter (AOL) mit 380 000 EW (Anschlussgröße von ca. 75 000 Einwohnern und 110 000 Einwohnergleichwerten) und drei parallel geschalteten Adsorbern mit Einfach- und Zweifach-Reaktivat Aquasorb 5000.
- KA Gütersloh Putzhagen mit 150 600 EW (Anschlussgröße von 145 000 EW) und zwei GAK-Großadsorbern (einer bestückt mit Frischkohle, der andere mit Reaktivat des Typs Hydriffin AR) und einem Kleinadsorber mit Frischkohle des Typs Hydriffin AR, um den Einfluss einer höheren Filtergeschwindigkeit bzw. geringerer Leerbettkontaktzeiten untersuchen zu können.

Insgesamt wurden in den Zuläufen und Filtraten der Adsorber 108 Wasserproben mittels neun biologischer Prüfverfahren, die verschiedene Wirkebenen abdecken, untersucht. Zur Ermittlung der allgemeinen Zellschädigung wurde der MTT-Test durchgeführt, zur Ermittlung der östrogenen Wirkung der ER-CALUX und zur Detektion des genotoxischen Potenzials der umuC-Test (mit und ohne metabolischer Aktivität). Zum Nachweis phytotoxischer Wirkpotenziale wurden der Algenwachstumshemmtest und der Wachstumsinhibitionstest mit der Wasserlinse *Lemna minor* durchgeführt. Die Beurteilung der Umweltrelevanz eines Schadstoffs in Gewässern erfolgte anhand des Daphnientests. *Daphnia magna* als Primärkon-

sument stellt ebenfalls eine wichtige Rolle im limnischen Nahrungsnetz dar, da nur schwimmende Daphnien in der Nahrungskette von Wassertieren zur Verfügung stehen. *Aliivibrio fischeri* dient als Modellorganismus für die Biolumineszenz und repräsentiert die Destruenten (Zersetzer organischen Materials). Kombiniert mit dem akuten Leucht bakterientest erlaubt der Zellvermehrungshemmtest den direkten Vergleich von akuter und chronischer Toxizität bei Betrachtung verschiedener Endpunkte (Biolumineszenz und Wachstumshemmung). Zusätzlich zu den biologischen Testverfahren erfolgte die Untersuchung einzelner anorganischer Parameter zum Ausschluss toxischer Effekte auf die Zelllinien sowie die Untersuchung von zwölf organischen Leitparametern.

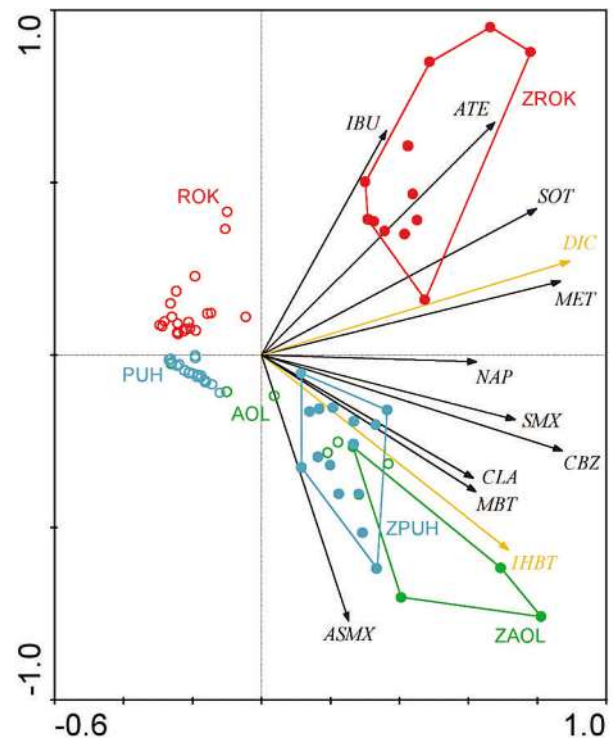
### Ergebnisse & Diskussion

Die erzielten Ergebnisse verdeutlichen, dass die drei untersuchten Kläranlagen über eine sehr gute Reinigungseffizienz ihres Abwassers verfügen. Durch den Einsatz der Aktivkohle als weiterführende Reinigungsstufe konnten die geringen Spurenstoffkonzentrationen zudem weiter verringert werden (s. Tab. 1).

Für alle ausgewählten Leitsubstanzen der Gruppe der Antibiotika und Betablocker, der Gruppe andere Humanpharmaka (Analgetikum und Antikonvulsivum) und der Gruppe Korrosionsschutzmittel der KA Rodenkirchen zeigte der mit Aquasorb 5000 bestückte Adsorber, die bessere Eliminationsleistung verglichen mit der GAK Hydriffin AR.

Auf der KA AOL nahm für alle ausgewählten Leitsubstanzen mit fortschreitenden Bettvolumina (BV) die Elimination kontinuierlich ab. Eine Desorption konnte für N4-Acetylsulfamethoxazol, Sulfamethoxazol, Diclofenac, Ibuprofen und Naproxen aufgezeigt werden.

Auf der KA Putzhagen war für Sulfamethoxazol die Elimination mit fortschreitenden Bettvolumina (BV) beider Großadsorber rückläufig und für N4-Acetylsulfamethoxazol und Clarithromycin war sie schon von Beginn an nur mäßig gut. Die Elimination von Diclofenac und Naproxen war in den beiden Großadsor-



Bilder: IWW Rheinisch-Westfälisches Institut für Wasser

**2 Hauptkomponentenanalyse der absoluten Konzentration der Spurenstoffe. Abläufe Nachklärung (gefüllte Symbole, mit „Z“ gekennzeichnet), Abläufe Adsorber (offene Symbole), rot: KA Rodenkirchen (ROK), grün: KA des Abwasserverbands Obere Lutter (AOL), blau: KA Putzhagen (PUH), Pfeile: Spurenstoffe, IBU: Ibuprofen, ATE: Atenolol, SOT: Sotalol, MET: Metoprolol, NAP: Naproxen, SMX: Sulfamethoxazol, CBZ: Carbamazepin, CLA: Clarithromycin, MBT: 4-Methylbenzotriazol, ASM: N4-Acetylsulfamethoxazol**

bern bis zum Ende des Untersuchungszeitraumes mit mehr als 20 000 BV sehr gut und langzeitstabil. 1H-Benzotriazol und 4-Methylbenzotriazol sind gut wasserlöslich und schwer abbaubar. Dennoch gelang ein effektiver Rückhalt beider Spurenstoffe bis zu einem durchgesetzten Bettvolumen von ca. 17 000 m<sup>3</sup> Wasser/m<sup>3</sup> Aktivkohle in beiden Großadsorbern.

In den umfangreichen Testreihen an verschiedenen GAK-Adsorbern mit unterschiedlichen Abwasserzusammensetzungen konnte im Ablauf der Adsorber nur selten ein ökotoxikologischer Effekt nachgewiesen werden. Dies kann teilweise auf die hohen Nachweisgrenzen in den Biotests zurückgeführt werden. Für einzellige Primärproduzenten (Algen), Süßwasserkrebse (Daphnien) und Primärproduzenten (Wasserlinsen) wurden in Einzelbefunden

**Tabelle 1: Übersicht des Spurenstoffspektrums der organischen Analytik sowie statistische Kenngrößen der Spurenstoffkonzentration im Zulauf der Adsorber der beiden Fallstudien KA AOL und KA Putzhagen.**

Stoffgruppe	Spurenstoff	KA AOL				KA Putzhagen			
		Arithm. Mittelwert (µg/L)	Median (µg/L)	Max. (µg/L)	Min. (µg/L)	Arithm. Mittelwert (µg/L)	Median (µg/L)	Max. (µg/L)	Min. (µg/L)
Antibiotika	Clarithromycin	0,23	0,19	0,52	0,10	0,18	0,13	0,50	0,06
	Sulfamethoxazol	0,35	0,36	0,51	0,22	0,30	0,27	0,51	0,15
Metabolit	N4-Acetylsulfamethoxazol	0,04	0,06	0,07	0,05	0,05	0,06	0,07	0,05
Betablocker	Atenolol	0,15	0,13	0,19	0,12	0,09	0,08	0,14	0,05
	Metoprolol	1,80	2,40	2,80	0,19	0,53	0,23	1,40	0,01
	Sotalol	0,10	0,09	0,17	0,04	0,23	0,23	0,31	0,17
Analgetikum	Diclofenac	2,10	1,84	2,92	1,42	2,26	2,19	3,21	1,41
	Ibuprofen	0,13	0,11	0,24	0,05	<0,01	<0,01	<0,01	0,01
	Naproxen	0,28	0,30	0,48	0,08	0,09	0,08	0,14	0,03
Antikonvulsivum	Carbamazepin	1,01	0,98	1,50	0,43	0,98	1,00	1,27	0,68
Korrosionsschutzmittel	1H-Benzotriazol	31,30	30,00	39,20	26,00	16,41	12,20	39,30	4,70
	4-Methylbenzotriazole	21,70	21,70	36,30	10,40	2,23	1,85	3,60	1,37

Überschreitungen der Wirkschwellen festgestellt und führten nicht zu einer schlechteren Einstufung der Wasserqualität an den jeweiligen Kläranlagenabläufen.

Mithilfe verschiedener statistischer Analysen wurden die mittels chemischer Analytik beobachteten Unterschiede in der Spurenstoffelimination bestätigt. So konnte aufgezeigt werden, dass die Zusammensetzung der Spurenstoffbelastung im Ablauf Nachklärung der KA Putzhagen und AOL ähnlich ist, sich aber deutlich von der KA Rodenkirchen abgrenzt (s. Abb. 1). Dieser Unterschied kann nicht abschließend geklärt werden, da als Ursachen u. a. die Struktur des Einzugsgebiets, der Fremdwasseranteil, der Anteil kommunalen und industriellen Abwassers sowie regional geprägte Verschreibungspraxen der niedergelassenen Ärzte in Betracht gezogen werden können. Für Kläranlagen mit ausreichender Adsorbereffektivität (> 0,8) stellt eine lineare Korrelation ein angemessenes Modell zur Vorhersage der Adsorbereffektivität aus dem durchgesetzten Bettvolumen dar. Diese kann z. B. mithilfe von Generalisierten Linearen Modellen (GLM) oder der Partial Least Squares Regression

(PLS) realisiert werden. Da hier insgesamt nur wenige Wirkungen in den durchgeführten biologischen Testverfahren auftraten, war der Datensatz nicht aussagekräftig genug, um einen Zusammenhang zwischen den biologischen und chemischen Messdaten darzustellen.

Unter Annahme eines einheitlichen spezifischen Personalkostensatzes (inkl. Lohnnebenkosten) von 68 000 €/Jahr (brutto) sowie einem spezifischen Energiekostensatz von 0,18 €/kWh (brutto) wurden basierend auf bestehenden Kostenberechnungen aus Vorgängerprojekten zu den KA AOL und Putzhagen fixe Personalkostenbestandteile für Administration (Bestellung/Abrechnung) und Laboranalytik sowie von der Anzahl der GAK-Wechsel abhängige, variable Personal-, Energie- und Aktivkohlekostenbestandteile für unterschiedliche Betriebsszenarien der Filterstufen auf den beiden Kläranlagen bestimmt. Im Ergebnis liegen die spezifischen Betriebskosten der GAK-Filtration auf der KA Putzhagen bei 8 bis 10 Cent/m<sup>3</sup> aufbereitetes Abwasser und auf der KA AOL bei 9 bis 10 Cent/m<sup>3</sup>. Der Großteil der spezifischen Kosten wird dabei in Übereinstimmung mit bisherigen Erhebungen von den Kosten

zur Beschaffung bzw. Reaktivierung der Aktivkohle verursacht. Werden die einzelnen Filter jedoch nicht gleichzeitig, sondern versetzt in Betrieb genommen, sodass Verschneidungseffekte der Einzelfiltrate im Sammelfiltrat genutzt werden können, lassen sich die individuellen Filterlaufzeiten deutlich erhöhen. Auf die spezifischen Betriebskosten wirkt dies unmittelbar kostensenkend.

Basierend auf der Annahme einer monatlichen Überprüfung von 24-h-Mischproben aus dem Sammelfiltrat der fünf umgerüsteten Filterkammern der KA AOL sowie der zwei umgerüsteten Filterkammern auf der KA Putzhagen erhöhen sich die spezifischen Monitoringkosten bei monatlicher Anwendung der Biotestbatterie in beiden Fallstudien um 0,7 bis 0,9 Cent/m<sup>3</sup> aufbereitetes Abwasser.

Aufgrund der erhöhten Kosten und der fehlenden (öko-)toxikologischen Effekte im Ablauf der GAK-Adsorber lässt sich die Installation der Biotestbatterie zur Überwachung der beiden untersuchten KA-Abläufe derzeit nicht rechtfertigen. Sollte sie dennoch zur Anwendung kommen, wäre insbesondere die Notwendigkeit des kostenintensiven

**LP Tipp+**  
mehr zum Thema:

- Mehr zu diesem Thema sowie die Quellen finden Sie unter dem Suchbegriff „Spurenstoffelimination“ auf [www.laborpraxis.de](http://www.laborpraxis.de).
- Am 04.09.2018 veranstaltet das IWW eine **Probennehmer-schulung** zur Entnahme von Trinkwasserproben für die Untersuchungen im Rahmen der Trinkwasserverordnung (weitere Infos unter [www.iww-online.de/veranstaltungen](http://www.iww-online.de/veranstaltungen)).





# Setzt neue Maßstäbe

Das LCMS-8060 Triple Quadrupole-MS vereint innovative Technologien – für unerreichte Sensitivität, unübertroffene Geschwindigkeit und herausragende Beständigkeit bei hoher LC/MS/MS-Datenqualität. Das sorgt für einen deutlich schnelleren und effektiveren Arbeitsablauf.

- **Weltweit höchste Empfindlichkeit**
- **Unübertroffene Geschwindigkeit**
- **Herausragende Beständigkeit\***
- **Zuverlässiger Service und Support**

**UFMS**  
ULTRA FAST MASS SPECTROMETRY

\*Beispiel: RSD-Wert von 3,5 % bei 2400 Alprazolam-Proben in Femtogramm-Bereichen über einen Zeitraum von 6 Tagen, eingebracht in Protein-präzipitierte menschliche Plasmaextrakte (über 400 Proben wurden jeden Tag injiziert).



Lemna-Wachstumshemmtest zu hinterfragen. Es empfiehlt sich eine zweistufige Anwendung nach dem „Wenn-Dann-Prinzip“, sofern dieser Test auf der nachgelagerten Ebene liegen kann und somit anzunehmen ist, dass er nicht für alle Probenentnahmen durchgeführt werden muss. So ließen sich die spezifischen Kosten der Biotestbatterie bestenfalls halbieren.










**Fazit**

Mit allen in den Kläranlagen eingesetzten Aufbereitungsverfahren, die granulierten Aktivkohle (GAK) als Adsorbens nutzen, war eine sehr effektive Verminderung von organischen Spurenstoffen möglich.

Die Versuche verdeutlichen, dass Primärproduzenten empfindlich auf die Abwasserinhaltsstoffe im Zu- und Ablauf der GAK-Filter reagieren. Zur Ermittlung genotoxischer Wirkungen sollte zudem die Untersuchung von angereicherten Proben in Betracht gezogen werden. Die Bestimmungsgrenze des ER-CALUX ist mit 0,7 ng EEQ/L so sensitiv, dass östrogene Wirkpotenziale über die native Probe erfassbar sind.

Die gewählte Biotestbatterie (s. Tab. 2) umfasst organismische Biotestverfahren, wie sie bereits in der Abwasserprüfung eingesetzt werden und entspricht dem Vorschlag einer modularen Biotestbatterie für das aquatische Umweltmonitoring von Schmidt et al. (2018) [1]. Trotz prinzipieller Eignung der

**Tabelle 2: Fließschema der verwendeten Biotests von der zellulären Ebene bis hin zu Primärkonsumenten.**

Biotestbatterie			
Zelluläre Ebene ↓	MTT-Assay 	ER-CALUX 	umuC-Assay 
Primärproduzenten ↓	Algen 		Wasserlinsen 
Destruenten ↓		Leuchtbakterien (akut und chronisch)	
Primärkonsumenten		Daphnien	

eingesetzten Biotestbatterie bezogen auf die gewählten Endpunkte kann festgehalten werden, dass im Langzeitbetrieb von Aktivkohleadsorbent chemische Parameter vor biologisch wirksamen Aktivitäten durchbrechen. Somit ist aufgrund der deutlich niedrigeren Nachweisgrenzen die Analytik chemischer Parameter zur Kontrolle von GAK-Filtern derzeit noch die Überwachungsmethode der Wahl.

Kriterien zur Bewertung des Durchbruchs chemischer Parameter werden aktuell unterschiedlich angelegt, bezüglich des Stoffspektrums und der einzuhaltenden Ablaufkonzentrationen. Hier besteht noch Abstimmungsbedarf seitens der Behörden, auch hinsichtlich der Frage von ggf. vorhandenen Mischungstoxizitäten. Da sich in den durchgeführten Algen- und Wasserlinsentests bereits deutliche Unterschiede zwischen den Organismen gezeigt haben, ist zu empfehlen weitere Pflanzentests zu betrachten. Makrophyten wie Myriophyllum sp. (Tausendblatt) oder Glyceria maxima (Wasserschwade), welche für die Pflanzenschutzmitteltestung im Gespräch sind, könnten eventuell noch sensibler reagieren und als Monitoringinstrument geeignet sein. Forschungsbedarf besteht zudem in der Erarbeitung niedrigerer Nachweisgrenzen in den Biotests, wie dies z.B. mit dem ER-CALUX gelungen ist. Durch Reduktion der bislang umfangreichen Einzelstoffanalytik auf ausgewählte Parameter und der Ergänzung der wirkungsbezogenen Analytik könnte ein ganzheitlicher Ansatz nach dem Vorsorgeprinzip ohne erhebliche Kosten-erhöhung durchgeführt werden. ■



**LP Info**

**Dr. Ilka Ottleben, Redakteurin**

**WIRKUNGSBEZOGENE ANALYTIK**

Das grundlegende Prinzip einer wirkungsbezogenen Analytik beruht darauf, dass in einem Screening-Ansatz nicht einzelne Wirkstoffe, sondern **biologische Effekte der Gesamtprobe** in **ausgewählten Zielsystemen** nachgewiesen werden. Dies bietet den Vorteil, dass auch Wirkungen **unbekannter Substanzen** detektiert werden können. Voraussetzung für die Entwicklung geeigneter Testsysteme sind detaillierte Erkenntnisse über die **molekularen Mechanismen**, die einer bestimmten **toxikologischen Wirkung** zugrunde liegen. Quelle: Braeuning, A., Broll, H. & Lampen, A. J. Verbr. Lebensm. (2016) 11: 91. <https://doi.org/10.1007/s00003-015-0979-z>



# PRAXISTAG HPLC

20. SEPTEMBER 2018, WÜRZBURG

29. NOVEMBER 2018, BERLIN

## vorbereiten | analysieren | bewerten

Auf dem Praxistag HPLC lernen Sie bei spannenden Vorträgen, in Hands-On-Workshops und in der Ausstellung mehr zur optimalen Anwendung der HPLC-Methode und zu technologischen Trends.



### Jetzt Programm entdecken und Frühbucher-Ticket sichern

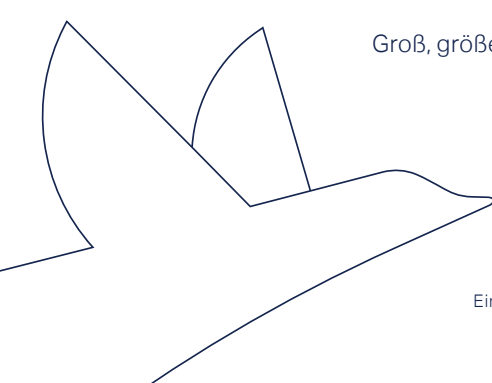
**Highlights:** Das Labor der Zukunft - Neue Trends und Entwicklungen in der HPLC

Die HPLC: zwischen Anwenderwunsch und Realität

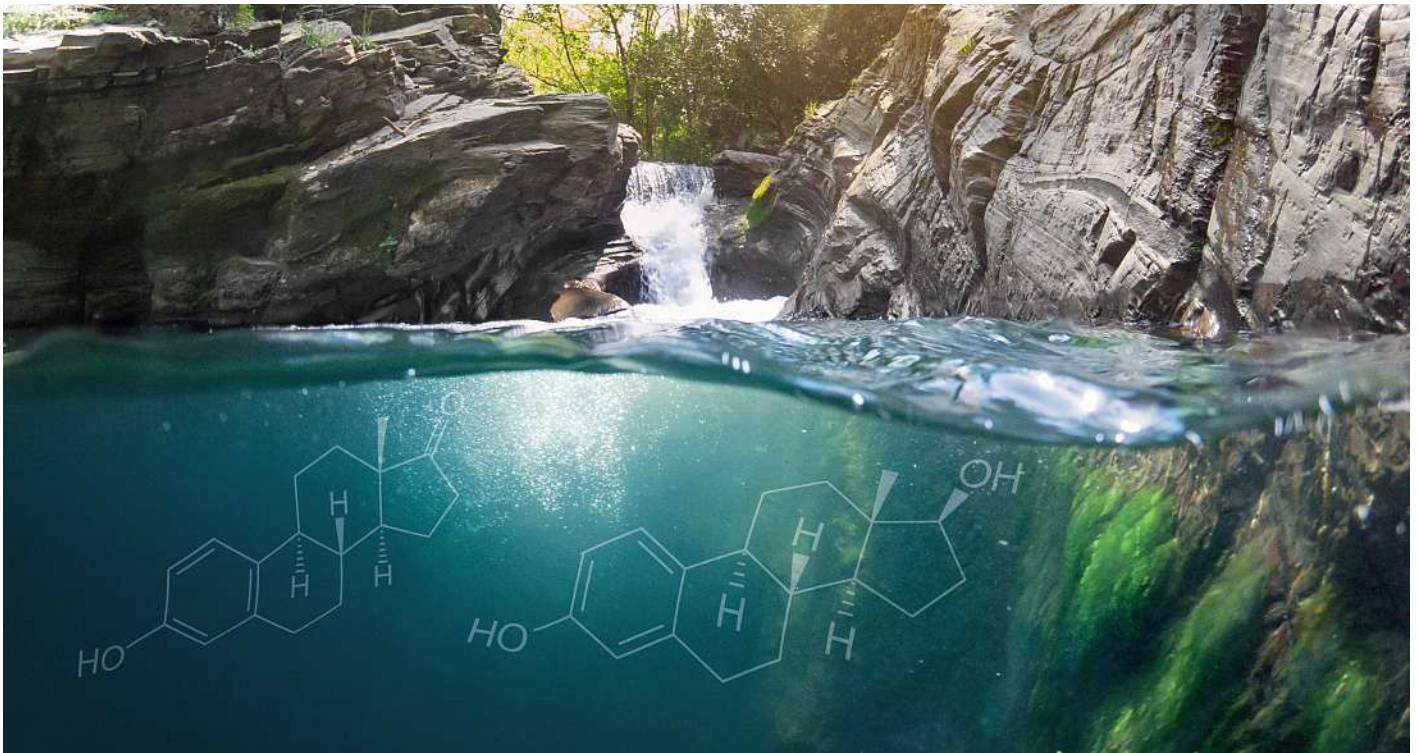
Groß, größer, zu groß? Tipps und Tricks für den richtigen Einsatz der GPC/SEC

Troubleshooting in der HPLC

[www.praxistag-hplc.de/jetzt-anmelden](http://www.praxistag-hplc.de/jetzt-anmelden)







**1** Die Steroidhormone 17 $\alpha$ -Ethinylestradiol (EE2), 17 $\beta$ -Estradiol (E2) und Estron (E1) werden über menschliche Ausscheidungen ins Abwasser und somit auch in Oberflächengewässer eingetragen.

# Hormone im Griff?

**Steroidhormon-Anreicherung aus Oberflächengewässern** // Hormone werden vielfach zu therapeutischen Zwecken eingesetzt. Nebeneffekt: Früher oder später gelangen sie auch in unsere Gewässer. Empfindliche Analytik ist daher gefragt. Die verfügbaren LC-MS/MS-Systeme sind für ein Direktinjektionsverfahren noch nicht sensitiv genug. Die Lösung heißt gezielte Anreicherung.

## LP Tipp+ mehr zum Thema:

- Mehr zum Thema, weitere Tabellen, Abbildungen und die Quellen zum Beitrag finden Sie unter den Stichworten „Wasser“ und „Hormone“ auf [www.laborpraxis.de](http://www.laborpraxis.de).
- Besuchen Sie die **2. Trinkwassertagung Metropolregion Rhein-Neckar** am 14. und 15. November in Mannheim (Mehr Informationen unter [www.iww-online.de](http://www.iww-online.de)).

JAN FUNKE\*, MICHELLE DIEDERICHS\*\*, PETER BALSAA\*, TORSTEN C. SCHMIDT\*\*

**H**ormone haben einen verantwortungsvollen Job: In unserem Körper regeln sie unzählige essenzielle Funktionen und das auch in minimaler Dosierung. Ihr Zusammenspiel im endokrinen System ist dabei sehr gut aufeinander abgestimmt, geringste Abweichungen können große Folgen haben. Sie verdienen daher zu Recht große Beachtung. Neben den Hormonen werden auch andere organische Spurenstoffe als potenzielle endokrine Disruptoren (s. LP-Info, S. 16) in die Umwelt eingetragen.

Die Steroidhormone 17 $\alpha$ -Ethinylestradiol (EE2), 17 $\beta$ -Estradiol (E2) und Estron (E1) aus der Gruppe der Östrogene sind endokrin wirksame Substanzen, welche über menschliche Ausscheidungen ins Abwasser gelangen und somit auch in Oberflächengewässer eingetragen werden [1]. Aufgrund ihrer endokrinen Eigenschaften wurden diese Stoffe in die Beobachtungsliste „Watch-List“, welche Teil des Artikels 8 der Richtlinie 2008/105/EG ist, aufgenommen. Die Mitgliedstaaten der EU sind demnach seit 2015 dazu aufgefordert, im Rahmen einer Analyse der Gesamtwasserprobe (whole water sample) Daten zu sammeln, um eine zukünftige Priorisierung von Schadstoffen durch die Kommission

zu unterstützen [2]. Derzeit ist jedoch keines der am Markt verfügbaren LC-MS/MS-Systeme in der Lage, die in der „Watch-List“ aufgeführten höchstzulässigen Nachweisgrenzen mittels Direktinjektion zu erreichen [3]. Die Notwendigkeit möglichst rasch ein robustes Verfahren zu etablieren, wird auch dadurch deutlich, dass sich im DIN-Normausschuss Wasserwesen (NAW) der Ar-

\*J. Funke, Dr. P. Balsaa  
IWW Rheinisch-Westfälisches Institut für Wasser, 45476 Mülheim an der Ruhr, Tel. +49-208-40303-221  
\*\*M. Diederichs, Prof. Dr. T. C. Schmidt  
Universität Duisburg-Essen, Instrumentelle Analytische Chemie und Zentrum für Wasser- und Umweltforschung, Universitätsstraße 5, 45141 Essen, Tel. +49-201-183-6772



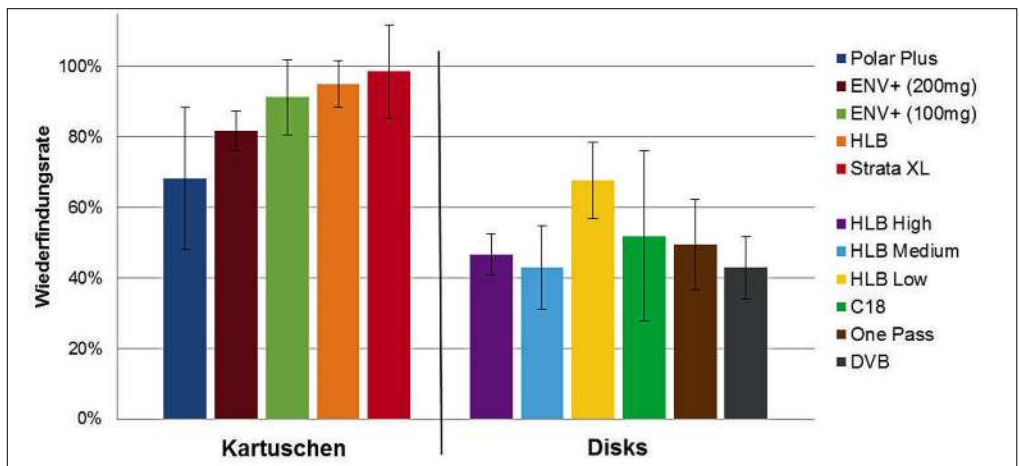
beitskreis 16 „LC-MS/MS-Verfahren“ mit genau diesen Parametern beschäftigt.

Im Rahmen eines Projekts wurden grundlegende Erkenntnisse gesammelt, um ein robustes, routineteaugliches Verfahren mittels Festphasenextraktion (Solid Phase Extraction, SPE) zu etablieren, bei dem die Bestimmung der Hormonkonzentration in der Gesamtwasserprobe berücksichtigt wurde. Für die Optimierung des Verfahrens wurden verschiedene SPE-Materialien, unterschiedliche Methoden der Probenstabilisierung und die Lagerung von SPE-Kartuschen nach der Anreicherung untersucht. Zusätzlich erfolgten Experimente mithilfe der Flüssig-Flüssig-Extraktion.

### Optimierung des Verfahrens

Bei der Optimierung wurde als Kenngröße die Wiederfindungsrate (WFR) betrachtet. In einem bestehenden Routineverfahren (SPE-LC-MS/MS) wird für die Hormonanalytik ein Wasservolumen von 1000 mL aufgearbeitet und auf 1000 µL Endvolumen aufkonzentriert. Die Messungen wurden an einem LC-MS/MS von Waters (Acquity-LC-System gekoppelt an ein TQD-Massenspektrometer) im ESI+ Modus durchgeführt. In den Tabellen 1, 2 und 3 (online) sind die optimierten Methodenparameter zusammengefasst.

- SPE-Materialien: Bei der SPE-Anreicherung wurden folgende Materialien getestet: HLB (Waters; 6 mL/200 mg), Polar Plus (Avantor; 6 mL/1000 mg), Strata-XL (Phenomenex; 3 mL/200 mg) sowie ENV+ (Biotage; 3 mL/200 mg und 6 mL/100 mg). Die nachfolgenden Arbeitsschritte waren für alle Materialien gleich. Es wurde mit 2 x 2 mL Acetonitril und 2 x 2 mL UPLC-Wasser konditioniert. Die Anreicherung der Wasserprobe erfolgte mit einem Volumenstrom von 15 mL/min. Anschließend wurden die Kartuschen 40 min im Stickstoffstrom getrocknet und dann mit 5 x 2 mL Acetonitril eluiert. Aufkonzentriert bis zur Trockene wurde das organische Extrakt im Wasserbad bei 45°C im Stickstoffstrom. Der Rückstand wurde mit 500 µL UPLC-Wasser und 500 µL Acetonitril resolvatziert. Von jeder Pro-



2 Ergebnisse der WFR für EE2 bei Aufarbeitung von dotiertem Trinkwasser (300 ng/L) mit verschiedenen SPE-Materialien und unterschiedlicher Kartuschen- bzw. Diskvarianten.

be wurde eine Dreifachbestimmung durchgeführt. In weiteren Versuchen wurden auch die SPE-Disks „HLB“ (High, Medium, Low), „C18“, „DVB“ und „One Pass“ von Horizon eingesetzt.

- Lagerung und Stabilisierung: Um eine Aussage über matrixbelastete Proben treffen zu können, wurden sowohl Trinkwasserproben als auch Oberflächenwasserproben (Ruhr) bearbeitet. Der Versuch erstreckte sich über eine Dauer von zwei Wochen, wobei die ersten Proben sofort aufgearbeitet und gemessen wurden, weitere Aufarbeitungen und Messungen wurden nach einer Woche und zwei Wochen Lagerung bei 4 bis 8°C durchgeführt. Die Stabilisierung erfolgte durch 40 mg/L Natriumazid und durch Ansäuern (HCl, pH 2). Die SPE-Anreicherung erfolgte mittels HLB-Kartuschen (Waters; 6 mL/200 mg).
- Lagerung von getrockneten HLB-Kartuschen: In weiteren Versuchen wurde getestet, ob eine Unterbrechung bei der Aufarbeitung nach dem Trocknen der beladenen Kartusche möglich ist und wie sich die WFR bei verschiedenen Lagerungsbedingungen verändern. Ein Teil der Kartuschen wurde am selben Tag eluiert und gemessen, die übrigen Kartuschen wurden im Gefrierschrank a) bei -16°C, b) im Abzug vor Sonnenlicht geschützt, bei Raumtemperatur (RT) und c) im Exsikkator unter Vakuum bei RT gelagert. Die

Tabelle 1: Einstellungen der verwendeten Methode

Einstellung	
Injektionsvolumen (µL)	20
Chromatographiesäule	Acquity UPLC HSS T3 1,8 µm; 2,1 x 50 mm
Eluent A	Wasser + 0,1% Ameisensäure
Eluent B	Acetonitril + 0,1% Ameisensäure

Tabelle 2: Informationen zum Laufmittelgradienten

Zeit (min)	Flussrate (mL/min)	%A	%B
0,00	0,350	90	10
0,30	0,350	90	10
6,00	0,350	10	90
6,05	0,350	90	10
7,00	0,350	90	10

weitere Aufarbeitung und Messung dieser Kartuschen erfolgte nach sieben bzw. nach vierzehn Tagen.

- Zugabe von Sediment: Weitere Experimente sollten zeigen, ob die WFR durch die Zugabe von Sediment beeinflusst wird. Dazu wurden 100 mL Trinkwasser mit 100 mg Sediment versetzt. Die Aufarbeitung erfolgte wie im Versuch SPE-Materialien mit HLB-Kartuschen.
- Flüssig-Flüssig-Extraktion (FFE): Für die FFE wurden 10 mL einer

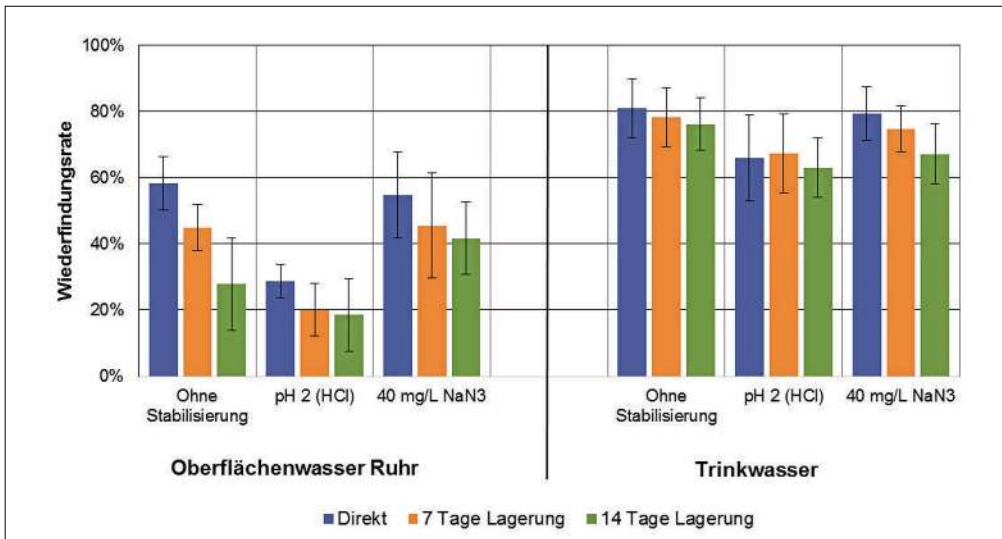


**LP Info**

**Dr. Ilka Ottleben, Redakteurin**

## ENDOKRINE DISRUPTOREN

**Endokrin wirksame Substanzen** sind Stoffe, die auf die Hormonaktivität des Körpers Einfluss nehmen oder sie stören können. Führt dies zu Beeinträchtigungen, werden sie als **endokrine Disruptoren** bezeichnet. **Menschen und Tiere** können über die Ernährung und andere Quellen einer Vielzahl von endokrin wirksamen Stoffen ausgesetzt sein. In den letzten Jahren häufen sich die Bedenken, dass endokrine Disruptoren endokrine **Krankheiten und Störungen** sowie hormonabhängige Krebsarten fördern und die **Fortpflanzungsfähigkeit und Entwicklung** beeinträchtigen könnten.



**3 Ergebnisse der WFR von EE2 bei Aufarbeitung von dotiertem Oberflächen- und Trinkwasser (300 ng/L) mit verschiedenen Stabilisierungsmethoden und einer Lagerdauer von bis zu zwei Wochen.**

Wasserprobe (Analytkonzentration: 300 ng/10 mL) mit 3 x 2 mL Ethylacetat extrahiert. Die organischen Extrakte wurden vereinigt und anschließend wie oben beschrieben zur Trockne eingedunstet, der Rückstand wurde mit 1 mL Wasser/Acetonitril (50/50) gelöst, in ein Vial überführt und gemessen.

### Ergebnisse

- SPE-Materialien: Der Einsatz von SPE-Kartuschen ermöglicht einen hohen Probendurchsatz und ist einfach zu handhaben. Bei den Disks ist die Aufarbeitung ohne ein geeignetes, automatisiertes Absaugsystem sehr zeitintensiv,

da nur wenige Proben von einem Mitarbeiter gleichzeitig aufgearbeitet werden können. In Abbildung 2 sind exemplarisch die Werte für EE2 dargestellt. Sehr gute WFR (> 90%) wurden sowohl mit den Materialien Strata XL, als auch mit HLB erreicht. Die WFR für ENV+ und Polar Plus sind mit ca. 60 bis 80% WFR noch gut. Im Vergleich zwischen 6 mL/100 mg und 3 mL/200 mg ENV+ zeigte es sich, dass auch die Sorbensmenge und die Geometrie der Kartusche einen Einfluss auf die WFR hat. Die erzielten WFR bei der Aufarbeitung mit den Disks lagen im Bereich von circa 40 bis 70%. Für E1, E2 und EE2 wurden die höchsten WFR mit

den HLB Low (60 bis 70%) erreicht. Mit den C18 Disks wurden vergleichbare WFR (ca. 60%) erreicht. Bei den HLB-Varianten „High“ und „Medium“ sowie DVB und One Pass waren die WFR schlechter (40 bis 50%). Grundsätzlich wurde festgestellt, dass im Vergleich Kartusche/Disk die Disks deutlich schlechtere WFR lieferten.

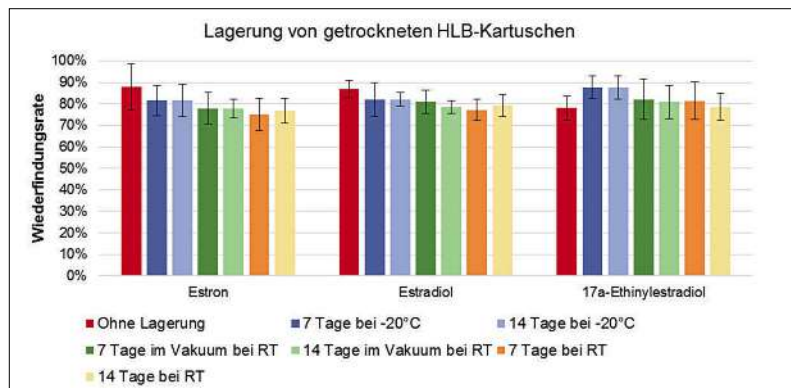
- Lagerung und Stabilisierung: Aus den in der Abbildung 3 exemplarisch dargestellten Ergebnissen für EE2 ist erkennbar, dass Matrixeffekte bei der Anreicherung von Hormonen eine Reduzierung der WFR von über 20% bewirken. Eindeutig konnte gezeigt werden, dass die Zersetzung der Substanzen bei einer Lagerung im matrix-belasteten Wasser (Ruhr) schneller voranschreitet als im Trinkwasser. Sowohl für Trink- als auch für Oberflächenwasser ergibt die Lagerung bei pH 2 keinen positiven Stabilisierungseffekt. Beim Ruhrwasser zeigt sich jedoch, dass durch den Zusatz von Natriumazid die Zersetzung der Analyten im Vergleich zu den Proben ohne Stabilisierung langsamer ist.
- Lagerung von getrockneten HLB-Kartuschen: Abbildung 4 zeigt die WFR bei den getrockneten HLB-Kartuschen nach sofortiger Messung und nach sieben und 14 Tagen. Es zeigt sich, dass die Erhöhung der Lagerdauer von einer auf zwei Wochen kaum Auswirkungen auf die WFR hatte. Außerdem ist zu erkennen, dass eine Lagerung der Kartuschen im Gefrierschrank die geringste Abnahme der WFR mit circa 5% zur Folge hatte, gefolgt von einer Lagerung im Exsikkator mit knapp 80%. Die geringsten WFR mit circa 75%, aber dennoch nur einer geringen Abnahme von circa 10%, wurden bei der Lagerung im Abzug bei Normaldruck und RT erreicht.
- Sedimentzugabe: Anhand von Abbildung 5 (s. online) ist zu erkennen, dass die Zugabe von Sediment (100 mg/100 mL) die WFR um 20 bis 30% verschlechtert.
- Flüssig-Flüssig-Extraktion: Mittels der FFE werden sehr gute WFR (92 bis 120%) für alle drei Analyten erzielt. Problematisch ist aus ökologischer Sicht die Wasserlös-

lichkeit des Ethylacetats von 95 mL pro Liter.

**Fazit**

Für ein routinetaugliches Verfahren ist, sowohl im Hinblick auf die WFR als auch auf die Handhabung, der Einsatz von SPE-Kartuschen zu empfehlen. Dabei konnten mit den Materialien Strata-XL und HLB sehr gute WFR erzielt werden.

Es ist ratsam, die Proben möglichst zeitnah nach der Probenahme zu bearbeiten, oder bei zwingender Lagerung Oberflächenwasserproben mit der Zugabe von Natriumazid zu stabilisieren. Eine gute Option bietet die gestaffelte Aufarbeitung. Die auf der SPE angereicherte Probe kann im getrockneten Zustand problemlos bis zu 14 Tagen im Gefrier-schrank gelagert werden.



**4 Ergebnisse der WFR von EE2 bei Aufarbeitung von dotiertem Trinkwasser (300 ng/L) und der Lagerung von getrockneten HLB-Kartuschen bis zu zwei Wochen bei unterschiedlichen Lagerbedingungen.**

Die Ergebnisse des Sedimentversuches zeigen, dass irreversible Sorptionseffekte nicht auszuschließen sind. Ob diese Probleme durch den Einsatz von isoto-penmarkierten Standards beherrschbar sind, muss in weiteren Versuchen überprüft werden.

Die Festphasenextraktion bietet die einfachste und schnellste Variante, um die Zielsubstanzen anzureichern. Darüber hinaus wäre es denkbar, dass diese Form der Anreicherung sogar unmittelbar bei der Probenahme durchgeführt werden kann.

www.laborpraxis.de/shop

**LABOR PRAXIS Shop**

**Für alle, die ihren Job lieben: Der LABORPRAXIS-Shop**

Von nützlich bis lustig – Zeigen Sie allen, dass Sie ein echter Labor-Fan sind.

www.laborpraxis.de/shop

LABOR PRAXIS ist eine Marke der VOGEL COMMUNICATIONS GROUP

**Qualitätssteigerung und Kosteneffizienz im ICP-MS Labor**

**ECO-M**

Hochreine Säuren und Wasser für Analysen im Spurenbereich, günstig und zeitnah vor Ort erzeugt

**ECO-Q**

UV-Aufschluss statt Mikrowelle, perfekt für organisch belastete Proben wie Abwässer, Säfte und Lebensmittel

**GE** Glass Expansion ICP/ICP-MS zertifizierter Vertriebspartner

**Burgener Research Inc.** PEEK und PTFE Zerstäuber

Sowie Originalteile fast aller Gerätehersteller im Bereich ICP/ICP-MS, AAS und UV-VIS

**MAASSEN SPEKTROSKOPIE**

+49 7121 890 739 0 info@maassen-gmbh.de

WWW.MAASSEN-GMBH.DE



## Probenvorbereitung

## Kooperativer Roboter



Chronect Bionic ist eine neue Lösung für die automatische Probenvorbereitung. Der multidimensional arbeitende Roboter ist mit sechs Gelenken ausgestattet, welche sich unabhängig voneinander bewegen können. Dadurch wird ein begrenzter Arbeitsbereich erweitert. Zudem ergänzt er die automatische Probenvorbereitung um weitere Arbeitsschritte, die bislang manuell durchgeführt werden mussten. Die Einsatzmöglichkeiten sind dabei vielseitig. Ein Anwendungsbeispiel ist die voll automatisierte Pulverdosisierung, welche die voll automatisierte Einwaage von bis zu 32 Substanzen während der Probenvorbereitung ermöglicht. Chronect Bionic übernimmt sowohl zeitraubende als auch unangenehme Arbeitsschritte. Die Ausführung erfolgt dabei exakt und verringert Fehlerquellen in der Probenvorbereitung. Labormitarbeiter gewinnen Zeit für andere Arbeiten, wie es in einer Pressemitteilung von Axel Semrau heißt. Individuell einsetzbar und in verschiedenen Ausführungen soll der Roboter Lücken im Labor schließen. Der Vertrieb in Europa erfolgt über Axel Semrau und in Nordamerika über Trajan Scientific and Medical.

// Tel. +49-2339-12090

**LP Info:** Mehr auf [laborpraxis.de](http://laborpraxis.de): Axel Semrau

## Schnelltest

## Legionellen quantifizieren

In weniger als zwei Stunden können Legionellen und andere pathogene Bakterien mit der Lab-on-a-Chip-Technologie von Rqmicro aus Wasserproben isoliert und anschließend quantifiziert werden. Das automatisierte Testverfahren basiert auf immunomagnetischer Separation und Mikrofluidik. Der Schnelltest korreliert mit dem klassischen Kultivierungsverfahren, soll laut Firmenangaben aber eine deutlich höhere Sensitivität garantieren. Das Verfahren schon die Zellstruktur und ermöglicht die nachfolgende Analyse mittels qPCR oder mit dem Durchflusszytometer. Besonders interessant ist die durchflusszytometrische Analyse, da die genaue Konzentration der lebenden Legionellen ermittelt werden kann. Auch lebensfähige, aber nicht kultivierbare Bakterien, die sich im sogenannten VBNC-Zustand (viable but non-culturable) befinden, können so nachgewiesen werden.

// Tel. +41-44-5125121

**LP Info:** Mehr auf [laborpraxis.de](http://laborpraxis.de): Rqmicro

## Core-Shell-Säulen

## Trennleistung und Stabilität

Die Raptor-Core-Shell-LC-Säulen von Restek erlauben eine hervorragende Trennleistung und Stabilität, wie es in einer Pressemitteilung heißt. Des Weiteren sollen sie symmetrische, schmale Peaks über einen langen Zeitraum liefern, wodurch sie sich insbesondere für Anwendungen in der Routineanalytik auszeichnen. Die Raptor-Core-Shell-Säulen eignen sich laut Hersteller zur Verbesserung kritischer Trennungen, denn die Raptor-Linie verbindet die Vorteile von Core-Shell-Säulen mit den besonderen LC-Selektivitäten von Restek. So sollen Raptor 5- $\mu\text{m}$ -Säulen die HPLC-Analytik verbessern und beschleunigen. Mit der Raptor 2.7- $\mu\text{m}$ -Säule lässt sich die UHPLC-Analytik robuster gestalten bzw. maximale Peakkapazität und Trennleistung erreichen (Raptor 1.8  $\mu\text{m}$ ). Der Hersteller garantiert zudem eine nach eigenen Angaben hervorragende Reproduzierbarkeit von Säule zu Säule sowie von Charge zu Charge.

// Tel. +49-6172-2797-42

**LP Info:** Mehr auf [laborpraxis.de](http://laborpraxis.de): Restek

## Neue Extraktionsmethode

## Für die Wasseranalytik

Die GC-MS/MS nach Stir Bar Sorptive Extraction (SBSE) erfüllt laut Gerstel die Voraussetzungen einer einfachen, leistungsfähigen und hochsensitiven Methode zum Nachweis von etwa 100 Substanzen. Hierzu zählen prioritäre Stoffe gemäß der Europäischen Wasserrahmenrichtlinie (2013/39/EU) mit Bestimmungsgrenzen (LOQs) im unteren Nanogramm- bzw. Subnanogramm-pro-Liter-Bereich für die meisten Komponenten. Erreicht wird dies durch eine zwei-stufige SBSE mit dem Gerstel-Twister. Die Extraktion der Analyten erfolgt, während der Twister die Probe durchmischt. Nach Entnahme des ersten Twisters erfolgt eine zweite SBSE unter geänderten Bedingungen und Verwendung eines zweiten Twisters. Beide Twister werden zusammen in einen Glasliner überführt, vollautomatisch in der Gerstel-Thermal-Desorption-Unit (TDU2) desorbiert und mittels GC-MS/MS analysiert. Das Ergebnis sind niedrigste Bestimmungsgrenzen für Wasserproben von nur 100 mL. Auch am Sediment anhaftende Analyten werden zuverlässig bestimmt. Die Gesamtmethode bedarf laut Firmenangaben eines deutlich reduzierten Einsatzes konventionell üblicher Lösemittel.

// Tel. +49-208-765030

**LP Info:** Mehr auf [laborpraxis.de](http://laborpraxis.de): Gerstel



LC/MS

## Neue Mikrofluss-LC/MS-Lösung



Nexera Mikros ist Shimadzu's neues, mikroflussraten-kompatibles LC/MS. Laut Firmenangaben soll es die Langlebigkeit und Bedienungsfreundlichkeit von LC-MS-Systemen besitzen und gleichzeitig eine deutlich erhöhte Empfindlichkeit bieten. Bei pharmazeutischen Entwicklungen müssen mitunter Spurenanalysen kleinster Bestandteile in Blutproben durchgeführt werden, etwa Untersuchungen zur Pharmakokinetik neuer Arzneimittel oder deren Metabolisierung. Hier werden LC/MS-Systeme eingesetzt, die mit Nanoflussraten kompatibel sind, um Zielkomponenten in das Massenspektrometer effizienter einzugeben. Dennoch können die Bedienungsfreundlichkeit und Arbeitsgeschwindigkeit leiden durch verstopfte Kapillare, Probleme bei der Erkennung von Flüssigkeitsleckagen oder die erforderliche Analysezeit einer einzelnen Probe. Die Nexera Mikros bietet Halb-Mikroflussraten (100 bis 500  $\mu\text{L}/\text{min}$ ), die oft für Analysen in bestehenden Anlagen zum Einsatz kommen, bis hin zu Mikroflussraten (1 bis 10  $\mu\text{L}/\text{min}$ ). Mit diesem System trägt Shimadzu nach eigenen Angaben dazu bei, die Produktivität in Pharmaunternehmen und klinischen Auftragsforschungsinstituten zu verbessern.

// Tel. +49-203-76870

**LP Info:** Mehr auf [laborpraxis.de](http://laborpraxis.de): Shimadzu

### LP Impressum



[www.laborpraxis.de](http://www.laborpraxis.de)

ISSN 0344-1733

**Kommunikationsdaten unserer Ansprechpartner:**  
E-Mail-Code: (bitte Schreibweise von Umlauten beachten): <vorname>.<name>@vogel.de;  
Telefon: +49-931-418-(4-stellige-Durchwahl)

#### Redaktion

**Leser-, Redaktionsservice:**  
Doris Popp (dpo)  
Tel. +49-931-418-2665  
Fax +49-931-418-2750  
[redaktion@laborpraxis.de](mailto:redaktion@laborpraxis.de)

**Chefredakteur:**  
Marc Platthaus (map), Tel. -2352

**Redakteurin:**  
Dr. Ilka Ottleben (ott), Tel. -2152

**Volontär:**  
Christian Lüttmann (clu), Tel. -2715

**Projektmanager Digital:**  
Matthias Back (mba), Tel. -2359

**Freie Mitarbeiterin:**  
Elke Oleson (ole)

**Chefin vom Dienst:**  
Alexandra Geißner

**Konzeption & Layout:**  
Vogel Design Werkstatt  
Ltg. Annette Sahlmüller, Tel. -2160

**Unternehmens- und Firmennamen:**  
Wir schreiben sie gemäß Duden wie normale Substantive. So entfallen etwa Großbuchstaben und Mittelinitialen in Firmennamen.

#### Publisher

Gerd Kielburger, Tel. -2536

#### Verkauf & Auftragsmanagement

**Verkaufsleitung:**  
Benjamin Wahler, Tel. -2105

**Auftragsmanagement:**  
Maria Dürr, Tel. -2257

**Verlagsvertretungen:**  
Tamara Mahler, Tel. -2215, Fax -2857

#### Marketing & Vertrieb

**Produkt Marketing Manager:**  
Marlen Wehner, Tel. -2840

**Abonnenten-Service:**  
DataM-Services GmbH,  
Franz-Horn-Str. 2, 97082 Würzburg,  
Martina Grimm, Tel. +49-931-4170-462,  
[mgrimm@datam-services.de](mailto:mgrimm@datam-services.de), [www.datam-services.de](http://www.datam-services.de)

**Bezugspreis:**  
Einzelheft 16,00 €. Abonnement Inland: jährl. 188,00 €,  
Abonnement Ausland: jährl. 209,60 €, (+ EU-Staaten ggf.  
7% Ust.). Alle Abonnementpreise inklusive Versandkosten.

**Verbreitete Auflage:**  
Angeschlossen der Informationsgemeinschaft zur  
Feststellung der Verbreitung von Werbeträgern -  
Sicherung der Auflagenwahrheit und EDA, geprüfte  
Fachzeitschriften Empfänger-Datei-Analyse.

**Datenbank:**  
Die Artikel sind kostenpflichtig über die Wirtschaftsdaten-  
bank GENIOS zu beziehen. [www.genios.de](http://www.genios.de)



**Vogel Communications Group GmbH & Co. KG**  
Max-Planck-Str. 7/9 in 97082 Würzburg  
Tel. +49-931-418-0  
[www.vogel.de](http://www.vogel.de)

**Beteiligungsverhältnisse:**  
Persönlich haftende Gesellschafterin:  
Vogel Communications Group Verwaltungs GmbH,  
Max-Planck-Str. 7/9 in 97082 Würzburg.  
Kommanditistin:  
Vogel Medien Holding GmbH & Co. KG,  
Max-Planck-Str. 7/9 in 97082 Würzburg

**Geschäftsführung:**  
Matthias Bauer (Sprecher)  
Florian Fischer,  
Günter Schürger

**Druck:**  
Vogel Druck und Medienservice GmbH,  
97204 Höchberg

**Copyright:**  
Vogel Communications Group GmbH & Co. KG.

**Nachdruck und elektronische Nutzung:**  
Wenn Sie Beiträge dieser Zeitschrift für eigene  
Veröffentlichungen wie Sonderdrucke, Websites,  
sonstige elektronische Medien oder  
Kundenzeitschriften nutzen möchten, erhalten Sie  
Information sowie die erforderlichen Rechte über  
[www.mycontentfactory.de](http://www.mycontentfactory.de) oder Manuela Maurer,  
Tel. +49-931-418-2786.

# Wirbel im Wasserlabor

## Automatisierte Analysenlösungen für die effiziente Bestimmung von ...

- rund 100 Komponenten in Oberflächenwasser inklusive Sediment gemäß **EU-Wasserrahmenrichtlinie (EU-WRRL)** und **lösemittelreduziert(!)**
- **Mikroplastik** – präzise mittels TED-GC/MS
- **Glyphosat/AMPA** sowie vielen weiteren Pflanzenschutzmitteln
- **Perfluorierten Tensiden (PFT)** mittels online-SPE und LC-MS/MS
- **Geruchsverursachern** wie Geosmin (analytisch und olfaktorisch)

Und was können wir für Sie tun?



Kundenorientierte GC/MS-  
und LC/MS-Lösungen für  
Ihre Wasseranalytik



Agilent Technologies  
Premier Solution Partner

**GERSTEL**

GERSTEL GmbH & Co. KG  
Eberhard-Gerstel-Platz 1  
45473 Mülheim an der Ruhr  
Tel. 0208 / 76503-0 | gerstel@gerstel.de