

Nachweis von TMDD in Oberflächengewässern mittels Nano-Chip-LC/QTOF-MS

Alexander Müller¹, Wolfgang Schulz und Walter H. Weber

¹ Universität Lüneburg, Fakultät Umwelt und Technik, Fachbereich Umweltwissenschaften

Spiegel-Online (01.10.2008):

Rätselhafter Schadstoff belastet deutsche Flüsse

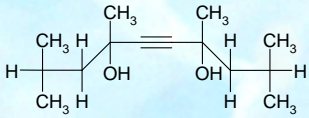
Von Volker Mrasek

Die Chemikalie TMDD führt die Rangliste der Fremdstoffe in deutschen Flüssen an. Doch niemand weiß, woher das Tensid kommt und wie gefährlich es ist.

Wissenschaftler fordern jetzt eine gezielte Analyse der Risiken und warnen vor weiteren, bislang unbekanntem Gefahrstoffen in Flüssen

(<http://www.spiegel.de/wissenschaft/natur/0,1518,581138,00.html>).

2,4,7,9-Tetramethyl-5-decin-4,7-diol (TMDD)



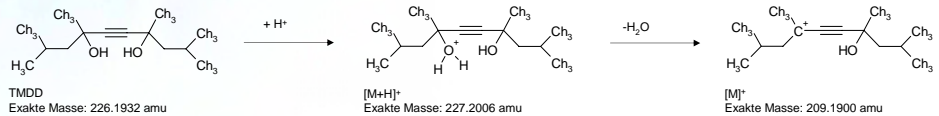
Summenformel: C₁₄H₂₆O₂
 Molmasse: 226.36 g/mol
 Exakte Masse: 226.1932 u
 CAS-Nr.: 126-86-3

Nach Bekanntwerden des zitierten Artikels wurde eine vorhandene Analysendatei einer industriellen Abwasserprobe hinsichtlich TMDD erneut ausgewertet. Die Datei stammte aus einer Untersuchung mittels Nano-LC-Q-TOF, die kurze Zeit zuvor analysiert wurde.

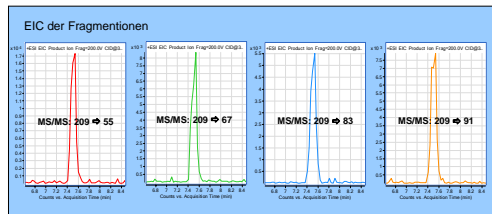
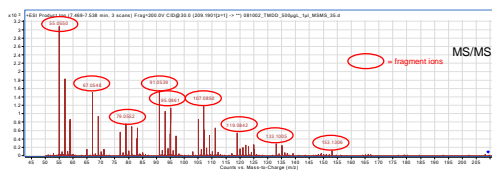
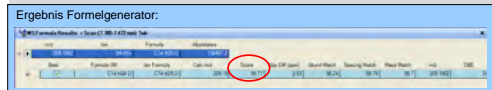
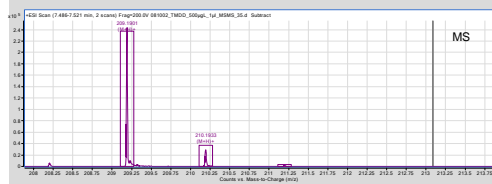
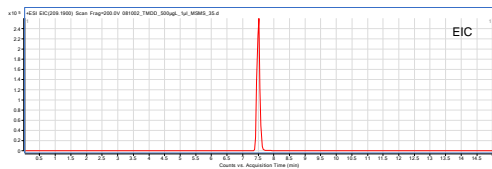
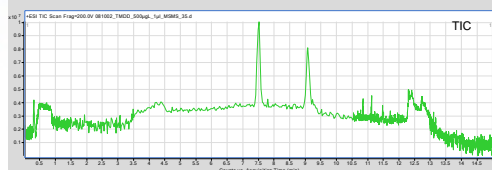
Die entsprechende Massenspur des ionisierten TMDD konnte in der Probe festgestellt und extrahiert werden. Mit Hilfe der ermittelten exakten Masse und des Formelgenerators konnte eine Summenformel generiert werden. Die Bewertung erfolgte mit einem absoluten Score, der sich aus den drei unterschiedlichen Scores: „Abweichung von der berechneten exakten Masse“, „Übereinstimmung mit dem theoretischen Isotopenmuster“ und dem so genannten „Spacing (Abstand der Isotopenpeaks)“ zusammensetzt.

Nach Erhalt von Referenzsubstanz wurden zudem zur Verifizierung der bis dahin erzielten Ergebnisse MS/MS-Experimente durchgeführt.

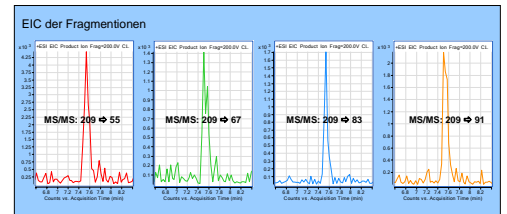
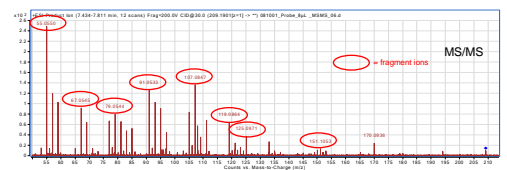
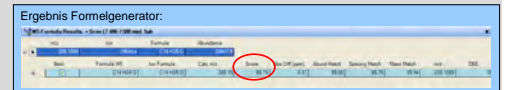
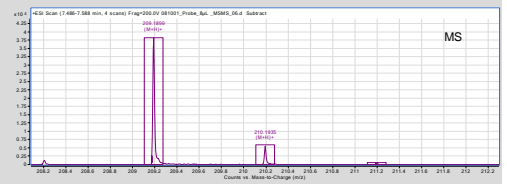
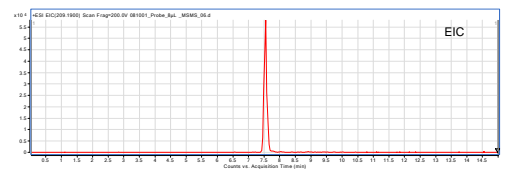
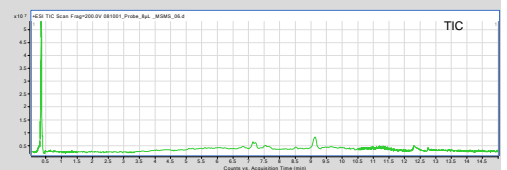
Ionisierung von TMDD:



Analysendaten Standard 500 µg/L



Analysendaten Probe



1. Erneute Auswertung einer bestehenden TOF-Analysendatei

2. Extraktion der Massenspur von TMDD (m/z = 209.1900)

3. Generieren von Summenformeln (Formelgenerator) und deren Bewertung mittels absolutem Score (rote Markierung)

4. Verifizierung der Ergebnisse durch MS/MS-Experimente (sobald Referenzsubstanz vorhanden)

Ergebnis:

In der Abwasserprobe konnte TMDD eindeutig identifiziert und mit einer Konzentration von 20 µg/L nachgewiesen werden.