



Fortschritte in der Identifizierung organischer Spurenstoffe: Zusammenführen der Hilfsmittel und Standardisierung der Suspected- und Non-Target Analytik

Akronym: **FOR-IDENT**

Bewilligung: 03/15-02/17

RISK IDENT

Identifizieren | Bewerten
Handeln | Kommunizieren

Strategien zur Identifizierung,
Bewertung und Minderung von
Spezialrisiken im Wasserkreislauf:
Spezialrisiko RISK-IDENT

Wie alles begann!

Dr. Marion Letzel/Dr. Marion Letzel
Berlin, 11.02.2015

Bewilligung: 11/11-02/15

gefördert vom:



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Bayerisches Landesamt für
Umwelt



HOCHSCHULE
WEIHENSTEPHAN-TRIESDORF
UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES



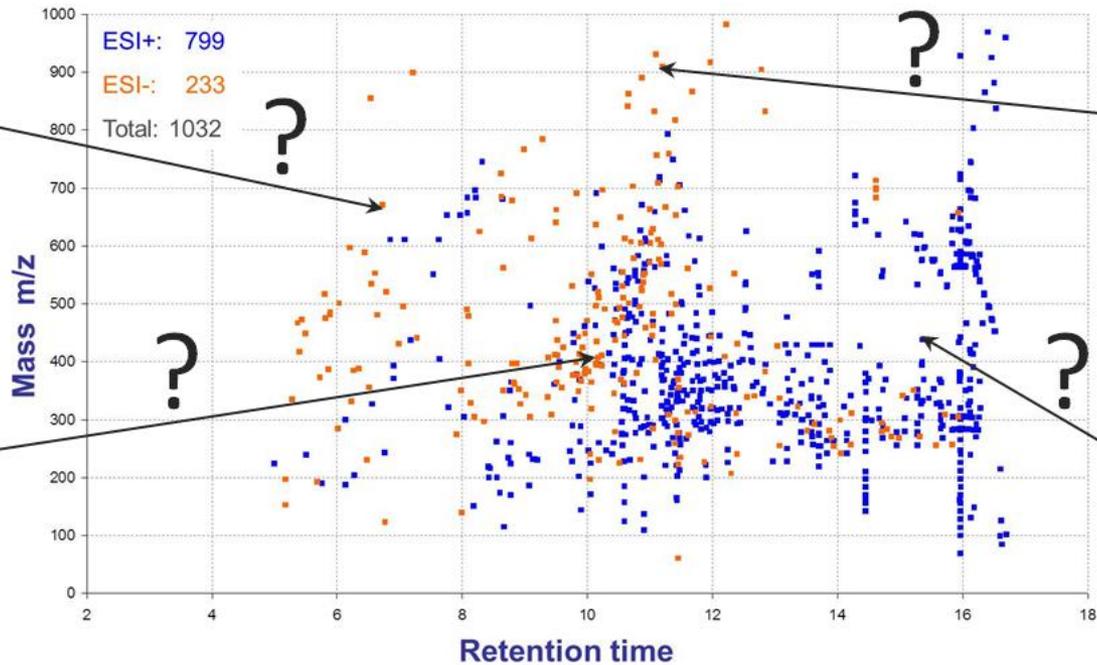
Technische Universität München

Zweckverband
Landeswasserversorgung



CONDIAS
CONDUCTIVE DIAMOND PRODUCTS

Anlass



Identifizieren

- Bislang unbekannte Spurenstoffe
- Abbauprodukte
- in Laborkläranlagen, Säulen, Abwässern, OW, Uferfiltraten mithilfe LC-MS/MS
- Aufbau einer Datenbank STOFF-IDENT

Bewerten

- Untersuchung von Persistenz, Mobilität und Rohwasserrelevanz
- Ökotoxikologische Wirktests
- Monitoring
- Bewertung des Risikos für die aquatische Umwelt

Minimieren

- Elimination von Spurenstoffen mit 4. Reinigungsstufe
- neues oxidatives Verfahren
- Handlungsanweisungen
- Wissenstransfer; => Kommune, Bürger, Wirtschaft

Identifizieren

- Bislang unbekannte Spurenstoffe
- Abbauprodukte
- in Laborkläranlagen, Säulen, Abwässern, OW, Uferfiltraten mithilfe LC-MS/MS
- Aufbau einer Datenbank STOFF-IDENT

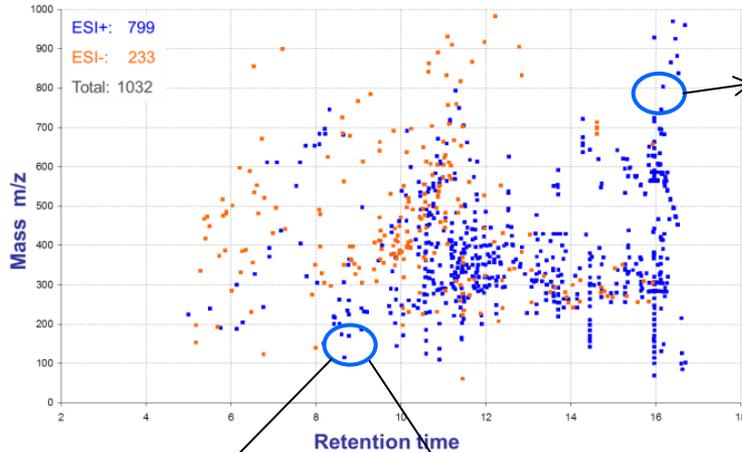
Bewerten

- Untersuchung von Persistenz, Mobilität und Rohwasserrelevanz
- Ökotoxikologische Wirktests
- Monitoring
- Bewertung des Risikos für die aquatische Umwelt

Minimieren

- Elimination von Spurenstoffen mit 4. Reinigungsstufe
- neues oxidatives Verfahren
- Handlungsanweisungen
- Wissenstransfer; => Kommune, Bürger, Wirtschaft

Vorgehensweise Identifizierung



Masse

Ermittlung
Summenformel

Datenbankabfrage, z.B.
Chemspider.com

viele Strukturvorschläge

Retentionszeit

Masse

Datenbankabfrage

STOFF-IDENT

wenige Struktur-
vorschläge

**Retentionszeit
-Index**

logD

Datenbankabfrage

STOFF-IDENT

ein Struktur-
vorschlag
(Priorisierung)

STOFF-IDENT: Datenbank gewässerrelevanter Stoffe

- Frei verfügbar
- Dauerhafte Weiterführung am Bayerischen Landesamt für Umwelt

8000 Stoffe, u.a.

- Industriechemikalien (v.a. REACH-registrierte Stoffe)
- Humane Arzneimittelwirkstoffe und bekannte Metabolite
- Pflanzenschutzmittel und -Metabolite
- Biozide
- Weitere (bisher nachgewiesene) Stoffe
- Transformationsprodukte



Fotos: LfU

Datenbankabfrage bei STOFF-IDENT

Gefunden: 22 Einträge - 13 sichtbar Herunterladen

Filter Bereichsfilter (z.B. 1.45-2.54) Nur Beste

Target identifier	Best match	Monoisotopic mass	Δ mass	logP	Δ logP	Name	CAS	EC Number	Elemental formula	SMILES
436.2343 / 10.80	X	435.2270	0.0006	5.00	2.51	valsartan	137862-53		C24H29N5O3	CCCCC(=O)N(Cc1ccc(cc1)N
252.1230 / 11.59	X	251.1158	0.0006	2.71	-0.11	Dipropyl pyridine-2,5-dicarboxy	136-45-8	205-245-9	C13H17NO4	CCCOC(=O)c1ccc(nc1)C(=O
208.1333 / 4.83	X	207.1259	0.0004	2.22	2.09	Ciclopirox	29342-05-1		C12H17NO2	Cc1cc(C2CCCC2)n(O)c(=C
209.1174 / 7.05	X	208.1099	0.0003	1.82	0.44	[[p-(2-methoxyethyl)phenoxy]r	56718-70-1	260-353-3	C12H16O3	COCCc1ccc(OCC2CO2)cc1

Compounds for SI.xls
RTI Standard
RTI Berechnung für alle Komponenten

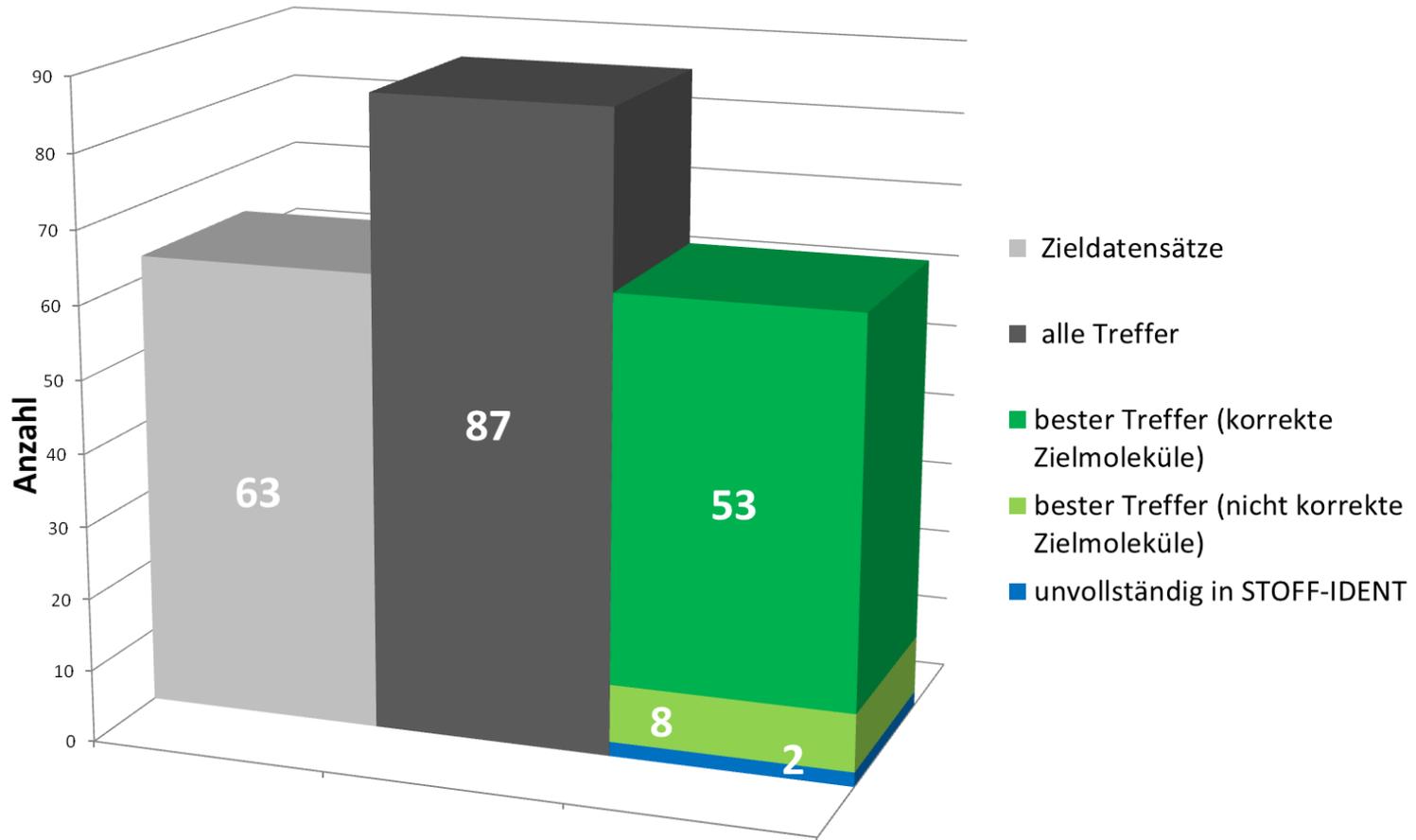
Kalibrationsdaten

Stoffname	RTI	logP	RT Mittel	rt1	rt3	rt2
Metformin	50.0	-1.36	1.2	1.2		
Chloridazon	87.2	1.11	6.4	6.4		
Carbetamide	95.3	1.65	7.8	7.8		
Monuron	99.5	1.93	8.2	8.2		
Metobromuron	104.2	2.24	10.2	10.2		
Chlorbromuron	113.4	2.85	11.7	11.7		

Ziele

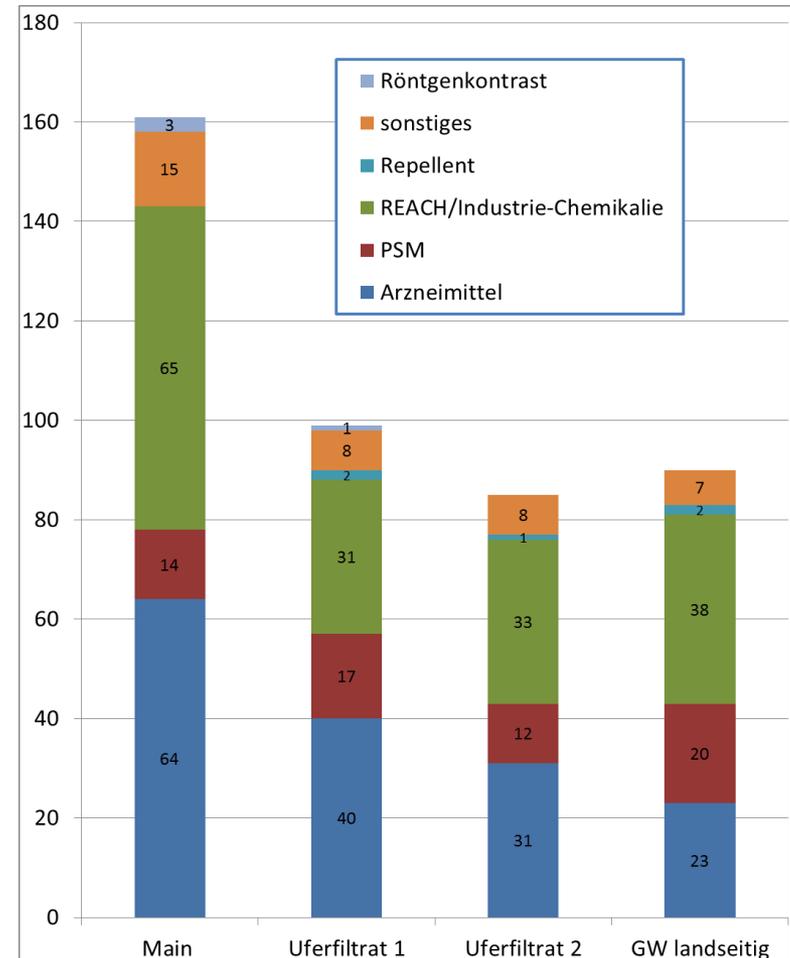
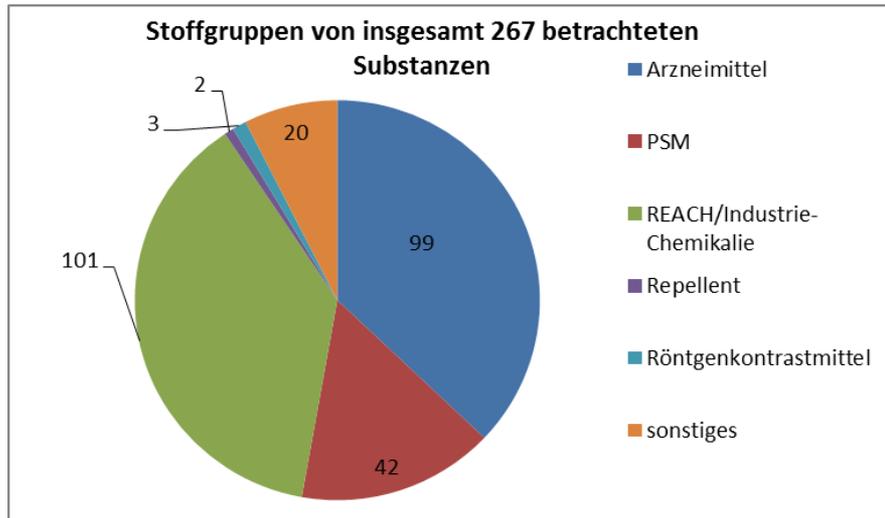
Identifizier	RTI	logP	Exakte Masse	RT Mittel	rt1	rt3	rt2
252.1230 / 11.59	112.9	2.82	252.1230	11.6	11.6		
267.0878 / 7.27	92.3	1.45	267.0878	7.3	7.3		
336.1814 / 9.04	101.4	2.05	336.1814	9.0	9.0		
436.2343 / 10.80	107.9	2.49	436.2343	10.8	10.8		
207.1735 / 11.57	113.2	2.83	207.1735	11.6	11.6		
207.1735 / 4.19	70.6	0.01	207.1735	4.1	4.1		

Validierung STOFF-IDENT mit Standardsubstanzen

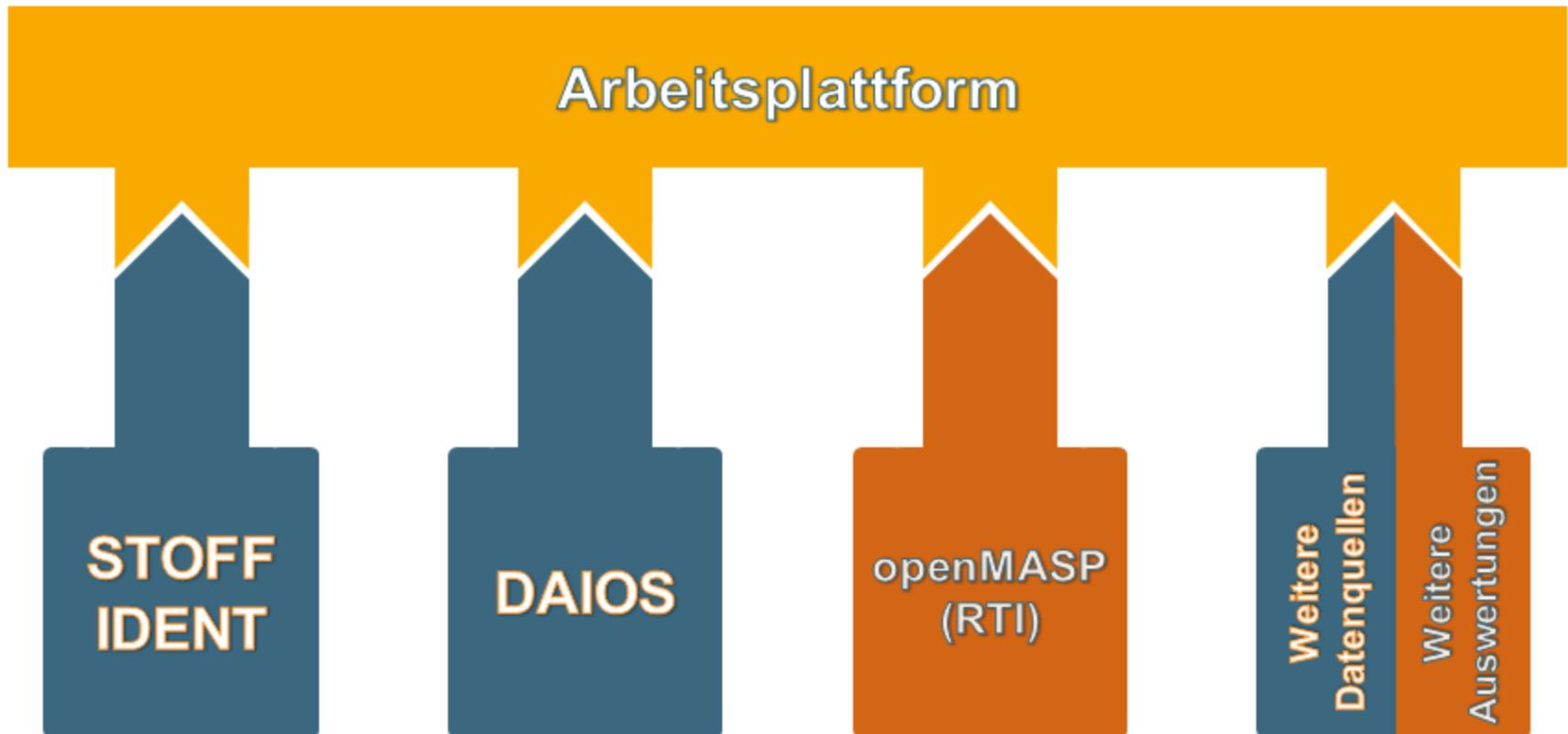


Stoffvorschläge in Oberflächengewässern/Uferfiltraten

Stoffvorschläge teilweise validiert (n=25)



Ausblick: Einbindung STOFF-IDENT in Arbeitsplattform



Identifizieren

- Bislang unkannte Stoffe
- Abbauprodukte
- in Laborkläranlagen, Säulen, Abwässern, OW, Uferfiltraten mithilfe LC-MS/MS
- Aufbau einer Datenbank STOFF-IDENT

Bewerten

- Untersuchung von Persistenz, Toxizität und Rohstoff
- Wirkstoffe
- Monitoring
- Bewertung des Risikos für die aquatische Umwelt

Minimieren

- Elimination von Spurenstoffen mit 4. Reinigungsstufe
- neues oxidatives Verfahren
- Handlungsanweisungen
- Bürger, Wirtschaft

Wie es nun weitergeht!

*Mit
Einbindung
(inter-)
nationaler
Partner*



Ziele



- Umsetzung der bereits konzipierten **Arbeitsplattform zur Bündelung aller Hilfsmittel**
- **Optimierung und Sicherung der Datenqualität** von STOFF-IDENT und DAIOS
- **Standardisierung und Definition von einheitlichen Qualitätsstandards** für die Messmethodik auf unterschiedlichen Systemen
- Erstellung eines **Leitfadens** für die Anwendung der Messstrategien
- **Nationale und internationale Harmonisierung** der Ergebnisse zur nachhaltigen Etablierung der Strategien



Arbeitspakete

AP1: Softwareentwicklung der integrierten Arbeitsplattform inklusive Analyse, Spezifikation, Design, Implementierung und Test

AP2: Laufender Praxistest der integrierten Arbeitsplattform, Suspected- und Non-Target Analytik von Kläranlagenabläufen, Oberflächengewässern, Uferfiltrat und Trinkwasser sowie Rückkopplung/Unterstützung AP1, AP3, AP4 und AP5

AP3: Optimierung und Sicherung der Datenqualität von STOFF-IDENT und DAIOS, (Fehlerkorrektur, Vervollständigung der Daten sowie Erweiterung und Qualitätssicherung der Funktionalitäten)



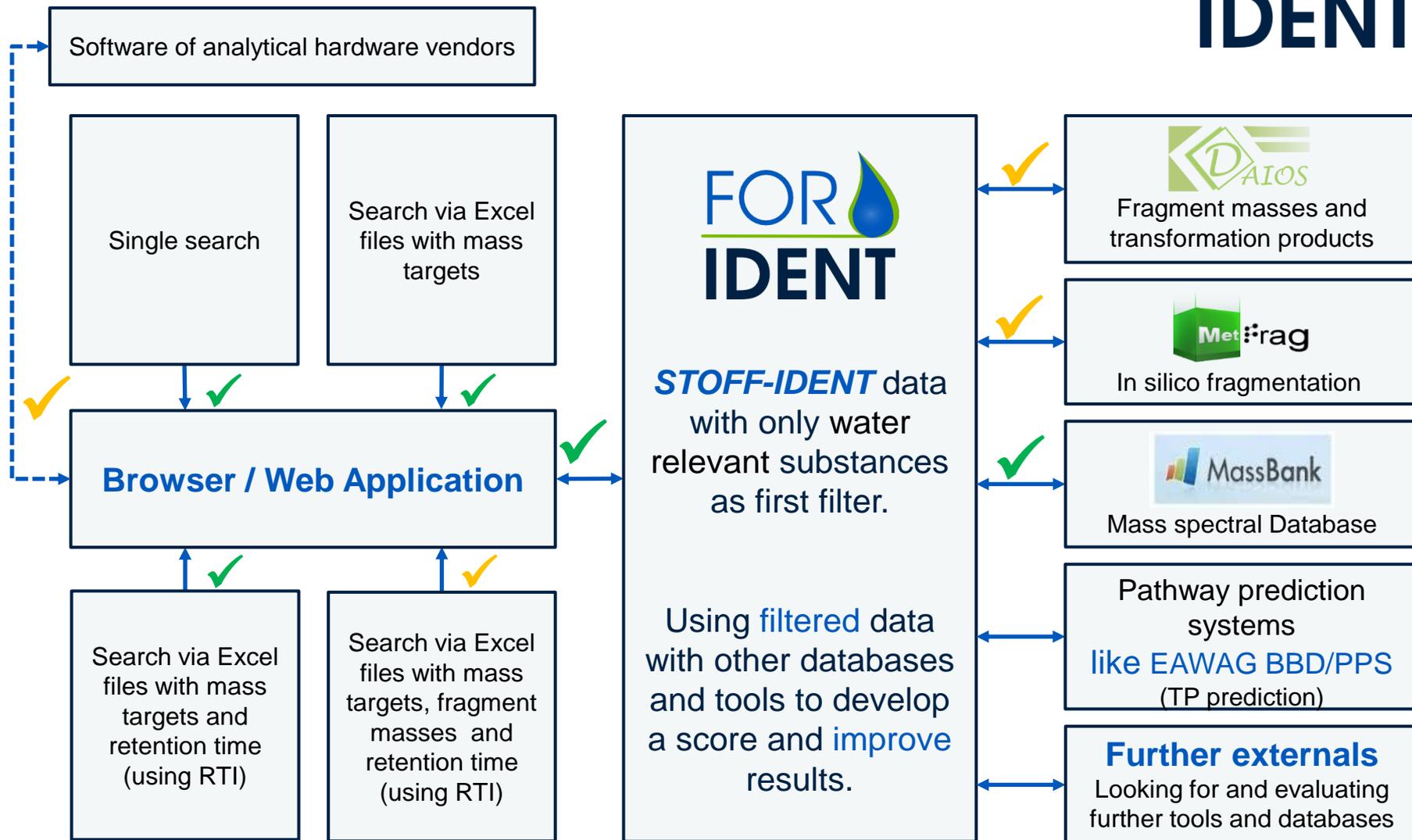
Arbeitspakete

AP4: Standardisierung des Non-/Suspected-Target Screenings sowie Steigerung der Qualität und der Effizienz, Durchführung eines nationalen Ringversuchs

AP5: Erstellung eines Leitfadens zur Nutzung und Harmonisierung der Strategien

AP6: Koordination des Projekts und Industriekooperationen sowie Erarbeitung internationaler Marketingstrategien und Informationsverbreitung

Open-Access Platform ,FOR-IDENT‘



GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

FOR-IDENT

FOR
IDENT

„Normalization of retention time to a retention time index (RTI) and logD value in LC-MS measurements“

Thomas Letzel



Bayerisches Landesamt für
Umwelt



HOCHSCHULE
WEIHENSTEPHAN-TRIESDORF
UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES



TUM

Technische Universität München

Zweckverband
Landeswasserversorgung





RTI

FOR
IDENT

Normalization of retention time to a retention time index (RTI) and logD value in LC-MS measurements

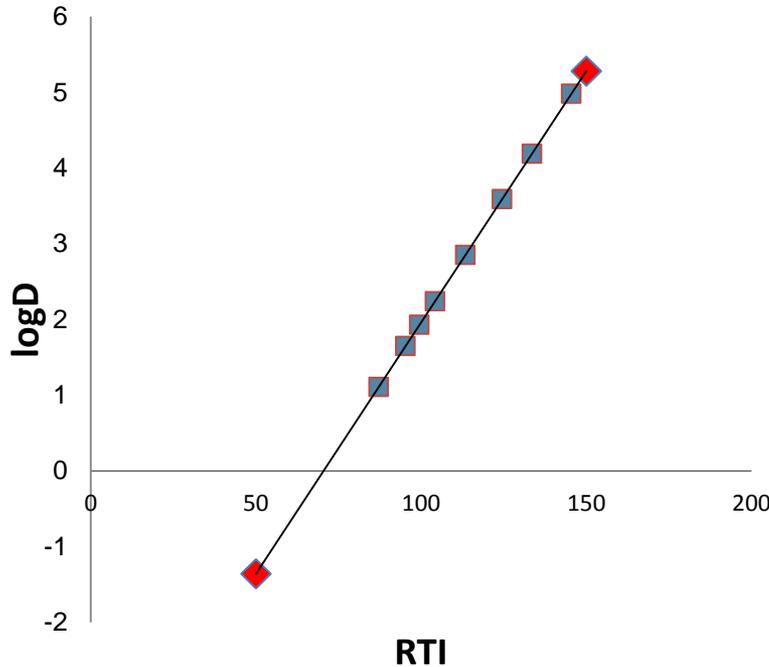
- Validation of the own chromatography and the mass spectrometric specificity and sensitivity via RTI
- Comparison of chromatographic data with other laboratories
- Using the RTI /logD as a filter in the Database STOFF-IDENT





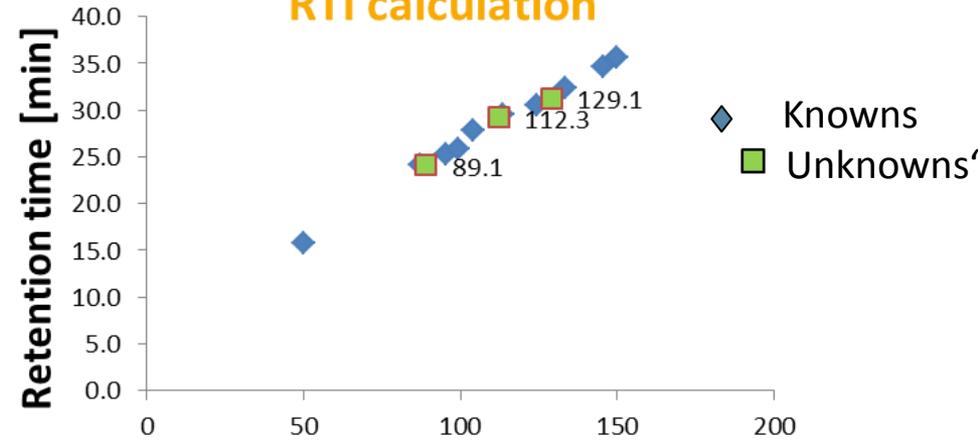
Normalization RTI- Known Standard (TUM)

RTI normalization

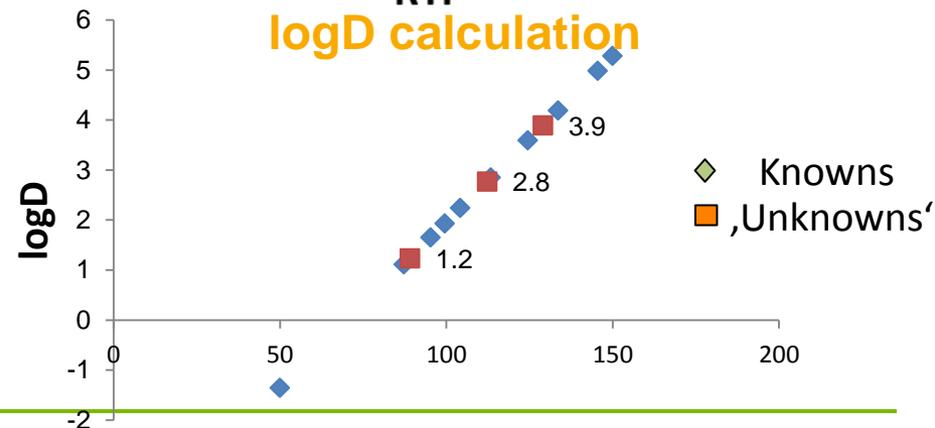


$$RT \triangleq RTI \triangleq \log D$$

RTI calculation



RTI logD calculation



GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

FOR-IDENT

FOR
IDENT

„Polarity Extended Chromatography“

including

Organization of International Round Robin with NORMAN partners

Thomas Letzel



Bayerisches Landesamt für
Umwelt



HOCHSCHULE
WEIHENSTEPHAN-TRIESDORF
UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES



TUM
Technische Universität München

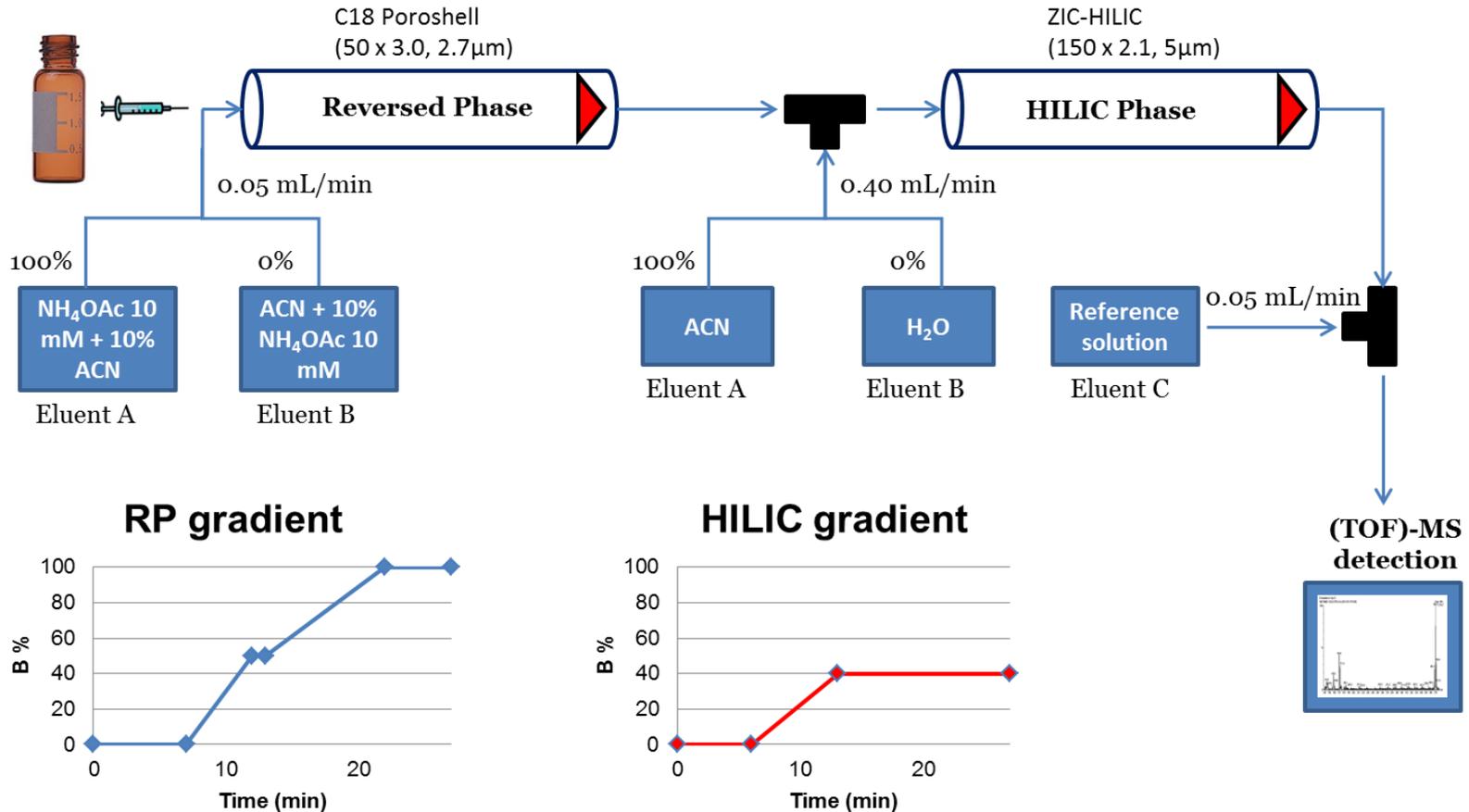
Zweckverband
Landeswasserversorgung



Berliner
Wasserbetriebe

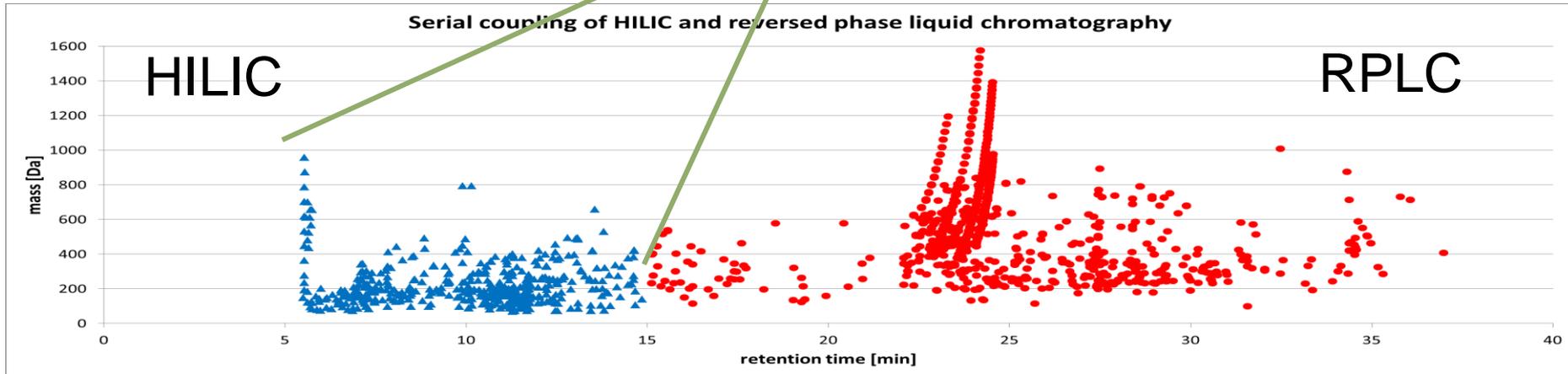
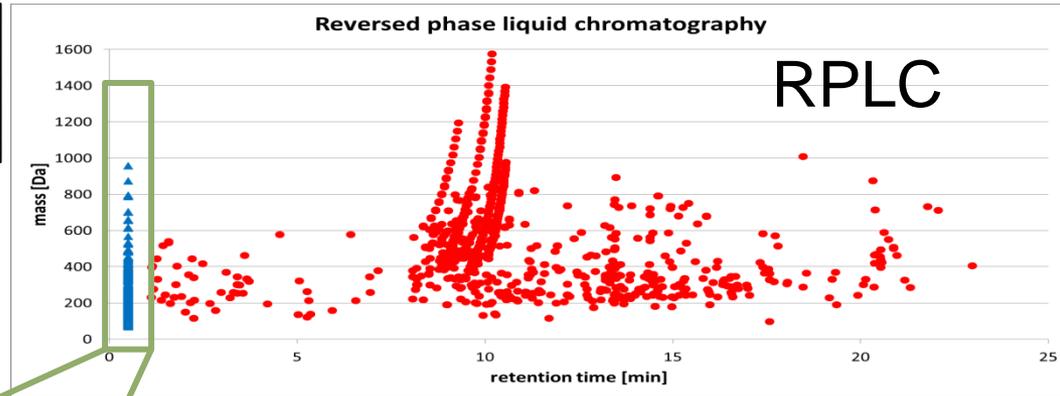
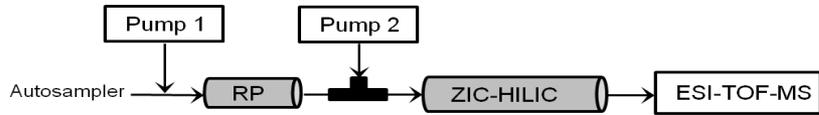


Polarity Extension



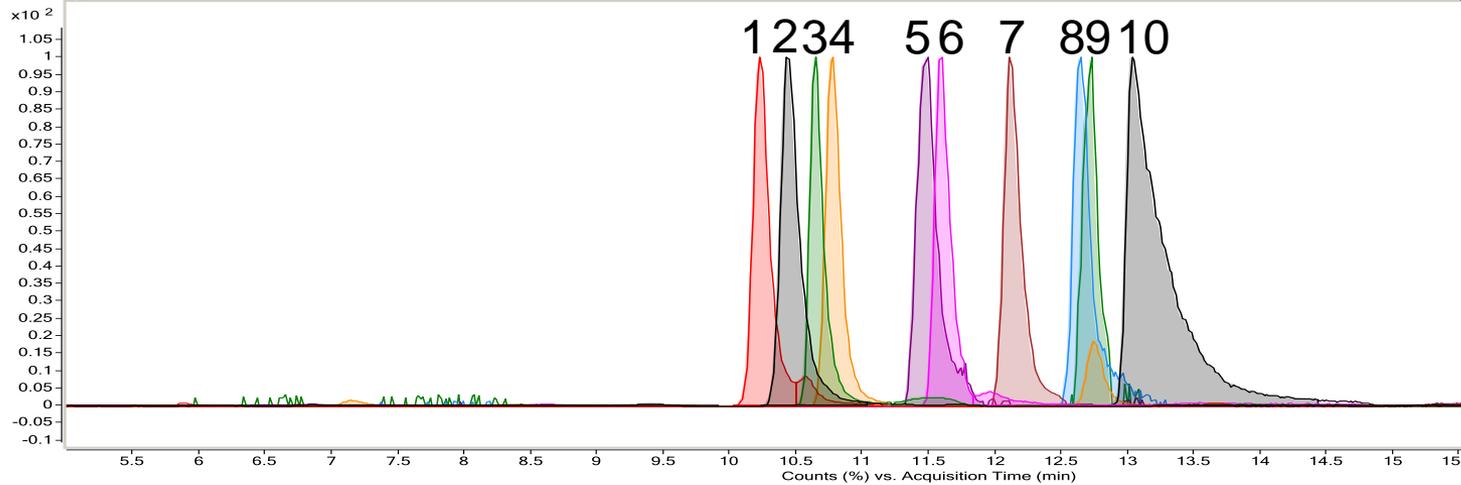
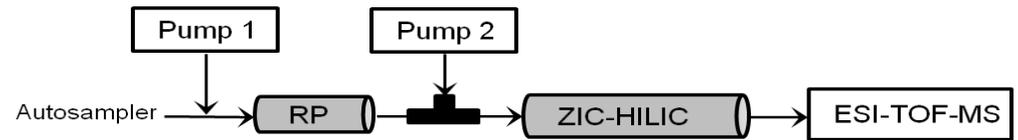


Polarity Extension





Example



1 Phe; 2 Leu; 3 Trp; 4 Ile; 5 Val; 6 Tyr; 7 Pro; 8 Thr; 9 Ala; 10 Asn

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

FOR-IDENT

FOR
IDENT

„European‘ and ‚World Wide‘ Initiative
to develop, harmonize and validate
„Screening Technologies for Water Samples‘
and **inviting on an open-access platform**



Bayerisches Landesamt für
Umwelt



HOCHSCHULE
WEIHENSTEPHAN-TRIESDORF
UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES



TUM
Technische Universität München

Zweckverband
Landeswasserversorgung



Berliner
Wasserbetriebe



NORMAN

Network of reference laboratories, research centres and related organisations for monitoring of emerging environmental substances



Menu

- › Emerging Substances
- › DATABASES
- › Topics and Activities
- › Workshops and Events
- › QA/QC Issues
- › Glossary
- › Useful links

Search

WELCOME TO THE NORMAN NETWORK



The NORMAN network enhances the exchange of information on emerging environmental substances, and encourages the validation and harmonisation of common measurement methods and monitoring tools so that the requirements of risk assessors and risk managers can be better met. It specifically seeks both to promote and to benefit from the synergies between research teams from different countries in the field of emerging substances.

Who should be part of the network?

All interested stakeholders dealing with emerging substances – whether in studying their occurrence and effects or risk assessment and risk management:

- › Competent authorities / Reference laboratories: i.e. institutes and organisations designated by the competent authorities at the national level to offer technical and scientific support in specific fields related to environmental protection.
- › Research centres and academia.

Highlights

New NORMAN Working Group on Indoor Environment and contaminants of emerging concern - Kick-off meeting, 8-9 December 2014, at IVM, Amsterdam

6th NORMAN General Assembly meeting took place on 9-10 December at IVM, Amsterdam

Workshop on 'Passive Sampling for monitoring of contaminants in the aquatic environment: Achievements to date and future perspectives'

Screening campaign of selected antibiotic resistance determinants and mobile genetic elements (AR/MGE) in WWTPs in Europe - announcement and invitation for participation

Cost Action ES1403 - New and emerging challenges and opportunities in wastewater reuse - NEREUS

[ARCHIVE](#)

Recent events

Date Title

Recent events

[ARCHIVE](#)



250th
Celebration

American Chemical Society National Meeting & Exposition

BOSTON

INNOVATION
from **D**iscovery
to **A**pplication

August 16-20, 2015
BOSTON, MA
www.acs.org/boston2015
#acsBoston

American Chemical Society

Assessing Transformation Products by Non-target and Suspected Target Screening: The New Frontier in Environmental Chemistry and Engineering

Jörg E. Drewes & Thomas Letzel

Chair of Urban Water Systems Engineering

Technical University of Munich, Germany



Sponsored by



Agilent Technologies

FOR 
IDENT

***Vielen
Dank
für Ihre
Aufmerk-
samkeit***



Bayerisches Landesamt für
Umwelt



HOCHSCHULE
WEIHENSTEPHAN-TRIESDORF
UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES



TUM

Technische Universität München

Zweckverband
Landeswasserversorgung

