



**Kanton Zürich
Baudirektion
AWEL**



Stoffspezifische Messkampagnen & Screenings

Der blinde Fleck oder die Fragen von morgen

Sabine Anliker

Gewässerschutzlabor

Fachtagung Gewässerschutzlabor

19. Januar 2023

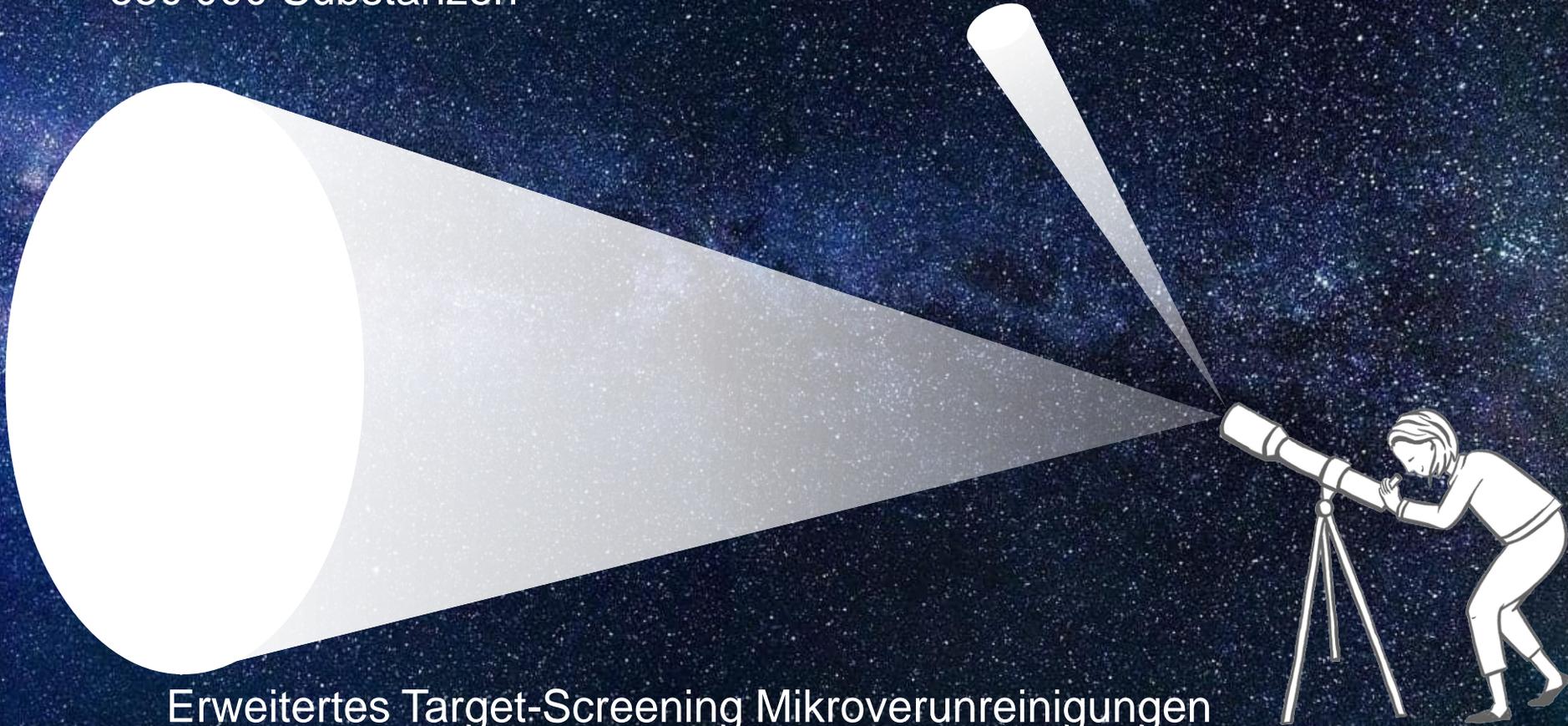


Chemisches Universum

> 350'000 Substanzen

Stoffspezifische Analyse: PFAS

Erweitertes Target-Screening Mikroverunreinigungen

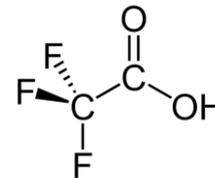
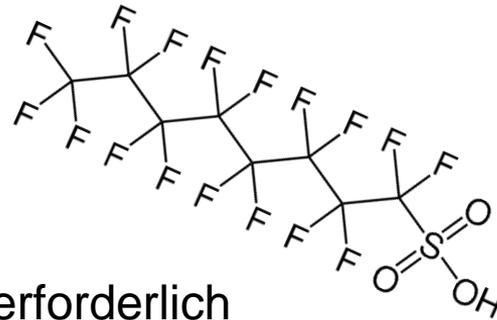


Per- und polyfluorierte Alkylverbindungen (PFAS)

- > 4700 Substanzen
- Schwer abbaubar «forever chemicals»
- Besonders toxische Vertreter verboten (PFOS & PFOA)
- Weltweit in allen Umweltkompartimenten vorhanden

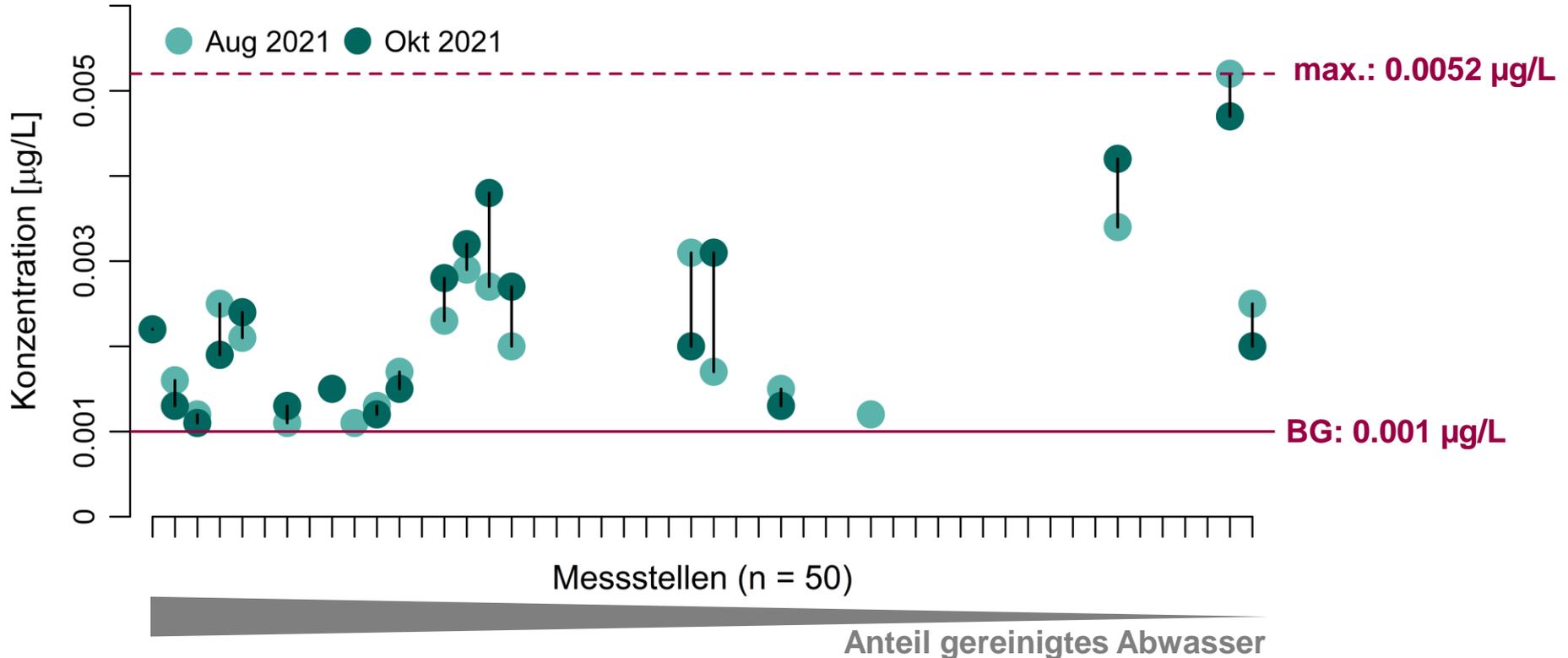
Herausforderung Analytik

- Hintergrundbelastung
- Extrem tiefe Nachweisgrenzen erforderlich
- Sorption (langkettige)
- Mobilität (ultra-kurzkettige)



Perfluoroktansulfonsäure (PFOS)

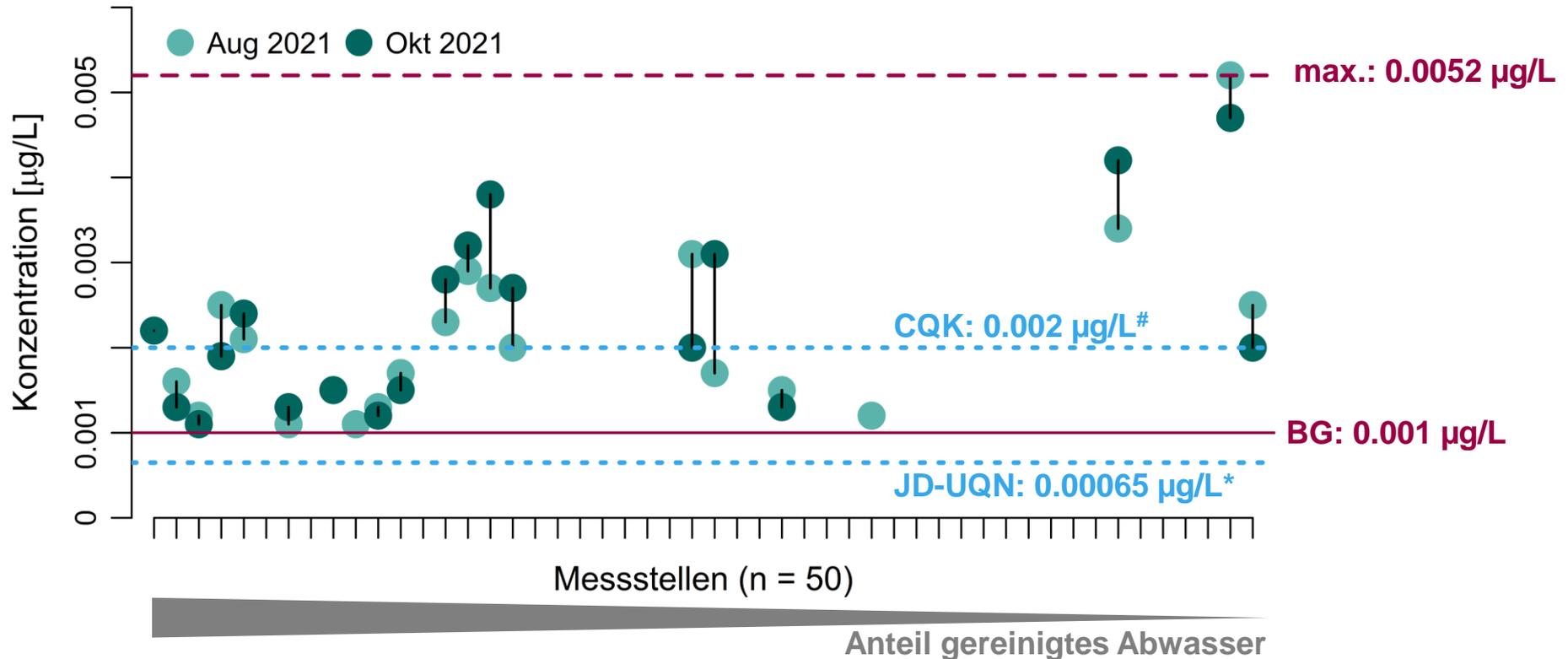
An 21 Messstellen (36 %) über der Bestimmungsgrenze (BG) nachgewiesen



Perfluoroktansulfonsäure (PFOS)

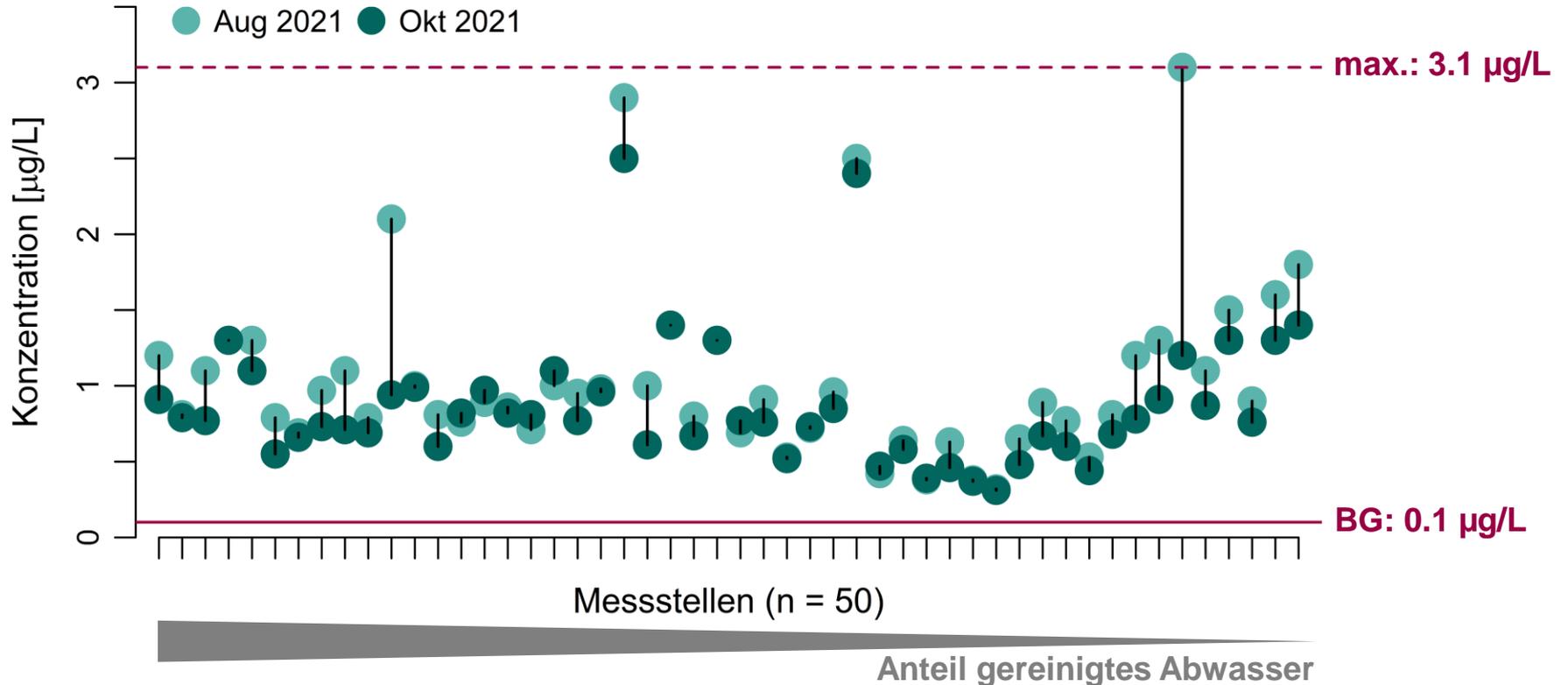
Chronisches Qualitätskriterium (Ökotoxzentrum CH)

* Jahresdurchschnitt-Umweltqualitätsnorm (Richtlinie 2013/39/EU)



Trifluoressigsäure (TFA)

An allen Messstellen in konstant hohen Konzentrationen nachgewiesen

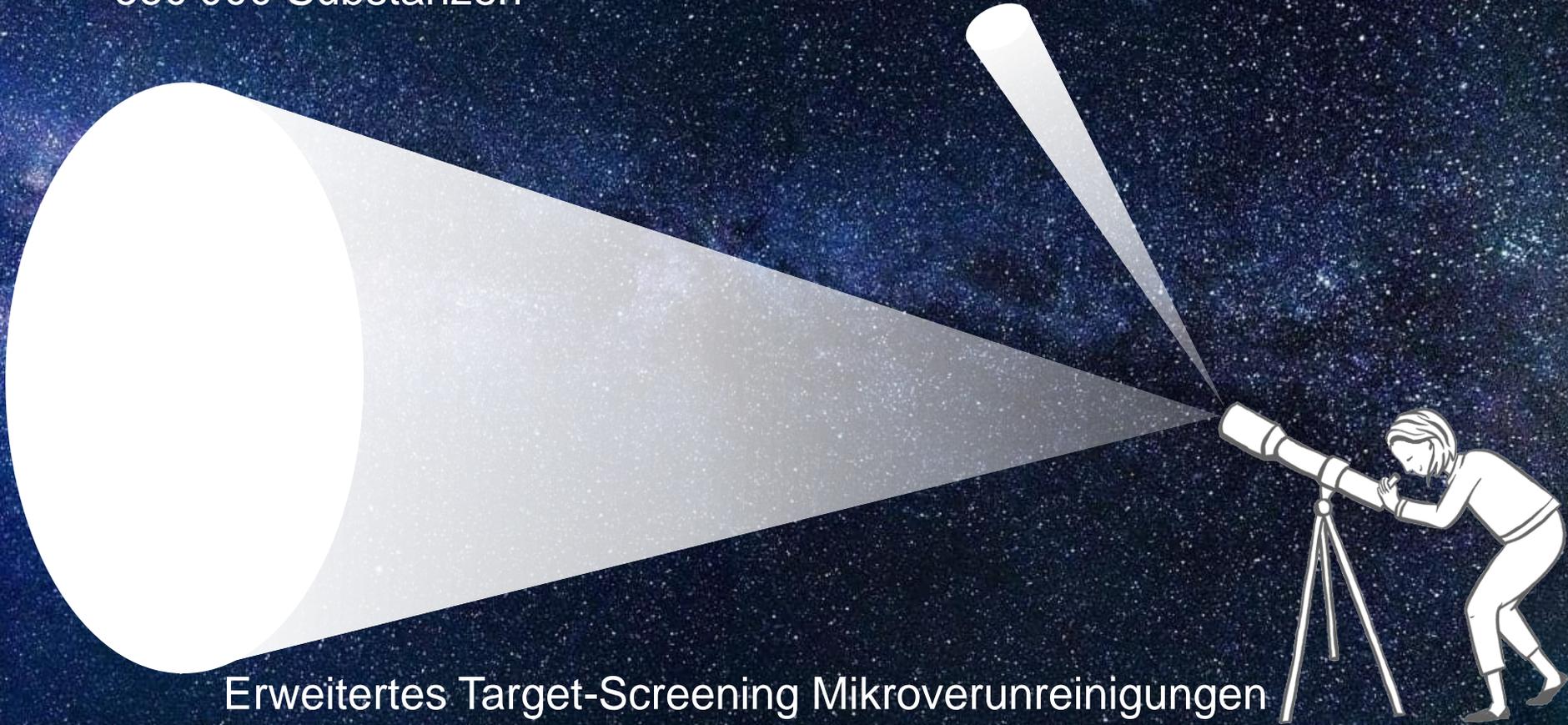


Chemisches Universum

> 350'000 Substanzen

Stoffspezifische Analyse: PFAS

Erweitertes Target-Screening Mikroverunreinigungen

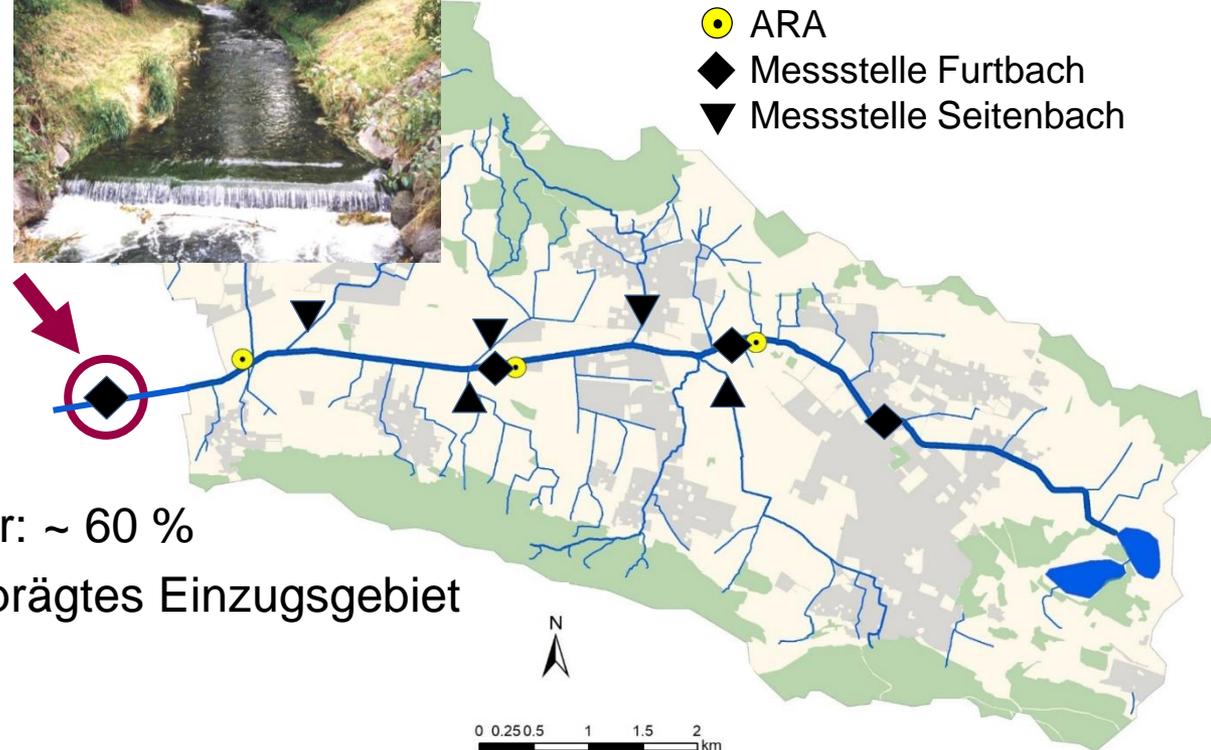


Erweitertes Target-Screening am stärksten belasteten Bach im Kt. ZH

Furtbach bei Würenlos
April – Sept 2019
40 Mischprobenproben

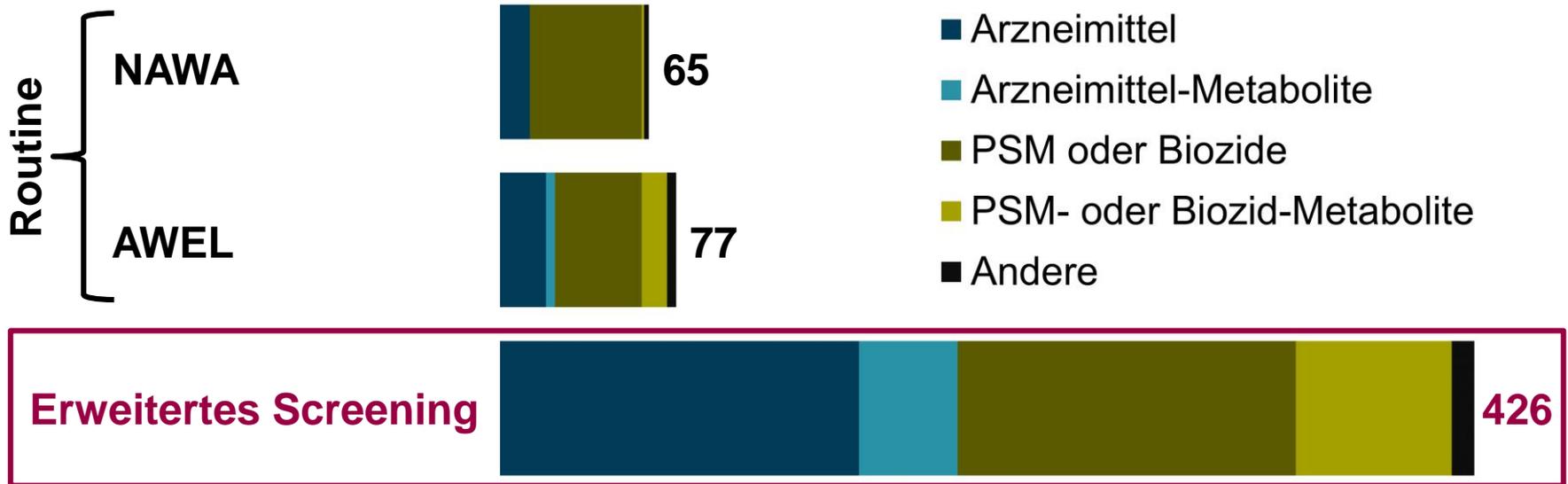


Mittlerer Abfluss: $0.7 \text{ m}^3/\text{s}$
Anteil gereinigtes Abwasser: ~ 60 %
Stark landwirtschaftlich geprägtes Einzugsgebiet



Erweitertes Target-Screening 568 Substanzen quantifizieren (+ 426)

Erfasst das Routine-Programm die **stoffliche Belastung** und das **Umweltrisiko**?

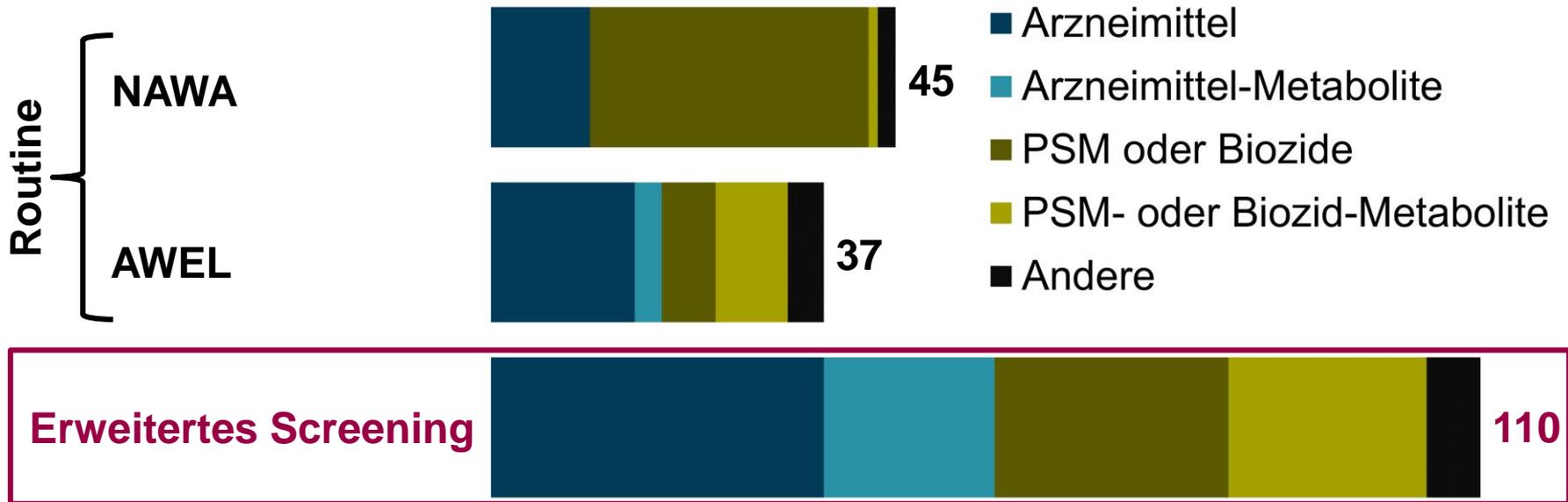


Erweitertes Target-Screening

Anzahl gefundene Substanzen: 192 (+ 110)



Stoffvielfalt von Routine-Programm unvollständig erfasst



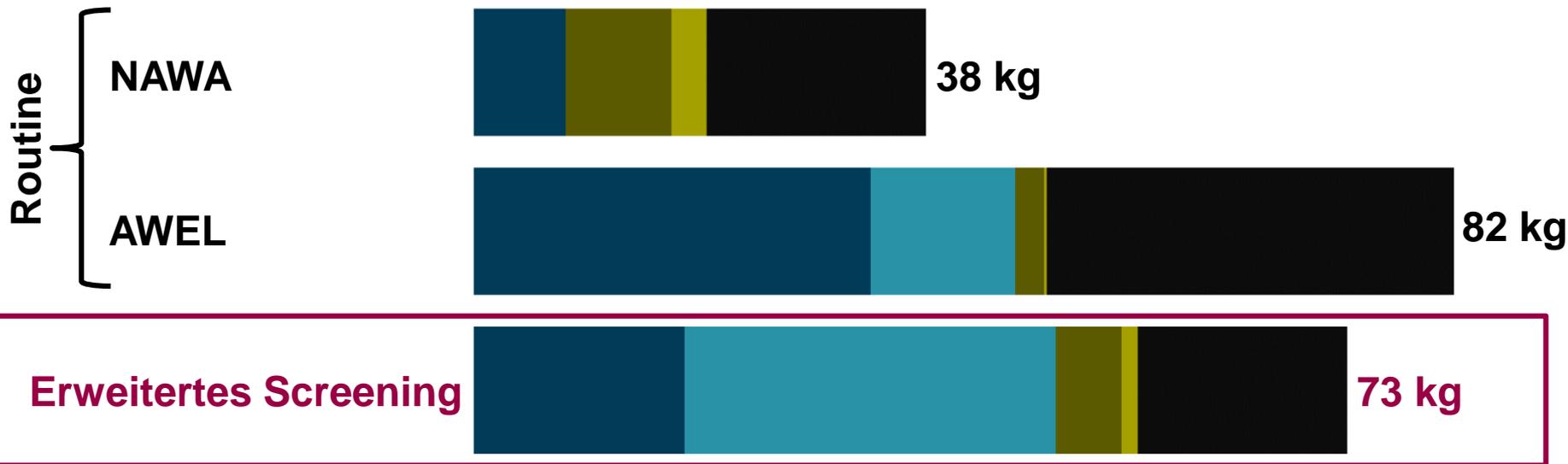
Erweitertes Target-Screening

Fracht in 6 Monaten: ~193 kg (+ 73 kg)



Routine-Programm unterschätzt **Fracht**

v.a. der Arzneimittel(-Metabolite) & Industriechemikalien

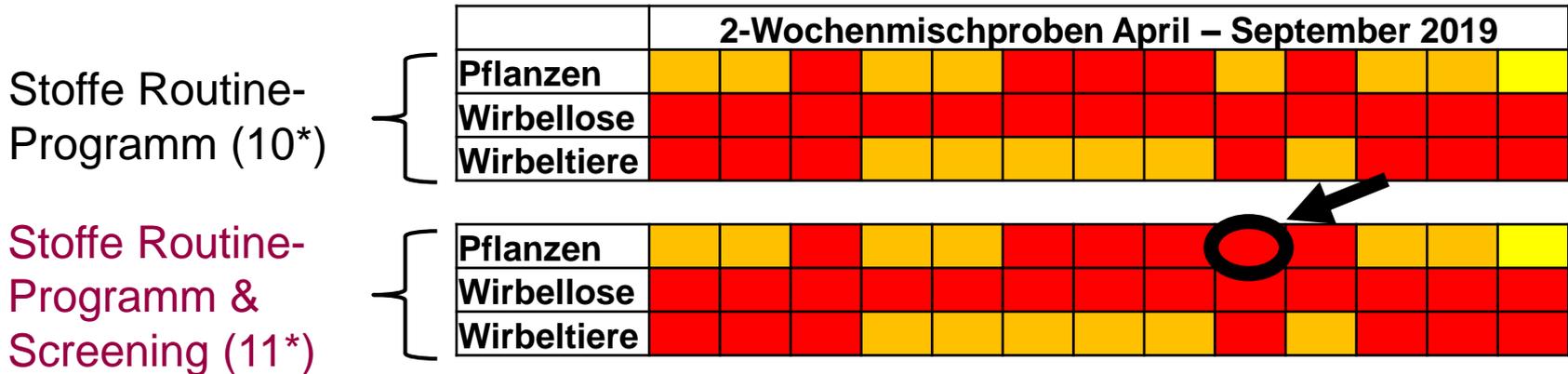


Erweitertes Target-Screening

Beurteilung Gewässerqualität: (nahezu) unverändert

Das Routine-Messprogramm erfasst das **bekannte Umweltrisiko**

Chronische Mischungsrisikoquotienten



* Anzahl für die Beurteilung relevante Stoffe, d.h. mit Überschreitung des chronisches Qualitätskriterium

Erweitertes Target-Screening

Viele Substanzen in Beurteilung nicht berücksichtigt

106 (55 %) der detektierten Substanzen **ohne Qualitätskriterium**,
v.a. Arzneimittel und Metabolite



Erweitertes Target-Screening: Fazit & Ausblick

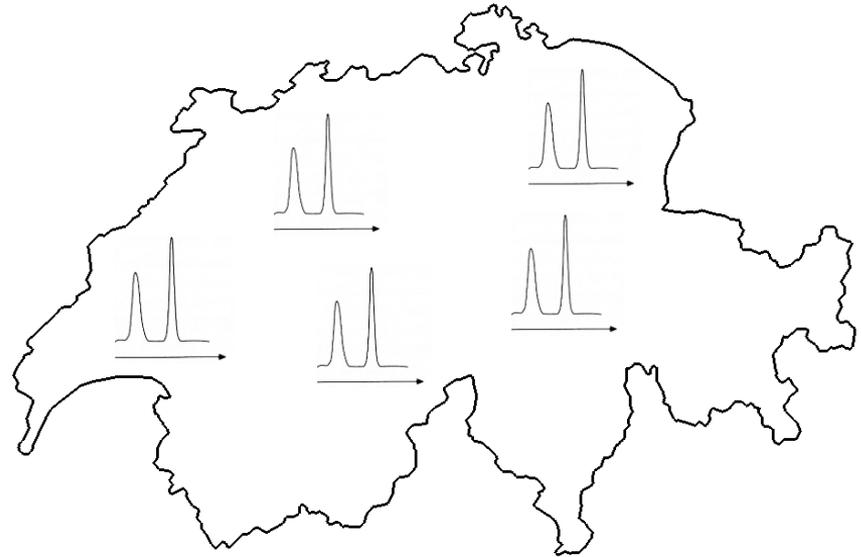
- Vertiefte Erkenntnisse zu stofflicher Belastung
- Wertvoll zur Justierung des Routine-Programms
- Enorm zeitintensiv!

→ **Automatisierung**



Projekt NTSuisse: Erweitertes Target-Screening automatisieren

- Plattform zur automatisierten Prozessierung von massenspektrometrischen Daten
- Daten gemeinsam nutzen und Auswertungen auf nationaler Ebene ermöglichen
- Lab'Eaux* Labors und der Eawag



* Lab'Eaux: Kompetenznetzwerk der kantonalen Umwelt-, Gewässerschutz- und Trinkwasserversorger-Laboratorien

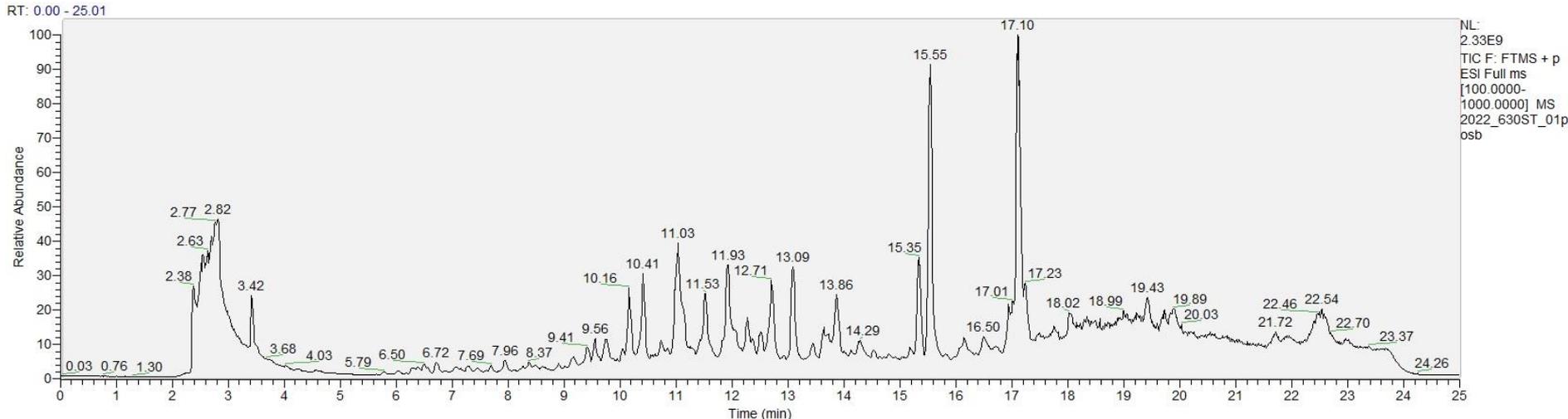
Nontarget Screening: Umweltbeobachtung der Zukunft



Nontarget-Screening: Umweltbeobachtung der Zukunft

Hochauflösende Massenspektrometrie

- detektiert «alles», keine Substanz-Vorauswahl nötig
- Hinweise zur chemischen Zusammensetzung und Struktur unbekannter Substanzen («nontargets»)
- Retrospektive Analysen



Nontarget-Screening: Umweltbeobachtung der Zukunft

Herausforderung: Priorisierung und Identifikation

MS2Tox Machine Learning Tool for Predicting the Ecotoxicity of Unidentified Chemicals in Water by Nontarget LC-HRMS

Pilleriin Peets, Wei-Chieh Wang, Matthew MacLeod, Magnus Breitholtz, Jonathan W. Martin, and Anneli Kruve*

🔗 Cite this: *Environ. Sci. Technol.* 2022, 56, 22, 15508–15517

Publication Date: October 21, 2022

<https://doi.org/10.1021/acs.est.2c02536>

Copyright © 2022 The Authors. Published by American Chemical Society

[RIGHTS & PERMISSIONS](#)  

Article Views | Altmetric | Citations

2191

19

-

[LEARN ABOUT THESE METRICS](#)

Share | Add to | Export

SIRIUS 4: a rapid tool for turning tandem mass spectra into metabolite structure information

[Kai Dührkop](#), [Markus Fleischauer](#), [Marcus Ludwig](#), [Alexander A. Aksenov](#), [Alexey V. Melnik](#), [Marvin Meusel](#), [Pieter C. Dorrestein](#), [Juho Rousu](#) & [Sebastian Böcker](#) ✉

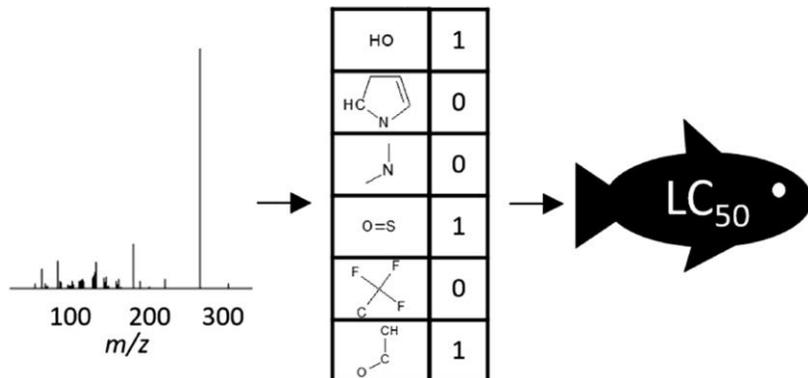
Nature Methods 16, 299–302 (2019) | [Cite this article](#)

16k Accesses | 406 Citations | 37 Altmetric | [Metrics](#)

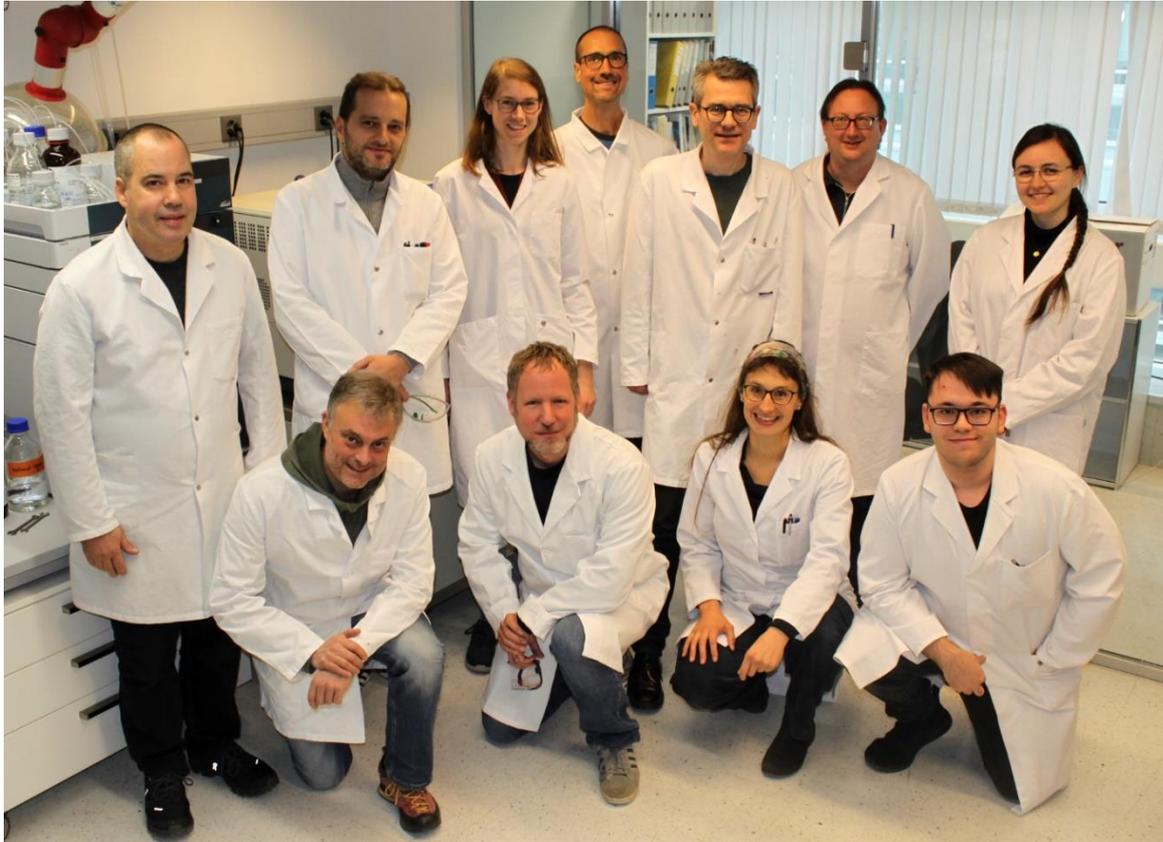


Abstract

Mass spectrometry is a predominant experimental technique in metabolomics and related fields, but metabolite structural elucidation remains highly challenging. We report SIRIUS 4 (<https://bio.informatik.uni-jena.de/sirius/>), which provides a fast computational approach for molecular structure identification. SIRIUS 4 integrates CSI:FingerID for searching in molecular structure databases. Using SIRIUS 4, we achieved identification rates of more than 70% on challenging metabolomics datasets.



Heute die Daten von morgen erheben



Herzlichen Dank!