

## **Identifizierung bislang unbekannter Spurenstoffe im Wasser im BMBF-Verbundprojekt RISK-IDENT: Aufruf zur Teilnahme an einem chromatographischen Ringversuch zur Validierung des Retentionszeitindex**

Die 2011 gestartete nationale Fördermaßnahme des BMBF ‚Risikomanagement von neuen Schadstoffen und Krankheitserregern im Wasserkreislauf (RiSKWa)‘ unterstützt 12 Verbundprojekte im Themenfeld ‚Wasser und Gesundheit‘.

Ziel dieser Fördermaßnahme ist es, innovative und dynamische Systeme des Risikomanagements für einen vorsorgenden Gesundheits- und Umweltschutz zu erarbeiten und in Form von Einzelbeispielen umzusetzen. Eines dieser Beispiele ist das Projekt ‚RISK-IDENT‘ zur Bewertung bislang nicht identifizierter anthropogener Spurenstoffe sowie Handlungsstrategien zum Risikomanagement im aquatischen System. Das Projekt wird koordiniert vom Bayerischen Landesamt für Umwelt unter Beteiligung zweier Universitäten bzw. Hochschulen, einem Zweckverband und einem KMU (siehe auch <http://risk-ident.hswt.de>). Im Mittelpunkt des Projekts RISK-IDENT stehen neue analytische Technologien und Strategien zur Erkennung und Bestimmung von organischen Schadstoffen und möglicher Abbauprodukte im Medium Wasser. Daneben werden ökotoxikologische Kenndaten erhoben sowie Abbau- und Transportprozesse betrachtet. Die Ergebnisse werden für Bildungs- und Kommunikationsmaßnahmen zum Zwecke einer effektiven Risikomanagements aufbereitet.

Analytische Schlüsselstrategie ist hierbei eine neu angelegte Technologie auf Basis des sogenannten ‚Suspected-Target Screening‘, bei dem die Analysen zunächst mittels klassischem ‚Non-Target-Screening‘ Ansätzen, d.h. LC-MS(/MS) vermessen werden, anschließend die Daten aber nicht gegen eine chemische (Spektren-)Datenbank, sondern gegen eine derzeit im Aufbau befindliche Stoffdatenbank (STOFF-IDENT) mit potentiell im Wasser vorkommenden Substanzen abgeglichen werden.

Im typischen ‚Non-Target-Screening‘ kommt normalerweise die Umkehrphasenchromatographie mit Kopplung zur Massenspektrometrie zum Einsatz. Dabei wird derzeit zur Identifizierung unbekannter organischer Moleküle überwiegend die massenspektrometrische Information genutzt (akkurate Masse und Strukturinformation durch Tandem-MS), während die Retentionszeit der Moleküle (und damit der logP bzw. logD) meistens jedoch nicht berücksichtigt wird. Da es sich aber um komplementäre Information handelt, vernachlässigt man dadurch sehr viel analytisches Potential.

Die Partner des RISK-IDENT-Konsortiums haben nun eine allgemein nutzbare Strategie entwickelt um einer breiten Öffentlichkeit den sogenannten Retentionszeitindex (auch RTI) zugänglich zu machen. Diese Strategie beinhaltet zuerst die Vermessung eines Referenzmixes mit Molekülen bekannter logP-Werte (später auch logD-Werte) und der softwaregestützten Bestimmung der daraus resultierenden normierten RTI-Werte. Darüber werden anschließend die Retentionszeiten unbekannter Substanzen bestimmt und somit der logP (später auch der logD) über den RTI direkt berechenbar. Die Nutzung der RTI-Normierung ermöglicht es ebenso die Retentionszeiten von Molekülen zwischen Laboratorien zu übertragen und zu vergleichen.

### **AUFRUF der TU München (an alle LC-MS-Labore) ZUR KOSTENFREIEN TEILNAHME AN EINEM RINGVERSUCH ZUR EVALUIERUNG DES RETENTIONSZEITINDEX**

Zur schnellen Validierung des RTI bitten wir Sie - als LC-MS-Laboratorium (mit Trennungen basierend auf C18-Umkehrphasenmaterial und nicht zwingend im Bereich des Abwassers tätig) - zur Teilnahme an einem großangelegten Ringversuch.

Hierbei werden Sie von uns einen Referenzmix bekommen der verschiedene organische Substanzen enthält, sowie eine Lösung mit ‚unbekannten‘ Substanzen. Beides wäre mit Ihrer im Labor etablierten LC-MS Methode zu vermessen und die Retentionszeiten softwaregestützt zu normieren. Die Software wird ab Mai 2012 unter ‚[openMASP.hswt.de](http://openMASP.hswt.de)‘ verfügbar sein. Diese Werte würden Sie dann der Studie zur Verfügung stellen und wir verwerten diese zu Etablierungs- und Evaluierungszwecken. Zusätzlich können Sie den direkten chromatographischen Vergleich und die Übertragbarkeit mit anderen Laboratorien nutzen sowie als einfaches Vorhersagewerkzeug einsetzen.

Aus den Erfahrungen heraus wollen wir zukünftig Modelle entwickeln, die auch der Bestimmung von logD und der Nutzung von Hydrophilic Interaction Liquid Chromatography (HILIC) gerecht werden.

Bitte fühlen Sie sich auch angesprochen wenn Sie typischerweise kein Wasser untersuchen sondern andere Proben! Der Retentionszeitindex ist ein applikationsübergreifender Wert!

Bei Interesse senden Sie einfach baldmöglichst ein E-Mail an [T.Letzel\[at\]wzw.tum.de](mailto:T.Letzel[at]wzw.tum.de) und Sie bekommen die entsprechenden Informationen, Unterlagen und Referenzsubstanzen.

(Stand 24. Mai 2012)

Derzeit veröffentlicht als Pressemitteilung in:

[http://www.afg.wzw.tum.de/index.php?id=11&tx\\_ttnews%5Btt\\_news%5D=7&cHash=45716d448f6dc17cde798df83406b911](http://www.afg.wzw.tum.de/index.php?id=11&tx_ttnews%5Btt_news%5D=7&cHash=45716d448f6dc17cde798df83406b911)

<http://www.analytik-news.de/Presse/2012/253.html>

<http://www.laborpraxis.vogel.de/forschung-und-entwicklung/grundlagenforschung/articles/362238/?cmp=beleg-mail>

<http://www.analytik.de/content/view/13443/62/>

<https://www.gdch.de/publikationen/newsletter/newsletter-vom-03052012.html>

<http://www.riskwa.de/de/1285.php>

<http://www.chemie.de/news/137743/identifizierung-bislang-unbekannter-spurenstoffe-im-wasser.html>