12. Jahrestagung Trinkwasserringversuche
Nordrhein-Westfalen – Niedersachsen, 2011

Zweckverband
Landeswasserversorgung

Analytik von Spurenstoffen im Trinkwasser - Was kommt noch alles auf uns zu?

Walter H. Weber und **Wolfgang Schulz**

Zweckverband Landeswasserversorgung
Am Spitzigen Berg 1
89129 Langenau

Weber.W@lw-online.de

Gliederung

Zweckverband
Landeswasserversorgung

- Einleitung
- Analytik von organischen Spurenstoffen
- Beispiele organischer Kontaminanten
- Was kommt noch alles auf uns zu?
- Zusammenfassung und Ausblick

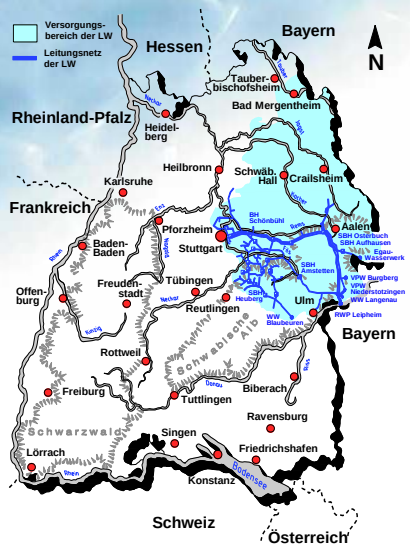
Gliederung

Zweckverband Landeswasserversorgung

- Einleitung
- AnalytiK von organischen Spurenstoffen
- Beispiele organischer Kontaminanten
- Was kommt noch alles auf uns zu?
- Zusammenfassung und Ausblick

Versorgungsgebiet der LW

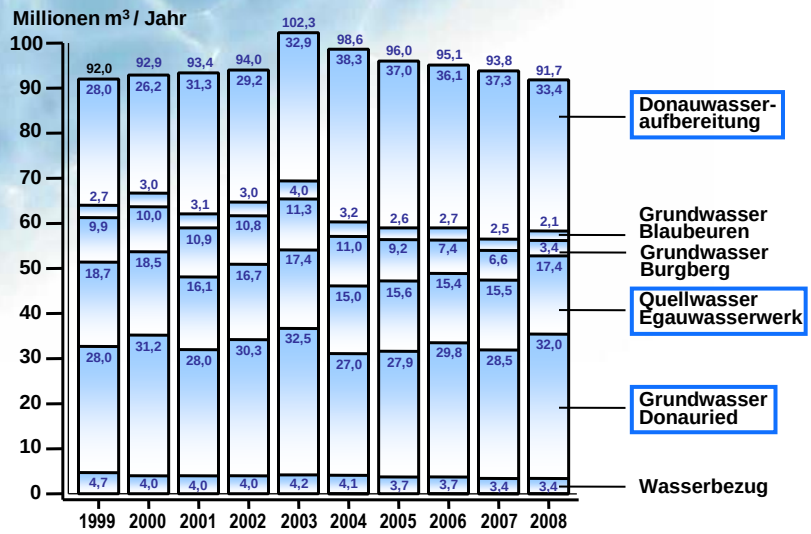
Zweckverband Landeswasserversorgung



- Versorgungsgebiet: Ulm - Stuttgart - Bad Mergentheim - Aalen
- 3 Millionen Einwohner im Versorgungsgebiet
- Fernwasseranteil ca. 50%

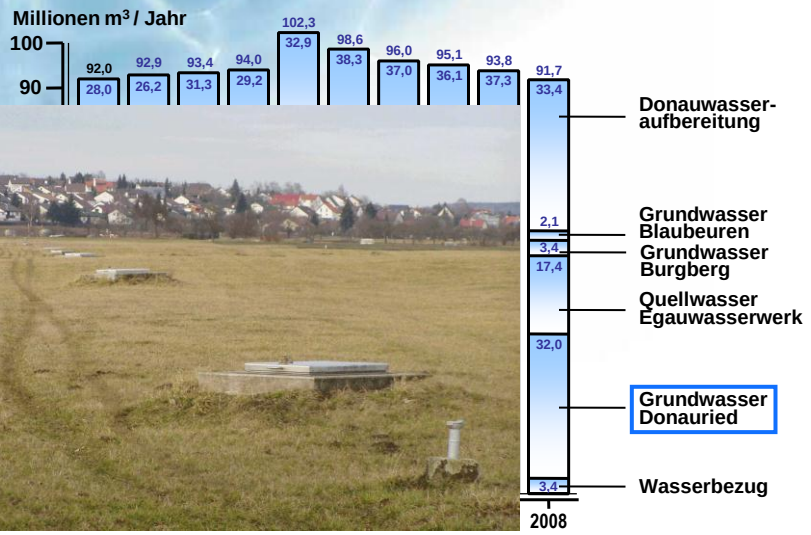
Wasserbereitstellung aus den einzelnen Gewinnungsanlagen

Zweckverband Landeswasserversorgung



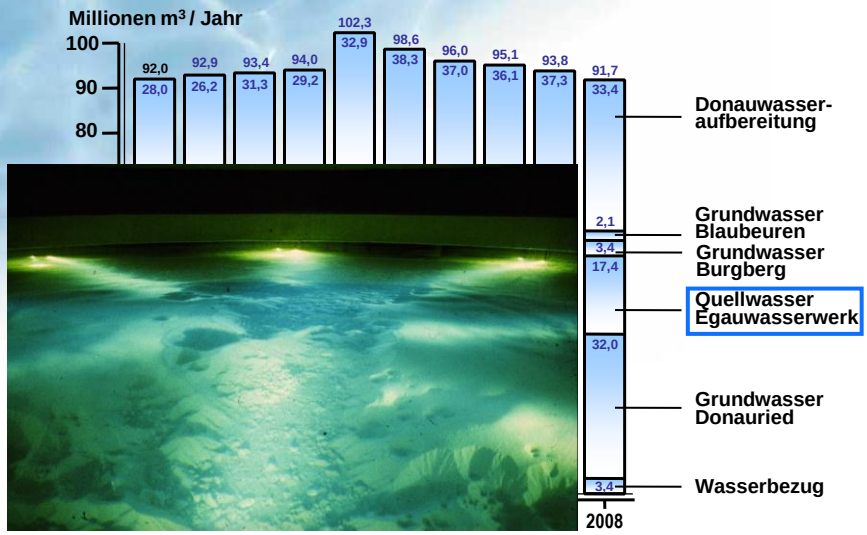
Wasserbereitstellung aus den einzelnen Gewinnungsanlagen

Zweckverband Landeswasserversorgung



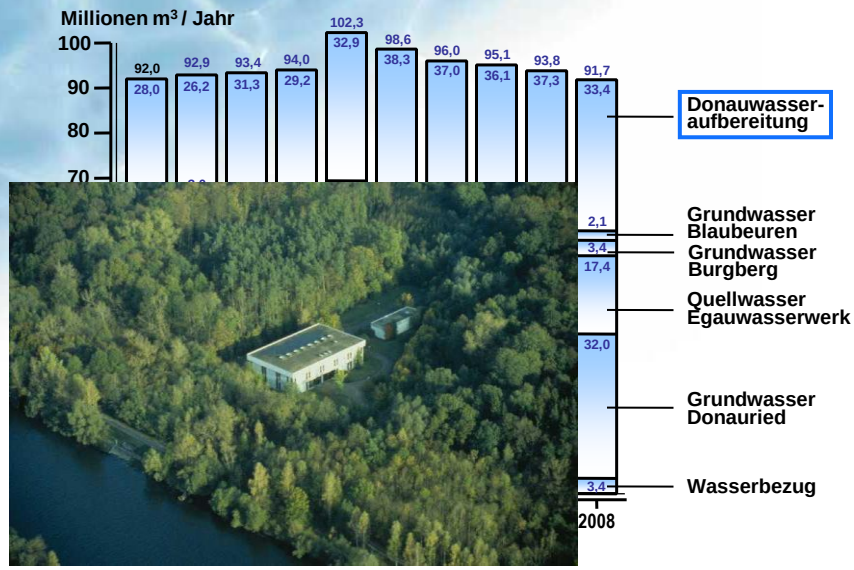
Wasserbereitstellung aus den einzelnen Gewinnungsanlagen

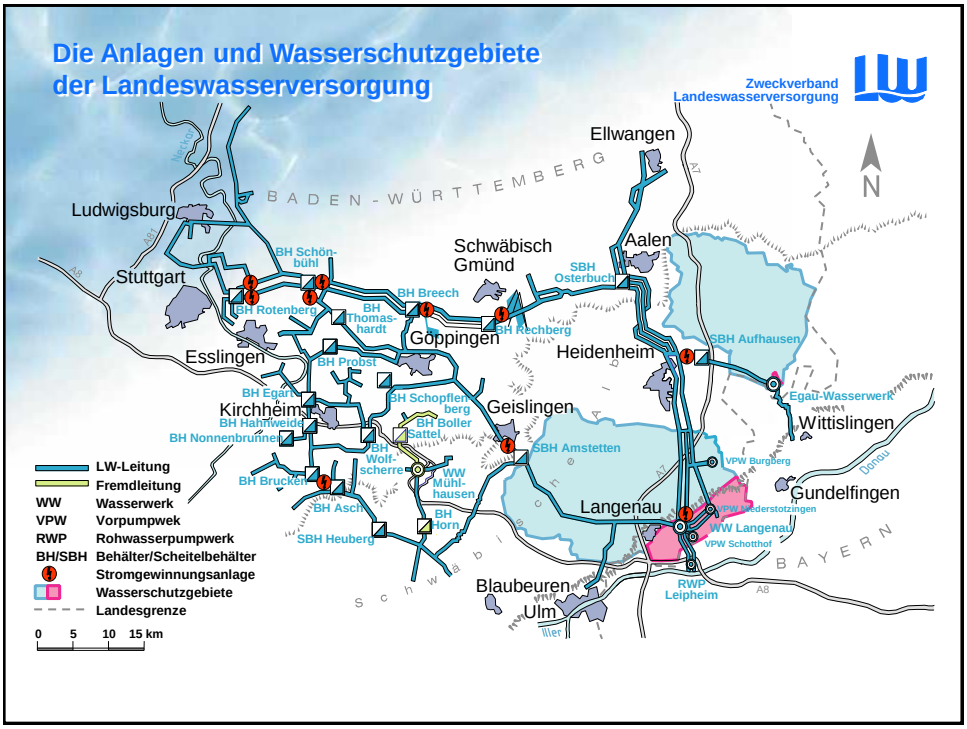
Zweckverband Landeswasserversorgung

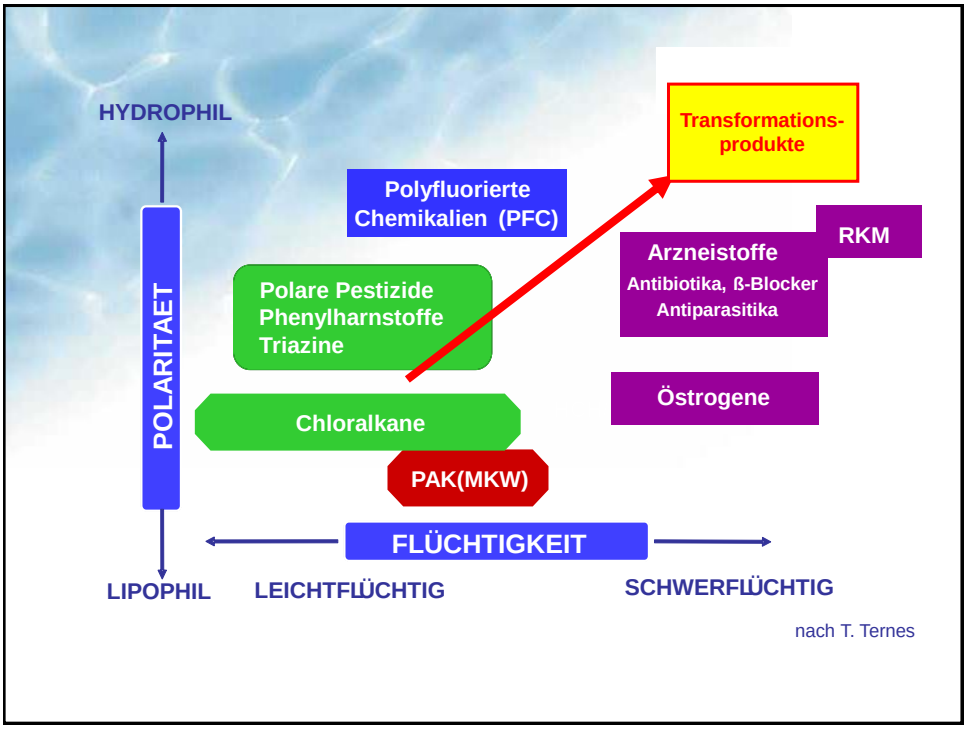


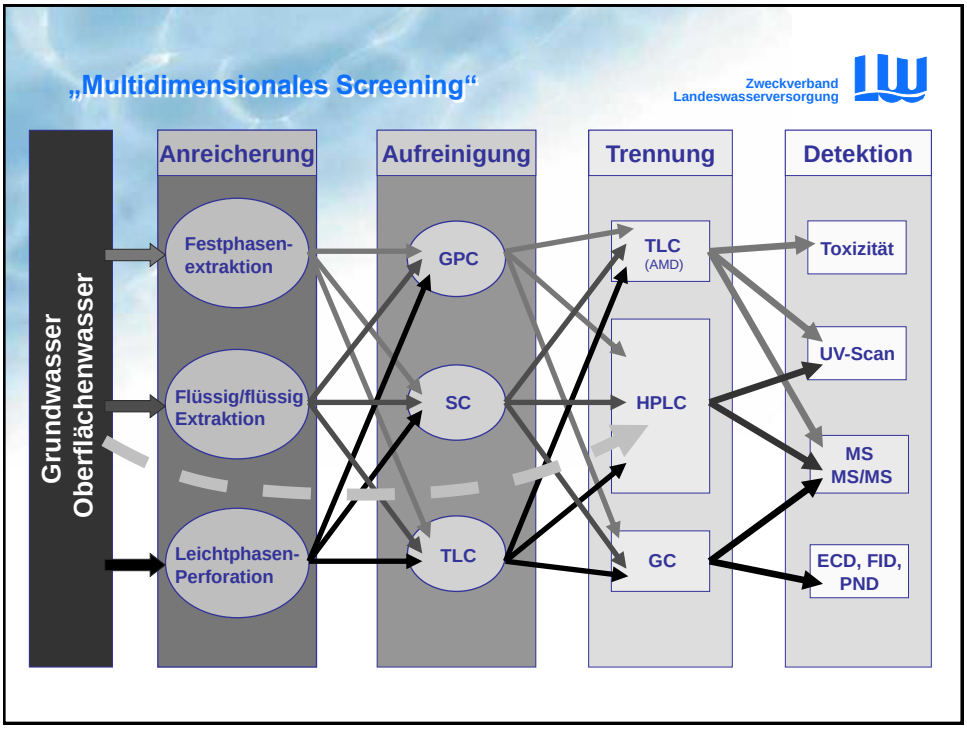
Wasserbereitstellung aus den einzelnen Gewinnungsanlagen

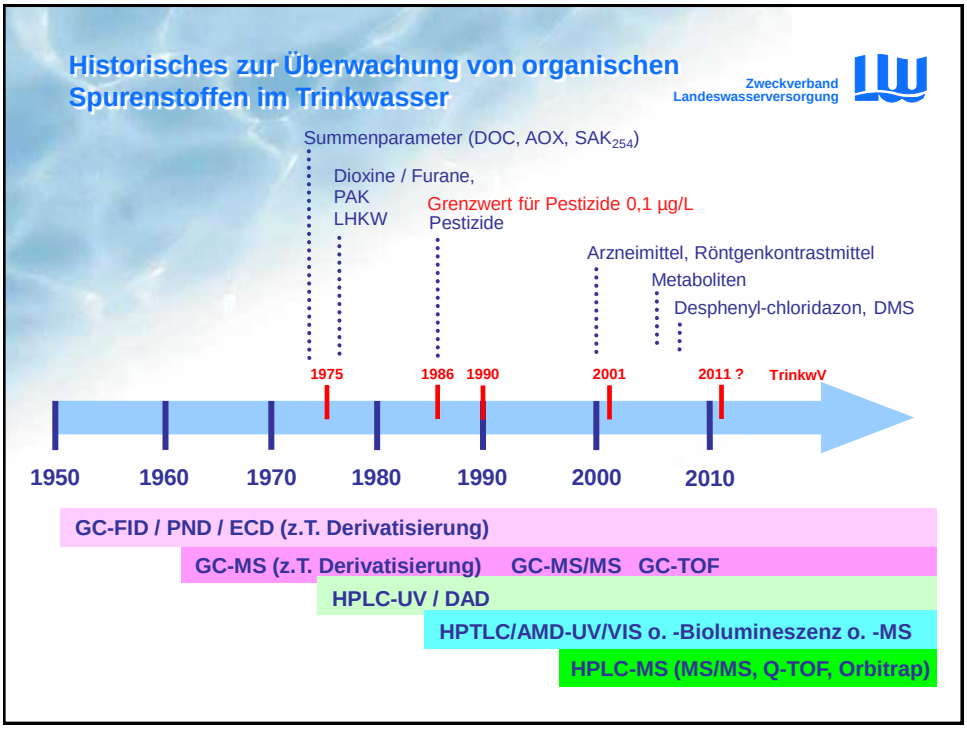
Zweckverband Landeswasserversorgung

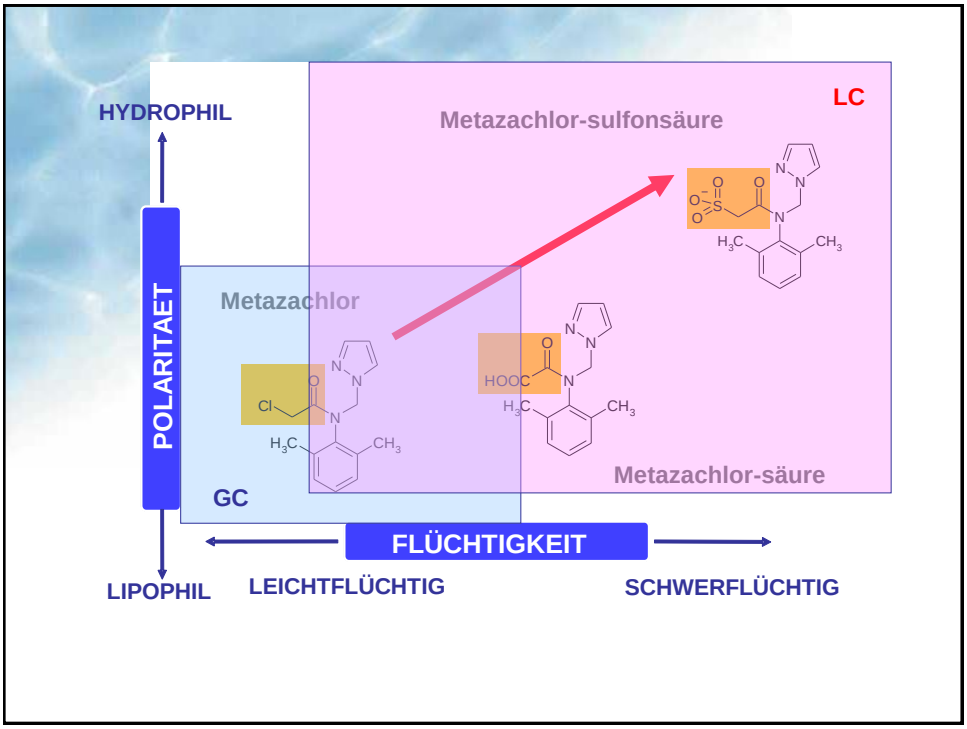



Die Anlagen und Wasserschutzgebiete
der Landeswasserversorgung
Zweckverband
Landeswasserversorgung
N
BADEN-WÜRTTEMBERG
BAYERN
Ludwigsburg
Stuttgart
Esslingen
Kirchheim
Goppingen
Geislingen
Schwäbisch
Gmünd
Aalen
Ellwangen
Heidenheim
Wittislingen
Gundelfingen
Langenau
Blaubeuren
Ulm
BH Schön-
bühl
BH Rotenberg
BH
Thomas-
hardt
BH Breech
BH Rechberg
BH Probst
BH Egart
BH Hahnweide
BH Nonnenbrunnen
BH Schopflen-
berg
BH Boller
Sattel
BH Wolf-
scherre
WW
Mühl-
hausen
BH Brucken
BH Asch
BH
Horn
SBH Heuberg
SBH
Osterbuch
SBH Aufhausen
SBH Amstetten
Egau-Wasserwerk
VPW Burgberg
VPW Niederstotzingen
WW Langenau
VPW Schotthof
RWP
Leipheim
LW-Leitung
Fremdleitung
WW Wasserwerk
VPW Vorpumpwek
RWP Rohwasserpumpwerk
BH/SBH Behälter/Scheitelbehälter
Stromgewinnungsanlage
Wasserschutzgebiete
Landesgrenze
0 5 10 15 km


HYDROPHIL
POLARITAET
LIPOPHIL
Transformations-
produkte
Polyfluorierte
Chemikalien (PFC)
RKM
Arzneistoffe
Antibiotika, ß-Blocker
Antiparasitika
Polare Pestizide
Phenylharnstoffe
Triazine
Östrogene
Chloralkane
PAK(MKW)
FLÜCHTIGKEIT
LEICHTFLÜCHTIG
SCHWERFLÜCHTIG
nach T. Ternes


„Multidimensionales Screening“
Zweckverband Landeswasserversorgung
Grundwasser
Oberflächenwasser
Anreicherung
Aufreinigung
Trennung
Detektion
Festphasen-extraktion
Flüssig/flüssig Extraktion
Leichtphasen-Perforation
GPC
SC
TLC
TLC (AMD)
HPLC
GC
Toxizität
UV-Scan
MS MS/MS
ECD, FID, PND


Historisches zur Überwachung von organischen Spurenstoffen im Trinkwasser
Zweckverband Landeswasserversorgung
Summenparameter (DOC, AOX, SAK254)
Dioxine / Furane,
PAK
LHKW
Grenzwert für Pestizide 0,1 µg/L
Pestizide
Arzneimittel, Röntgenkontrastmittel
Metaboliten
Desphenyl-chloridazon, DMS
1975
1986
1990
2001
2011 ?
TrinkwV
1950
1960
1970
1980
1990
2000
2010
GC-FID / PND / ECD (z.T. Derivatisierung)
GC-MS (z.T. Derivatisierung)
GC-MS/MS
GC-TOF
HPLC-UV / DAD
HPTLC/AMD-UV/VIS o. -Biolumineszenz o. -MS
HPLC-MS (MS/MS, Q-TOF, Orbitrap)



Umweltgerechte Produkte

Wie Pflanzenschutzmittel spurlos verschwinden

Mit Adam und Eva begann bekanntlich die Menschheitsgeschichte. Und mit ihnen auch die Unkrautplage. Erinnern wir uns: Mit Hilfe eines Apfels hatte die erste Frau den ersten Mann listig verführt. Die Strafe des Herrn war fürchterlich. »Verflucht sei der Acker um deinetwillen... Dornen und Disteln soll er dir tragen.«

Fortan war der Garten Eden verschlossen – die Nachkommen von Adam und Eva mußten im Schweiße ihres Angesichts für ihr Brot arbeiten.

Für große Teile der mittlerweile auf über fünf Milliarden angewachsenen Menschheit stellt die Sorge um das tägliche Brot immer noch das größte Problem dar, denn Disteln und Dornen, Insekten und Pilzbefall gefährden nach wie vor den Ernteertrag. Gewinnen sie die Überhand, drohen Hungerkatastrophen.

Schädlich nur für Schädlinge

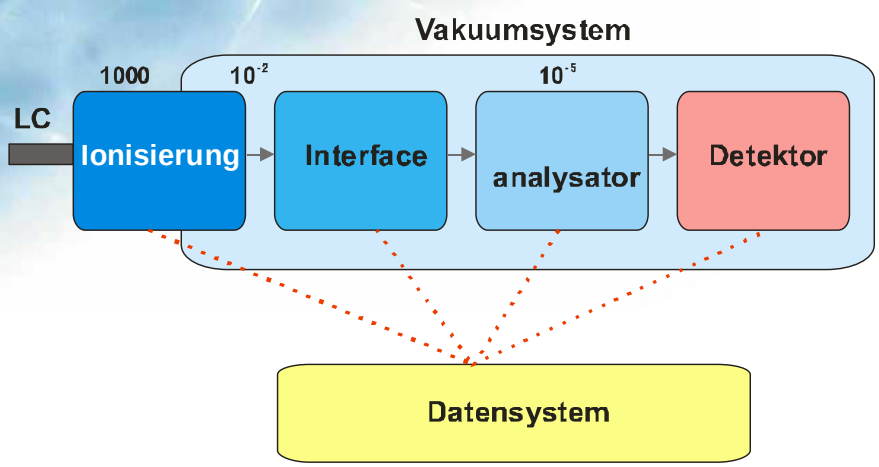
Gliederung

Zweckverband Landeswasserversorgung

- Einleitung
- Analytik von organischen Spurenstoffen
- Beispiele organischer Kontaminanten
- Was kommt noch alles auf uns zu?
- Zusammenfassung und Ausblick

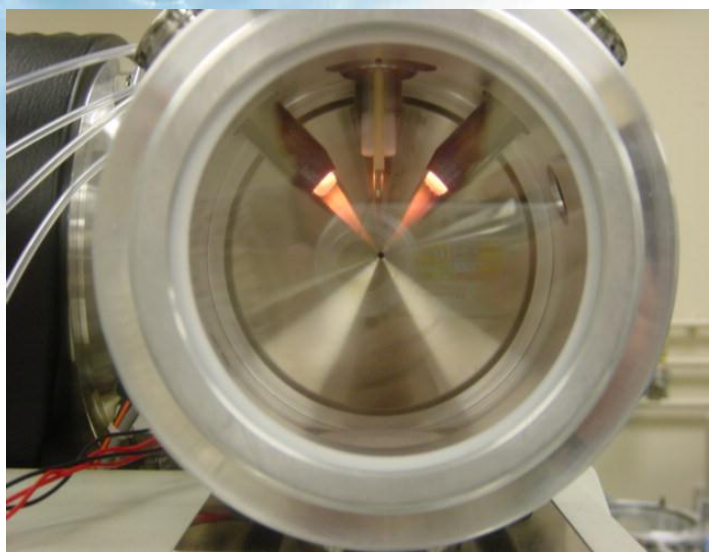
Aufbau LC-MS

Zweckverband Landeswasserversorgung



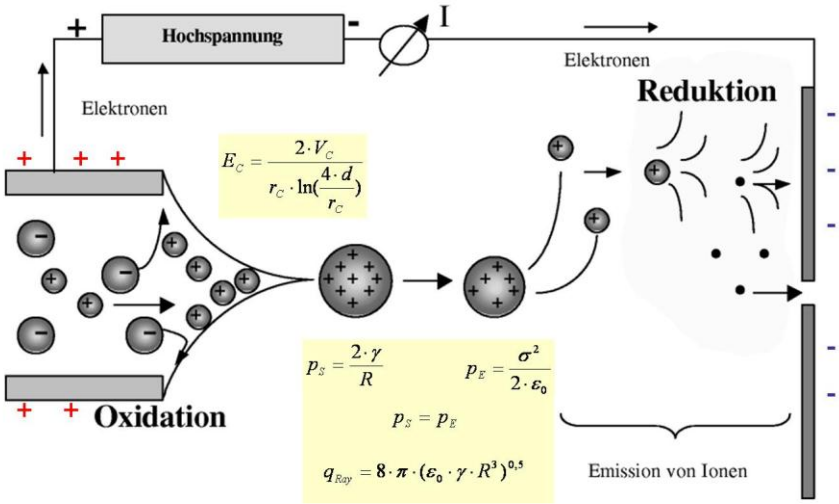
ESI - Ionenquelle

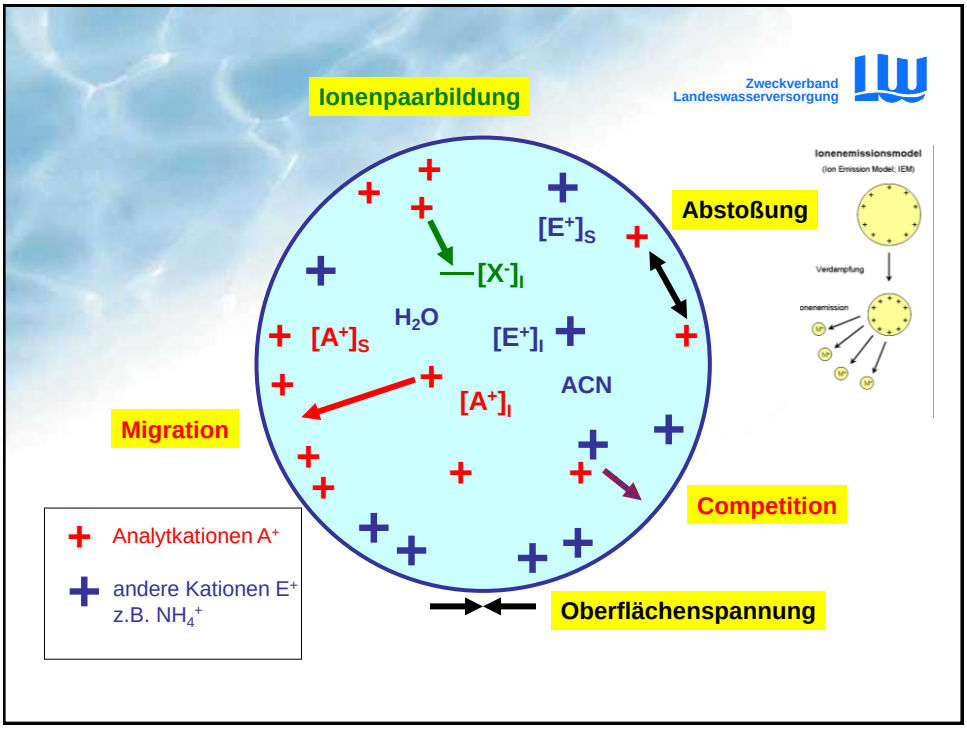
Zweckverband Landeswasserversorgung

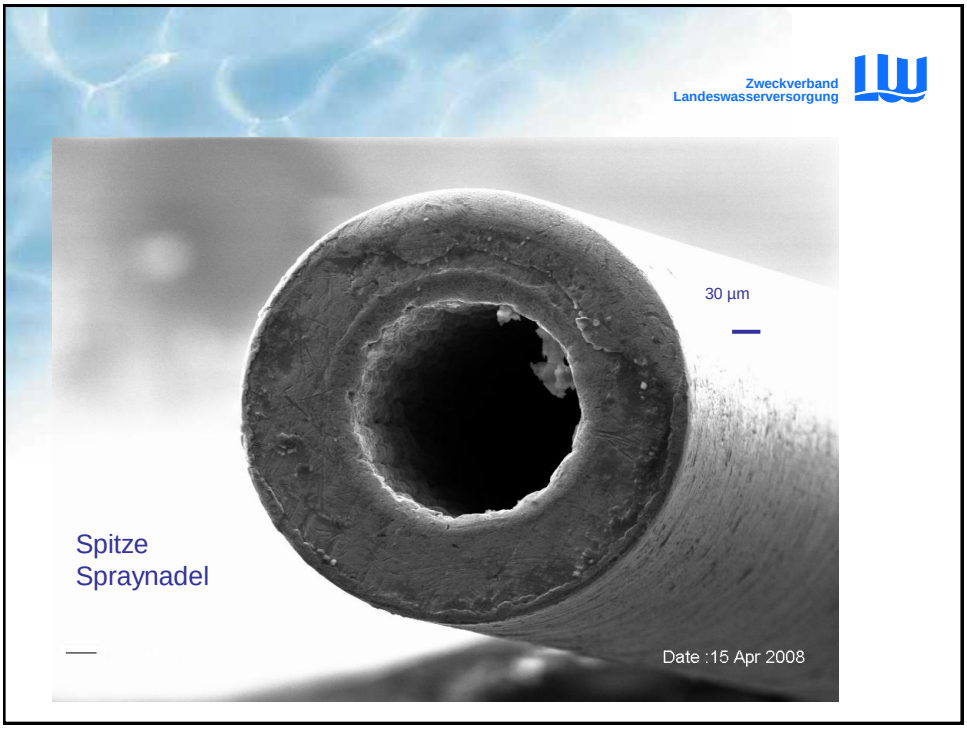


Elektrosprayionisation (ESI)

Zweckverband Landeswasserversorgung

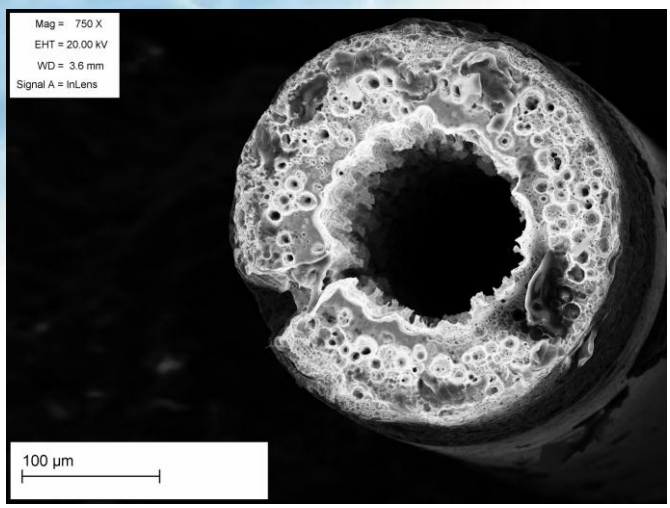


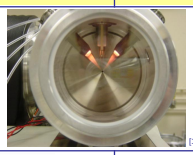
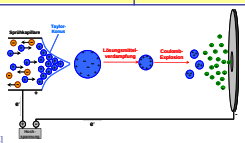
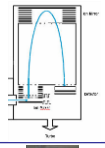
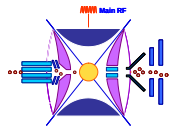
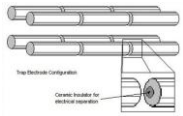
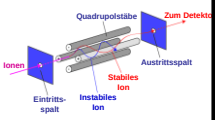
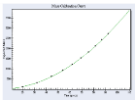
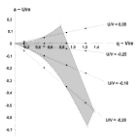
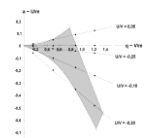
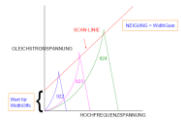

Zweckverband
Landeswasserversorgung
Ionenpaarbildung
Abstoßung
Migration
Competition
Oberflächenspannung
$[E^+]_S$
$[X^-]_I$
H_2O
$[A^+]_S$
$[E^+]_I$
ACN
$[A^+]_I$
Analytkationen A^+
andere Kationen E^+
z.B. NH_4^+
Ionenemissionsmodel
(Ion Emission Model; IEM)
Verdampfung


Zweckverband
Landeswasserversorgung
30 µm
Spitze
Spraynadel
Date :15 Apr 2008

Spraynadel

Zweckverband Landeswasserversorgung



	Time-of-Flight	Ion Trap	Linear Ion Trap	Quadrupole
Ionenquelle: Electrospray Ionisation	  [1]			[2]
Schema			 [GNU Free Documentation License]	
Abbildung	[3]	[4]	[5]	[6]
Funktionsweise	• Trennung der Ionen aufgrund unterschiedlicher Flugzeiten • Zugrunde liegende Gleichungen: $E_{kl} = e \cdot z \cdot U = \frac{1}{2} \cdot m_i \cdot v^2$ $t = s \cdot \sqrt{\frac{m_i}{2 \cdot z \cdot e \cdot U}}$ mit $v = \frac{s}{t}$ • Kalibrierfunktion: 	• Dreidimensionales Hochfrequenzfeld • Einfang von Ionen • Destabilisierung der Bahnen von Ionen mit bestimmten m/z-Werten durch Änderung der Frequenz ⇒ Auslass dieser Ionen • Stabilitätsdiagramm: 	• Zweidimensionales Hochfrequenzfeld • Einfang von Ionen • Destabilisierung der Bahnen von Ionen mit bestimmten m/z-Werten durch Änderung der Frequenz ⇒ Auslass dieser Ionen • Stabilitätsdiagramm: 	• Lineares Hochfrequenzfeld • Trennung der Ionen durch Änderung der Frequenz und folgende Anregung von Ionen bestimmter m/z-Werte auf stabile Bahnen • Stabilitätsdiagramm: 

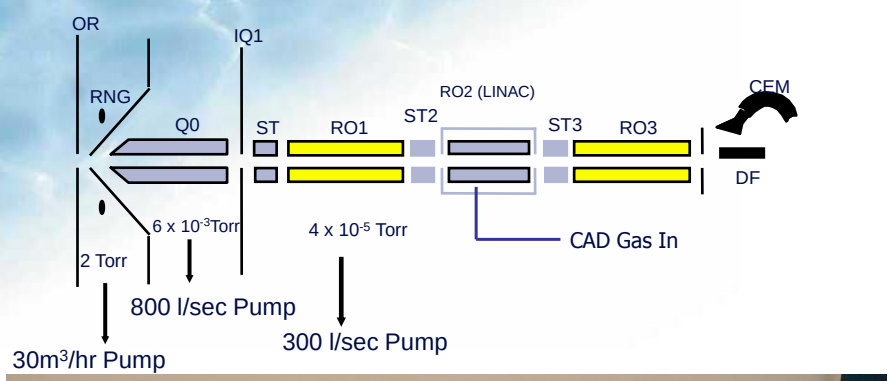
Orbitrap (ThermoFischer Scientific)

Zweckverband Landeswasserversorgung

Quelle: ThermoFischer Scientific

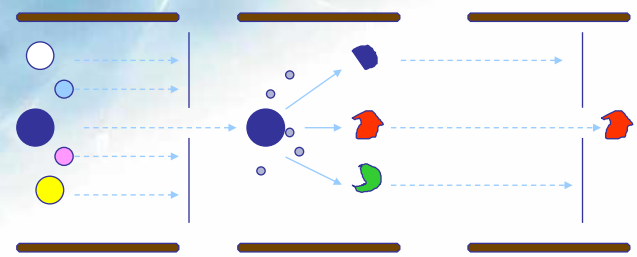
Ionenpfad (Tripelquad) AB

Zweckverband Landeswasserversorgung

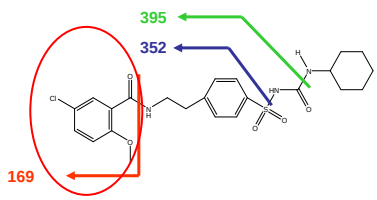


MS/MS Arbeitsweise
Multiple Reaction Monitoring (MRM)

Zweckverband
Landeswasserversorgung



Ion selektieren | fragmentieren | spezifisches Bruchstück



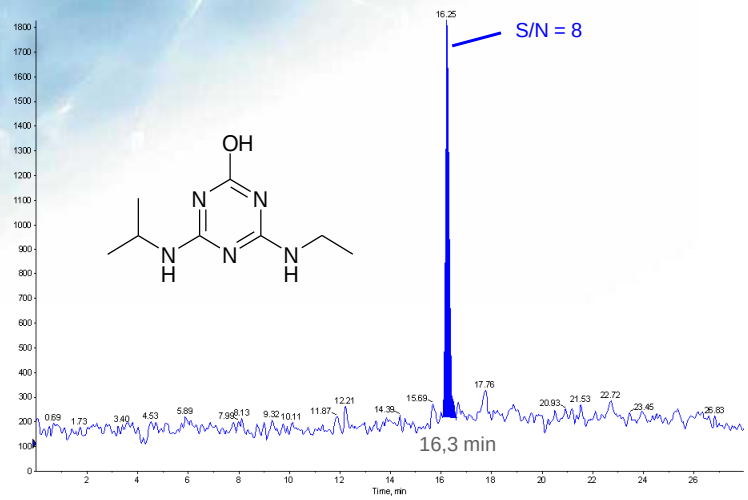
Gliederung

Zweckverband
Landeswasserversorgung

- Einleitung
- Analytik von organischen Spurenstoffen
- Beispiele organischer Kontaminanten
- Was kommt noch alles auf uns zu?
- Zusammenfassung und Ausblick

Direkte Messung von 10 ng/L Hydroxyatrazin

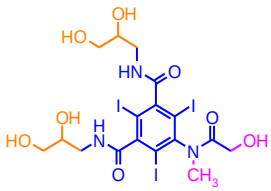
Zweckverband Landeswasserversorgung



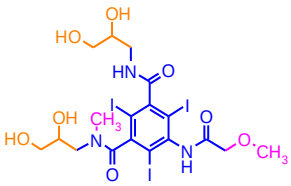
Massenübergang: 198 -> 156; Injektionsvolumen: 100 µL

Vergleich verschiedener nicht-ionischer iodierter Röntgenkontrastmittel (RKM)

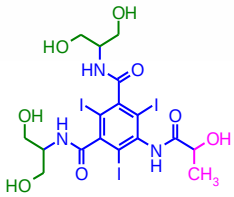
Zweckverband Landeswasserversorgung



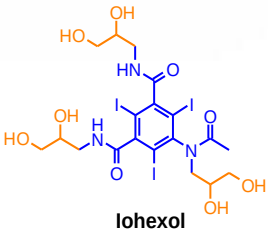
Iomeprol



Iopromid



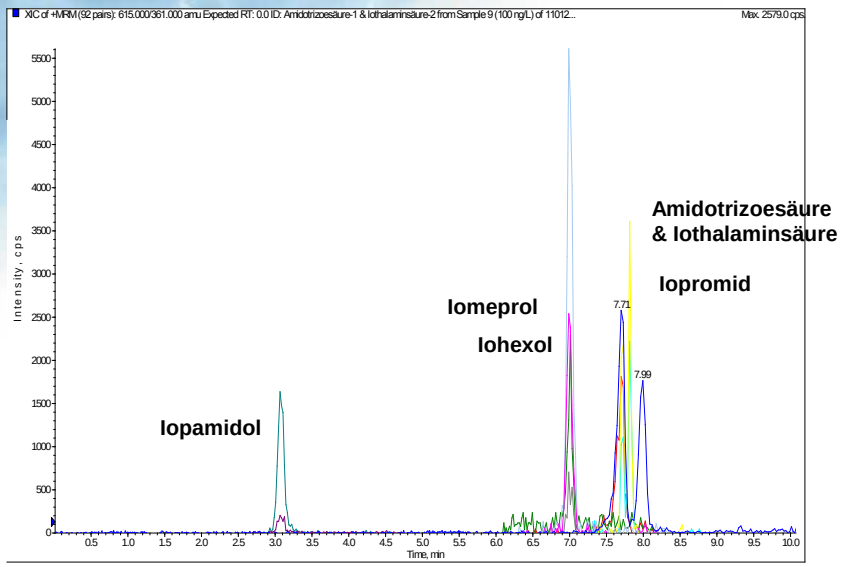
Iopamidol



Iohexol

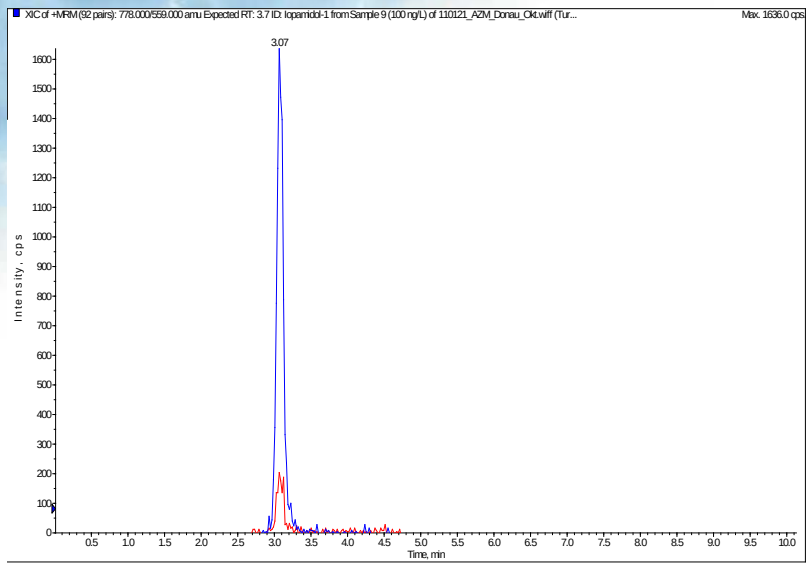
Anreicherungsfreie Bestimmung von 100 ng/L iodierten Röntgenkontrastmitteln (Qtrap 5500)

Zweckverband Landeswasserversorgung



Anreicherungsfreie Bestimmung von 100 ng/L Iopamidol (Qtrap 5500)

Zweckverband Landeswasserversorgung



Anwendung von iodierten Röntgenkontrastmitteln in der medizinischen Diagnostik

Zweckverband Landeswasserversorgung

Verbrauch:

- je Anwendung: ~ 100 g
- 3000 t pro Jahr weltweit

Strukturklassen:

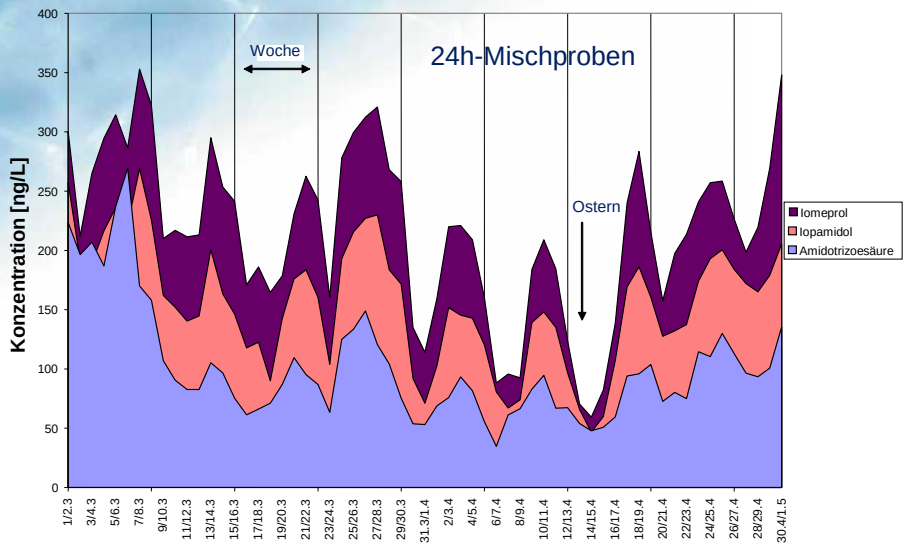
- ionisch und nicht-ionisch
- monomer und dimer

➢ Überwiegend nicht-ionische Monomere

31

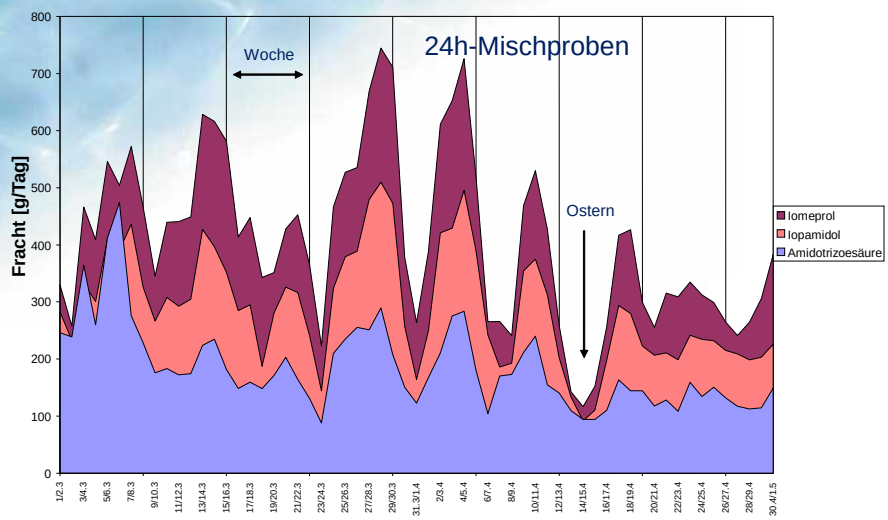
Vorkommen von Röntgenkontrastmitteln in der Donau bei Leipheim (2009)

Zweckverband Landeswasserversorgung



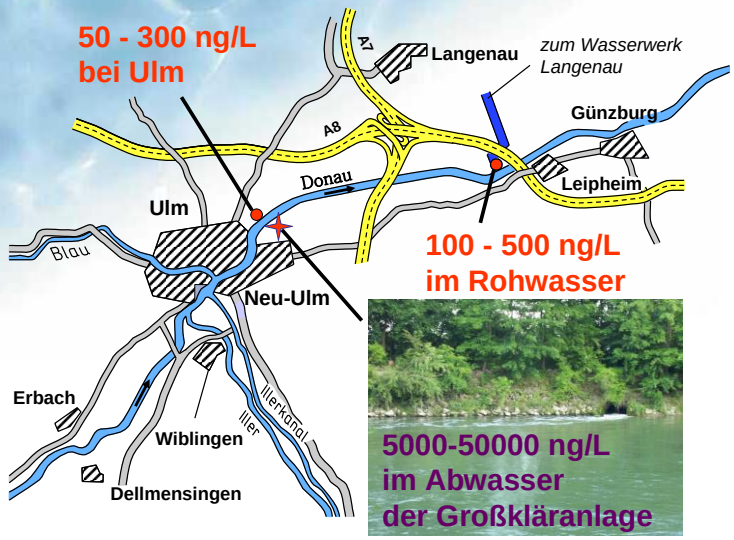
Fracht von Röntgenkontrastmitteln in der Donau bei Leipheim (2009)

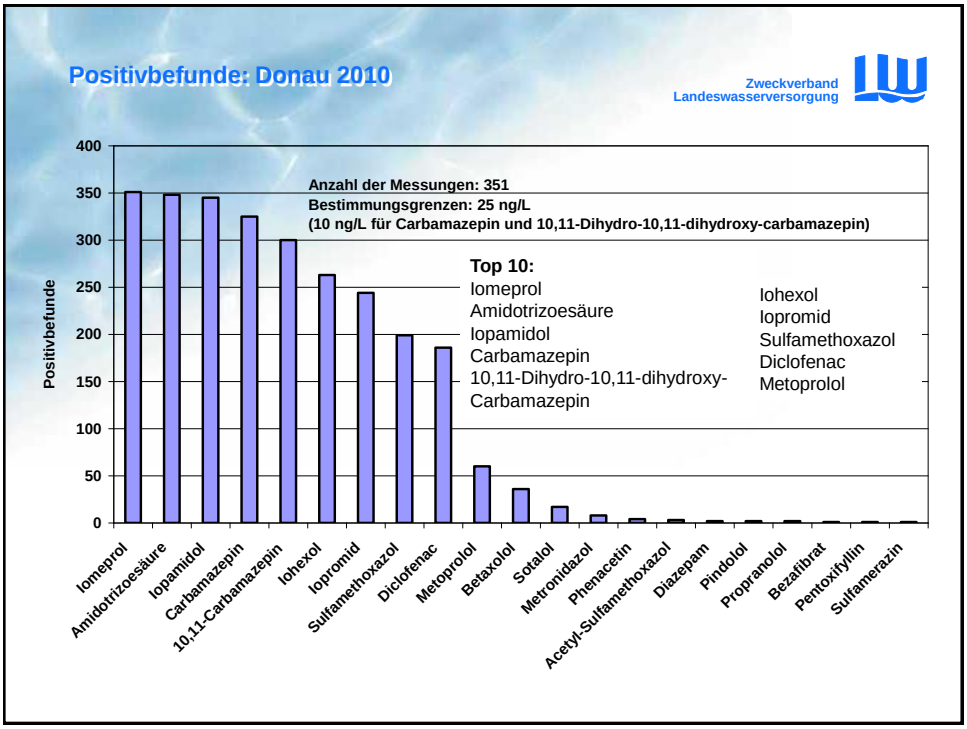
Zweckverband Landeswasserversorgung

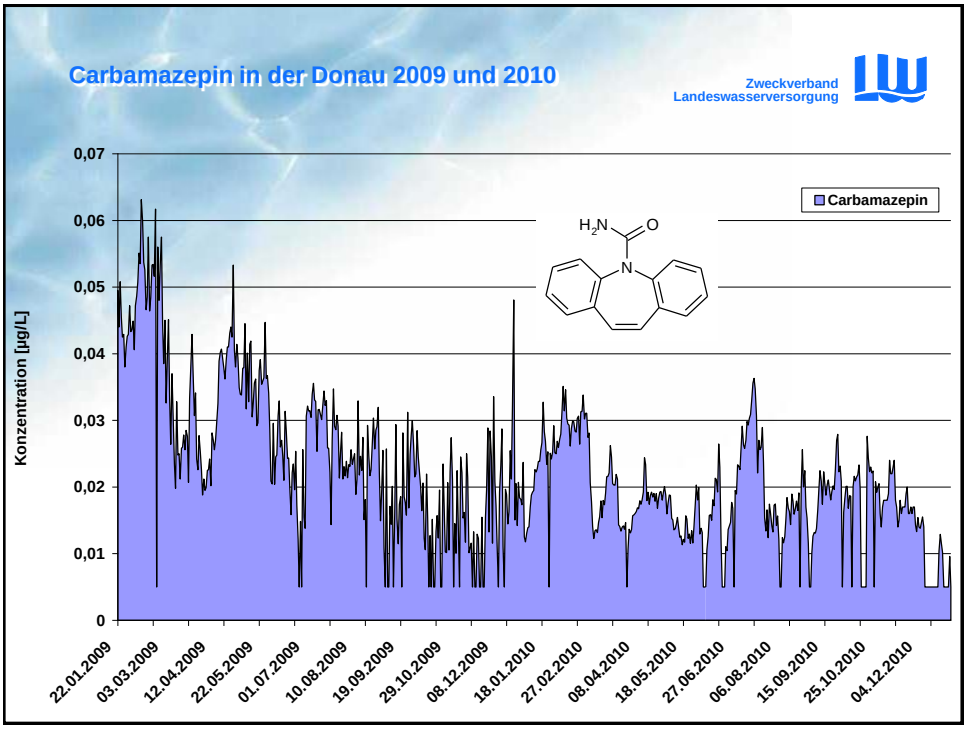


Vorkommen von Röntgenkontrastmitteln in der Donau

weckverband Landeswasserversorgung

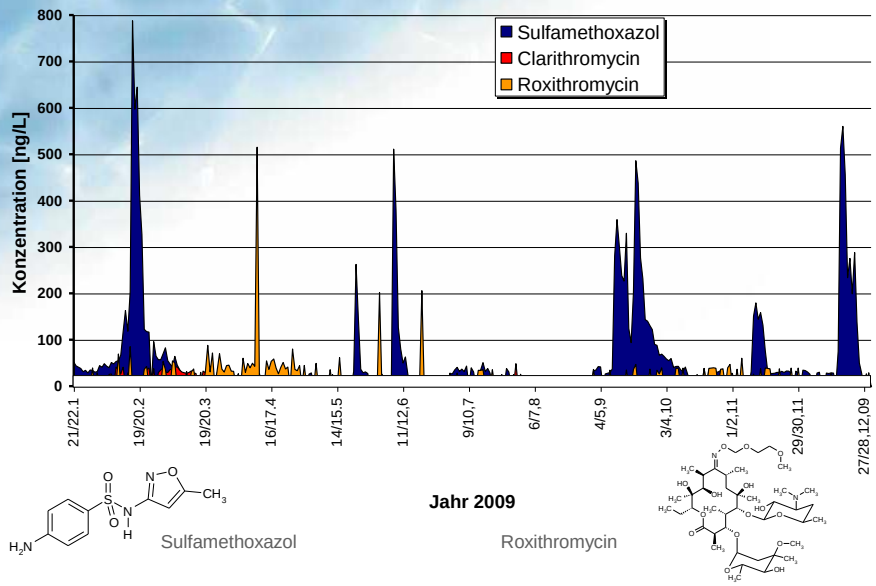



Positivbefunde: Donau 2010
Zweckverband
Landeswasserversorgung
Positivbefunde
400
350
300
250
200
150
100
50
0
Anzahl der Messungen: 351
Bestimmungsgrenzen: 25 ng/L
(10 ng/L für Carbamazepin und 10,11-Dihydro-10,11-dihydroxy-carbamazepin)
Top 10:
Iomeprol
Amidotrizoesäure
Iopamidol
Carbamazepin
10,11-Dihydro-10,11-dihydroxy-Carbamazepin
Iohexol
Iopromid
Sulfamethoxazol
Diclofenac
Metoprolol
Iomeprol
Amidotrizoesäure
Iopamidol
Carbamazepin
10,11-Carbamazepin
Iohexol
Iopromid
Sulfamethoxazol
Diclofenac
Metoprolol
Betaxolol
Sotalol
Metronidazol
Phenacetin
Acetyl-Sulfamethoxazol
Diazepam
Pindolol
Propranolol
Bezafibrat
Pentoxifyllin
Sulfamerazin


Carbamazepin in der Donau 2009 und 2010
Zweckverband
Landeswasserversorgung
Konzentration [µg/L]
0,07
0,06
0,05
0,04
0,03
0,02
0,01
0
Carbamazepin
H2N
O
N
22.01.2009
03.03.2009
12.04.2009
22.05.2009
01.07.2009
10.08.2009
19.09.2009
29.10.2009
08.12.2009
18.01.2010
27.02.2010
08.04.2010
18.05.2010
27.06.2010
06.08.2010
15.09.2010
25.10.2010
04.12.2010

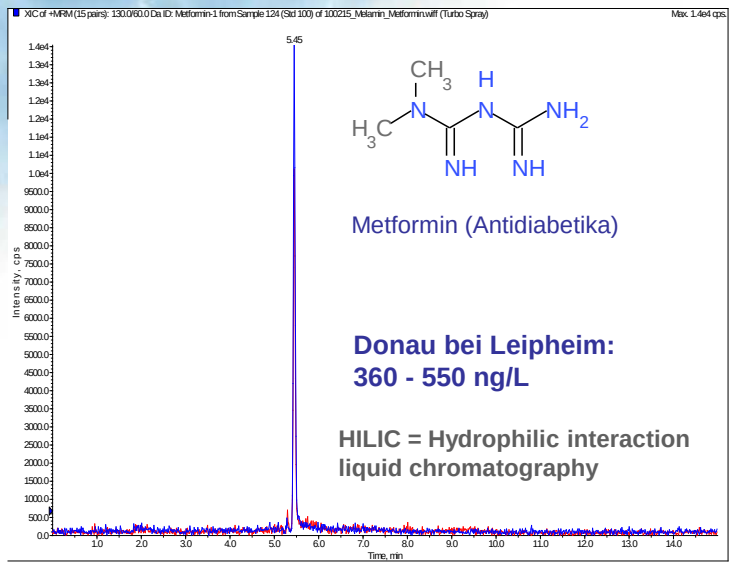
Vorkommen von Antibiotika in der Donau bei Leipheim (2009)

Zweckverband Landeswasserversorgung



LC-MS/MS-Chromatogramm für 100 ng/L Metformin

Zweckverband Landeswasserversorgung



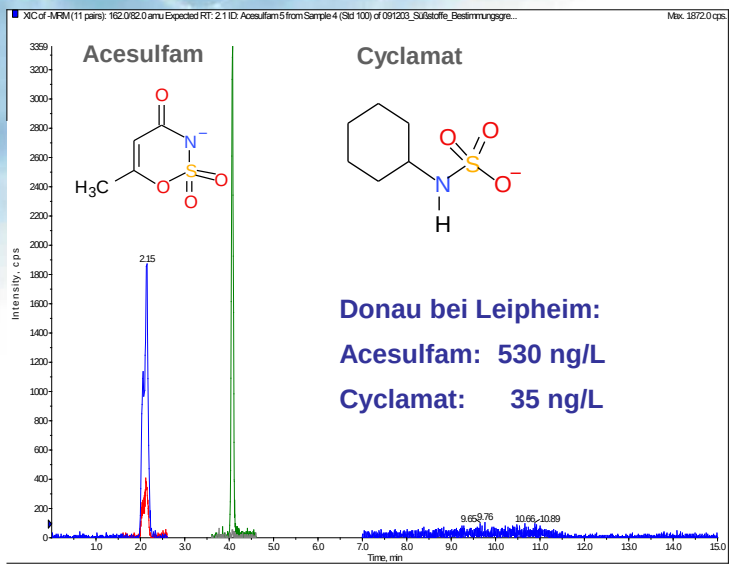
Metformin (Antidiabetika)

Donau bei Leipheim: 360 - 550 ng/L

HILIC = Hydrophilic interaction liquid chromatography

LC-MS/MS-Chromatogramm für 100 ng/L Süßstoffe

Zweckverband Landeswasserversorgung



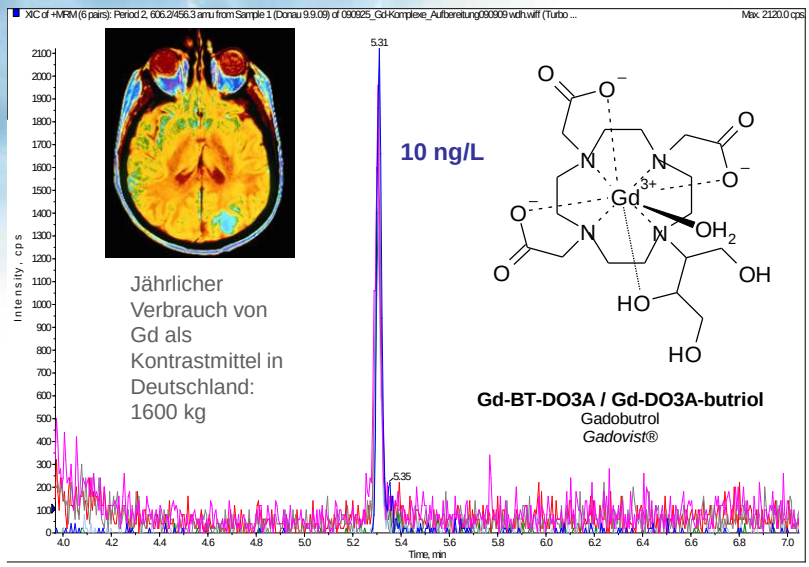
Donau bei Leipheim:

Acesulfam: 530 ng/L

Cyclamat: 35 ng/L

Gadovist in der Donau bei Leipheim

Zweckverband Landeswasserversorgung



10 ng/L

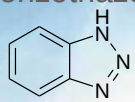
Jährlicher Verbrauch von Gd als Kontrastmittel in Deutschland: 1600 kg

Gd-BT-DO3A / Gd-DO3A-butriol
Gadobutrol
Gadovist®

Benzotriazol und Tolyltriazole

Zweckverband Landeswasserversorgung

1H-Benzotriazol

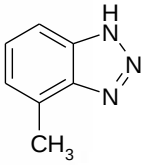


Anwendungsgebiete

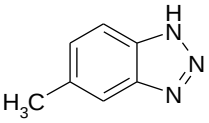
- Kühlwasser
- Kühl- und Heizkreisläufe
- Kühlschmiermittel
- Glykolische Frostschutz-Konzentrate (z. B. in Automobilen)
- Metallbearbeitungsflüssigkeiten
- Hydraulikflüssigkeiten
- Metallpolituren
- Wachse
- Saure Reinigungsmittel
- Desinfektionsmittel
- Enteisungsflüssigkeiten
- Vulkanisierungsverzögerer für Chloroprene- und Halobutly-Gummi
- Wasseraufbereitung
- Metallbearbeitung und Metallverarbeitung (Löten, Beschichten, Schweißen)
- Galvanik
- Zusatz zu alkoholbasierenden Treibstoffen
- Photographie

Tolyltriazole

4-Methyl-benzotriazol

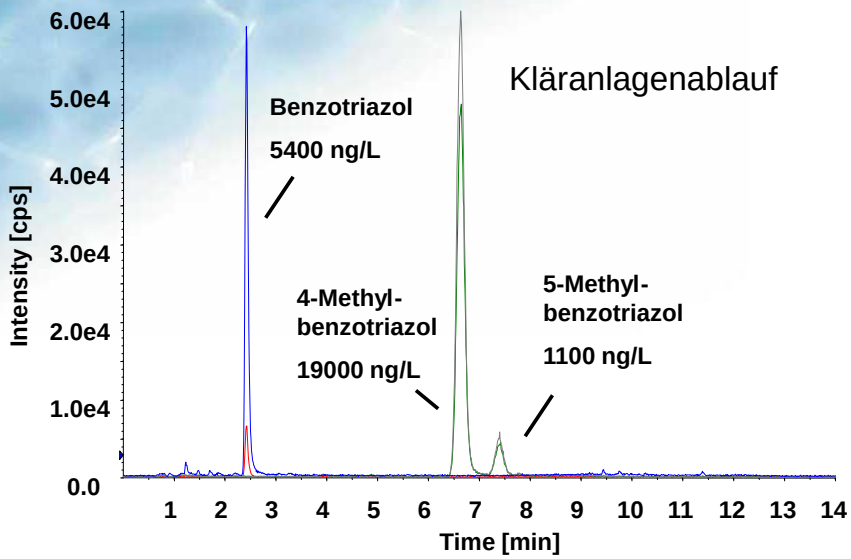


5-Methyl-benzotriazol



Chromatographische Trennung der Tolyltriazole

Zweckverband Landeswasserversorgung

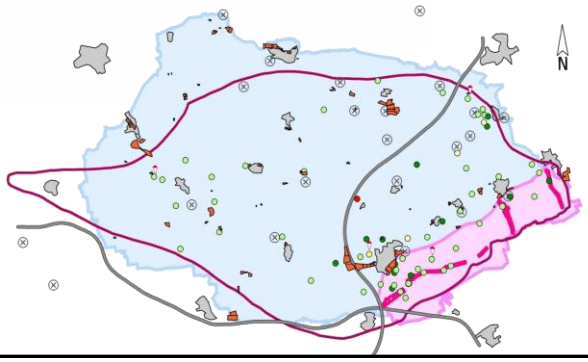


„Stichtagsbeprobung Grundwässer“

Zweckverband Landeswasserversorgung

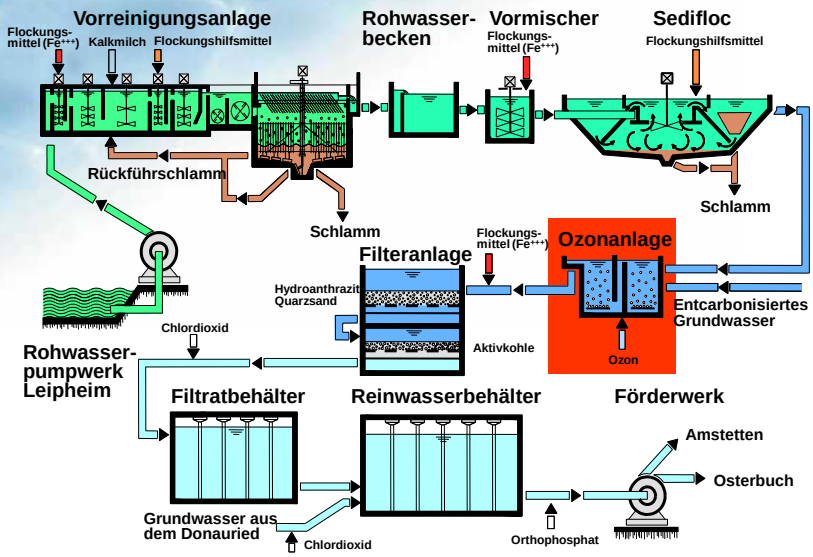
	Benzotriazol	Tolyltriazole
Min	< 5 ng/L	< 5 ng/L
Median	< 5 ng/L	< 5 ng/L
Max	173 ng/L	75 ng/L
Anzahl > BG	28 (35 %)	15 (19 %)
Mittel > BG	57 ng/L	29 ng/L

Es wurden 79 Proben auf das Vorkommen von Benzotriazol und Tolyltriazole untersucht.



Schema der Donauwasseraufbereitung im Wasserwerk Langenau

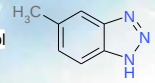
Zweckverband Landeswasserversorgung

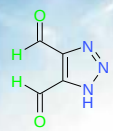


Mögliche Reaktionsprodukte von 5-Methyl-benzotriazol bei der Ozonung

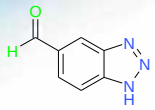
Zweckverband Landeswasserversorgung

5-Methyl-Benzotriazol

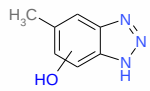




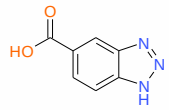
$C_4H_3N_3O_2$
[M-H]- = 124.0153



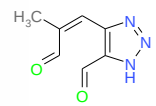
$C_7H_5N_3O$
[M-H]- = 146.0359853



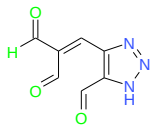
$C_7H_7N_3O$
[M-H]- = 148.0516354



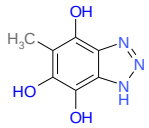
$C_7H_5N_3O_2$
[M-H]- = 162.0309



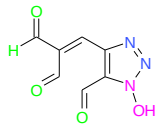
$C_7H_7N_3O_2$
[M-H]- = 164.04655



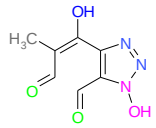
$C_7H_5N_3O_3$
[M-H]- = 178.0258146



$C_7H_7N_3O_3$
[M-H]- = 180.0414647



$C_7H_5N_3O_4$
[M-H]- = 194.0207292



$C_7H_7N_3O_4$
[M-H]- = 196.0363793

Röntgenkontrastmittel im Trinkwasser

Zweckverband Landeswasserversorgung

Herkunft	Iohexol [ng/L]	Iopamidol [ng/L]	Iomeprol [ng/L]	Iopromid [ng/L]	Amidotrizoesäure [ng/L]
Hamburg	< 10	3	15	< 1	< 1
Berlin	< 10	150	14	18	21
Leipzig	< 10	7	1	1	10
Dresden	< 10	3	1	< 1	3
Frankfurt/Main	< 10	4	< 1	< 1	16
Köln	< 10	11	< 1	< 1	33
Essen	48	390	20	10	250
Dortmund	< 10	240	1	4	52
Stuttgart	< 10	19	9	7	< 1
München	< 10	< 1	< 1	< 1	< 1
Sylt	< 10	< 1	< 1	< 1	5

Quelle: Zeitschrift Feinschmecker 9/2006 (Institut Prof. W. Jäger)

Arzneimittel im Trinkwasser

Zweckverband Landeswasserversorgung

Herkunft	Diclofenac [ng/L]	Sulfa-methoxazol [ng/L]	Ifosfamid [ng/L]	Carba-mazepin [ng/L]	Clofibrin-säure [ng/L]
Hamburg	1	< 1	< 1	< 1	5
Berlin	7	< 1	4	76	4
Leipzig	< 1	< 1	< 1	4	< 1
Dresden	< 1	< 1	< 1	< 1	< 1
Frankfurt/Main	< 1	< 1	< 1	3	3
Köln	< 1	< 1	< 1	< 1	< 1
Essen	< 1	1	< 1	5	< 1
Dortmund	8	3	< 1	64	< 1
Stuttgart	< 1	< 1	< 1	< 1	< 1
München	< 1	< 1	< 1	1	< 1
Sylt	< 1	< 1	< 1	< 1	< 1

Quelle: Zeitschrift Feinschmecker 9/2006 (Institut Prof. W. Jäger)

Gliederung

Zweckverband Landeswasserversorgung

- Einleitung
- Analytik von organischen Spurenstoffen
- Beispiele organischer Kontaminanten
- **Was kommt noch alles auf uns zu?**
- Zusammenfassung und Ausblick

Anwendungs- und Produktionsmengen

Zweckverband Landeswasserversorgung

Anwendungsmenge in Deutschland

Humanpharmaka (ca. 2800):	ca. 6.500 t/a
Veterinärpharmaka:	ca. 1.000 t/a
Pestizide (ca. 200):	ca. 30.000 t/a
Tenside:	ca. 188.000 t/a

Produktionsmenge in Deutschland

Kosmetische Inhaltsstoffe:	> 500.000 t/a
EDTA:	ca. 29.000 t/a

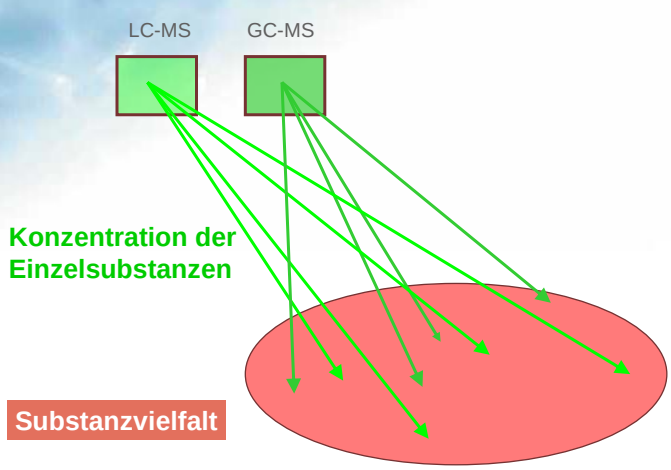
Herkunft / Quellen

Haushaltschemikalien, Additive technischer Produkte, Industriechemikalien, landwirtschaftliche Stoffe……

Strategie

Zweckverband Landeswasserversorgung

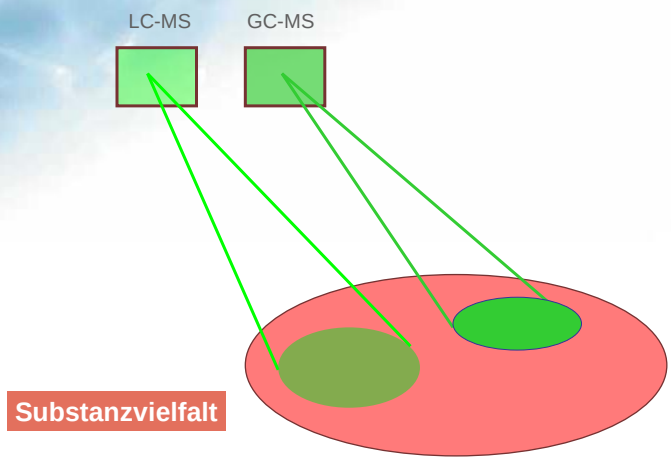
Chemisch-physikalische Einzelstoffanalytik



Strategie

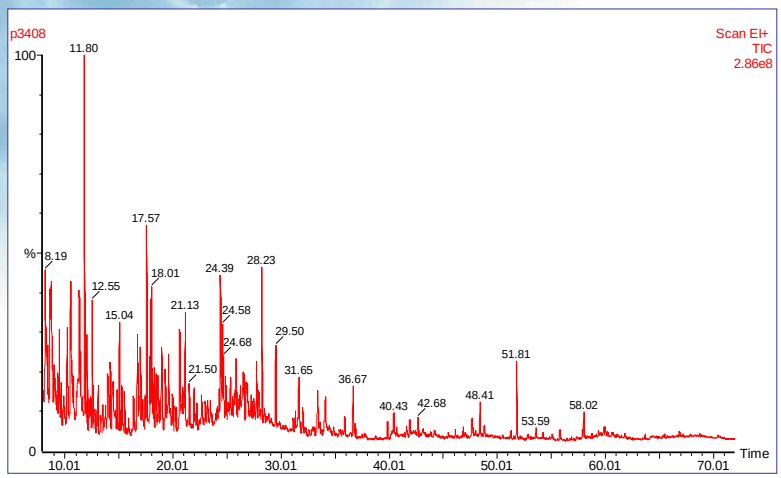
Zweckverband Landeswasserversorgung

Chemisch-physikalische Einzelstoffanalytik



Bodensee Rohwasser 60 m

Zweckverband Landeswasserversorgung

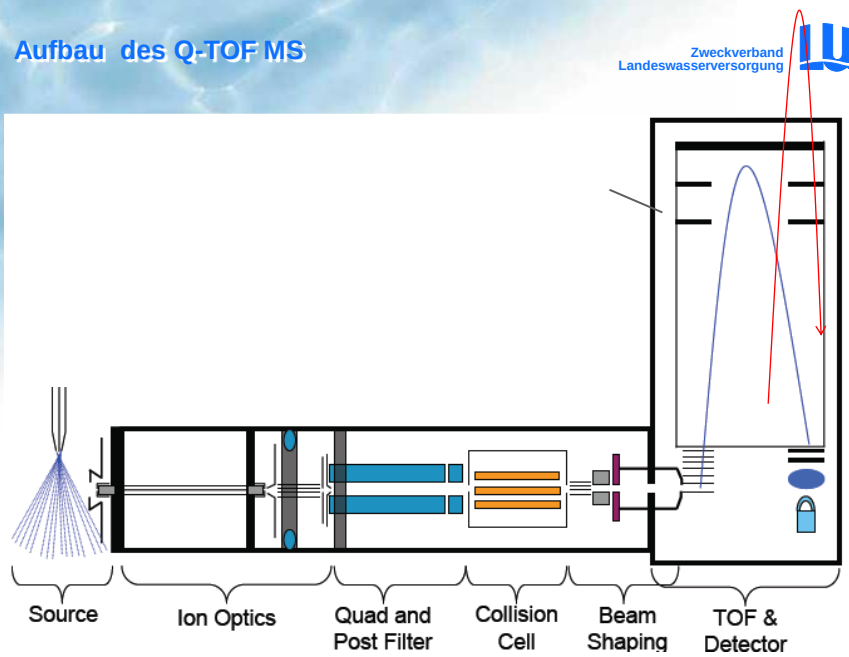


kontinuierliche Anreicherung von 3,5 Liter Rohwasser (unfiltriert)

Quelle: M. Petri, BWV

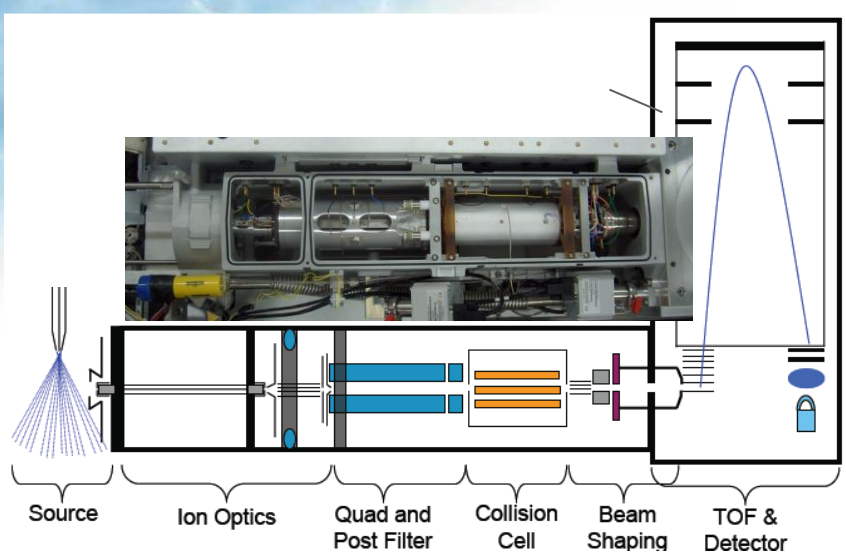
Aufbau des Q-TOF MS

Zweckverband Landeswasserversorgung

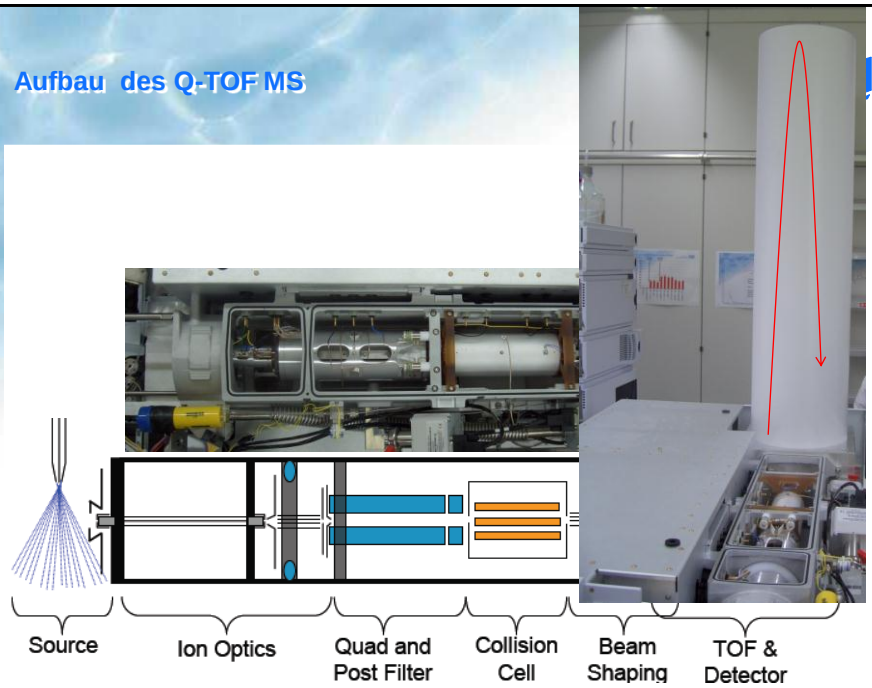


Aufbau des Q-TOF MS

Zweckverband Landeswasserversorgung



Aufbau des Q-TOF MS



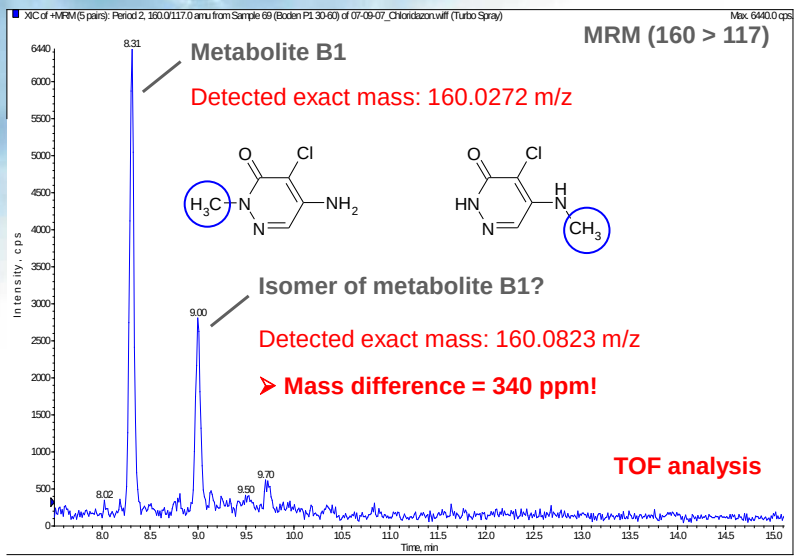
MS method parameters

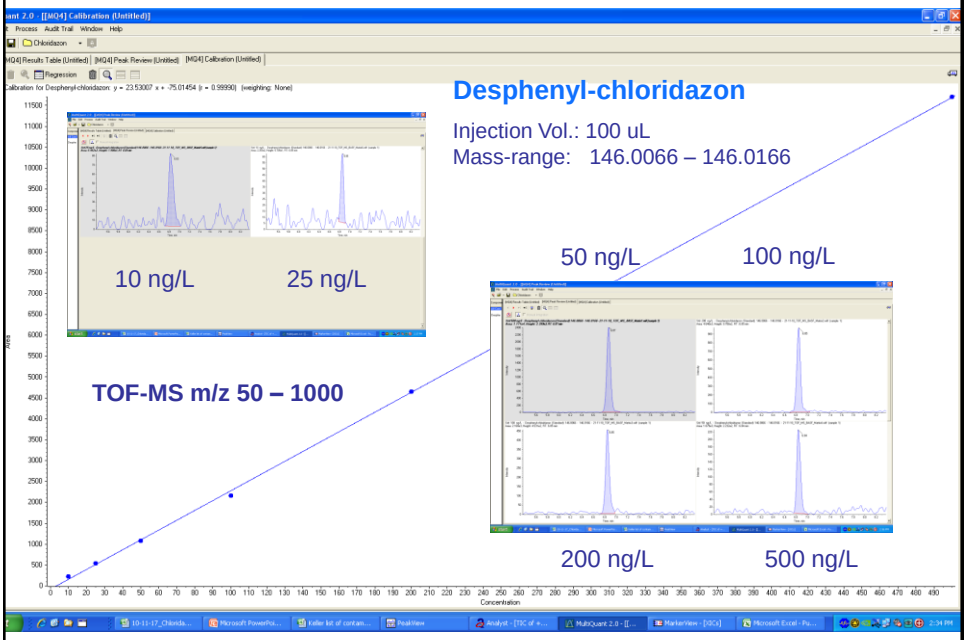
Zweckverband Landeswasserversorgung

System:	AB SCIEX Triple TOF 5600 System
Temperature:	500 °C
Curtain gas:	40 psi
Gas 1:	40 psi
Gas 2:	50 psi

Bestimmung von Metabolit B1 mittels LC-MS/MS

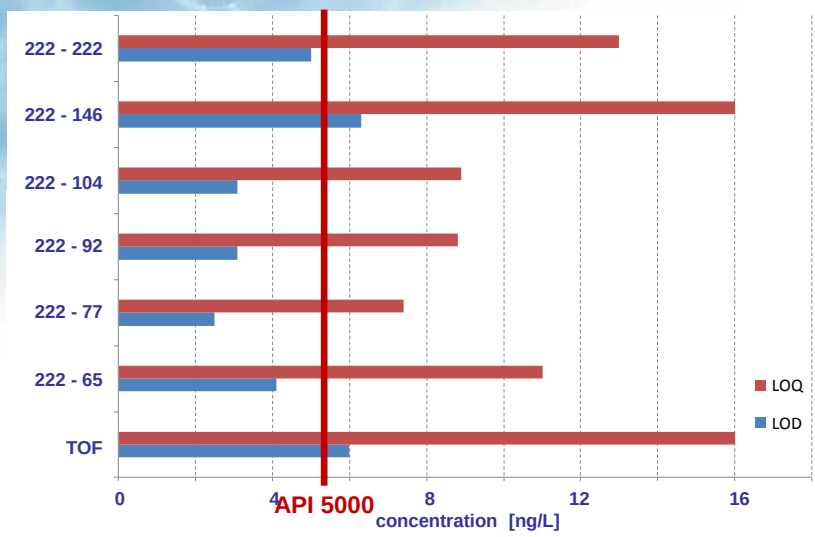
Zweckverband Landeswasserversorgung





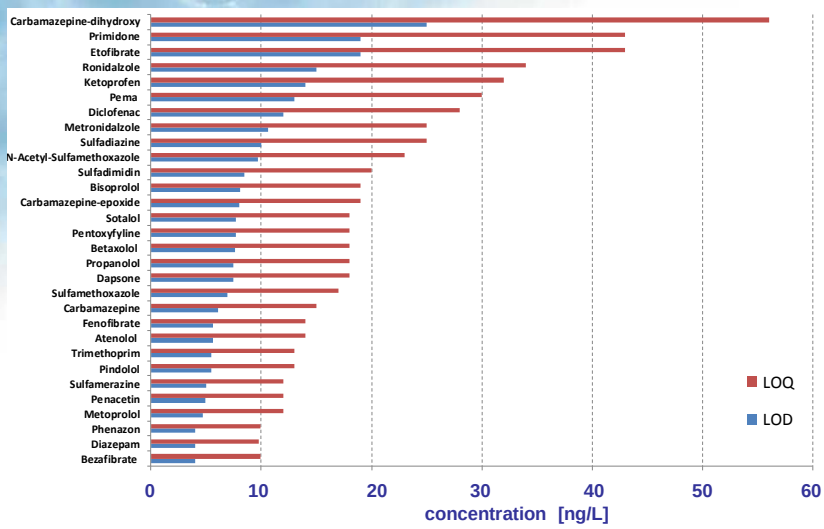
LOD and LOQ for chloridazone MS/MS

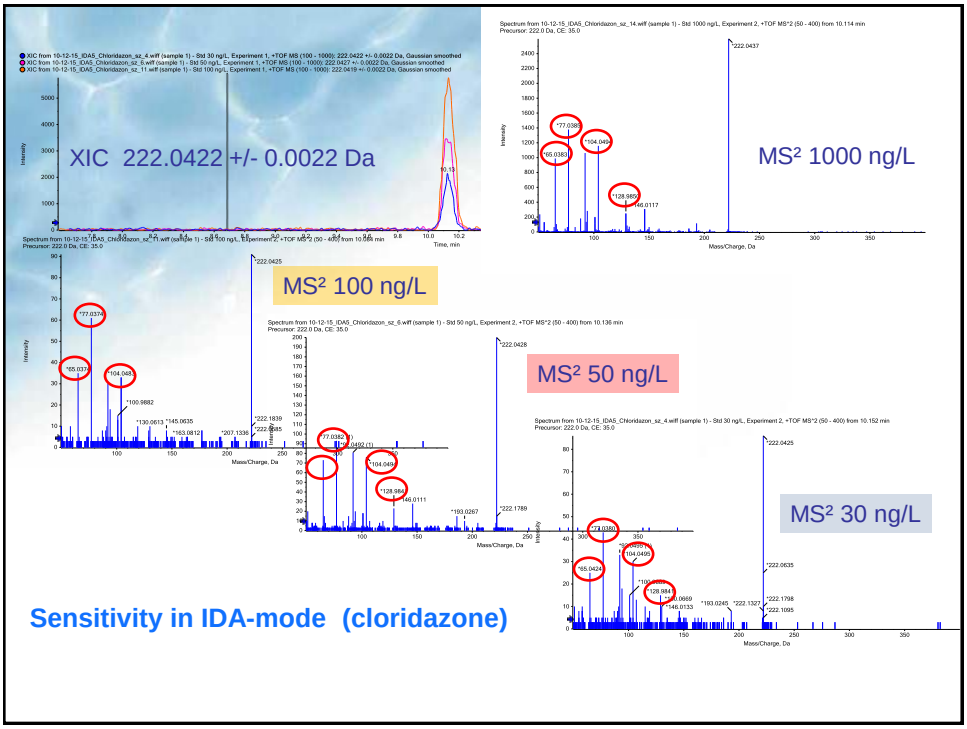
Zweckverband Landeswasserversorgung

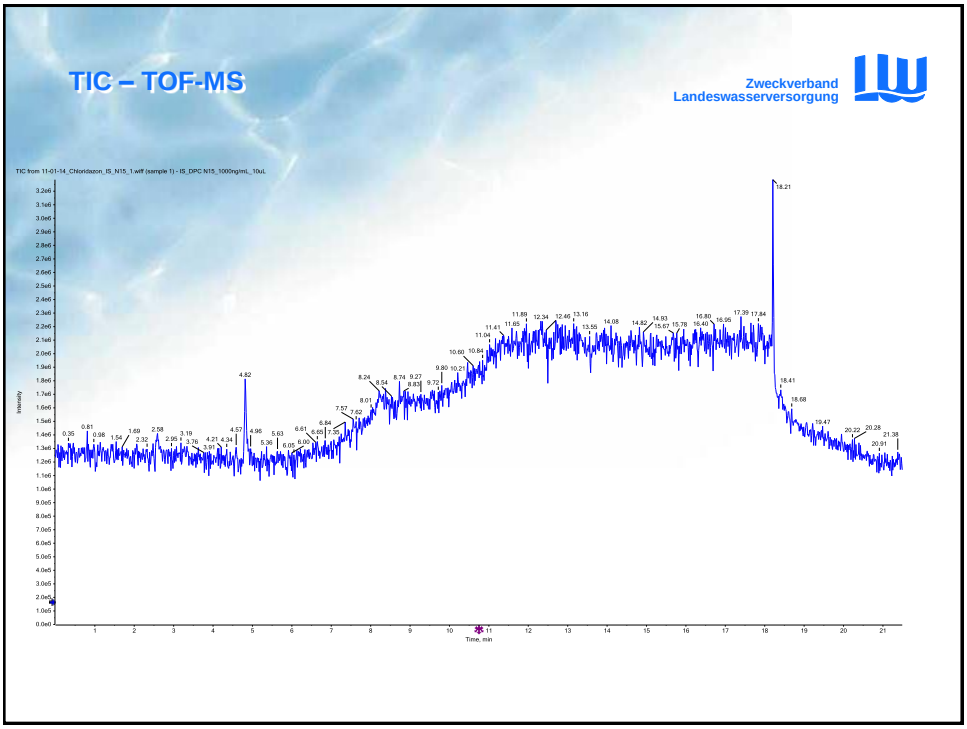


LOD and LOQ for some pharmaceuticals TOF -MS (DIN 32645)

Zweckverband Landeswasserversorgung

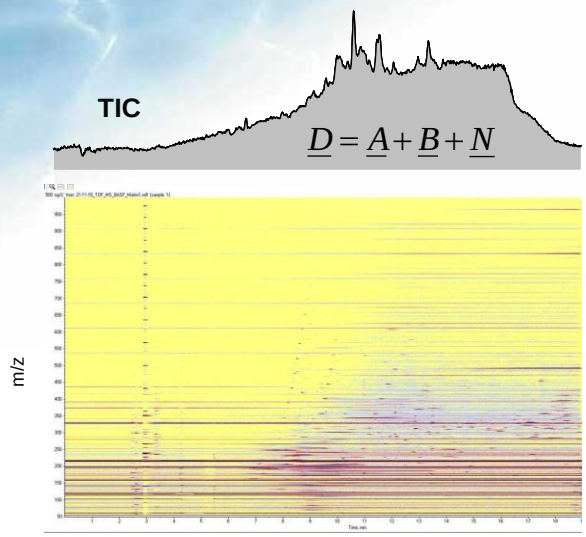



XIC 222.0422 +/- 0.0022 Da
MS² 1000 ng/L
MS² 100 ng/L
MS² 50 ng/L
MS² 30 ng/L
Sensitivity in IDA-mode (cloridazone)


TIC – TOF-MS
Zweckverband
Landeswasserversorgung

Datenauswertung

Zweckverband Landeswasserversorgung



Datenauswertung

Zweckverband Landeswasserversorgung

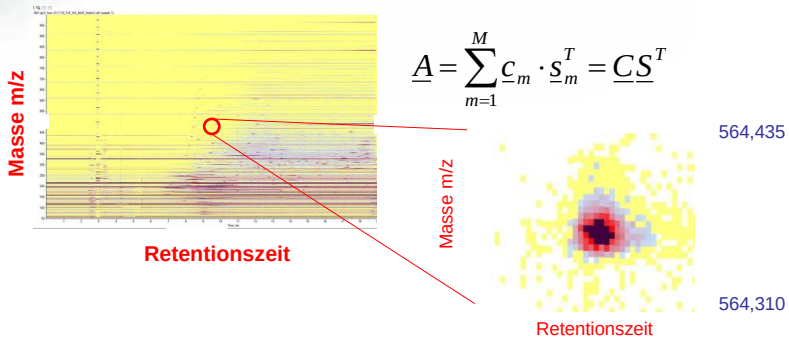
$$\underline{D} = \underline{A} + \underline{B} + \underline{N}$$

$$\begin{pmatrix} d_{1,1} & \bullet & d_{1,j} \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ d_{i,1} & \bullet & d_{i,j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \bullet & a_{1,j} \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ a_{i,1} & \bullet & a_{i,j} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{1,1} & \bullet & b_{1,j} \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ b_{i,1} & \bullet & b_{i,j} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} n_{1,1} & \bullet & n_{1,j} \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ n_{i,1} & \bullet & n_{i,j} \end{pmatrix}$$

D: Daten
A: Analysensignal
B: Blank
N: Noise

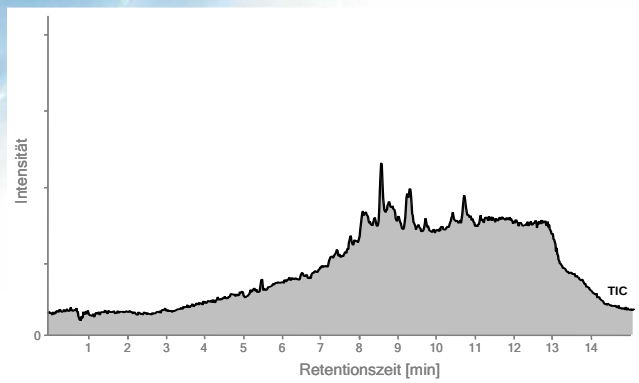
C: Concentration
S: Spektrum

$$\underline{A} = \sum_{m=1}^{M} \underline{c}_m \cdot \underline{s}_m^T = \underline{C}\,\underline{S}^T$$



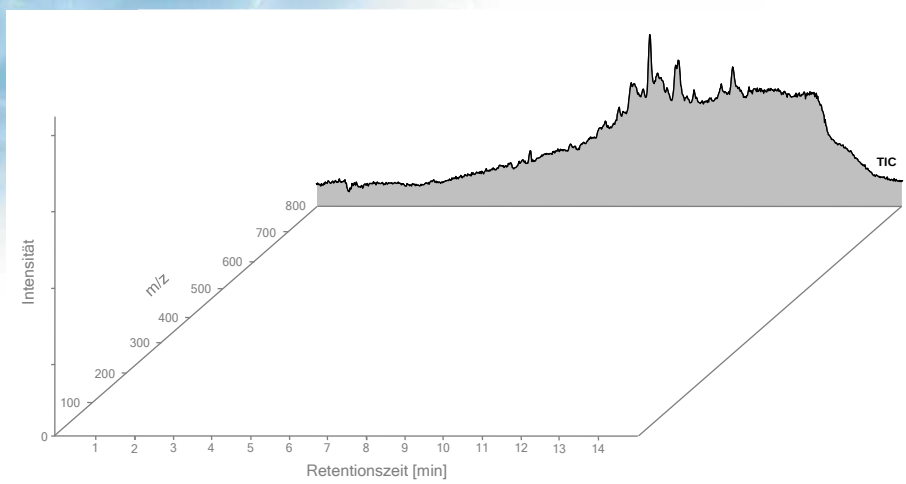
Totalionenstromchromatogramm (TIC)

Zweckverband
Landeswasserversorgung



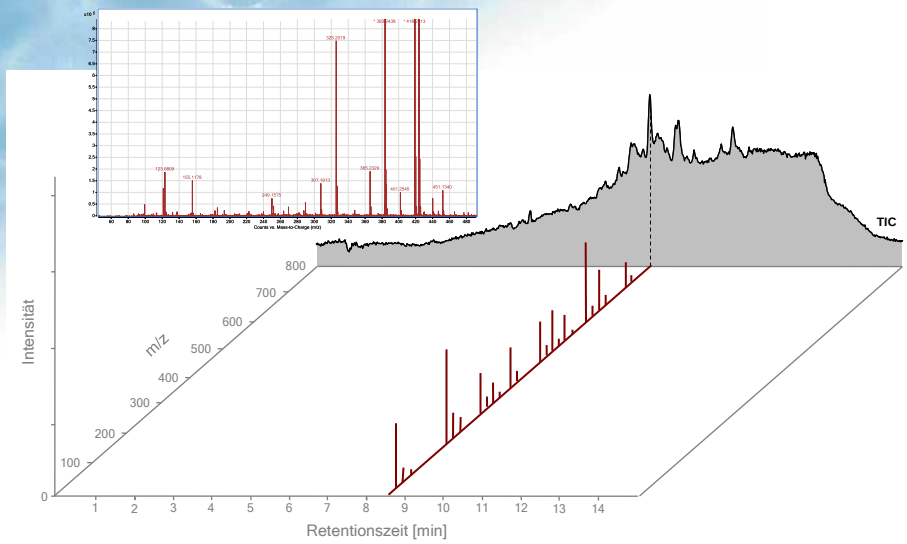
Totalionenstromchromatogramm (TIC)

Zweckverband
Landeswasserversorgung



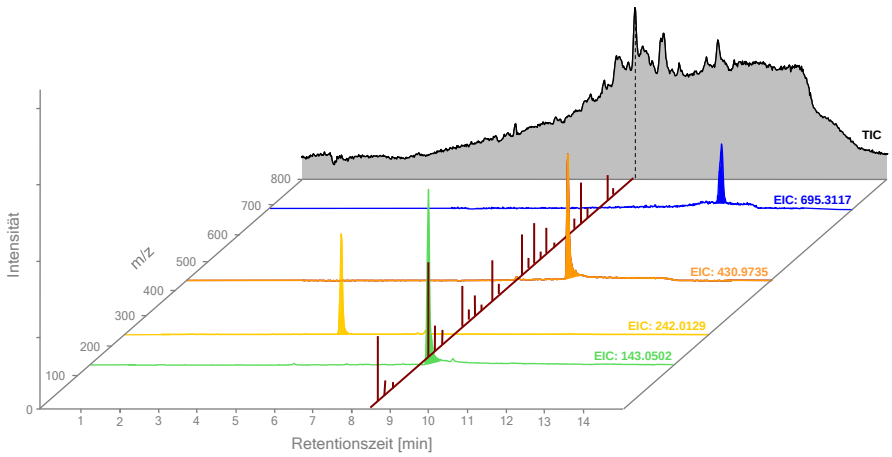
Massenspektrum

Zweckverband Landeswasserversorgung



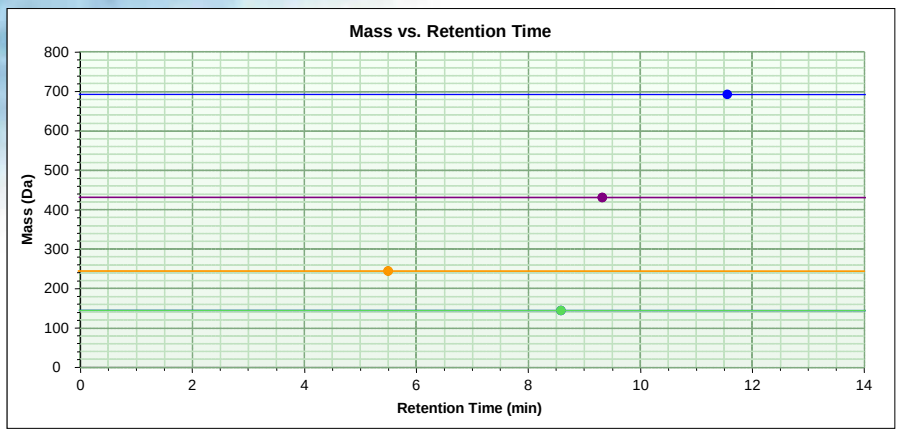
Extrahiertes Ionenstromchromatogramm (EIC)

Zweckverband Landeswasserversorgung



Darstellung der Komponenten in einem Masse-Retentionszeit-Diagramm („Punktewolke“)

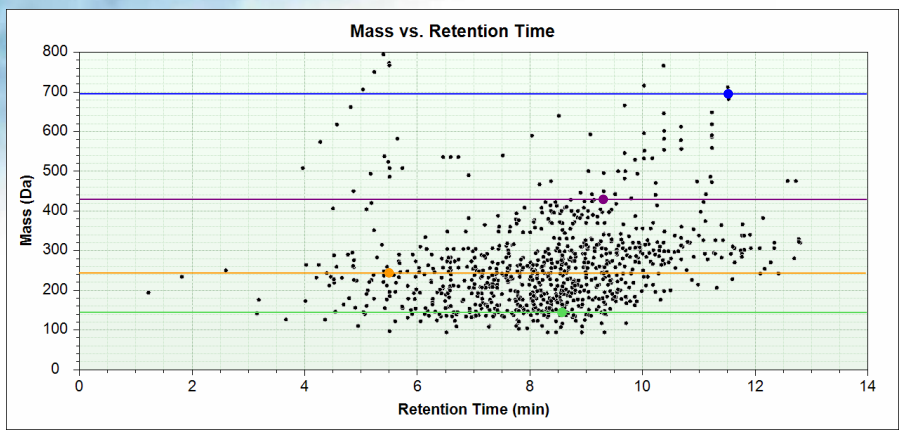
Zweckverband Landeswasserversorgung



Darstellung der Komponenten in einem Masse-Retentionszeit-Diagramm („Punktewolke“)

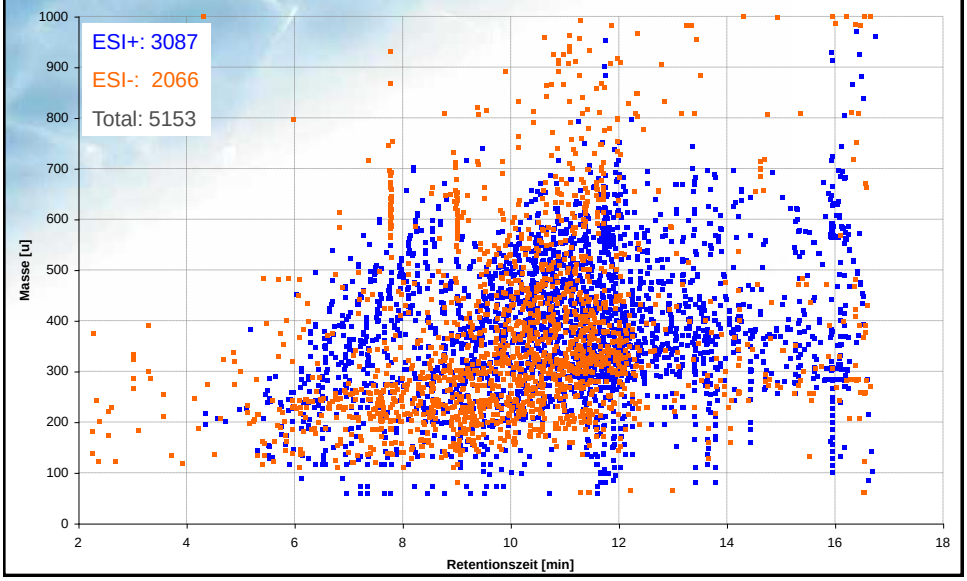
Zweckverband Landeswasserversorgung

Softwareunterstütze Berechnung der Komponenten mittels Molecular Feature Extractor (MFE)



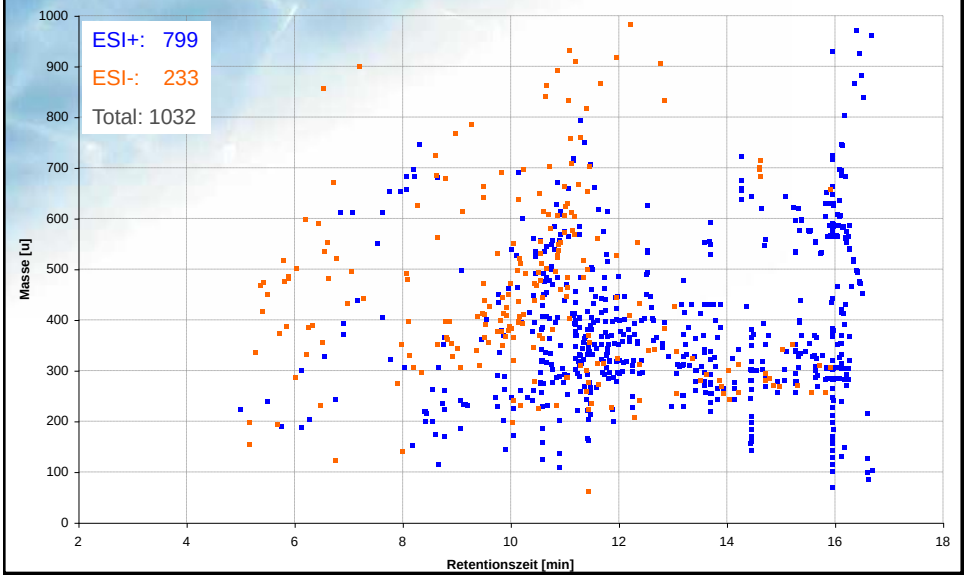
Industriell beeinflusstes Grundwasser

Zweckverband Landeswasserversorgung



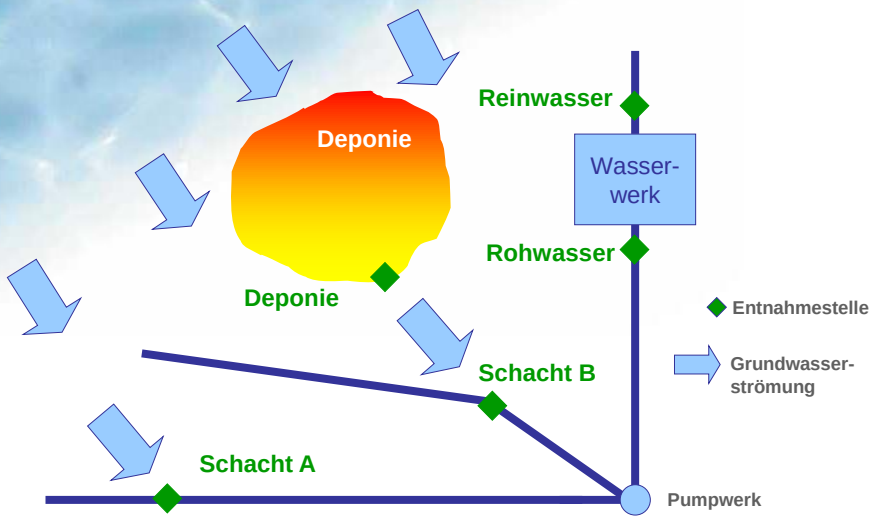
Unbelastetes Grundwasser

Zweckverband Landeswasserversorgung



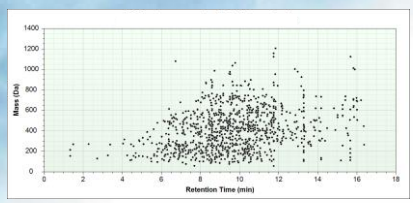
Übersichtsplan

Zweckverband Landeswasserversorgung

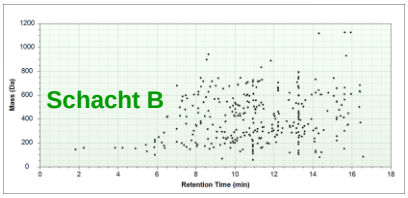


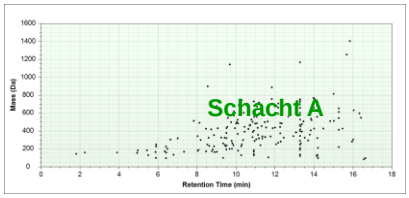
Datenauswertung

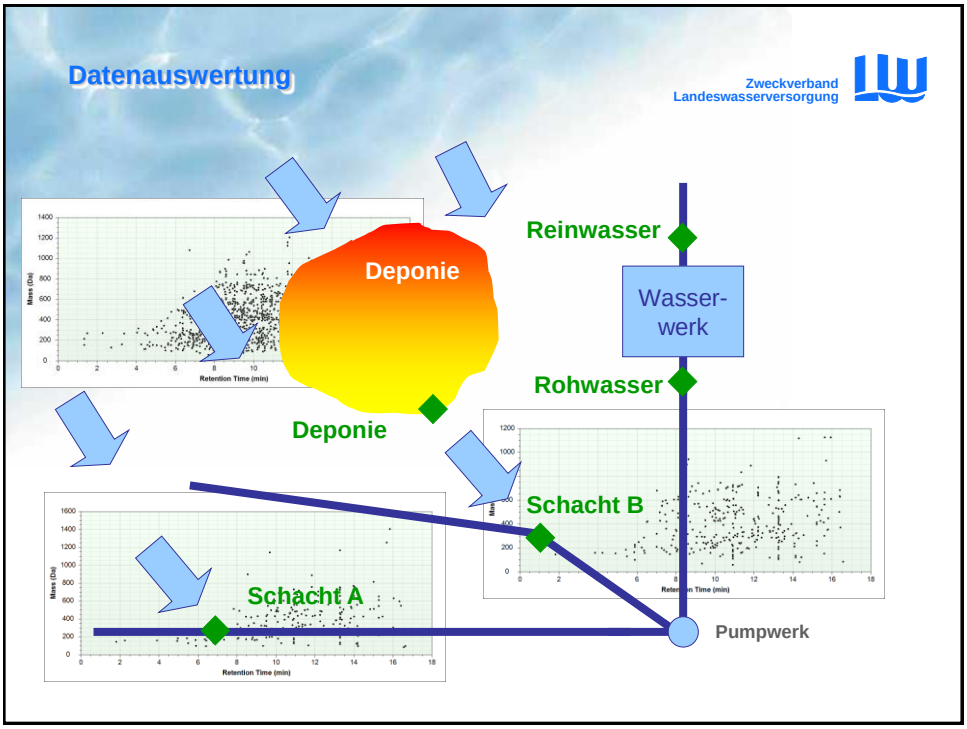
Zweckverband Landeswasserversorgung

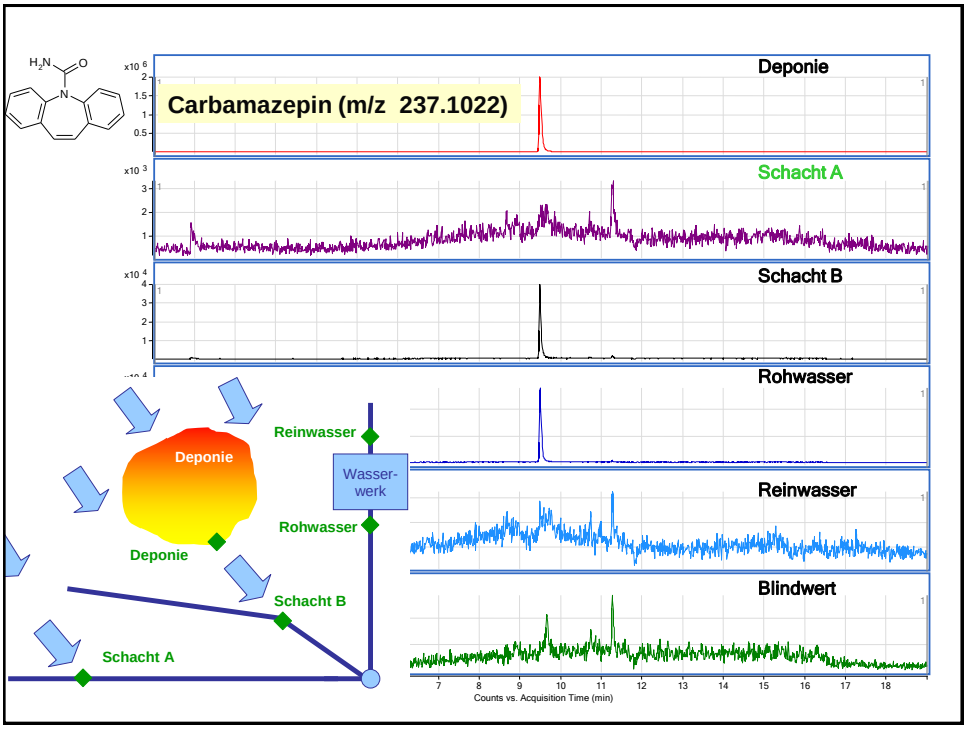


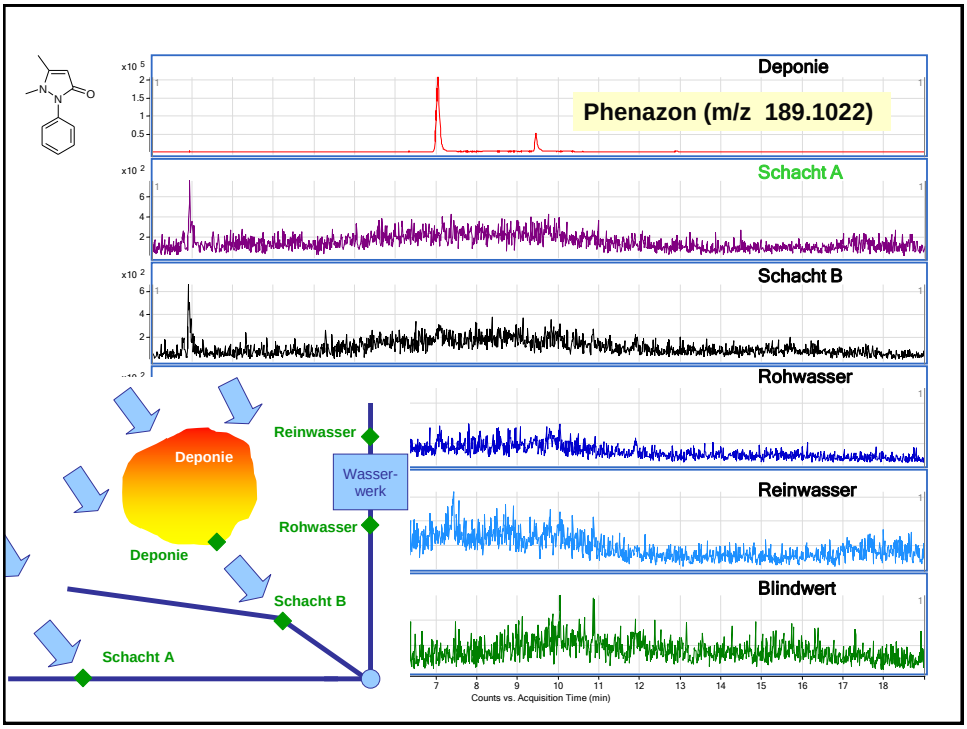
Deponie

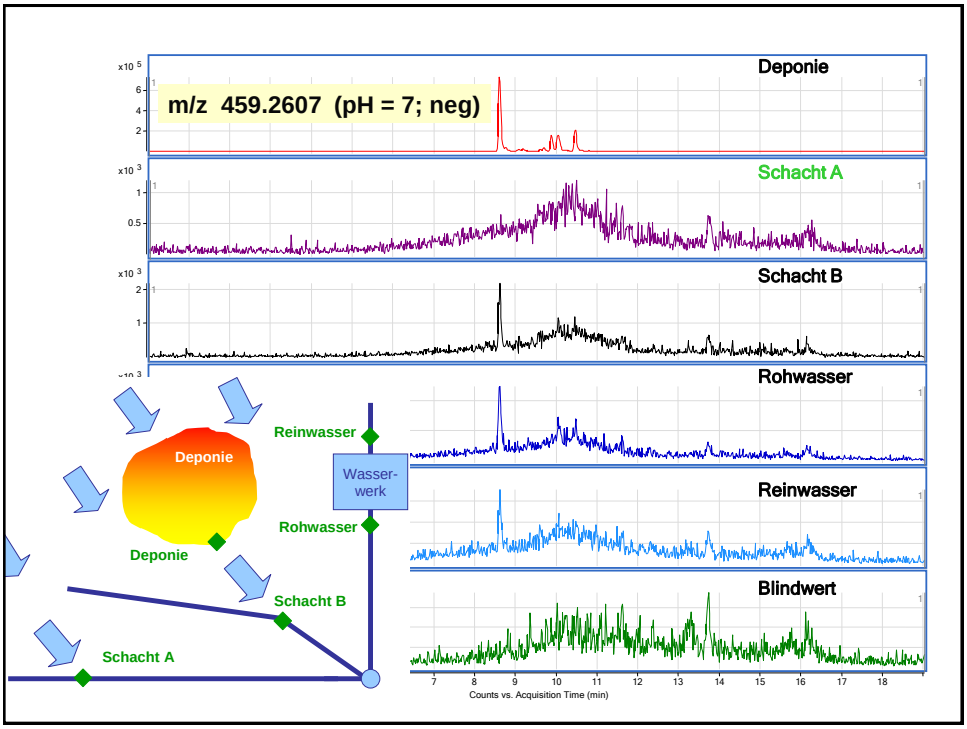




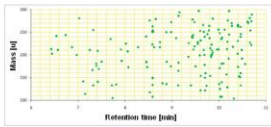

Datenauswertung
Zweckverband
Landeswasserversorgung
Deponie
Reinwasser
Wasser-
werk
Rohwasser
Deponie
Schacht B
Schacht A
Pumpwerk
Retention Time (min)
Mass (Da)


Carbamazepin (m/z 237.1022)
Deponie
Schacht A
Schacht B
Rohwasser
Reinwasser
Blindwert
Reinwasser
Wasser-
werk
Rohwasser
Deponie
Deponie
Schacht B
Schacht A
Counts vs. Acquisition Time (min)

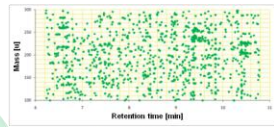

Phenazon (m/z 189.1022)
Deponie
Schacht A
Schacht B
Rohwasser
Reinwasser
Blindwert
Reinwasser
Deponie
Wasser-
werk
Rohwasser
Deponie
Schacht B
Schacht A
Counts vs. Acquisition Time (min)


m/z 459.2607 (pH = 7; neg)
Deponie
Schacht A
Schacht B
Rohwasser
Reinwasser
Blindwert
Reinwasser
Deponie
Wasser-
werk
Rohwasser
Deponie
Schacht B
Schacht A
Counts vs. Acquisition Time (min)

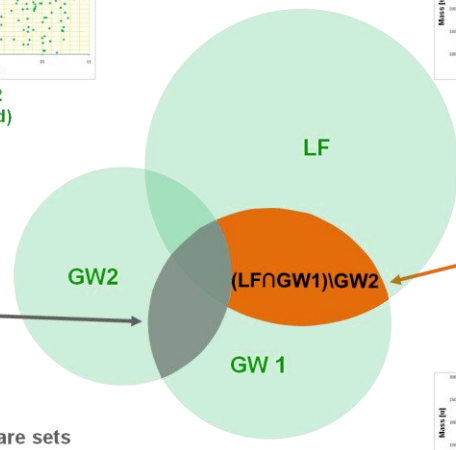
Intersection- org. substances relevant for the waterworks



GW well 2
(unaffected)

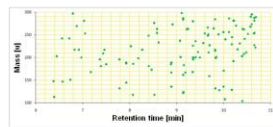


Landfill (LF)



Common compounds of GW1 and GW2

Common compounds of the LF and GW1 but not in GW2

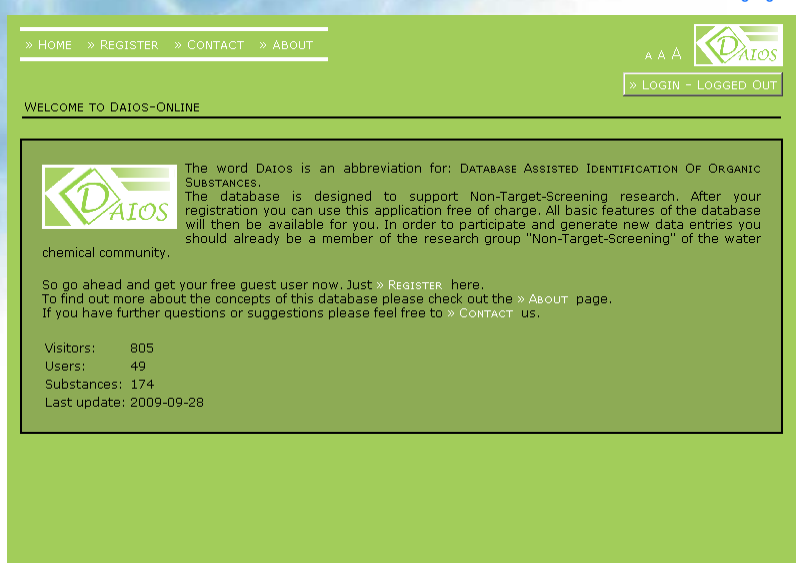


GW well 1

LF, GW1 and GW2 are sets
$M = \{ (m,t)_1, \ldots, (m,t)_n \}$ of the elements (compounds) mass m and retention time t.

DAIOS

Zweckverband Landeswasserversorgung



Tab „MS/MS“

Zweckverband Landeswasserversorgung

» HOME » SEARCH » INDEX » NEW SUBSTANCE » ADMIN

A A A

» LOGOUT » EDIT USER

PHENAZONE

MAIN | SECONDARY DATA | MISC | MS/MS | CHROMATOGRAPHY | TRANSFORMATION TREE

Precursor Mass 0.0 add Precursor delete precursor

- H+
- -H+
- NH4++
- Cl
- Na+
- Br
- K+
- HCOO
- Other

Fragment Mass 0.0 add fragment delete fragment

189.1022 [M+H]+ 147.091 104.05 77.04 58.066 56.051

Tab „Transformation Tree“

Zweckverband Landeswasserversorgung

» HOME » SEARCH » INDEX » NEW SUBSTANCE » ADMIN

A A A

» LOGOUT » EDIT USER

PHENAZONE

MAIN | SECONDARY DATA | MISC | MS/MS | CHROMATOGRAPHY | TRANSFORMATION TREE

Warning: changes take effect immediately, a save is performed automatically

Precursor to Phenazone ADD NEW

(4-(1-Hydroxy-1-meth
1,2-Dihydro-4-amino-
1-Acetyl-1-methyl-2-d
1-Acetyl-1-methyl-2-p
1H,1H,2H,2H-Perfluo
2,3-Dichloroaniline
2,4,5-T
2,4,5-TB

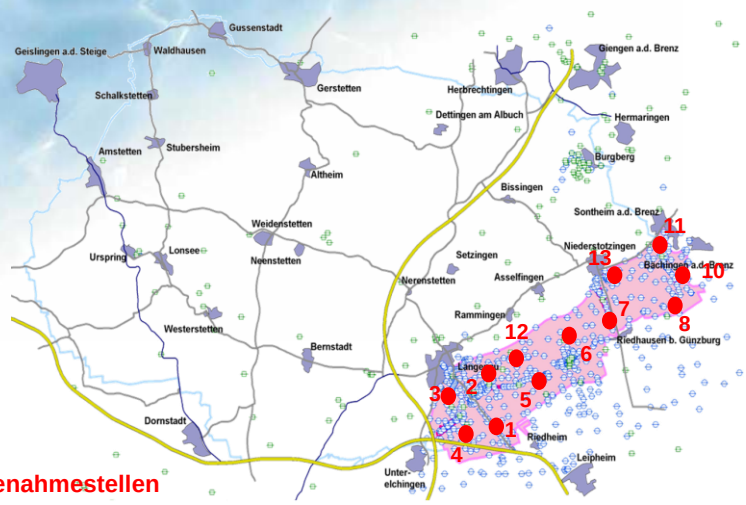
Phenazone 188.094963 C11H12N2O

ADD NEW **Decompositions** of Phenazone

Dimethylpyrazolone (DP) 112.063663 C5H8N2O remove	1-Acetyl-1-methyl-2-phenylhydrazide (AMPH) 164.094963 C9H12N2O remove	4-Hydroxyantipyrine 204.089878 C11H12N2O2 remove	3-Hydroxymethylantipyrine 204.089878 C11H12N2O2 remove

Hauptkomponentenanalyse

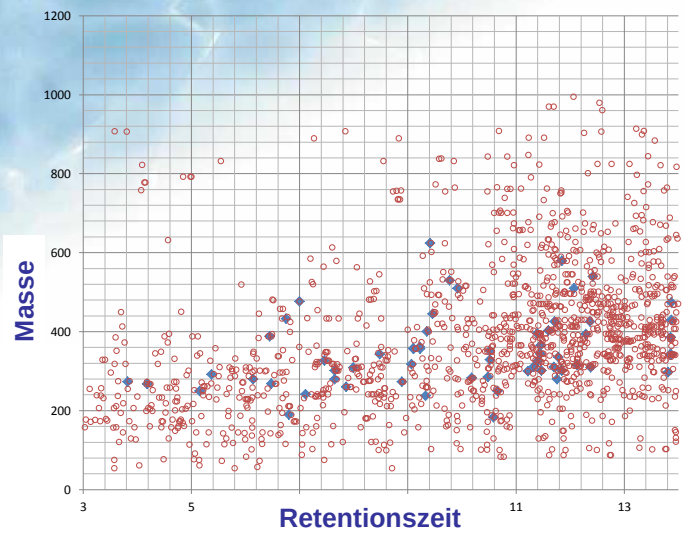
Zweckverband
Landeswasserversorgung



Probenahmestellen

Masse – RT scatter plot (Punktwolke)

Zweckverband
Landeswasserversorgung



Masse@RT
1
2
3
4
.
.
.
.
n

Hauptkomponentenanalyse (HKA)

Zweckverband Landeswasserversorgung

Merkmale (Substanzen)
Masse@Retentionszeit

Probe	1	2	3	4	5	6	7	.	.	n
1	12	258	65	96	35	789	20	50	10	<5
2	15	893	25	47	62	<2	89	152	263	21
3	43	29	84	536	29	61	43	88	16	6,2
4	76	84	189	39	49	83	256	49	324	52
5	48	69	265	24	110	45	12	16	<5	45
6	321	92	21	65	<2	36	9,3	37	91	5,2
7	59	48	32	75	69	91	41	66	38	321
8	54	37	47	145	235	58	87	26	29	66
.										
.										
m	193	36	72	89	36	39	251	91	48	<5

z.B. n = 400

z.B. m = 13

HKA

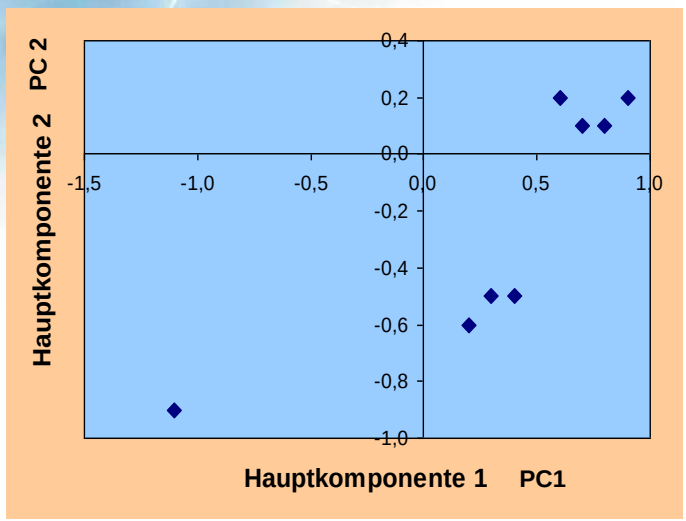
Hauptkomponenten
PC1 – PC2 – PC3

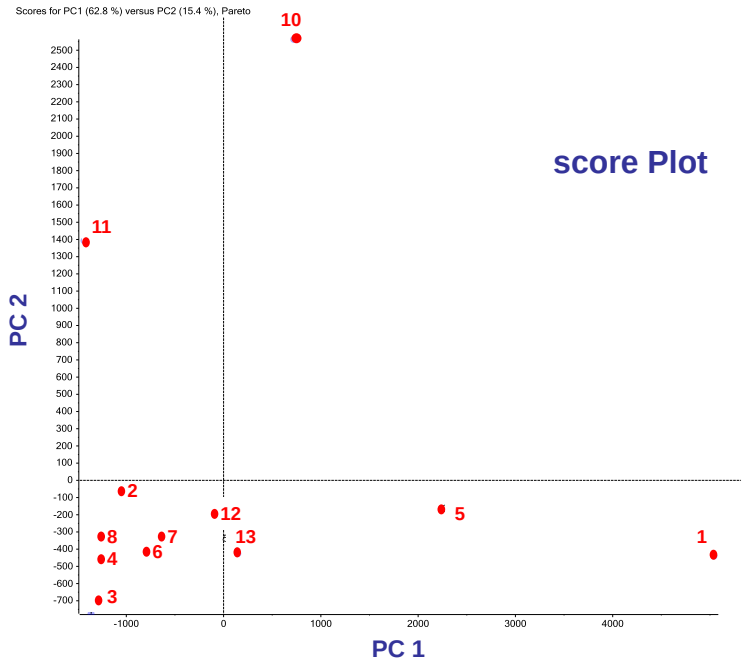
Probe	1	2	3
1	0,2	-0,6	1,2
2	0,6	0,2	0,5
3	-1,1	-0,9	2,5
4	0,7	0,1	0,3
5	0,9	0,2	1,5
6	0,3	-0,5	0,9
7	0,8	0,1	-1,1
8	0,4	-0,5	0,4
.			
.			
m	0,3	0,4	0,1

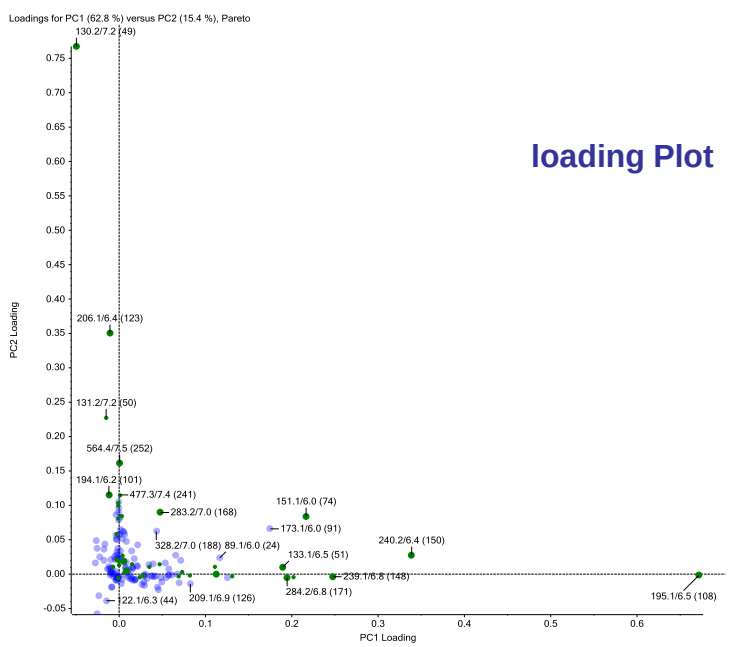
Datensatz Punktwolke

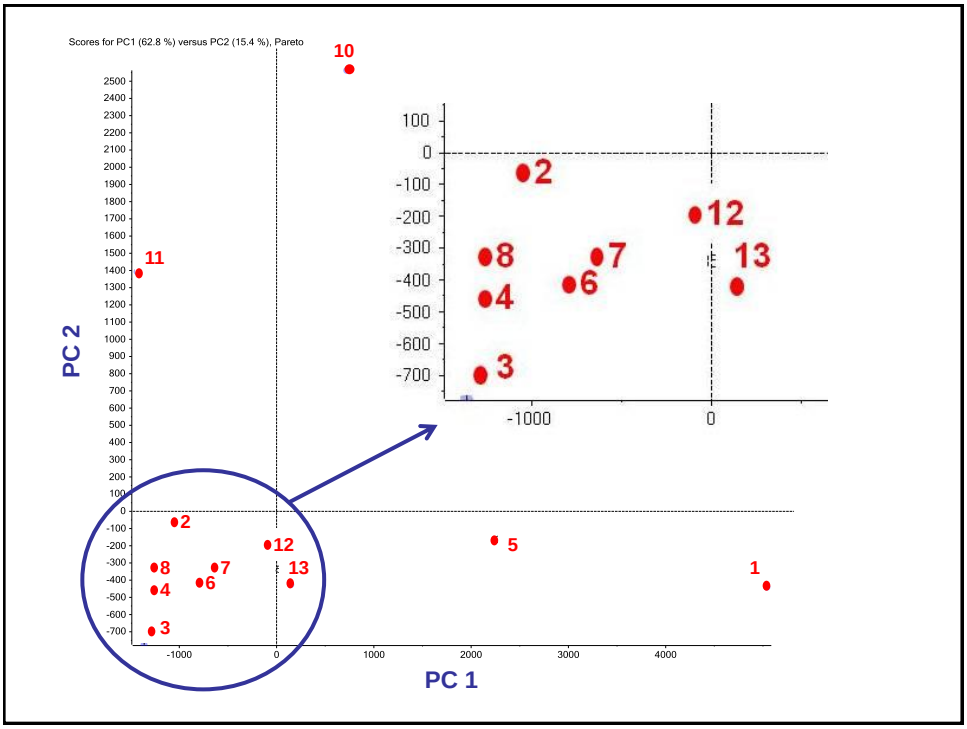
Hauptkomponentenanalyse (HKA)

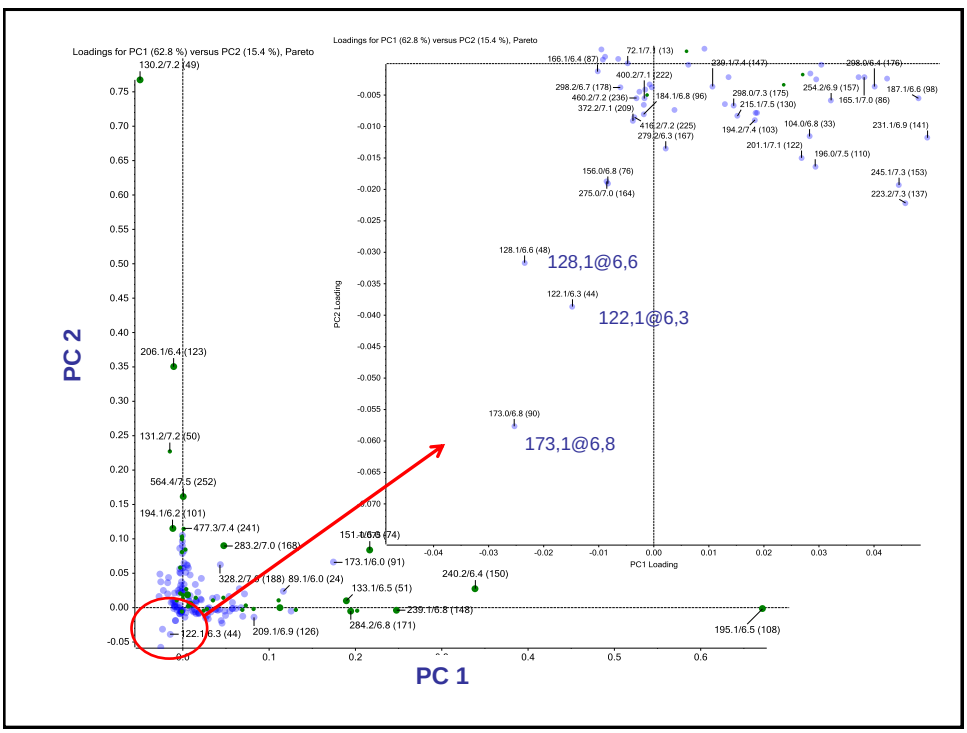
Zweckverband Landeswasserversorgung

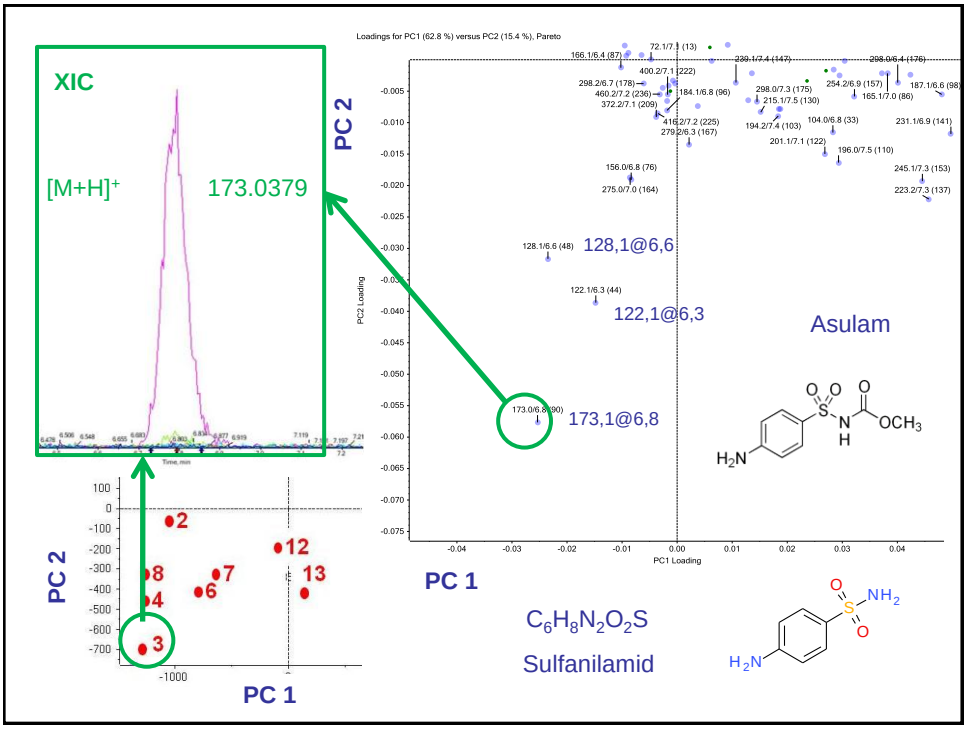



Scores for PC1 (62.8 %) versus PC2 (15.4 %), Pareto
score Plot
PC 2
PC 1
10
11
2
12
5
8
7
13
1
4
6
3


Loadings for PC1 (62.8 %) versus PC2 (15.4 %), Pareto
loading Plot
PC2 Loading
PC1 Loading
130.2/7.2 (49)
206.1/6.4 (123)
131.2/7.2 (50)
564.4/7.5 (252)
194.1/6.2 (101)
477.3/7.4 (241)
283.2/7.0 (168)
151.1/6.0 (74)
173.1/6.0 (91)
328.2/7.0 (188)
89.1/6.0 (24)
240.2/6.4 (150)
133.1/6.5 (51)
239.1/6.8 (148)
284.2/6.8 (171)
122.1/6.3 (44)
209.1/6.9 (126)
195.1/6.5 (108)


Scores for PC1 (62.8 %) versus PC2 (15.4 %), Pareto
PC 2
PC 1
10
11
2
12
5
8
7
13
1
4
6
3


Loadings for PC1 (62.8 %) versus PC2 (15.4 %), Pareto
PC 2
PC 1
PC2 Loading
PC1 Loading
128,1@6,6
122,1@6,3
173,1@6,8



Gliederung

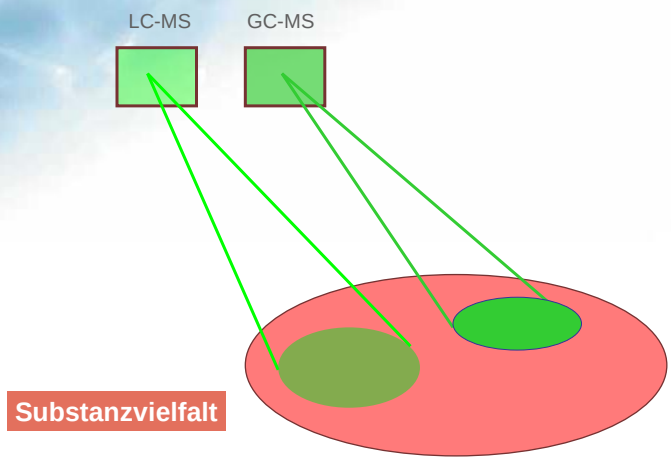
Zweckverband Landeswasserversorgung

- Einleitung
- Analytik von organischen Spurenstoffen
- Beispiele organischer Kontaminanten
- Was kommt in Zukunft noch auf uns zu
- **Zusammenfassung und Ausblick**

Strategie

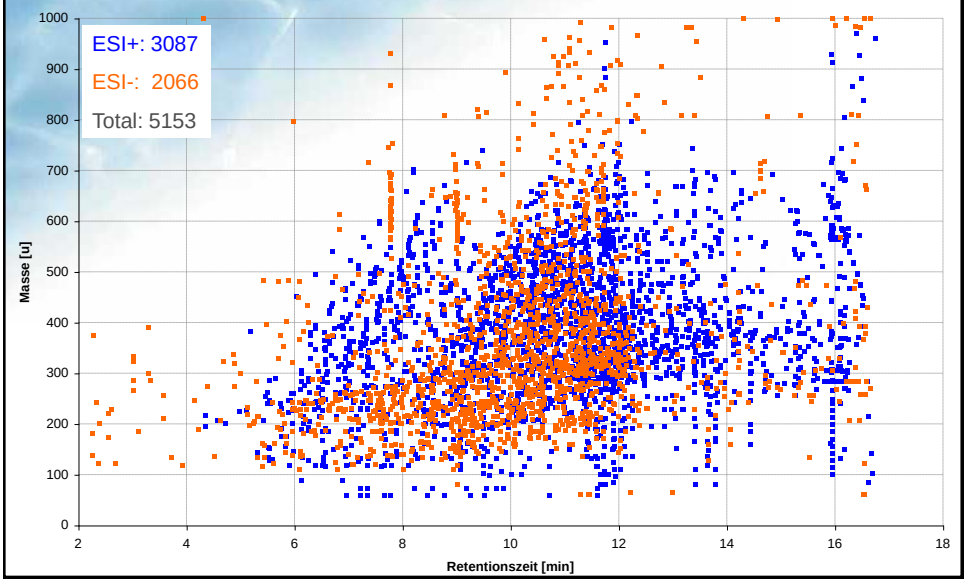
Zweckverband Landeswasserversorgung

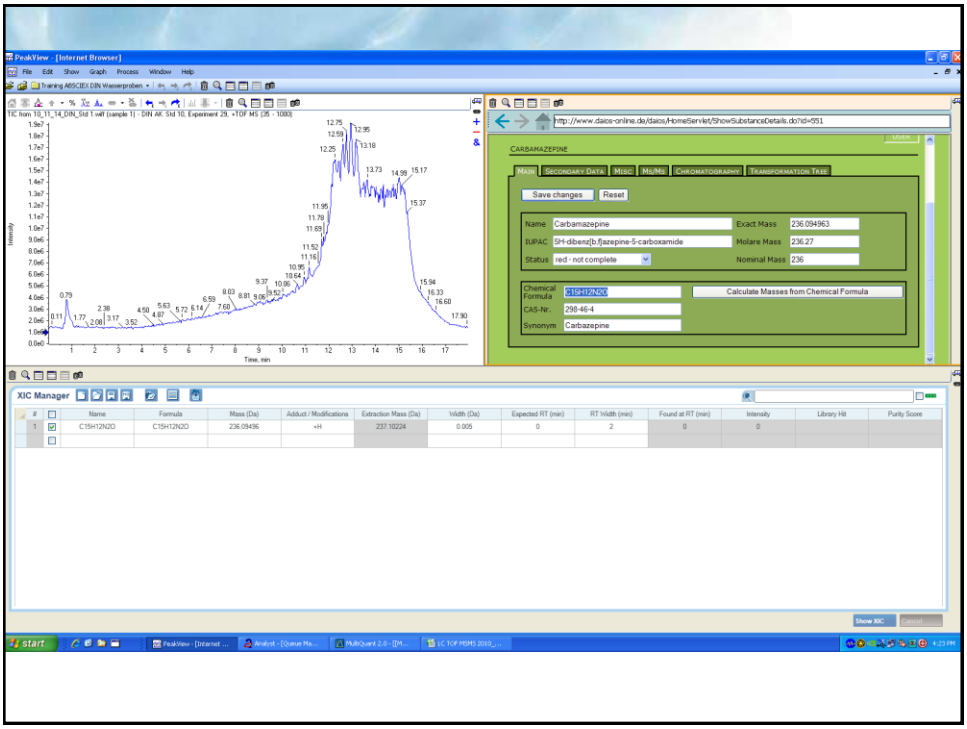
Chemisch-physikalische Einzelstoffanalytik



Industriell beeinflusstes Grundwasser

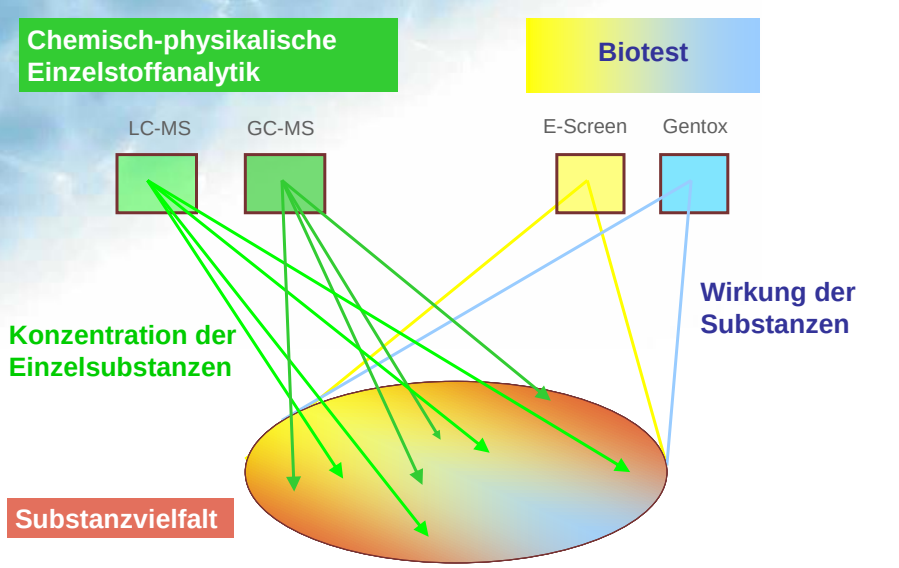
Zweckverband Landeswasserversorgung





Zusammenfassung – Ausblick

Zweckverband Landeswasserversorgung



Zusammenfassung – Ausblick

Zweckverband Landeswasserversorgung

„Spucke nicht in den Brunnen –
Du wirst selbst aus ihm trinken müssen!“

(Russisches Sprichwort)

Betriebs- und Forschungslabor

Zweckverband Landeswasserversorgung

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit

LWF 2011 am 7./8.11.2011 in Langenau