

Non-Target-Analytik

für eine vorsorgliche Überwachung von Trinkwasserressourcen und -aufbereitungsprozessen

Der anhaltende Eintrag von organischen Spurenstoffen in Gewässer, die als Trinkwasserressourcen dienen, veranlasst deren ständige Überwachung, sodass unverzüglich auf Änderungen reagiert und Maßnahmen eingeleitet werden können. Die konventionelle, auf ein festes Substanzspektrum ausgerichtete Analytik erfasst allerdings nicht alle in einer Probe enthaltenen Inhaltsstoffe und weist damit einen entscheidenden Nachteil auf: Wasserversorger müssen für die Trinkwassergewinnung immer damit rechnen, dass bislang unbekannte und demzufolge bisher nicht untersuchte Substanzen auftreten, die ein potenzielles Gesundheitsrisiko im Trinkwasser darstellen können. Zudem sind viele Einzelmessungen nötig, um überhaupt eine große Substanzpalette abdecken zu können. Mit der Non-Target-Analytik lässt sich ein weitaus größerer Umfang an Substanzen mit nur einer Messung erfassen. Darüber hinaus ermöglicht sie es, Veränderungen und Trends bei der Überwachung von Trinkwasserressourcen auch im Nachhinein – also retrospektiv – zu identifizieren, wenn neue Erkenntnisse dies nahelegen. Die Non-Target-Analytik ermöglicht in diesem Zusammenhang einen Blick in die Vergangenheit. So können wiederum vorsorglich und damit proaktiv Maßnahmen eingeleitet werden, um eine Beeinträchtigung der Trinkwasserqualität zukünftig zu verhindern. Zur besseren Bewertung von Störstoffen sollen zukünftig auch toxikologische Untersuchungen durchgeführt werden, die Aufschluss zu potenziellen Risiken von Störstoffen geben sollen.

von: Dr. Vanessa Hinnenkamp, Dr. Peter Balsaa, Dr. Ulrich Borchers & Dr. David Schwesig (alle: IWW Zentrum Wasser)

In der industrialisierten Welt werden fortlaufend neue organisch-chemische Verbindungen für die Anwendung in der Industrie, in der Landwirtschaft, als Arzneimittel und im Haushalt entwickelt – mehr als 5.000 wurden vom Rat der Sachverständigen für Umweltfragen als potenziell umweltrelevant eingestuft. Mit modernen Methoden der Wasseranalytik werden diese Substanzen zunehmend in der Umwelt und auch in Trinkwasserressourcen und im Trinkwasser selbst gefunden. Großes Aufsehen haben in diesem Zusammenhang in den letzten Jahren beispielsweise die Befunde von gesundheitsschädlichen Stoffen wie perfluorierte Tenside (PFT) in der Ruhr oder Pflanzenschutzmittel-Metabolite wie N,N-Dimethylsulfamid (DMS) hervorgerufen, aus denen in Verbindung mit einem Ozoneinsatz in der Wasseraufbereitung auch toxische Verbindungen (in diesem Beispiel: krebserregende Nitrosamine) entstehen [1, 2]. Mit der zunehmenden Forderung nach Ozon als 4. Reinigungsstufe in kommunalen Kläranlagen wird das Potenzial für die Bildung von Abbauprodukten mit ggf. toxikologischer Relevanz in Oberflächengewässern noch größer.

In der Trinkwasserverordnung (TrinkwV) sind zwar Grenzwerte für „Biozide und Pflanzenbehandlungsmittel“ sowie einige Einzelstoffe genannt, die Mehrzahl der organischen Mikroverunreinigungen ist jedoch unreguliert. Diese „Regelungslücke“ wird derzeit vom Umweltbundesamt (UBA) durch die Ableitung von „Gesundheitlichen Orientierungswerten (GOW)“ im Rahmen des GOW-Konzepts für auffällige Einzelstoffe geschlossen. Hierzu werden Einzelstoffbewertungen auf der Basis toxikologischer Daten durchgeführt. Dieser Regelungsrahmen befindet sich derzeit in dynamischer Entwicklung – es ist absehbar, dass das UBA eine verbindlichere Gesamtbewertung von „Mikroschadstoff – Konzentration – (Umwelt- und Human-)Wirkung“ auch regulatorisch etablieren wird. Hierzu wurde bereits im Jahr 2015 ein UBA-Forschungsvorhaben namens ToxBox abgeschlossen, in dem toxikologische Bewertungskriterien für Trinkwasser-Schadstoffe entwickelt wurden [3]. Die Trinkwasser-Kommission des Bundes beschäftigt sich aktuell mit den möglichen regulatorischen Konsequenzen.

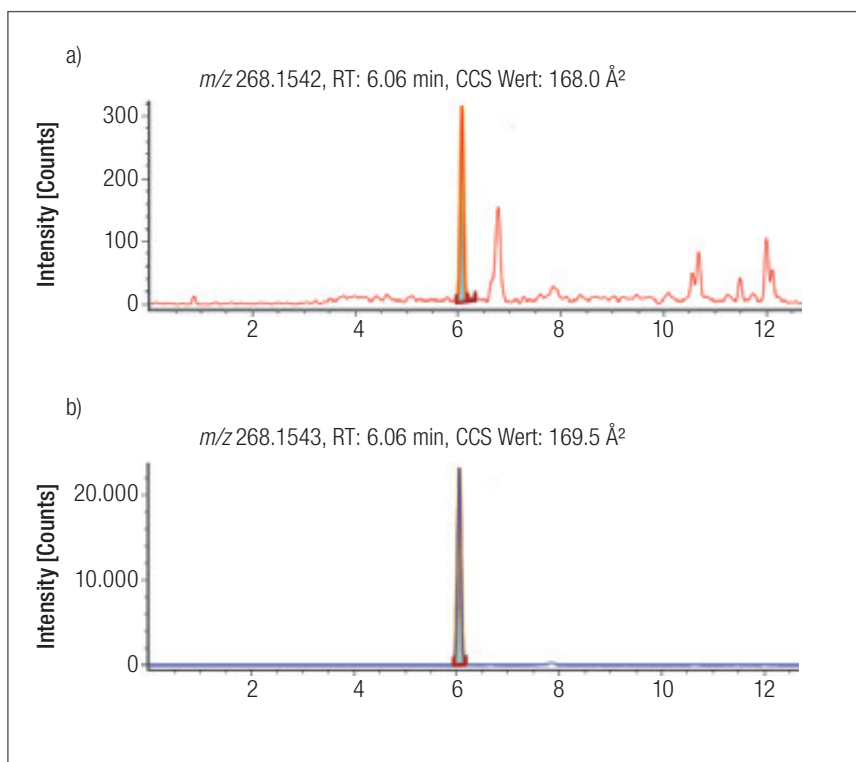


Abb. 1: Chromatogramme zur Identifizierung von Metoprololsäure/Atenololsäure: a) Signal in der Trinkwasserprobe, b) Signal der Referenzsubstanz

- Gibt es Korrelationen zu anderen Ereignissen oder Maßnahmen im Einzugsgebiet?
- Gibt es Hinweise zur Eintragsquelle?
- Wird die Substanz durch die Aufbereitung entfernt?

Die daraus abgeleiteten Informationen geben eine erste Einschätzung zum Vorkommen einer Substanz und können als Entscheidungshilfe für weitere Maßnahmen genutzt werden.

Die vor drei Jahren bei IWW eingeführte Kopplung einer „NT-Analytik“ mit einer Teststrategie zu toxikologischen Wirkungen kann somit als ein hochgradig innovativer Ansatz mit enormem Potenzial für eine vorsorgende Produktqualitätssicherung des WVU betrachtet werden.

Non-Target-Screening

Die Umweltanalytik ist ein wichtiges Instrument, um unerwünschte organische Mikroschadstoffe aus den Bereichen Landwirtschaft, Haushalt und Industrie in den unterschiedlichsten Wassermatrizes quantitativ und qualitativ, selbst in niedrigsten Konzentrationen, nachzuweisen. Obwohl bereits eine große Substanzpalette im „Target-Screening“ (Nachweis bekannter Substanzen) routinemäßig analysiert werden kann, wurden in den letzten Jahren verstärkt Anstrengungen unternommen, um möglichst alle (und somit auch unbekannt) organischen Wasserinhaltsstoffe erfassen zu können: durch „Non-Target-Screening“, kurz: NT-Screening.

Neuere Studien belegen, dass viele unbekannt Chemikalien nicht nur ein hohes Risiko für aquatische Organismen darstellen, sondern auch die Gesundheit des Menschen beeinträchtigen können. Da gezielte Analysen hier nicht möglich sind, können diese Belastungen nur mittels integrierter Untersuchungsansätze aufgespürt werden, wie z. B. mit der Effekt-gerichteten Analyse (Effect Directed Analysis (EDA)) [5]. EDA stellt eine interdisziplinäre Strategie dar, die bioanalytische

Wie die größeren Belastungsereignisse von PFT in der Ruhr, DMS im Rhein oder Pflanzenschutzmittel(PSM)-Metaboliten im Grundwasser zeigen, müssen Wasserversorgungsunternehmen (WVU) immer damit rechnen, dass neue Problemstoffe gefunden werden, die ein potenzielles Gesundheitsrisiko im Trinkwasser hervorrufen können. Das WVU ist hierbei immer in der defensiven Position, da

- meist nur unvollständige Kenntnisse über vorhandene Belastungen vorliegen und
- kurzfristig keine Aussagen zur Gesundheitsgefährdung möglich sind.

Selbst wenn – wie in der Vergangenheit auch häufiger geschehen – nach mehreren Wochen und Prüfung durch das UBA keine Gesundheitsgefährdung festgestellt werden kann, ist ein Imageschaden des WVU und ein damit einhergehender potenzieller Vertrauensverlust der Kunden gegeben. Vor diesem Hintergrund besteht ein Bedarf an analytischen Ansätzen, die ein vorausschauendes Screening über das Auftreten von Spurenstoffen

in Trink- und Rohwässern sowie deren potenzieller Wirkung ermöglichen. Die Non-Target-Analytik (NT-Analytik) in Kombination mit toxikologischen Teststrategien kann diese Lücke schließen. Mit dem DVGW-Forschungsvorhaben „WBA-BeReit“ konnte bereits ein Ansatz für eine orientierende Bewertung organischer Spurenstoffe in Rohwasserressourcen zur Trinkwassergewinnung und -aufbereitung entwickelt werden [4].

Neben der Identifikation neu auftretender stofflicher Belastungen erlaubt die NT-Analytik es bei einem fortlaufenden Monitoring auch, retrospektiv Gewässerverunreinigungen zu analysieren. Im Falle einer neu entdeckten, bisher nicht betrachteten Substanz kann die retrospektive Auswertung anhand bereits vorliegender Daten wertvolle Informationen liefern. Damit lassen sich zu einer Substanz Fragestellungen beantworten wie beispielsweise:

- Wie sieht die zeitliche Entwicklung aus (Trendanalyse)?
- Können saisonal bedingte Veränderungen abgeleitet werden?

Korrelator und
akustisches Wasserleack-
ortungsgerät in Kombination

SeCorrPhon AC 200

professionell – flexibel – intelligent



- schnelle und zuverlässige Benutzerführung durch Anwendungsfälle
- integrierter Audioplayer zum direkten Vor-Ort-Vergleich von Leckgeräuschen
- problemloses Messen unterschiedlicher Rohrabschnitte, Rohrmaterialien, Durchmesser und Leitungslängen
- hochentwickelte Firmware ermöglicht dem Anwender einen fast vollständig automatisierten Ablauf der Messungen

Verfahren zur toxikologischen Wirkung von Chemikalien mit chemischer Analytik und physikalisch-chemischen Trennverfahren verbindet. Auf der chemisch-analytischen Seite wurde mit der hochauflösenden Massenspektrometrie gerätetechnisch die Basis hierfür geschaffen. Durch hochsensitive Geräte ist es möglich, Wasserproben durch direkte Injektion ohne aufwendige Probenvorbereitung zu messen. Die konkrete Anwendung im Stoffscreening in Gewässern ist Gegenstand der aktuellen Forschung.

Das NT-Screening beruht darauf, dass durch chromatografische Auftrennung einer Wasserprobe mit unbekanntem Inhaltsstoffen und deren massenspektrometrische Untersuchung zunächst einzelne Stoffe (sogenannte Features) und deren Detektionsintensität (Response) erkannt werden. Ein Feature zeichnet sich dabei durch eine Kombination der folgenden verschiedenen spezifischen Merkmale aus:

- chromatografische Retentionszeit (RT in min),
- Verhältnis von Masse zu elektrischer Ladung (m/z in Da),
- Projektionsfläche des Moleküls im Gasstrom beim massenspektrometrischen Nachweis (CCS in Å²).

Mit der entwickelten Methode ist es möglich, Substanzen zu erfassen, die unter den festgelegten chromatografischen Bedingungen retardieren (beispielsweise polare Substanzen wie Metformin bis moderat polare Verbindungen wie Pendimethalin), unter den eingestellten Bedingungen ionisiert werden können (in der Regel stickstoff- und sauerstoffhaltige Verbindungen) sowie messtechnisch bedingt im Massenbereich von 100 bis 1.000 Da liegen.

Anhand einer Datenbank, in der spezifische Merkmale wie z. B. die Summenformel (zur Berechnung der exakten Masse und des Isotopenverhältnisses), Fragment-Ionen und CCS-Werte für viele untersuchte Einzelstoffe enthalten sind, kann so ein unbekannter Einzelstoff in einer Wasserprobe iden-

tifiziert werden. Als eindeutig identifiziert gilt eine Substanz allerdings erst nach Abgleich und Übereinstimmung mit der Referenzsubstanz. Dies ist jedoch aufgrund der Verfügbarkeit und den Kosten von Referenzstandards nicht immer gegeben. Die Intensität des detektierten Signals lässt Rückschlüsse auf die Konzentration in der Wasserprobe zu. Beim NT-Screening werden zunächst nur auffällige Features ermittelt. Als auffällig wird ein Feature bezeichnet, wenn die detektierte Intensität einen gewissen Schwellenwert überschreitet. Dieser Schwellenwert ist jedoch nicht für einzelne Features vorab festgelegt, sondern muss vom Anwender gewählt werden, in der Regel auf der Basis von Erfahrungswerten für die jeweils untersuchte Matrix.

Das folgende Anwendungsbeispiel aus der Praxis des IWW verdeutlicht das Verfahren: Bei der Non-Target-Untersuchung eines Trinkwasseraufbereitungsprozesses konnte durch die Datenbankrecherche ein auffälliges Feature als Metoprololsäure/Atenololsäure, ein Abbauprodukt aus den beiden Betablockern Metoprolol und Atenolol, im Roh- und Trinkwasser bei Messungen im positiven Ionisationsmodus identifiziert werden (Abb. 1). Rückwirkend wurde auf Basis archivierter Daten eine Trendanalyse von Response-Werten der Roh- und Trinkwasserproben erstellt (Abb. 2). Diese zeigen schwankende Response-Werte. Saisonale Abhängigkeiten können nicht abgeleitet werden. Durch die Quantifizierung mittels externer Kalibration wurden Konzentrationen von 0,007 Mikrogramm pro Liter ($\mu\text{g/l}$) bis 0,013 $\mu\text{g/l}$ in den Trinkwasserproben und 0,013 $\mu\text{g/l}$ bis 0,025 $\mu\text{g/l}$ in den Rohwasserproben im Zeitraum von Mai 2017 bis Juni 2020 bestimmt. Damit wird der allgemeine Vorsorgewert von 0,1 $\mu\text{g/l}$ deutlich unterschritten und es besteht bezüglich dieser Substanz kein akuter Handlungsbedarf seitens des WVU, abgesehen von einer laufenden vorsorglichen Beobachtung der Konzentrationsentwicklung und einer Aufnahme der Stoffe in das regelmäßige Monitoring.

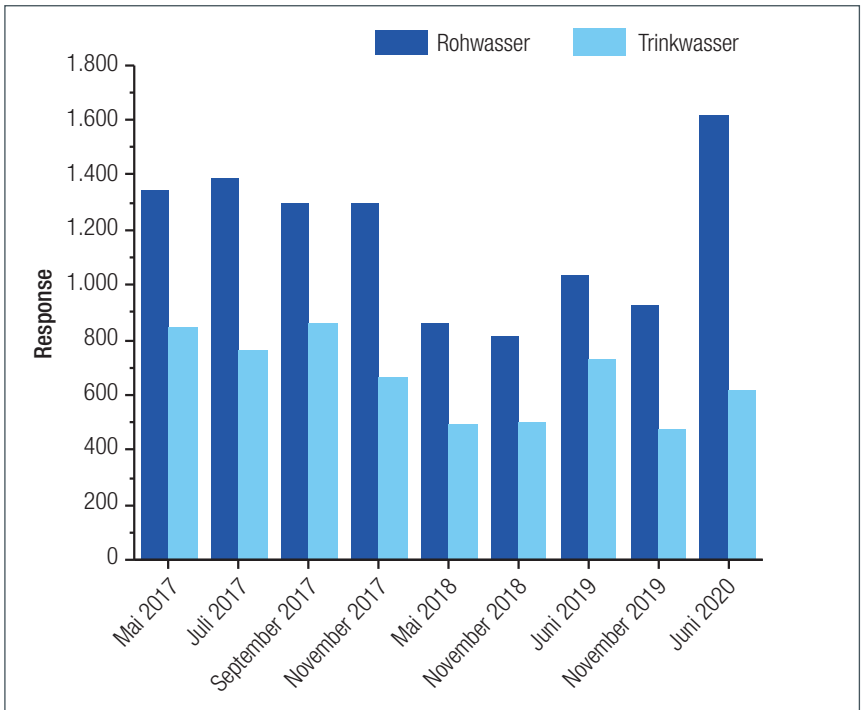


Abb. 2: Verlauf der Response-Werte im Roh- und Trinkwasser von Metoprololsäure/Atenololsäure (Mai 2017 bis Juni 2020)

Semiquantitative Analytik

Um neben den unbekannt Substanzen auch Informationen zu bekannten Substanzen zu erhalten, wurde – basierend auf denselben Messdaten wie für die Non-Target-Untersuchung – eine Methode für eine semiquantitative Analytik entwickelt [6]. Dabei werden über eine externe Kalibration (Konzentrationsbereich: 100 Nanogramm pro

Liter (ng/l) bis 1.000 ng/l) inzwischen mehr als 160 umweltrelevante Substanzen in den Proben semiquantitativ bestimmt. Die Auswahl erfolgte aufgrund der langjährigen Erfahrungen des IWW auf Basis der Häufigkeit von Nachweisen in verschiedenen Wasserproben (Grund- und Oberflächenwasser, Uferfiltrat, Kläranlagenablauf etc.). Diese Auswahl ist erweiterbar, sodass WVU fortlaufend auf aktuellem Stand

hinsichtlich der Untersuchung organischer Spurenstoffe sein können. Semi-quantitativ bedeutet in diesem Fall, dass Matrixeffekte, die messtechnisch bedingt auftreten und das Ergebnis beeinflussen, nicht berücksichtigt werden. Demzufolge werden Konzentrationsbereiche als Ergebnis angegeben, in denen die Konzentration einer Substanz zu erwarten ist. Das Ergebnis wird im Excel-Format erstellt und die Konzentrationsangaben sind in vier Gruppen geclustert und farblich dargestellt (Ampelprinzip). Substanzen, die hingegen nicht nachgewiesen werden (d. h., es existiert kein Signal an der für die Substanz spezifischen Retentionszeit), werden mit n.n. (Farbe Weiß) für nicht nachweisbar ausgewiesen. Substanzen, die demnach im Konzentrationsbereich > n.n. und < 100 ng/l liegen, werden mit der Farbe Grün, der Konzentrationsbereich > 100 ng/l und < 1.000 ng/l mit der Farbe Gelb und der Konzentrationsbereich > 1.000 ng/l mit der Farbe Rot gekennzeichnet (Tab. 1). Die Grenzen von 100 ng/l und 1.000 ng/l für die einzelnen Schwellen wurden aus den üblichen Vorgehensweisen bei der GOW- und Leitwert-Festsetzung entlehnt. Die Ergebnisse dieser vereinfachten Ampel-Bewertung können WVU als Entscheidungsgrundlage für weitergehende Maßnahmen (z. B. in den Gebieten Ressourcenschutz, Überwachung, Aufbereitung) verwenden und geben einen Überblick über das Ausmaß des Handlungsbedarfs.

Tabelle 1: Auszug einer semiquantitativen Analyse am Beispiel einer Trink-, Grund- und Oberflächenwasserprobe

Substanz	Trinkwasser	Grundwasser	Oberflächenwasser
1H-Benzotriazol	Green	n. n.	Yellow
Acesulfam	n. n.	n. n.	Green
Amidotrizoesäure	Green	Green	Yellow
Candesartan	Green	Green	Yellow
Carbamazepin	Green	Green	Green
Diclofenac	n. n.	n. n.	Red
Linuron	n. n.	n. n.	n. n.
Losartan	n. n.	n. n.	Green
S-Metolachlor-Met CGA368208	n. n.	Green	n. n.
S-Metolachlor-Met NOA413173	n. n.	Green	n. n.
Sulfamethoxazol	n. n.	Green	Green
Valsartan	Green	n. n.	Green
Valsartansäure	Green	n. n.	Yellow

Suspect-Screening

Als Ergänzung zur semiquantitativen Analytik kann ein Suspect-Screening angewendet werden. Dazu erfolgt ein Abgleich der Messdaten aus einer Probe mit Daten aus einer Datenbank. Dabei können Merkmale eines Features, wie beispielsweise das Masse-zu-Ladungsverhältnis (m/z), das Isotopenverhältnis, der CCS-Wert, die Retentionszeit und Fragmente mit der Datenbank abgeglichen werden. Die Datenbanken enthalten Einträge zu Pflanzenschutzmitteln, Pharmaka und weiteren Substanzen, wie z. B. Industriechemikali-

en und natürlich in der Umwelt vorkommende Toxine. Im Falle eines Treffers kann eine Substanz vorläufig identifiziert werden (Level 2). Erfolgt ein Abgleich mit der entsprechenden Referenzsubstanz, so kann im Falle der Übereinstimmung die Substanz eindeutig identifiziert werden (Level 1). Bei vorläufig identifizierten Substanzen wird besonderes Augenmerk auf Pflanzenschutzmittel aufgrund der Grenzwerte in der Trinkwasserverordnung und allgemein in Trinkwasserproben ermittelte Treffer gelegt. Hier werden vorwiegend Referenzstandards beschafft, um den Treffer einer Substanz zu bestätigen. **Abbildung 3** zeigt ein Beispiel des Reportings. Das Suspect-Screening liefert wichtige Hinweise auf das Vorkommen organischer Spurenstoffe in Wasserproben. Daraus können Empfehlungen für eine Routine-Analytik abgeleitet werden, um die Untersuchungsumfänge anzupassen.

TIC-Analyse

Um eine schnelle Übersicht darüber zu erhalten, ob organische Störstoffe in höheren Konzentrationen in einer Wasserprobe auftreten, wird die Darstellung des Totalionenstromchromatogramms gewählt. Als Totalionenstrom (total ion current, TIC) bezeichnet man die Summe der Ströme, die von den Ionen aller m/z-Werte im Spektrum erzeugt wird. Es handelt sich um eine zweidimensionale Darstellung, in der auf der X-Achse die Retentionszeit (RT in Minuten) und auf der Y-Achse die Intensität des Ionenstroms aufgetragen wird. Ein im TIC-Chromatogramm erkennbares Signal muss somit nicht zwingend nur von einer Substanz erzeugt werden, sondern es können sich auch mehrere Substanzen unter dem Signal verbergen. Ein deutlich erkennbares Signal ist aber immer ein Hinweis, dass an dieser Stelle im Chromatogramm mindestens eine io-

nisierbare Substanz existent ist, die dann in weiteren Schritten charakterisiert und ggf. sogar identifiziert werden kann.

Im Rahmen einer Überwachung eines Trinkwasseraufbereitungsprozesses konnte beispielsweise eine Auffälligkeit im TIC einer Probe beobachtet werden, die auf einen Peak mit der Retentionszeit von 10.72 min, einem m/z von 193.1033 und einem CCS-Wert von 141.8 \AA^2 im negativen Ionisationsmodus zurückzuführen war (**Abb. 4**). Die Datenbankrecherche ergab einen Treffer für die Substanz Octylphosphonsäure, die u. a. als Bestandteil in Reinigungsmitteln vorkommt. Durch die Messung der Referenzsubstanz konnte die Octylphosphonsäure bestätigt und damit eindeutig identifiziert werden. Eine retrospektive Datenevaluierung zeigte, dass die Octylphosphonsäure spontan auftrat und im nachfolgenden Monitoring nicht oder

swan
ANALYTICAL INSTRUMENTS



AMI Trides

AMI Turbiwell

AMI SAC254

Kontinuierliche Prozessüberwachung

Verlässliche Resultate von der Quelle bis ins Verteilungsnetz.

Swan Analytische Instrumente AG · CH-8340 Hinwil
www.swan.ch · swan@swan.ch

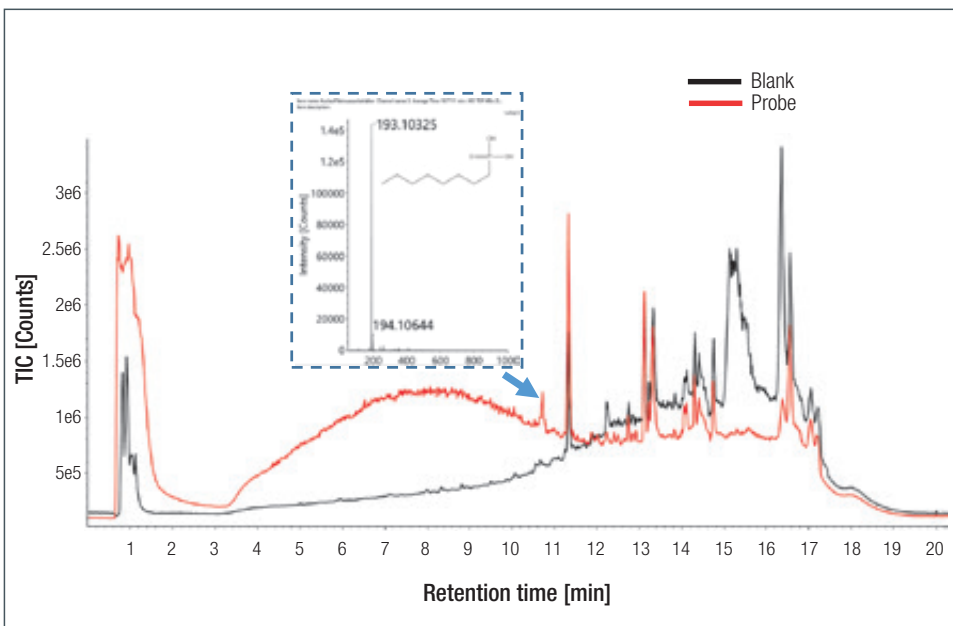
SWISS  MADE



Probennummer						
Probenbezeichnung						
Kunde						
Probenahme-Objekt	Trinkwasserprobe					
Entnahmestelle						
Probenahme (Datum)						
Parameter	Klassifizierung	Identifikation	m/z gemessen	RT (min)	CCS (Å²)	Response
1,3-Benzothiazol-2-sulfonsäure	Transformationsprodukt von 2-Mercaptobenzothiazol (Vulkanisationsbeschleuniger)	Level 1	213,9643	6,22	140,63	452
Probennummer						
Probenbezeichnung						
Kunde						
Probenahme-Objekt	Grundwasserprobe					
Entnahmestelle						
Probenahme (Datum)						
Parameter	Klassifizierung	Identifikation	m/z gemessen	RT (min)	CCS (Å²)	Response
Datenbankrecherche negativ, keine Treffer						
Probennummer						
Probenbezeichnung						
Kunde						
Probenahme-Objekt	Oberflächenwasserprobe					
Entnahmestelle						
Probenahme (Datum)						
Parameter	Klassifizierung	Identifikation	m/z gemessen	RT (min)	CCS (Å²)	Response
1,3-Benzothiazol-2-sulfonsäure	Transformationsprodukt von 2-Mercaptobenzothiazol (Vulkanisationsbeschleuniger)	Level 1	213,9645	6,23	140,17	3289
Fexofenadine	Pharmaka, Antihistamin	Level 1	502,2953	9,68	226,3	1742
Flecainide	Pharmaka, Herzrhythmusstörungen	Level 1	415,143	8,82	193,8	4285
Tiapride	Pharmaka, Neuroleptika	Level 2	329,1535	5,29	185,07	688

Quelle: IWW

Abb. 3: Beispiel eines Reportings des Suspect-Screenings



Quelle: IWW

Abb. 4: TIC-Messung einer Probe im Vergleich zu einer Blank(Reinstwasser)-Messung

nur mit sehr geringem Response nachgewiesen werden konnte. Das hier gezeigte Beispiel verdeutlicht das Potenzial der Methode zur unmittelbaren Erkennung organischer Störstoffe im Trinkwassergewinnungsprozess, das mit der Routineanalytik allein nicht immer gegeben ist.

Fazit und Ausblick

Mit der NT-Analytik lassen sich im Gegensatz zur zielgerichteten Analytik unbekannte bzw. bislang nicht betrachtete Stoffe erfassen und ggf. auch identifizieren, wodurch sich die Qualität von Trinkwasserressourcen umfangreicher beurteilen lässt. Im Fall von neu auftretenden Störstoffen im Rohwasser können so rechtzeitig Maßnahmen eingeleitet werden, um den Eintritt ins Trinkwasser zu verhindern. Für Trinkwasseraufbereitungsprozesse geben die Daten eine wesentliche Unterstützung bei der Bewertung des Prozesses hinsichtlich der Effektivität und Robustheit. Zusätzlich können einzelne Prozessschritte, wie z. B. die Bildung von Desinfektionsnebenprodukten, untersucht werden. Die semiquantitative Analytik ermöglicht für eine große Anzahl an Substanzen eine Einschätzung des Konzentrationsbereichs und somit über ein Ampelsystem eine Einstufung bezüglich Relevanz und Handlungsbedarf. Für einen schnellen Überblick reicht die Information aus dem TIC. Das Auftreten von Störstoffen kann somit schnell (2–3 Stunden nach der Probenahme) erkannt werden. Eine detaillierte Datenanalyse mit dem Ziel der eindeutigen Substanz-Identifikation erfordert aber bislang eine komplexere und zeitintensivere Vorgehensweise. Um auch hier den Prozess zu beschleunigen, und das Potenzial der NT-Analytik für die praktische Anwendung besser zu erschließen, werden leistungsfähigere Softwareprogramme für die Datenauswertung benötigt.

Werden NT-Messdaten langfristig archiviert, so ist nach einer ggf. später erfolgenden Identifikation einer Sub-

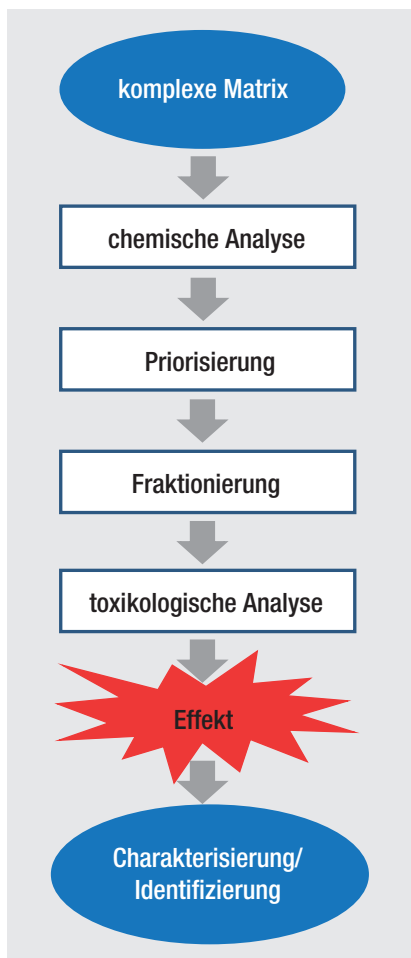


Abb. 5: Workflow für die zukünftige Untersuchung der Wasserproben

stanz auch eine retrospektive Auswertung möglich. Diese kann im Falle einer neuen Substanz wichtige Informationen zum Auftreten, dem Kon-

zentrationenverlauf und dem Eintragsverhalten liefern.

Durch die Kombination mit toxikologischen Testverfahren lässt sich das Anwendungspotenzial der NT-Analytik noch weiter steigern. Zukünftig sollen auffällige Signale (Störfälle) in der TIC-Analyse auch toxikologisch untersucht werden. Störstoffe werden dabei durch Fraktionierung der Probe isoliert. Anschließende toxikologische Untersuchungen der Fraktion sollen dazu beitragen, eine Aussage zu potenziellen Effekten treffen zu können, um somit Störstoffe besser bewerten zu können. **Abbildung 5** zeigt zusammengefasst den Workflow der zukünftigen Probenbearbeitung. ■

Literatur

[1] Schäfer, A.: Perfluorinated surfactants contaminate German waters. *Environ. Sci. Technol.* 2006; 40:7108-7109.
 [2] Schmidt, C. K., Brauch, H. J.: N,N-dimethylsulfamide as precursor for N-Nitrosodimethylamide (NDMA) formation upon ozonation and its fate during drinking water treatment. *Environ. Sci. Technol.* 2008; 42:6340-6346.
 [3] Grummt, T., Braunbeck, T., Hollert, H., Kramer, M.: Leitfaden Gefährdungsbasiertes Risikomanagement für anthropogene Spurenstoffe zur Sicherung der Trinkwasserversorgung (Tox Box). Umweltbundesamt 2018.
 [4] Stütz, L., Schulz, W., Winzenbacher, R., Happel, O., Schmutz, B., Scheurer, M.: Wirkungsbezogene Analytik in der Trinkwassergewinnung, in: *DVGW energie | wasser-praxis*, Ausgabe 2/2020, S. 46–51.
 [5] Brack, W.: Effect-directed analysis: A promising tool for the identification of organic toxicants in complex mixtures? *Anal. Bioanal. Chem.* 2003; 377:397-407.

Quelle: IWW

[6] Hinnenkamp, V., Balsaa, P., Schmidt, T. C.: Quantitative screening and prioritization based on UPLC-IM-Q-TOF-MS as an alternative water sample monitoring strategy. *Anal. Bioanal. Chem.* 2019; 411:6101-6110.

Die Autoren

Dr. Vanessa Hinnenkamp ist wissenschaftliche Mitarbeiterin am IWW Zentrum Wasser in Mülheim an der Ruhr.

Dr. Peter Balsaa ist Geschäftsfeldleiter der Organisch-Chemischen Analytik am IWW Zentrum Wasser in Mülheim an der Ruhr.

Dr. Ulrich Borchers ist Bereichsleiter Wasserqualität am IWW Zentrum Wasser in Mülheim an der Ruhr.

Dr. David Schwesig ist technischer Leiter des IWW Zentrums Wasser in Mülheim an der Ruhr.

Kontakt:

Vanessa Hinnenkamp
 IWW Zentrum Wasser
 Moritzstr. 26
 45476 Mülheim an der Ruhr
 Tel.: 0208 40303-440
 E-Mail: v.hinnenkamp@iww-online.de
 Internet: www.iww-online.de



Hochleistungsadsorbentien

für die Elimination von Spurenstoffen im Trinkwasser, Abwasser und Prozesswasser

Wir bieten:

- Machbarkeitstest
- Konzeptionierung
- Pilotierung
- Planung & Design
- Realisierung
- Regenerierung von Adsorbentien
- Ermittlung geeigneter Desorptionsmethoden
- Ermittlung adsorptiver Parameter
- Qualitätssicherung



Blücher GmbH, Mattmannstr. 25, 40699 Erkrath
 Tel. 0211 92440 / Mail: saratech@bluecher.com

www.bluecher.com

