

TAGUNGSBERICHT

Langenauer Wasserforum 2015

„Wieviel Spurenanalytik brauchen wir?“

Am 9. und 10. November 2015 trafen sich unter dem Leitthema „Wieviel Spurenanalytik brauchen wir?“ mehr als 290 Praktiker und Forscher aus dem Bereich der Wasser- und Umweltanalytik zum 11. Langenauer Wasserforum (LWF). Fachleute aus Deutschland, Österreich und der Schweiz sind der Einladung nach Langenau gefolgt. Die Veranstaltung wurde in bewährter Weise auf dem Gelände des Wasserwerks Langenau veranstaltet und stellt somit den direkten Bezug zur Labor- und Wasserwerkspraxis her. Das LWF fand bis 2013 in jährlichem Rhythmus statt und wird seitdem in zweijährlichem Zyklus veranstaltet.

Den Kern des Vortragsprogramms bildeten 11 wissenschaftliche Fachvorträge zu aktuellen Entwicklungen im Bereich der Wasser- und Umweltanalytik und deren Bedeutung für die Wasserwirtschaft. Ergänzt wurde dies durch Kurzvorträge mit dem Fokus auf die praxisrelevanten Applikationen der analytischen Technologien und Geräte.



Erster Veranstaltungstag

Das Forum wurde von *Dr. Rudi Winzenbacher* eröffnet, der zum 01.01.2014 die Leitung der Abteilung Betriebs- und Forschungslabor und damit verbunden die Schirmherrschaft über das LWF übernommen hat. Das Hauptprogramm begann dann mit zwei Keynotes: *Prof. Dr. Frieder Haakh* (Landeswasserversorgung) leitete in das Themenfeld der organischen Spurenstoffe ein und beleuchtete das Spannungsfeld der öffentlichen Wahrnehmung. Dabei gab er auch Impulse für die Kommunikation. Den derzeitigen Kenntnisstand zu organischen Spurenstoffen im urbanen Wasserkreislauf stellte *Prof. Dr. Martin Jekel* (Technische Universität Berlin) vor. Er legte besonderes Augenmerk auf die Leistungsfähigkeit und die zu erwartenden Kosten einer erweiterten Abwasserreinigung.

Einige aktuelle Fragestellungen zur Target-, Supect- und Non-Target-Analytik mittels Flüssigkeitschromatographie (LC) und der modernen Massenspektrometrie (MS) wurden am Montagnachmittag in mehreren Vorträgen behandelt. In einem Überblicksvortrag stellte *Prof. Dr. Gérard Hopfgartner* (Universität Genf) die LC-MS-Technologie detailliert vor und diskutierte Mess- und Auswertestrategien sowohl für die Target- als auch für die Non-Target-Analytik. *Heinz Singer* (Eawag) nahm die hochauflösende Massenspektrometrie (HRMS) ins Zentrum seines Vortrags und diskutierte die Analytik im Hinblick auf die Hardware und Software.

Beispiele waren die Anwendung der LC-HRMS für die Rheinüberwachung in Basel und die Identifikation neuer Spurenstoffe. Die Herausforderungen beim Non-Target-Screening für die Roh- und Trinkwasserüberwachung diskutierte Tobias Bader (Landeswasserversorgung). An Praxisbeispielen zeigte er die aktuelle Vorgehensweise bei der Datenauswertung.

Im Rahmen von Kurzvorträgen konnten Vertreter der Aussteller neue Entwicklungen vorstellen. *Dr. Thomas Glauner* (Agilent) präsentierte eine datenbankbasierte Auswertung beim Screening. *Christoph Kuntzsch* (Waters) thematisierte die Bedeutung der Protomer-Bildung bei der LC-MS-Analytik. Neue Applikationen für die sensitive Analytik organischer Spurenstoffe stellte *Jan Stenzler* (Shimadzu) vor. *Dr. André Schreiber* (Sciex) nutzte seinen Kurzvortrag zur Präsentation eines neu eingeführten Massenspektrometers.

Wichtige Hinweise zur Auswahl eines geeigneten Säulenmaterials für die Chromatographie wurden am Montagnachmittag gegeben. *Dr. Ute Beyer* (Restek) thematisierte die Partikelgröße und die Beschaffenheit der stationären Phase. Die Abwägung zwischen Umkehrphase, Mixed-Mode-Phasen oder HILIC für polare Analyte war Thema des Beitrags von *Dr. Harald Dibowski* (dichrom).

Inhaltlich abgerundet wurde der erste Vortragstag durch zwei Beiträge zur möglichen Bewertung der Messergebnisse. Ein Ansatz dazu mittels wirkungsbezogener Analytik mit verschiedenen Endpunkten wurde von *Stefan Weiß* (Landeswasserversorgung) dargestellt. Und warum Wirktests essentiell für die Risikobewertung sind, erklärte *Prof. Dr. Rita Triebkorn* (Universität Tübingen) am Beispiel von Kläranlagen und deren Vorflutern.

Zweiter Veranstaltungstag

Der Dienstagvormittag begann mit einer Session zu Applikationen und Techniken der Gaschromatographie (GC) gekoppelt mit der MS. *Andreas Kremser* (Universität Duisburg-Essen) stellte eine neue Generation der Mikroextraktionstechnik SPME für die Wasseranalytik als zuverlässiges und automatisierbares Verfahren der Probenvorbereitung vor. Gegenüber der bisherigen SPME-Technik konnte die Extraktionsausbeute bspw. für polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK) deutlich gesteigert und die Bestimmung mittels GC-MS somit sensitiver erfolgen.

Drei Kurzvorträge gaben weitere Impulse für die GC-MS. So wurden die Ergebnisse einer Evaluierung der „Stir Bar Sorptive Extraction“ für GC-gängige prioritäre Stoffe von *Dr. Oliver Lerch* (Gerstel) diskutiert. Die Möglichkeiten der GC-QToF nach Atmosphärendruckionisation waren Thema des Beitrags von *Dr. Gordon van 't Slot* (Bruker). Und am Beispiel der iodierten Desinfektionsnebenprodukte machte *Dr. Martin Kaltenecker* (Thermo) die Vorteile der hochauflösenden GC-MS-Analytik deutlich.

Beim Thema Desinfektionsnebenprodukte bleibend konnte *Prof. Dr. Thomas Ternes* (Bundesanstalt für Gewässerkunde) inhaltlich zur Vortragsreihe Trinkwasser überleiten. Im Zentrum seines Vortrags standen die Transformationsprodukte des Röntgenkontrastmittels Iopamidol, die bei der Chlorung gebildet werden.

In einem zum Nachdenken aufrufenden Vortrag nahm sich *Prof. Dr. Jan Andersson* (Westfälische Wilhelms-Universität Münster) der vergangenen 40 Jahre PAK-Forschung an. Er stellte die Auswahl der bisher untersuchten 16 EPA-PAK in Frage und warb für die Aufnahme anderer Vertreter mit höherer Relevanz.

Dr. Oliver Happel (DVGW-Technologiezentrum Wasser) stellte die aktuellen Arbeiten zur Analytik von sechswertigem Chrom in Roh- und Trinkwässern mittels Ionenchromatographie (IC) gekoppelt mit der Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma (ICP-MS) vor. *Thomas Kolb* (Deutsche Metrohm) konnte die Analytik von Chromat in seinem Kurzvortrag zur Ionenchromatographie toxischer Anionen ergänzen.

Begleit- und Rahmenprogramm

An beiden Tagen war Zeit vorgesehen, die Fachausstellung unter Beteiligung von 30 Firmen zu neuesten Analysensystemen und Laborprodukten zu besuchen und direkt mit Vertretern der Gerätehersteller oder Vertriebspartnern ins Gespräch zu kommen. Darüber hinaus wurden neue Erkenntnisse zur Wasser- und Umweltanalytik in Form von 21 Posterbeiträgen dargestellt. Im Rahmen einer Laborbesichtigung konnte außerdem der fachliche Austausch zu sechs ausgewählten analytischen Schwerpunktthemen unterstützt werden.

Zum Rahmenprogramm gehörten das Get-together am Sonntagabend mit einer Event-Führung durch das Wasserwerk Langenau und der Montagabend mit Buffet und Cocktailbar. An beiden Abenden nutzten die Teilnehmer die Gelegenheit, das Umfeld im Wasserwerk näher kennen zu lernen und sich mit den Kolleginnen und Kollegen in entspannter Atmosphäre abseits des Fachprogramms zu unterhalten.

Wieviel Spurenanalytik brauchen wir?

Für einen Wasserversorger lässt sich das Leitthema etwas präziser folgendermaßen formulieren: Was ist für eine sichere Trinkwasserversorgung analytisch notwendig und wo besteht im Hinblick auf den Nutzen neuer Analysetechniken noch Entwicklungsbedarf? Wohin muss die Reise der Spurenstoffanalytik gehen, um ein zuverlässiges Erkennen von Stoffen und daraus abgeleitet ein zielgerichtetes Handeln zu ermöglichen?

Zur Beantwortung dieser Fragestellung kann in unterschiedlicher Richtung diskutiert werden. Zum einen kann auf die Quantität abgehoben werden, sprich die Festlegung von Umfang und Häufigkeit der notwendigen Untersuchungen. Diesbezüglich sind in der Trinkwasserverordnung und von den zuständigen Überwachungsbehörden gewisse Mindestanforderungen festgelegt. Darüber hinaus ist es Sache eines jeden Wasserversorgungsunternehmens, für sich selbst den ausreichenden Untersuchungsbedarf auszuloten. Bezüglich Spurenstoffe kann hier orientierend auf die Grundwasserverordnung sowie die Wasserrahmenrichtlinie und die Liste prioritärer Stoffe hingewiesen werden.

Klar ist, dass aufgrund der Vielzahl an organischen Spurenstoffen und deren möglichen Transformationsprodukte nicht alle neu identifizierten Stoffe in die Routineüberwachung aufgenommen werden können. Vielmehr erscheint es sinnvoll, die im konkreten Anwendungsfall wichtigsten Indikatoren für drohende anthropogene Beeinflussungen (z. B. aus Kläranlagen) in die Untersuchung miteinzubeziehen. Auf dieser Basis sollte sich mit vertretbarem Aufwand ein ausreichend detailliertes Bild der Roh- und Trinkwasserqualität ergeben.

Weiterhin kann bei oben genannter Fragestellung die notwendige Untersuchungsmethodik diskutiert werden. Neben der bisher etablierten Target-Analytik, bei der ja nur die Substanzen gefunden werden, nach denen gezielt gesucht wird, zeichnet sich langsam auch die Non-Target-Analytik als Überwachungsmöglichkeit ab. Zahlreiche Arbeitsgruppen haben sich in den letzten Jahren dieser neuen Analysestrategie gewidmet. Es hat sich gezeigt, dass so bisher nicht berücksichtigte Stoffe aufgespürt werden konnten. Außerdem können Prozessabläufe damit umfassender betrachtet werden. Allerdings muss man sich bei all dem auch den derzeitigen Grenzen des Non-Target-Screenings bewusst sein. Naturgemäß ist bei der Summe an Messdaten ein gewisser Anteil falsch positiver und falsch negativer Ergebnisse möglich, der durch neue Peakerkennungs- und Datenauswertestrategien so weit wie möglich minimiert werden muss. Zuverlässigkeit (Wiederholbarkeit) und Robustheit der Messtechnik muss ebenfalls weiter verbessert werden, so dass die Messung ein- und derselben Probe unabhängig von Geräten und Analytiker wirklich stets das identische Ergebnis liefert. Zu berücksichtigen ist auch der zum Teil erhebliche Aufwand der Methode, um an die interessierenden Substanzen und deren Identität sowie die Konzentrationen zu kommen. All diese Punkte stellen noch wesentliche Herausforderungen bei der Weiterentwicklung der Non-Target-Analytik dar und sind Gegenstand einiger Arbeiten der wasserchemischen Gesellschaft oder des DVGW bzw. mancher Forschungsvorhaben.

In dem BMBF-geförderten Projekt FOR-IDENT etwa werden die derzeit verfügbaren Non-Target-Technologien vergleichend betrachtet und die Auswertestrategien einer Standardisierung unterzogen.

Zur Bewertung der detektierten Substanzen genauso wie von Aufbereitungsprozessen kann die wirkungsbezogene Analytik mithelfen. Anhand des Nachweises von Wirkungen einzelner Spurenstoffe oder Stofffraktionen ermöglicht sie eine Priorisierung der Identifikationsnotwendigkeit unbekannter Substanzen und gleichzeitig eine erste orientierende Risikoeinschätzung. Dies ist von großer Bedeutung, da der Wasserversorger immer häufiger mit der Notwendigkeit einer schnellen Bewertung „neuer“ Spurenstoffe konfrontiert ist. Leider ist er dabei oft allein gelassen; mit einer Ad-hoc-Bewertung durch die zuständigen Behörden kann in der Regel nicht gerechnet werden.

Zum dritten kann das Leitthema im Hinblick auf notwendige Bestimmungsgrenzen diskutiert werden. Damit verbunden ist auch die Frage, wie der Verbraucher am besten zu informieren ist. So mag es intern durchaus sinnvoll sein, möglichst niedrige Bestimmungsgrenzen zu erreichen und anzuwenden, um frühzeitig Beeinflussungen der Roh- oder Trinkwasserqualität erkennen zu können. Andererseits bringt jeder positive Nachweis eines Stoffs im Wasser den Bedarf der Erklärung und Bewertung mit sich. In der öffentlichen Diskussion sind die gemessenen Spurenkonzentrationen meist nur schwer sachgerecht zu vermitteln, oder sie werden gar nicht berücksichtigt – der Nachweis eines Stoffs an sich wird dann bereits negativ bewertet. Nicht zuletzt deshalb erscheint es sinnvoll, eine gewisse Berichtsgrenze festzulegen. Für organische Spurenstoffe ohne weitere besondere Bewertung oder Regulierung wird hier eine Berichtsgrenze von 10 ng/L vorgeschlagen. Liegen die gemessenen Konzentrationen unterhalb dieser Berichtsgrenze, so kann die Einhaltung von Grenz-, Leit- oder Orientierungswerten sicher kontrolliert werden. Lediglich für spezielle Substanzgruppen wie die Estrogene können niedrigere Berichtsgrenzen sinnvoll sein.

Konzentrationen unterhalb der Berichtsgrenze können zwar gemessen und für interne Auswertungen genutzt werden, sollten jedoch nicht vorschnell veröffentlicht werden. Generell ist abzuwägen, ob es sinnvoll ist, alle Messdaten beispielsweise gleich ins Internet zu stellen. Denn damit kann man die Chance einer Erklärung der zum Teil komplexen Sachverhalte nicht mehr steuern. Gleichwohl ist Transparenz als vertrauensbildende Maßnahme unabdingbar. Und ein wichtiger Baustein hierzu ist die moderne Trinkwasseranalytik mit ihren leistungs- und aussagekräftigen Disziplinen (Non-Target-Screening, Wirkungsbezogene Analytik).

Ausblick

Bedanken möchten wir uns für Ihre zahlreichen Rückmeldungen und das überaus positive Feedback. Wir werden uns von Ihren Anregungen zu Vortragsthemen inspirieren lassen und sind zuversichtlich, auch für das nächste LWF ein interessantes und abwechslungsreiches Programm gestalten zu können. Das 12. Langenauer Wasserforum wird am 13. und 14. November 2017 stattfinden.

AUTOREN

Dr. Wolfram Seitz und Dr. Rudi Winzenbacher
Zweckverband Landeswasserversorgung
Betriebs- und Forschungslabor
Am Spitzigen Berg 1
89129 Langenau
www.lw-online.de

