



Spuren in der Vergangenheit lesen

28. August 2018 | Irene Bättig
Themen: Schadstoffe

Werden Wasserproben mit einem Massenspektrometer analysiert, zeigen sich auch Peaks von Verbindungen, die noch gar nicht bekannt sind oder nach denen gar nicht gesucht wurde. Rücken diese Moleküle zu einem späteren Zeitpunkt in den Fokus von Umweltforschenden, können sie rückwirkend in gespeicherten Messergebnissen nachgewiesen werden.

Gespeicherte Messergebnisse aus Massenspektrometern sind eine Fundgrube. Mit „Retrospective Suspect Screening“ – der rückblickenden Suche nach Verdächtigen – wollen acht Referenzlabors in Europa und Australien, unter ihnen auch die Eawag, diese nun nutzen, um ein weltweites Frühwarn-Netzwerk zu etablieren. So können innert kurzer Zeit Daten zur Verfügung stehen, wie verbreitet neu auftretende Problemstoffe in der Umwelt vorkommen.

Die Moleküle zuverlässig aus bestehenden Massenspektren unterschiedlicher Herkunft zu identifizieren, bietet aber einige Herausforderungen. Entscheidend ist beispielsweise, dass die Daten von hochauflösenden Massenspektrometern kombiniert mit einer Chromatografie stammen und alle Parameter einer Qualitätskontrolle unterzogen wurden. In einem Pilotprojekt haben die Forschenden nun archivierte Massenspektren von Wasserproben aus 14 Ländern und 3 Kontinenten auf neue Verbindungen untersucht und dabei Empfehlungen zur Erhebungen und Analyse der Daten oder zur Qualitätskontrolle erarbeitet. Mit dem Screening wiesen sie weiträumig verschiedene Tenside, Medikamente und in der Industrie verwendete Chemikalien nach und konnten zeigen, dass das Konzept mit unterschiedlichen Datensätzen aus verschiedenen Ländern funktioniert.

Massenspektrometrie

Massenspektrometer sind aus der Umweltanalytik nicht mehr wegzudenken. Dank ihnen lässt sich bestimmen, welche Moleküle in welchen Mengen in einer Probe vorkommen. Die Moleküle werden ionisiert, fragmentiert und nach Masse und Ladung aufgetrennt. Dabei entsteht ein für jede Verbindung spezifisches Muster– das Massenspektrum. Dieses ist für eine Verbindung fast so charakteristisch wie ein Fingerabdruck für einen Menschen. Weil in Umweltproben unzählige Substanzen vorliegen, werden diese vorgängig chromatografisch separiert. So wird die Analyse noch spezifischer.

Publikation

Alygizakis, N. A.; Samanipour, S.; Hollender, J.; Ibáñez, M.; Kaserzon, S.; Kokkali, V.; van Leerdam, J. A.; Mueller, J. F.; Pijnappels, M.; Reid, M. J.; Schymanski, E. L.; Slobodnik, J.; Thomaidis, N. S.; Thomas, K. V. (2018) Exploring the potential of a global emerging contaminant early warning network through the use of retrospective suspect screening with high-resolution mass spectrometry, *Environmental Science and Technology*, 52(9), 5135-5144, [doi:10.1021/acs.est.8b00365](https://doi.org/10.1021/acs.est.8b00365), [Institutional Repository](#)

Kontakt



Juliane Hollender

Senior scientist / Gruppenleiterin

Tel. +41 58 765 5493

juliane.hollender@eawag.ch



Andri Bryner

Medienverantwortlicher

Tel. +41 58 765 5104

andri.bryner@eawag.ch

<https://www.eawag.ch/de/info/portal/aktuelles/newsarchiv/archiv-detail/spuren-in-der-vergangenheit-lesen>