

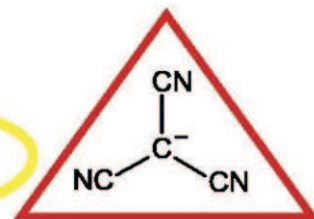
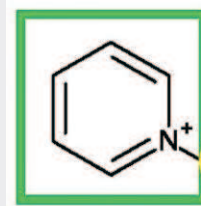


Mitteilungen der Fachgruppe

# Umweltchemie und Ökotoxikologie

Gesellschaft Deutscher Chemiker

- Humanarzneimittelrückstände in Klärschlamm
- Abbaubarkeit von ionischen Flüssigkeiten
- Protokoll der Vorstandssitzung
- Kurz vorgestellt:  
AG "Epidemiologie des Umwelteinflusses bei Alterungsprozessen" IUF Düsseldorf,  
Professur "Biomarker in der Arbeitsmedizin" IBACON GmbH
- Veranstaltungsankündigungen, Tagungsberichte mit einem Interview mit Prof. Crutzen, Kurznachrichten und Personalien





## International scientific conference with additional public engagement day in German language



The conference „Our Climate – Our Future“, Regional perspectives on a global challenge will take place from 6–8 October, 2014 in Berlin. It is organised in eight concurrent sessions, which cover an interdisciplinary spectrum of current international and national research work in regional climate change. Each session is highlighted by an internationally well-known scientist presenting his/her keynote during the conference.

### Conference Sessions:

- Regional climate system modelling
- Sea level changes from global to regional and local scales
- Arctic Change
- The land surface in the climate system
- Atmospheric composition and climate: Interactions from global to regional scales
- Extreme meteorological events and their impacts in a changing climate
- Integrated strategies for climate change mitigation and adaptation
- Rapid climate change in the past – mechanisms, processes and regional patterns

Conference Homepage: <https://reklim-conference-2014.de/>

## Tagungsberichte

### Fortschritte in der Suspected- und Non-Target-Analytik: Softwaretools, Datenbanken und ihre Anwendung“, 28.-29.03.2014, Augsburg

Spurenstoffe zu identifizieren ist schwierig: Zum einen kommen sie nur in sehr geringen Mengen vor, zum anderen gibt es häufig keine Referenzsubstanzen für Vergleichsmessungen. Deshalb bleiben im Wasser viele Spurenstoffe noch unbekannt, darunter auch Transformationsprodukte bekannter Chemikalien. Jedoch liefert die moderne Flüssigchromatographie (LC) gekoppelt mit hochauflösender (HR) und akkurat messender Massenspektrometrie (LC-HRMS-Analytik) immer mehr Daten, um zunächst unbekannte Stoffe im Wasser zu identifizieren. Dazu fand Ende März in Augsburg eine zweitägige Fachtagung statt, die das Thema Suspected- und Non-Target-Analytik im aquatischen Bereich unter dem Aspekt der Verbesserung und Erweiterung der Auswertemodule für die großen Datenmengen aus der LC-HRMS Messung betrachtete. Vorgestellt wurden Geräte-Software, Retentionszeitindex (RTI), sowie die Datenbanken STOFF-IDENT und DAIOS. Dazu wurden jeweils der aktuelle Stand der Entwicklung gezeigt und verschiedene Anwendungsbeispiele demonstriert.



Gruppenfoto der Tagungsteilnehmer

Diese Fachtagung war eine konsequente Weiterführung vorangegangener Workshops im Rahmen des Querschnittsthemas „Non-Target Analytik und Datenbanken“ der BMBF-Fördermaßnahme „Risikomanagement von neuen Schadstoffen und Krankheitserregern im Wasserkreislauf (RISKWa)“ und wurde von den dort geförderten Projekten RISK-IDENT und ASKURIS gemeinsam organisiert. Der Einladung folgten um die 90 Personen, darunter viele Analytiker(innen) aus dem Wasser- und Umweltbereich sowie anderer Disziplinen, (Bio)Informatiker(innen) und nicht zuletzt Industrievertreter(innen) der instrumentellen Analytik. Dieses Jahr fanden sich auch verstärkt Teilnehmer(innen) aus dem behördlichen Umfeld ein.

# Informationen

Zunächst begrüßte Dr. Werner Reifenhäuser (Leiter der Abteilung 7-Zentrale Analytik, Stoffbewertung am LfU) die Teilnehmer herzlich und wünschte der Veranstaltung einen nachhaltigen und diskussionsreichen Verlauf. Eine interessante und kritische Einführung in das Thema präsentierte Prof. Thorsten Reemtsma (UFZ) basierend auf der Frage 'Non-Target-Screening - Analytik ohne Ziel?' deren Beantwortung schon zu ersten Diskussionen führte. Im Anschluss daran stellten Dr. Manfred Sengl (LfU) und Dr. Uwe Dünnebier (BWB) die Projekte RISK-IDENT (<http://risk-ident.hswt.de>) bzw. ASKURIS (<http://www.askuris.tu-berlin.de>) und die darin enthaltenen Analysestrategien vor. In der zweiten Tageshälfte wurden vertieft Hilfsmittel zum Non- und Suspected-Target Screening behandelt wie der Retentionszeitindex RTI (Dr. Thomas Letzel, TUM), die Nutzung massenspektrometrischer Datenbanken oder des Chromatographischen Hydrophobizitätsindices CHI (Dr. Martin Krauss, UFZ) sowie die Nutzung von Datenbanken wie DAIOS (Dr. Wolfgang Schulz, LW) und STOFF-IDENT (Dr. Marion Letzel, LfU). Daran anschließend fand ein 1,5-stündiger Workshop zum Einsatz von Datenbanken und integrierter Softwareplattformen statt. Der Schwerpunkt lag auf der Vorstellung der Datenbank STOFF-IDENT, die sich auf gewässerrelevante Spurenstoffe fokussiert und automatisch Substanzvorschläge aus gemessener exakter Masse und Retentionszeit generiert.



Beitrag von Dr. Wolfgang Schulz auf der Fachtagung



Präsentation von Frau Dr. Marion Letzel

Der zweite Tag war geprägt durch Proben eines Kläranlagenablaufs sowie des dazugehörigen ozonierten Ablaufs, die im Vorfeld an ausgewählte Teilnehmer versandt, mit den ihnen zur Verfügung stehenden Screening-Techniken untersucht und mit entsprechender Software ausgewertet wurden. Anhand dieser Proben diskutierten Anwender und Hersteller von Analysegeräten welche Möglichkeiten es gibt, unbekannte Substanzen aufzuspüren, nachzuweisen und zu bestätigen. Angesprochen wurden auch unterschiedliche Darstellungsmöglichkeiten der jeweils genutzten Software.

Es präsentierten der Reihe nach Dr. Bettina Seiwert (UfZ) zusammen mit Dr. Matthias Hofmann (Waters GmbH), Prof. Christian Zwiener (Uni Tübingen) zusammen mit Dr. Friedrich Mandel (Agilent Technologies Deutschland GmbH), Dr. Wolfgang Schulz (LW) zusammen mit Dr. Detlev Schleuder (AB Sciex Germany GmbH) und Florian Bode/Patricia van Baar (beide BWB) zusammen mit Dr. Olaf Scheibner (Thermo Fisher Scientific GmbH). Die begleitenden Diskussionsrunden zeigten auf, dass die meist ähnlichen und teilweise doch unterschiedlichen Strategien in eine gemeinsame Richtung gehen.

So endete auch die abschließende Plenumsdiskussion in der Feststellung, dass der in den letzten Jahren intensivierte Austausch zwischen analytischen Anwendern, Stoffbewertern und Geräteherstellern essentiell ist für das Ziel, die Techniken, Auswertemodule und Ergebnisverwertung der LC-HRMS Non-Target Analytik weiterhin zu verbessern. Dieser Austausch soll nun unter dem Dach der 'Wasserchemischen Gesellschaft' weitergeführt werden.

Dr. Marion Letzel, Bayerisches Landesamt für Umwelt, Wielenbach ([marion.letzel@lfu.bayern.de](mailto:marion.letzel@lfu.bayern.de))