

# Screening-Untersuchungen als Baustein eines risikobasierten Monitoringprogramms

Dr. A. Liesener

08.11.2023



# Hintergrund - Was ist „Screening“?

- (technische) Entwicklungen der letzten Jahre ermöglichen die Nutzung von breit angelegten Screening-Messungen
  - aktuell primär LC-HRMS Kopplungen -> Einschränkung des erfassbaren Stoffspektrums

- Unterschied zwischen Target-Analytik und Screening-Verfahren

Target-Analytik

SemiQuantitative Analytik

SuspectTarget-/  
NonTarget-Analytik



Quantitative Informationen

Qualitative Informationen

wenige Stoffe in einzelnen,  
optimierten Methoden

viele Stoffe in  
wenigen Methoden

sehr viele Stoffe in einzelnen,  
generischen Methoden

- Regelwerke bisher mit Fokus auf „klassische“ Target-Analytik erstellt und umgesetzt
  - Ermittlung von quantitativen Analysendaten zur Kontrolle der Einhaltung von Grenzwerten et al.
- aber: qualitative Ansätze (= Screening) sind nicht ausgeschlossen

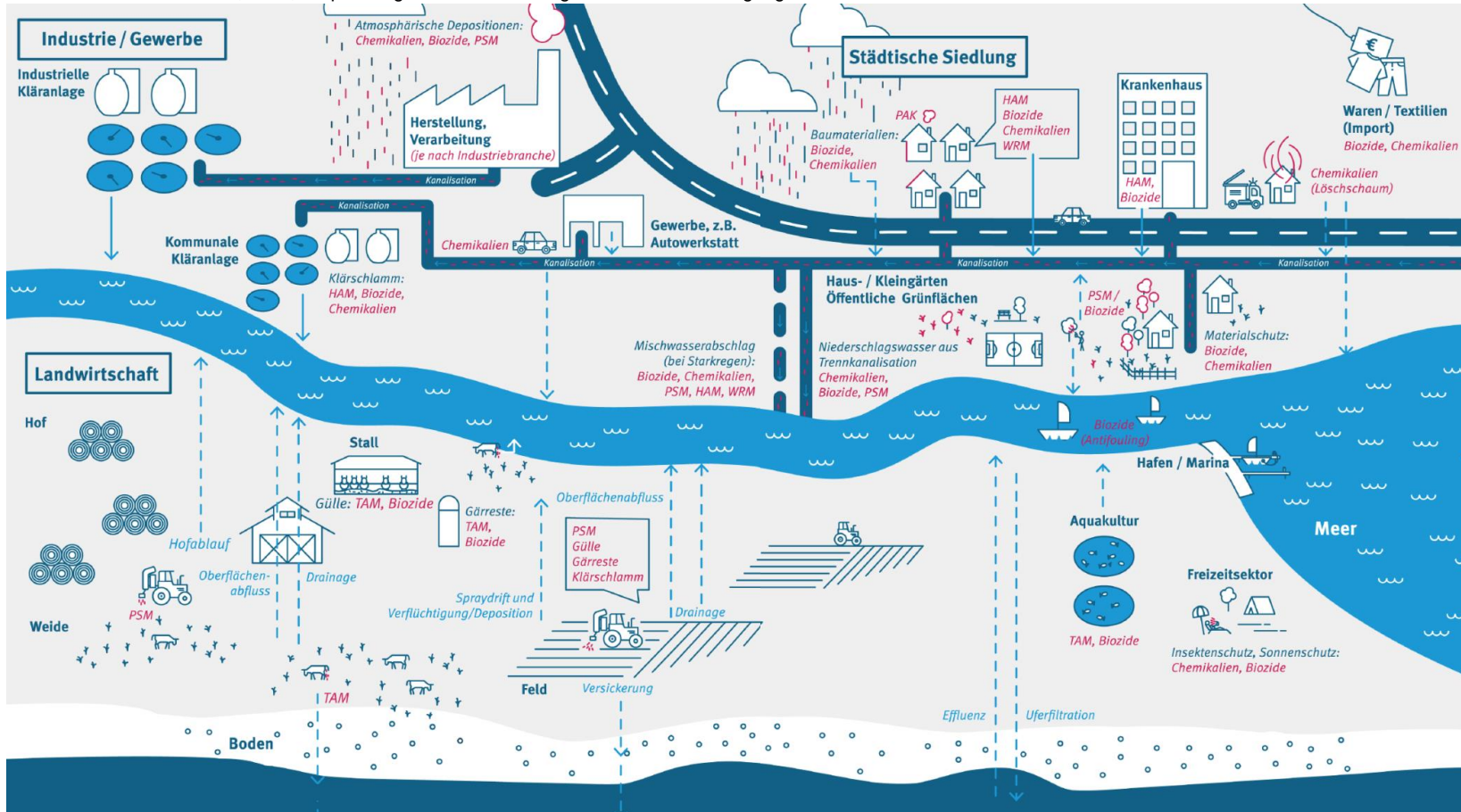
# Risikobasierte Monitoringplanung

---

- **Umsetzung in TrinkwV 2023**
  - Details noch nicht ganz klar -> fehlende Verordnungen
- **Vorgehen:**
  - Bewertung der Risiken für Schäden an der Wasserressource
  - Übersetzung in Analysenumfänge und –häufigkeiten -> mit Behörden abgestimmte Monitoringpläne
  - Kontrolle des Rohwassers und Kontrolle des Trinkwassers
- **Problem:**
  - diverse Quellen führen zu sehr großem Spektrum an potenziell zu überwachenden Stoffen

# Belastungsquellen und Stoffspektrum

Quelle: Umweltbundesamt, 2018, Empfehlungen zur Reduzierung von Mikroverunreinigungen in den Gewässern



---> Einträge aus diffusen Quellen: Sprayabdrift, Oberflächenabfluss, Drainage, Versickerung ins Grundwasser

—> Punktquellen: Einträge in die Kanalisation und aus Kläranlagen      - - - - Schadstoffe

- **PSM:** ca. 250 Wirkstoffe
- **Biozide:** ca. 500 Wirkstoffe aus verschiedensten Anwendungsbereichen
- **Human-Pharmaka:** ca. 1200 Wirkstoffe
- **Tier-Pharmaka:** ca. 270 Wirkstoffe (z.T. überschneidend mit Human-Pharmaka)
- **Industrie- / Haushaltschemikalien:** ca. 40.000 Stoffe mit >1 t/a Herstellung oder Import in REACH
- **plus Metabolite und Transformationsprodukte der obigen Stoffe**

# Resultierende Problemstellung

- Spektrum der „möglicherweise vorkommenden Stoffe“ ist extrem groß und mit klassischen Analytikansätzen nicht zu beherrschen
- Beschränkung auf eine überschaubare Anzahl an Analyten ist zwingend erforderlich
  - Messaufwand -> ca. 40 Substanzen pro Methode; Laufzeiten von ca. 10 bis 40 min pro Probe und Methode
  - Auswahl anhand von Vorgabedokumenten, Behördenauflagen, *best practice*, konkreten Befunden

⇒ nur ein sehr kleiner Teil der wahrscheinlich relevanten Stoffe wird erfasst

⇒ Lösungsansatz: Kombination aus **Target-Analytik** und **verstärktem Screening**

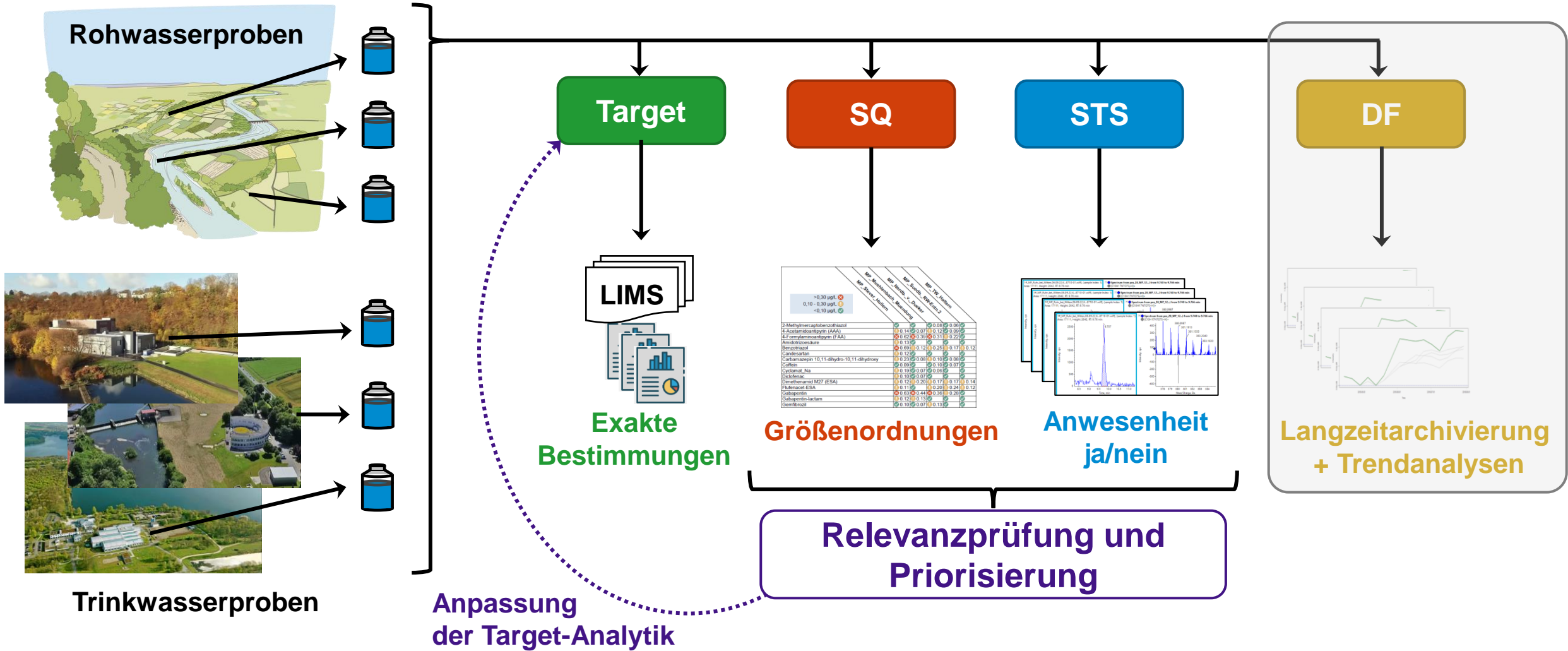
Fokus auf „Pflichtprogramm“ aus TrinkwV und tatsächlich vorhandenen Risikostoffen

breite Erfassung von möglicherweise vorhandenen Risikostoffen

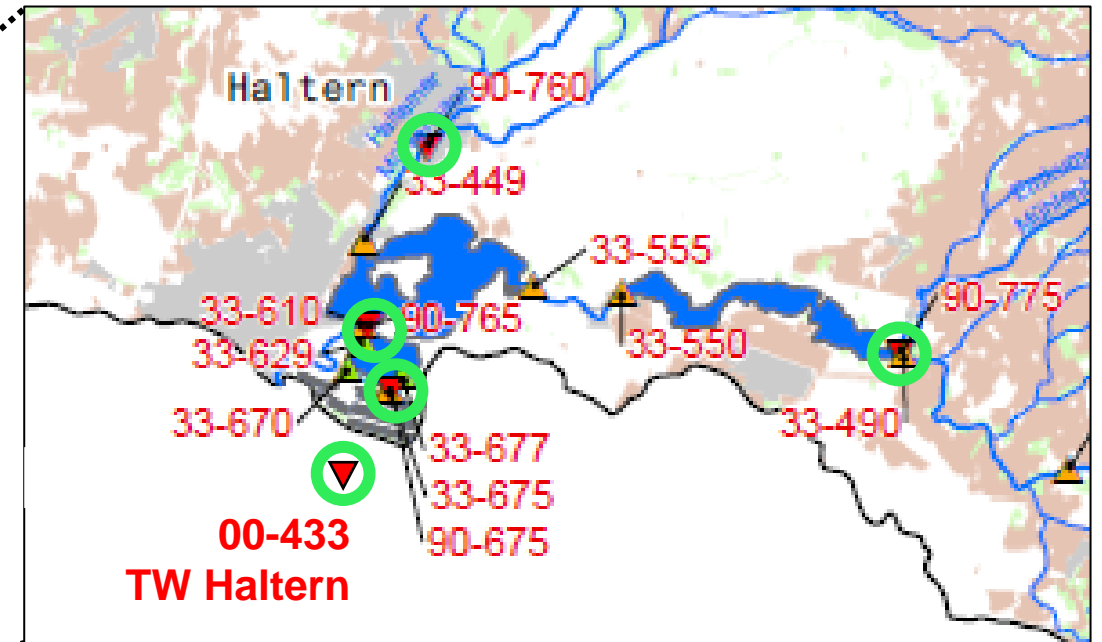
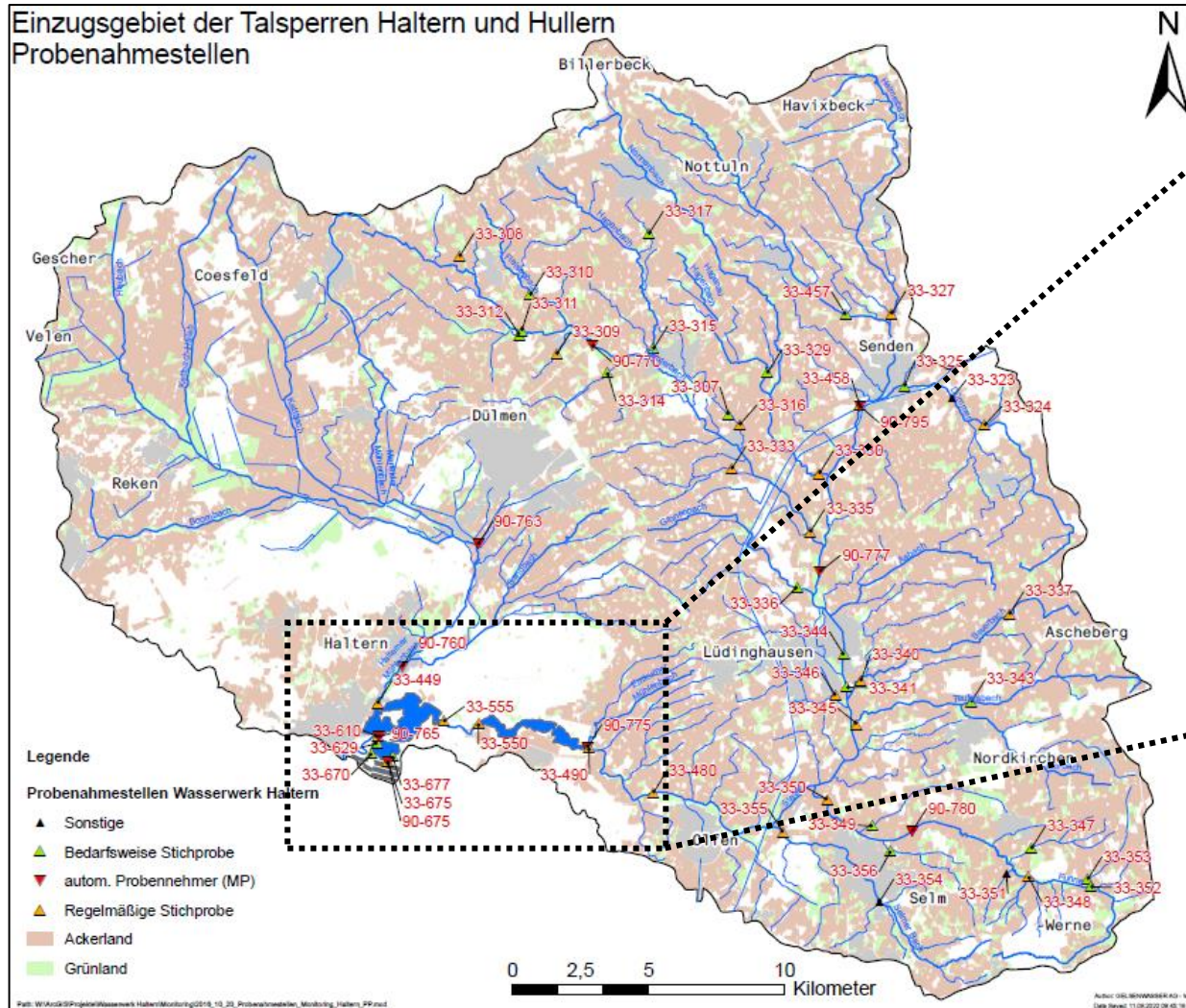
⇒ Ziel: Erfüllung des Risiko-Gedankens unter Vermeidung von zusätzlicher Target-Analytik



# Kombination Target- und Screening-Analytik



# Umsetzung am Beispiel des WW Haltern Probestellen im Einzugsgebiet



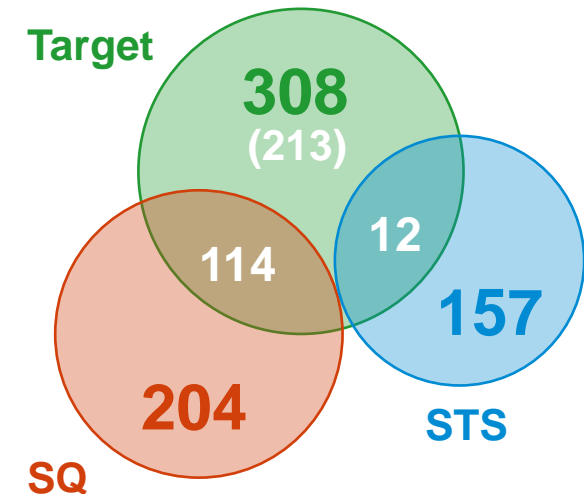
- ▼ Automatiche Probenehmer (90-XXX)  
(24 h Mischproben)
- ▲ Stichprobestellen (33-YYY)

# Umsetzung am Beispiel des WW Haltern

## Aufbau des Untersuchungsprogramms

- **Target-Analytik**
  - zweiwöchentlich bis halbjährliche Messungen in Roh- und Trinkwasser
  - 308 Stoffe in der Überwachung
- **SemiQuantitatives Screening**
  - wöchentlich Roh- und Trinkwasser (Mischproben)
  - 204 Stoffe in der Überwachung
- **Suspect Target Screening**
  - wöchentlich Roh- und Trinkwasser (Mischproben)
  - 157 Stoffe im Routineabgleich
- **Digital Freezing**
  - fortlaufende Sicherung der wöchentlichen Messungen für SQ und STS
  - anlassbezogene NTS und spezielle STS Auswertungen

Verteilung der Parameter:

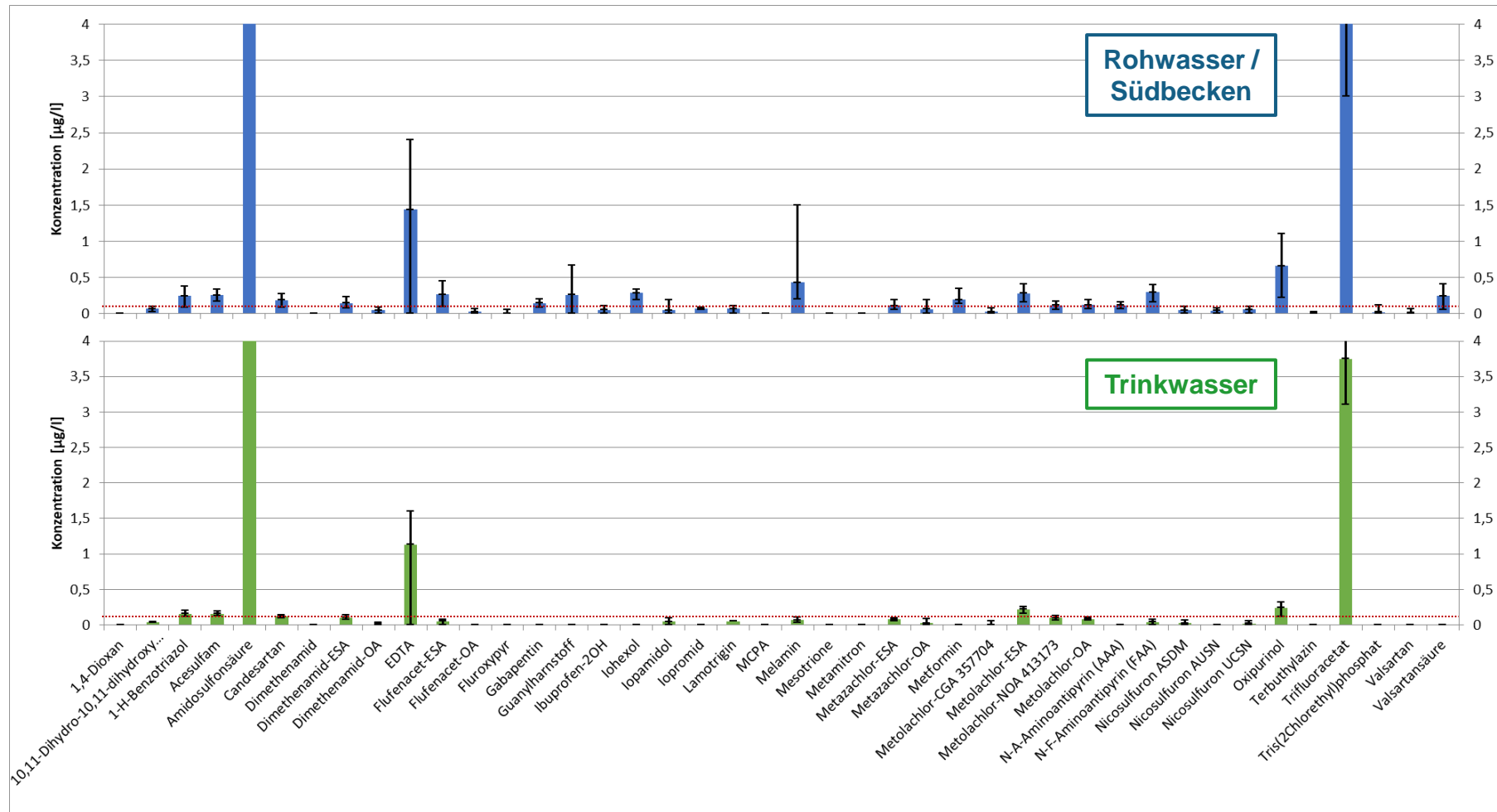


$\Sigma = 543$  Spurenstoffe



# Target-Analytik Befundlage Roh- und Trinkwasser (01/2022 bis 09/2023)

## Min-/Max-/Mittelwerte der relevanten Stoffkonzentrationen



### Quantitative Auswertung



26 Stoffe mit Befunden >0,1 µg/l

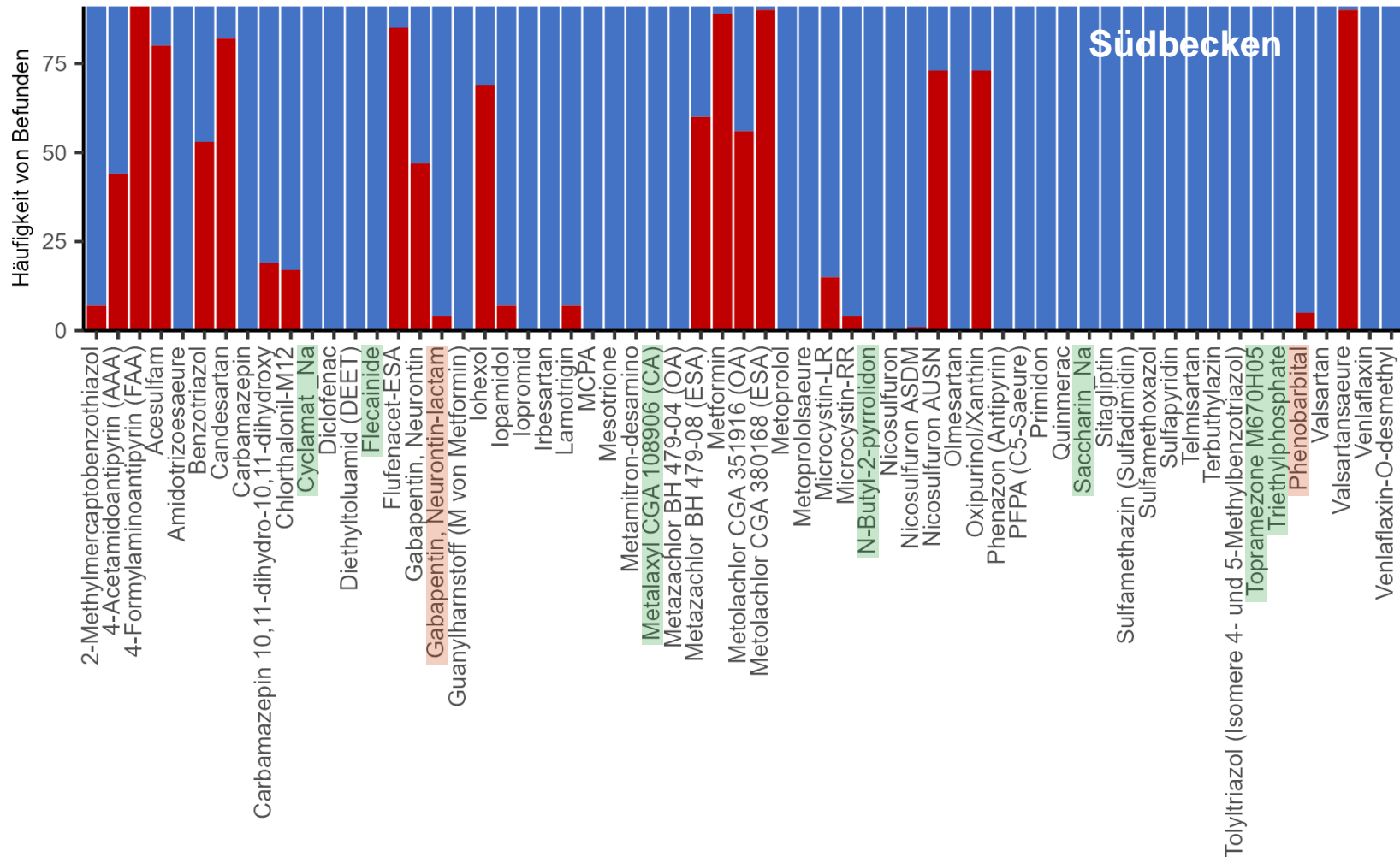


12 Stoffe mit Befunden >0,1 µg/l

**Alle GOW / TW-LW werden eingehalten**  
**Ausnahme: Oxipurinol zeitweise Überschreitung**

# SQ-Befundlage im Roh- und Trinkwasser (01/2022 bis 09/2023)

## Häufigkeiten der Befunde im Rohwasser



### Legende

- Anzahl Befunde < 0,1 µg/l
- Anzahl Befunde > 0,1 µg/l

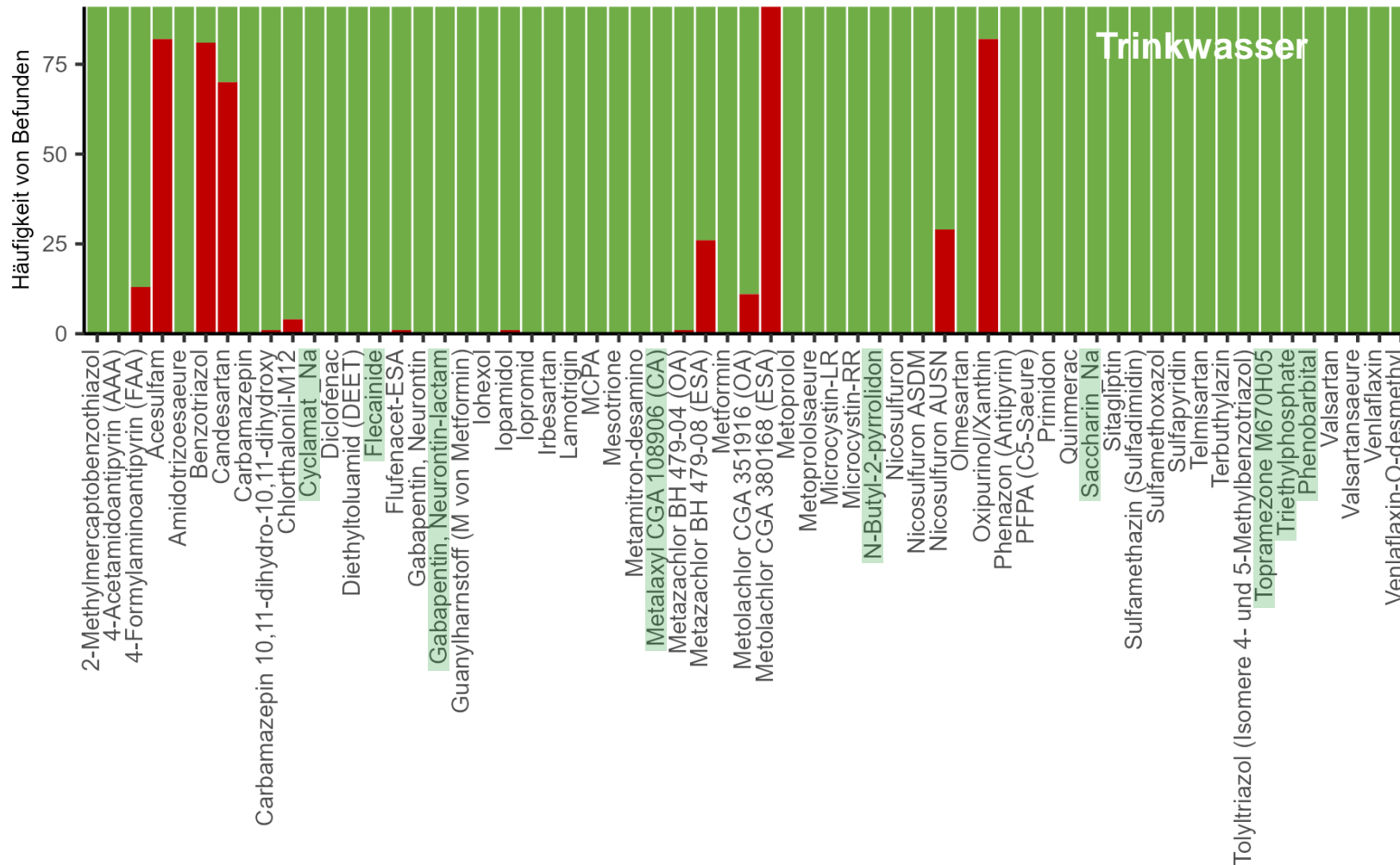


### Qualitative Auswertung

- 25 Stoffe mit positiven Befunden
- Häufigkeit der Befunde heterogen von selten bis immer
- Stoffe aus den Klassen PSM-Metabolite, Pharmaka-/Metabolite, Industriestoffe
- 2 Stoffe mit Positiv-Befunden nicht in Target-Analytik abgedeckt

# SQ-Befundlage im Roh- und Trinkwasser (01/2022 bis 09/2023)

## Häufigkeiten der Befunde im Trinkwasser



### Legende

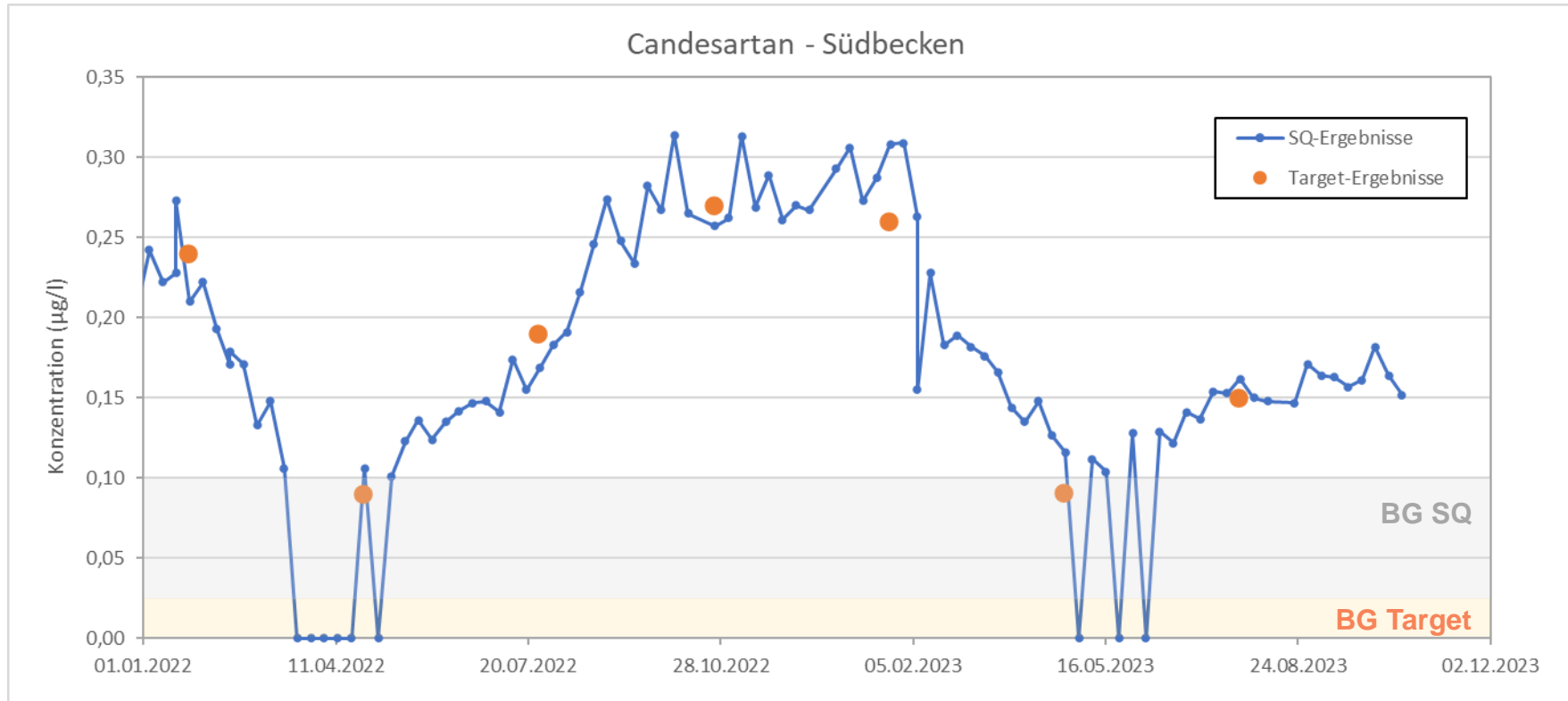
- Anzahl Befunde < 0,1 µg/l
- Anzahl Befunde > 0,1 µg/l



### Qualitative Auswertung

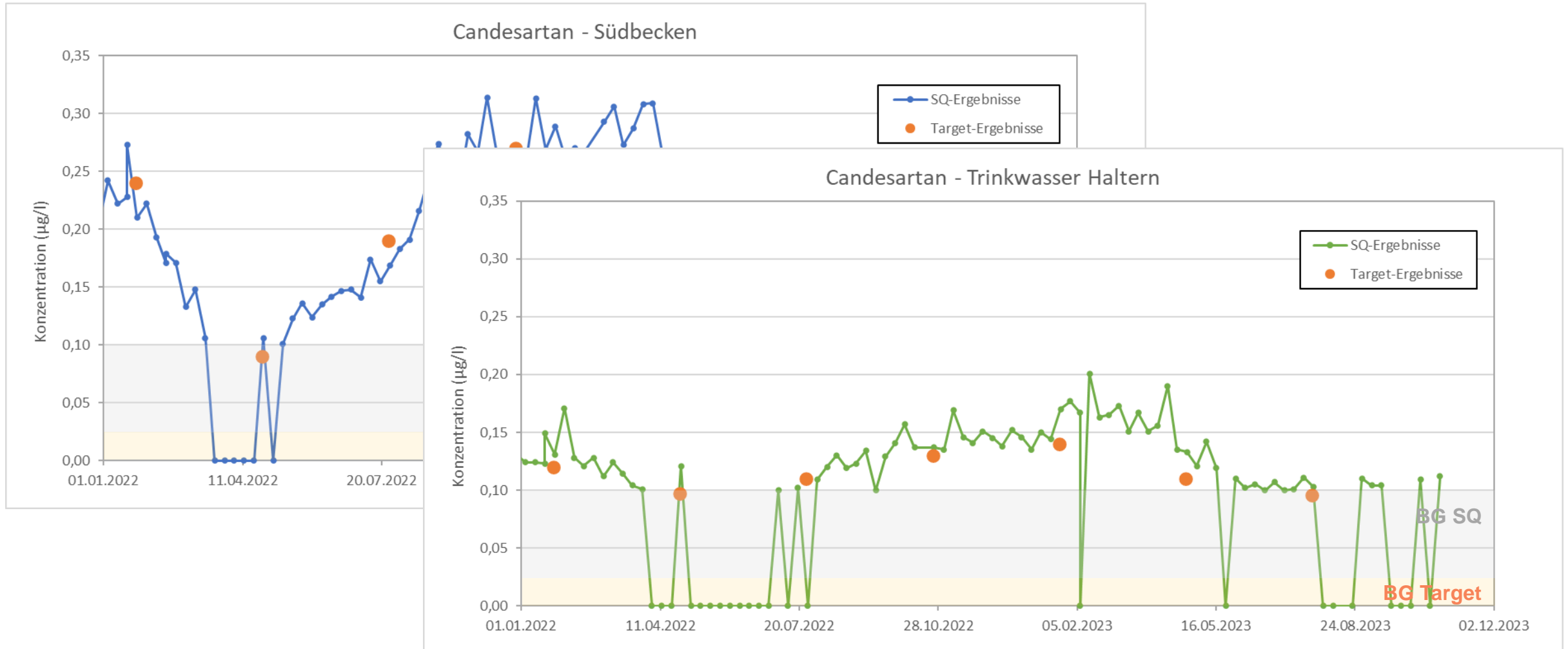
- 14 Stoffe mit positiven Befunden
- Häufigkeit der Befunde heterogen von selten bis immer
- alle Stoffe mit Positiv-Befunden in Target-Analytik abgedeckt

# Konzentrationsverläufe Candesartan aus SQ- und Target-Daten



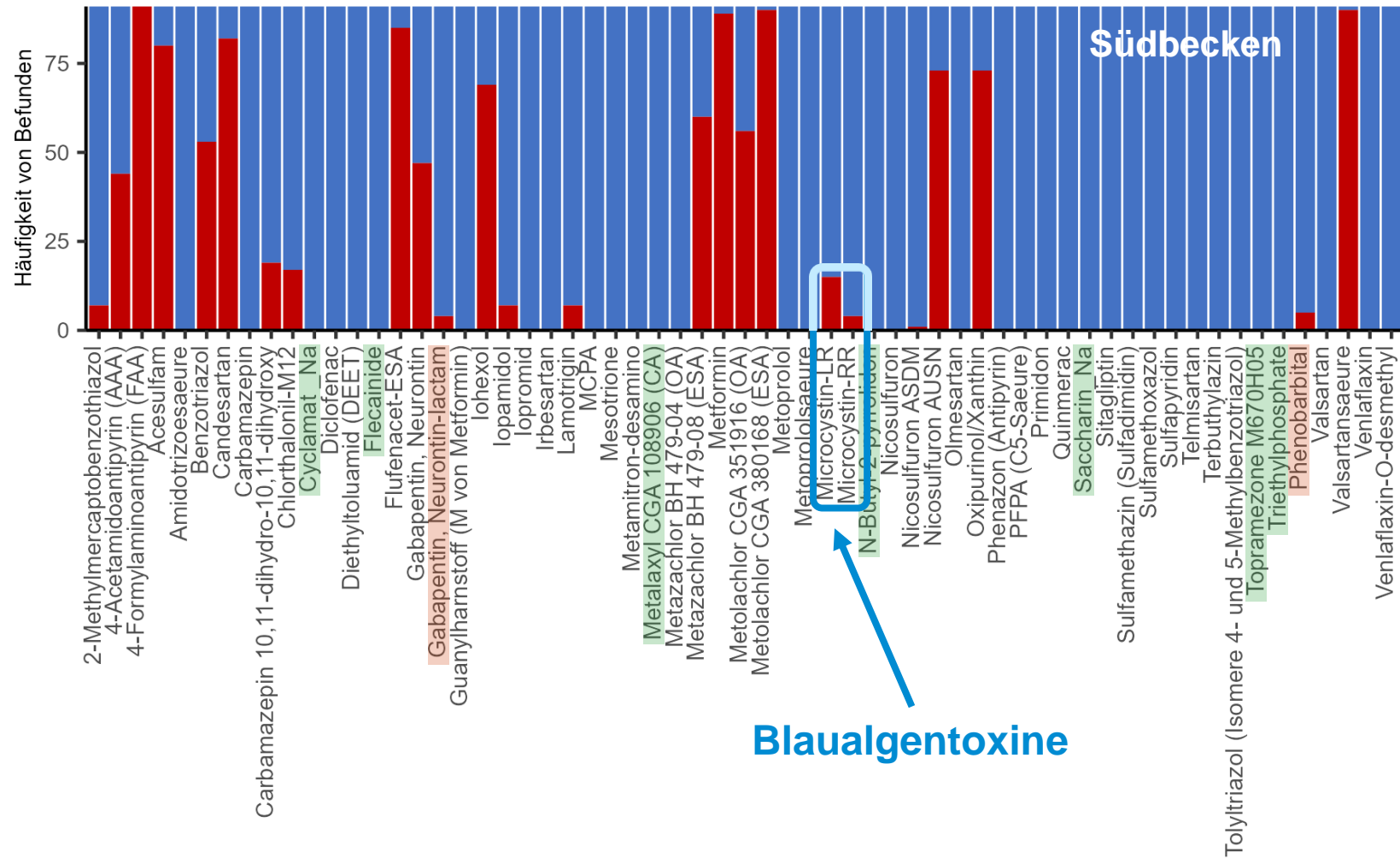


# Konzentrationsverläufe Candesartan aus SQ- und Target-Daten

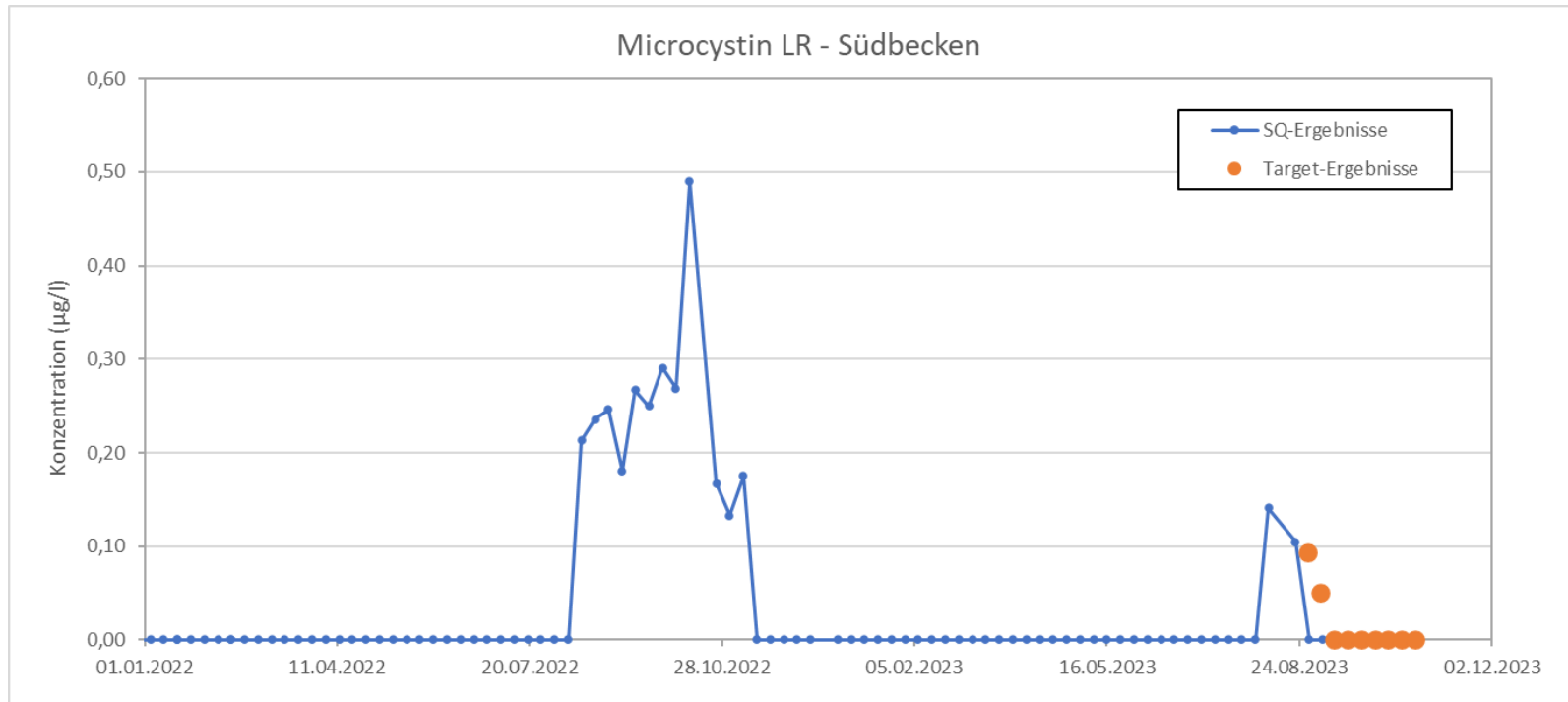


# SQ-Befundlage im Roh- und Trinkwasser (01/2022 bis 09/2023)

## Häufigkeiten der Befunde im Rohwasser



# Konzentrationsverläufe Microcystin-LR aus SQ- und Target-Daten

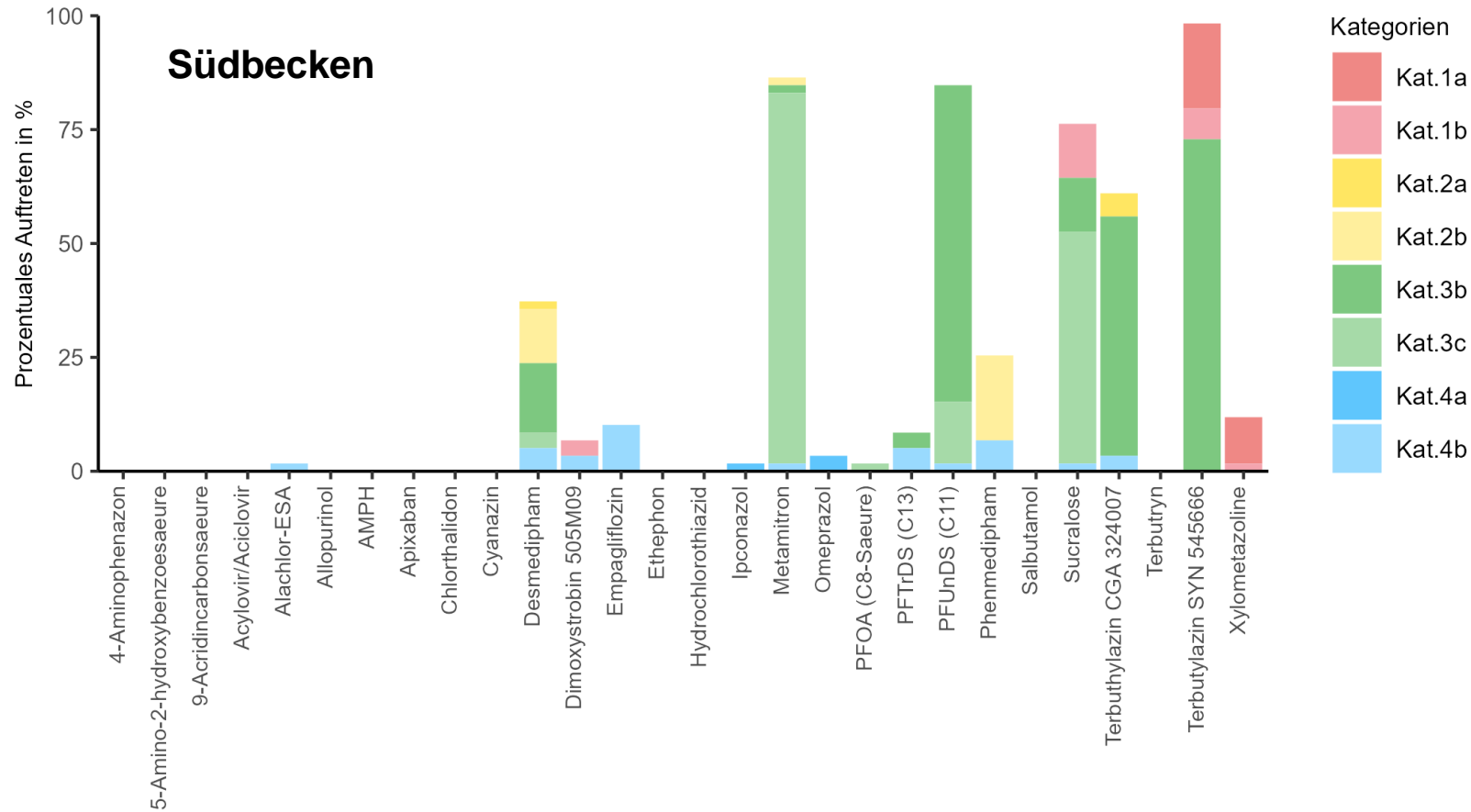


## ⇒ SemiQualitative Auswertung

- messbare Toxin-Konzentrationen bereits vor Anzeichen einer Algenblüte
- SQ-Ergebnisse dienen als Trigger für Start der Target-Analytik

# STS-Befundlage in Roh- und Trinkwasser (01/2023 bis 09/2023)

## Häufigkeiten der Befunde im Rohwasser



Kategorien

- Kat.1a
- Kat.1b
- Kat.2a
- Kat.2b
- Kat.3b
- Kat.3c
- Kat.4a
- Kat.4b

⇒ Kategorien beschreiben die Wahrscheinlichkeit einer korrekten Stoff-Identifizierung (Kat. 1 – sicher; Kat. 4 – möglich)

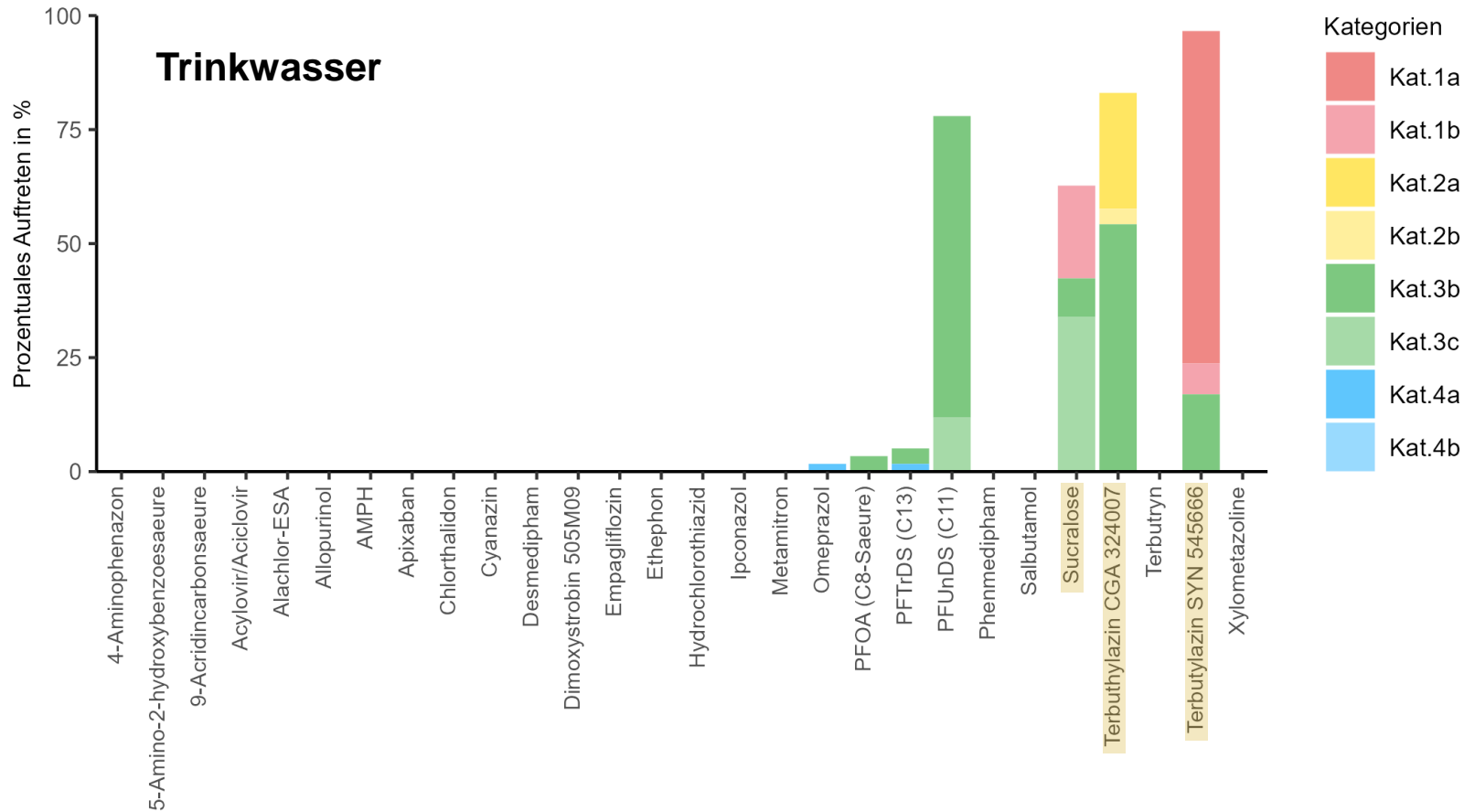
⇒ **Qualitative Auswertung**

- „sichere“ Positiv-Befunde für 8 Stoffe
- hauptsächlich Befunde mit geringerer Wahrscheinlichkeit -> insgesamt weniger relevant -> zusammen mit Kat. 1 / 2 Befunden Hinweis auf schwankende Konzentrationen

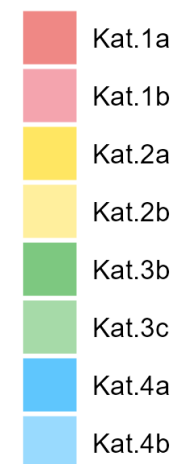


# STS-Befundlage in Roh- und Trinkwasser (01/2023 bis 09/2023)

## Häufigkeiten der Befunde im Trinkwasser



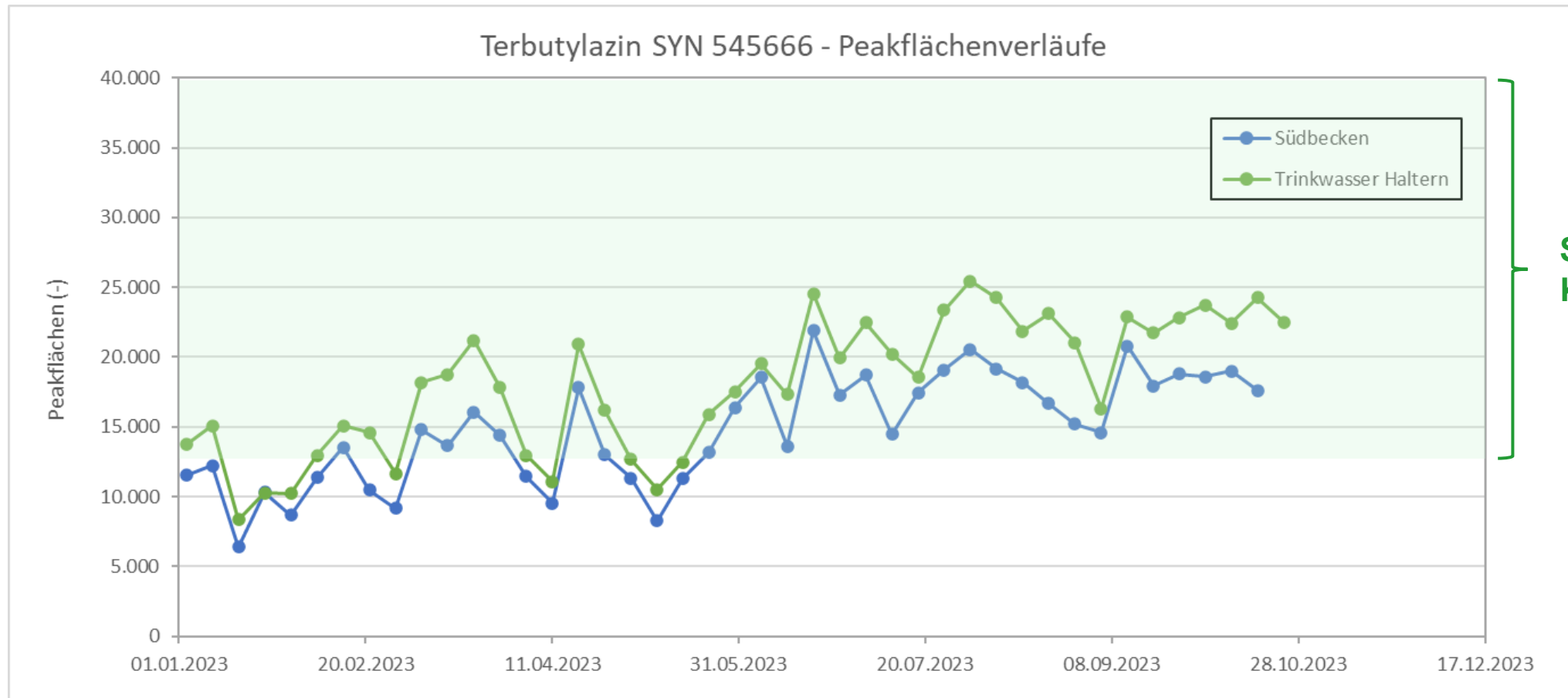
Kategorien



### Qualitative Auswertung

- „sichere“ Positiv-Befunde für 3 Stoffe
- ebenfalls hauptsächlich Befunde mit geringerer Wahrscheinlichkeit

# Signalverlauf Terbutylazin SYN 515666 aus STS-Daten



# Ergebnisse des Monitoringprogramms

---

- **Rohwässer**
  - Target: 26 von 308 Stoffen in relevanten Konzentrationen
  - SQ: 25 von 204 Stoffen in potenziell relevanten Größenordnungen; 23 Stoffe auch in Target erfasst
  - STS: 8 von 157 Stoffen mit bestätigten Befunden
- **Trinkwässer**
  - Target: 12 von 308 Stoffen in relevanten Konzentrationen
  - SQ: 14 von 204 Stoffen in potenziell relevanten Größenordnungen; alle in Target erfasst
  - STS: 3 von 157 Stoffen mit bestätigten Befunden
- **mögliche Folgeaktivitäten**
  - Überführung von Sucralose und Terbutylazin SYN 545666 in SQ-Screening
  - Bestätigung der Befunde für Terbutylazin CGA 324007 durch Abgleich mit Referenzsubstanz

# Fazit

---



- **SQ-Untersuchungsprogramm**
    - ergänzt das Target-Programm und erfasst weitere für das (Roh)Wasser relevante Stoffe
  - **STS-Untersuchungsprogramm**
    - erkennt bisher nicht erfasste Stoffe; schließt die Gegenwart von Stoffen aus
- ⇒ **Screening-Verfahren ergänzen das Target-Monitoring**
- schließen zeitliche und stoffliche Lücken des Target-Monitorings
  - erlauben eine datenbasierte Priorisierung des Target-Monitorings in Ergänzung zur Risikobewertung der Quellen im Einzugsgebiet
  - ermöglichen einen schnellen Überblick über Trends und können als Trigger für tiefergehende Untersuchungen dienen
- ⇒ **Vorteile:**
- einfache Anpassung des Screening-Umfangs an aktuelle Fragestellungen
  - Kostenersparnis durch Vermeidung von zusätzlicher Target-Analytik



---

# Danke für Ihre Aufmerksamkeit!

**Dr. André Liesener**  
Westfälische Wasser- und Umweltanalytik GmbH  
Willy-Brandt-Allee 26  
45891 Gelsenkirchen  
Email: [andre.liesener@wwu-labor.de](mailto:andre.liesener@wwu-labor.de)

