



Mitteilungen der Fachgruppe

Umweltchemie und Ökotoxikologie

Gesellschaft Deutscher Chemiker

- Chemische Belastung von Seitenstrukturen an der Elbe
- Massenspektrometrische in-situ-Analytik
- Planare SPE und Microliter Flow Injektion Analysis - TOFMS
- Kurz vorgestellt:
Lehrgebiet Wasserwesen an der HTW Dresden und Ecosa
- Bericht von der Jahrestagung in Gießen
- Veranstaltungsankündigungen,
Kurznachrichten und Personalialia

4/2014

20. Jahrgang, Dezember 2014 ISSN 1618-3258



Impressum

Mitteilungen der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie

Herausgegeben von der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie der Gesellschaft Deutscher Chemiker
www.gdch.de/umweltchemie

Redaktion:

Prof. Dr. Dr. Klaus Fischer
 Analytische und Ökologische Chemie
 FB VI –Raum- und Umweltwissenschaften–
 Universität Trier
 Campus II, Behringstr. 21, D-54296 Trier
 Tel. und Fax: 0651/ 201-3617
 Sekretariat: 0651/ 201-2243
 E-Mail: fischerk@uni-trier.de

Abkürzung:

Mitt Umweltchem Ökotox

Design/ Technische Umsetzung:

Dr. Matthias Kudra, Universität Leipzig
 E-Mail: kudra@uni-leipzig.de

ISSN: 1618-3258

Das vorliegende Heft der Mitteilungen wurde sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Herausgeber, Autoren und Redakteure für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen sowie für eventuelle Druckfehler keine Haftung.

Titelbild:

Verleihung des Paul-Crutzen-Preises an Thorsten Hüffer durch Prof. Andreas Schäffer im Rahmen der Jahrestagung in Gießen

Originalbeiträge

- 92 **S. Heise:** Untersuchungen zur chemischen Belastung von Seitenstrukturen an der Elbe
- 96 **S. Schulz et al.:** Was kann die moderne massenspektrometrische in-situ-Analytik in der Umwelt- und Lebensmittelforschung leisten?
- 100 **C. Oellig und W. Schwack:** Planare SPE und Microliter Flow Injection Analysis-TOFMS – ein schnelles Pestizid-Screening für Obst und Gemüse

Aus der Fachgruppe

- 104 Bericht über die FG-Jahrestagung in Gießen
- 106 Bericht über die FG-Mitgliederversammlung am 8.09.2014
- 107 Bericht des AK Atmosphärenchemie
- 107 Jahresbericht 2013/14 des Arbeitskreises Umweltmonitoring
- 108 Ausschreibung des Paul-Crutzen-Fachgruppenpreises 2015

Kurz vorgestellt

- 109 Lehrgebiet Wasserwesen in der Fakultät Bauingenieurwesen/Architektur an der Hochschule für Technik und Wirtschaft Dresden
- 111 Ecosa – ecological sediment & soil assessment

Informationen

Veranstaltungsankündigungen

- 113 Contaminated Sediments 2015 – 8.-13.03.2015, Ascona, Schweiz
- 113 3rd Int. Symposium on Green Chemistry, 3.-7.05.2015, La Rochelle, Frankreich
- 114 Wasser 2015 – Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft in der GDCh, 11.-13.05.2015, Schwerin
- 114 Gordon Research Conference: Atmospheric Chemistry, 2.-7.08.2015, Waterville Valley, USA
- 115 Gordon Research Conference: Drinking Water Disinfection By-Products, 9.-14.08.2015, South Hadley, USA
- 115 EAC 2015 - European Aerosol Conference, 6.-11. 09.2015, Mailand
- 116 15. EuCheMS Int. Conference on Chemistry and the Environment, 20.-25.09.2015, Leipzig

Kurznachrichten

- 116 Nanosicherheitsforschung – sind wir auf dem richtigen Weg?
- 117 EFSA Risk Assessment Guidance for Plant Protection Products
- 117 Weltweite integrierte Bewertung systemischer Pestizide
- 118 Geplantes Freihandelsabkommen (TTIP) in der Kritik – negative Konsequenzen für Umweltstandards befürchtet
- 118 EuCheMS drängt auf Maßnahmen gegen den Klimawandel
- 118 Public Consultation on the Ratification by the EU of the Minamata Convention on Mercury
- 119 EU Joint Research Centre (JRC): Chemical pollutant mixtures: how safe are they?
- 119 UBA-Texte 72/2014: Environmental hazard of selected TiO₂ nanomaterials
- 120 EEA-Report: Costs of air pollution from European industrial facilities 2008–2012

Personalia

- 121 Eintritte in die FG 13.08.2014-24.11.2014
- 122 Geburtstage 1. Quartal 2015



Untersuchungen zur chemischen Belastung von Seitenstrukturen an der Elbe

Susanne Heise (susanne.heise@haw-hamburg.de), Hamburg

Zusammenfassung

Mehr als 1000 Seitenstrukturen finden sich in der Talaue der deutschen nicht-tidalen Elbe, die zusammengenommen eine Fläche von 50 km² haben. Die Beprobung von 15 ausgesuchten Seitenstrukturen (Altarme, Buchten und Altwasser) zwischen Fluss-km 340 und 569 im Frühjahr 2013 zeigte eine hohe Belastung der Sedimente mit historisch emittierten organischen und anorganischen Schadstoffen. Obwohl lokale Quellen in einzelnen Fällen nicht auszuschließen sind, weist das relativ ähnliche Kontaminationsmuster der Sedimente auf einen Schwebstoff-gebundenen Eintrag der Schadstoffe bei Hochwasserereignissen hin.

Untersuchungen zur Erosionsstabilität zeigen ein differenziertes Bild auf, nach dem 6 der 15 untersuchten Seitenstrukturen mit Sedimentmächtigkeiten von 20 bis 100 cm bereits bei Strömungsgeschwindigkeiten in erheblichem Maße mobilisiert und ausgetragen werden können, die einem langsam fließenden Gewässer (1,6 km/h) entsprechen. Im Falle einer Überflutung werden angeschlossene Altarme und Altwasser jedoch häufig sehr stark durchströmt, was zu einer umfangreichen Resuspension der Sedimente führen wird.

Ob Seitenstrukturen zwischen den Hochwasserereignissen jedoch als Reservoir kontaminierter, abgelagerter Schwebstoffe anzusehen sind, oder ob bei Überflutungen große Mengen tiefer gelegener, historisch kontaminierter Alt-Sedimente in die Elbe eingetragen werden, bleibt zu klären.

1. Einleitung

Im Bereich der deutschen Binnenelbe liegen mehr als 1000 Seitenstrukturen in der Talaue, die insgesamt eine Fläche von ca. 50 km² einnehmen. Den größten Anteil hieran haben Altwasser (nicht angeschlossen) und Altarme (einseitig angeschlossen), die Teil des früheren Elbverlaufs sind. Je nach ihrer Lage in der Talaue und Wasserstand bzw. Abfluss der Elbe werden sie bei einem Hochwasser einseitig oder beidseitig an die Elbe angeschlossen und können dann mit hoher Geschwindigkeit durchströmt werden.

Schwebstoffe und Sedimente der Elbe sind historisch durch Bergbau und Industrie belastet [1, 2]. Es ist zu erwarten, dass Gewässer, die an das Schwebstoffregime der Elbe ständig oder zeitweise bei hohen Abflüssen angeschlossen waren oder werden, ebenfalls durch Schadstoffe belastet sind. Nur wenige Publikationen (z.B. [3]) haben sich diesbezüglich mit Seitenstrukturen beschäftigt und untersucht, ob und wie viel Material im Hochwasserfall erodiert wird und wie viel Schwebstoff sich bei zurückgehendem Hochwasser wieder absetzt. Anlässlich der Erarbeitung eines Sedimentmanagementplans für die Elbe durch die Internationale Kommission zum Schutz der Elbe (IKSE) wurden im Frühjahr

2013 daher ausgewählte Seitenstrukturen auf ihre Sedimentbelastung, die Erodierbarkeit der Oberflächensedimente und die Sedimentmächtigkeit untersucht.

Diese Studie sollte Aussagen darüber treffen, ob a) ein Schadstoffaustrag aus Seitenstrukturen erfolgen kann und man b) von den erhobenen Charakteristika der Gewässer auf ein mögliches Risiko schließen könnte.

2. Methodik

Auswahl der Probenahmestandorte

Für diese Studie wurden 15 Seitenstrukturen zwischen Fluss-km 340 und 569 ausgewählt, die sich in ihrer Lage und Entfernung zum Fluss und in ihrer Anschlusssituation unterscheiden (eine Bucht, vier Altarme mit Anschluss bei MQ (langjähriger, durchschnittlicher Abflusswert), acht Altwasser mit Anschluss bei 2 MQ, 2 Altwasser mit Anschluss bei 3 MQ) (Tabelle 1).

Nr.	Fluss -km	Naheliegender Ort	Art der Seitenstruktur	Angeschlossen bei	Überströmt bei
1	568	Sassendorf	Bucht	MQ	2MQ
2	568	Sassendorf	Altwasser	2MQ	2MQ
3	551,6	Bleckede	Altwasser	3MQ	3MQ
4	509	Damnatz	Bucht/ Altarm	MQ	2MQ
5	509	Damnatz	Altwasser	2MQ	2MQ
6	509	Damnatz	Altwasser	3MQ	3MQ
7	505,5	Brandleben	Altarm	MQ	2MQ
8	505,5	Brandleben	Altwasser	2MQ	2MQ
9	497,8	Grippel	Altarm	MQ	3MQ
10	497,8	Grippel	Altwasser	2MQ	3MQ
11	451,8	Losenrade	Altarm	MQ	2MQ
12	451,8	Losenrade	Altwasser	2MQ	2MQ
13	389,5	Fischbeck	Altwasser	2MQ	3MQ
14	389,5	Fischbeck	Altwasser	2MQ	3MQ
15	333,2	Gerwisch	Altwasser	2MQ	HQ ₅

Tab. 1: Beschreibung der für die Untersuchung selektierten Seitenstrukturen (MQ: langjährig durchschnittlicher Abflusswert bzw. ein Vielfaches davon (2 MQ, 3 MQ); HQ₅: Ingenieurtechnisch ermittelter wahrscheinlich erreichter Hochwasserscheiteldurchfluss innerhalb von 5 Jahren).

Da sich die Seitenstrukturen fast ausschließlich im Elbe-Biosphärenreservat befinden, wurden die Beprobungen mit Genehmigung der verantwortlichen Naturschutzbehörden von

einem Schlauchboot mit E-Motor aus in den Monaten April und Mai 2013 durchgeführt. Sedimentmächtigkeiten einer Seitenstruktur wurden an jeweils mehreren Querprofilen mit einer Peilstange erhoben. Je nach Größe und Beschaffenheit der Seitenstruktur wurden weiterhin an einer bis drei Positionen Sedimentkerne zur Ermittlung der Sedimenteigenschaften (Korngröße, Wassergehalt), des Schadstoffgehalts (Durchmesser Sedimentkernstecher 7,5 cm, *HYDROBIOS*) und der Erosionsstabilität (Durchmesser Sedimentkernstecher 10 cm, Spezialanfertigung *Technik Service A. Meyer*) gezogen. Die tiefen Sedimentproben wurden mit Hilfe eines Torfbohrers gewonnen.

Messung der Erosionsstabilität

Für die Messung der Erosionsstabilität vor Ort wurde die Erosionsapparatur „Gust'scher Mikrokosmos“ (Anfertigung: *Technik Service A. Meyer*) genutzt, bei der aus zwei sich überlagernden Strömungsregimen eine homogene Schubspannungsgeschwindigkeit über der Sedimentoberfläche erzielt wird [4]. Während diese Schubspannungsgeschwindigkeit während der Messung schrittweise erhöht wird, wird die Resuspendierung der Sedimentoberfläche über einen optischen Backscatter verfolgt (*OptekTrübungssensor Inline*). Die Durchflussmessung erfolgt kontinuierlich über einen Ultraschalldurchflussmesser (*Sonoflow CO.55*, Fa. *Sonotec*).

Durchführung chemischer Analysen

Für die Bestimmung der Korngrößenverteilung und der Schadstoffgehalte wurden die entsprechenden Unterproben in Glasgefäße überführt und ins analytische Labor transportiert. Alle Analysen wurden von der Gesellschaft für Bioanalytik mbH (GBA) in Hamburg durchgeführt. Schadstoffgehalte wurden in den Tiefen 0 bis 10 cm, 10 bis 20 cm und tiefer als 20 cm bestimmt. Die chemische Analyse auf Schwermetalle erfolgte in der <20 µm-Fraktion nach DIN EN ISO 17294-2 (E29) bzw. DIN EN 1483 (E12) (Quecksilber). Organische Schadstoffe wurden in der kleiner 2 mm Fraktion mit GC-MSD (PAKs), nach DIN EN ISO 6468-F1 (HCB), bzw. DIN ISO 10382 (weitere SHKW) bestimmt.

3. Ergebnisse und Diskussion

Erhebung ortskonkreter Sedimentvolumina

In allen beprobten Seitenstrukturen hatten sich erhebliche Mengen an Schwebstoffen abgelagert. Häfen, Altwasser und Altarme zeigten mittlere Sedimentmächtigkeiten von 20 bis mehr als 150 cm, wobei die Dicke der Sedimentauflage innerhalb der Seitenstrukturen stark variierte. Durchgehend geringe Sedimentmächtigkeiten wurden in keinem Fall verzeichnet. Wie mobil die Sedimente sind, ob sie also mit ansteigender Strömungsgeschwindigkeit resuspendiert werden würden, sollte die Messung mit der Erosionsapparatur klären.

Erodierbarkeit der Sedimente

Nur ein Kern aus einem Altwasser bei Damnatz war leicht erodierbar mit einem u^*_{crit} von weniger als 1 cm/s. Mittlere kritische Schubspannungsgeschwindigkeiten zwischen 1 und

2 cm/s, wie sie auch von Bohling[5] und von Humann[6] mit einem vergleichbaren Gerät für Brackwassersedimente bestimmt wurden, wurden in dieser Studie sowohl für Altarme als auch für Altwasser gemessen. Die Schwellenwerte innerhalb einer Seitenstruktur waren dabei häufig ähnlich: Im Altarm Grippel schwankten die u^*_{crit} zwischen 1,17 und 1,51 cm/s ($n=3$) (siehe Abbildung 1), während sie im Altwasser bei Sassendorf ($n=3$) und im Altarm bei Losenrade ($n=2$) immer oberhalb von 2 cm/s lagen. Eine Vorhersage der Erosionsstabilität auf der Basis der Korngrößenverteilung war nicht möglich. Ein Bezug zur Lage der Seitenstrukturen in der Talauke konnte ebenfalls nicht abgeleitet werden.

Inwiefern die erzeugten Schubspannungsgeschwindigkeiten tatsächlich in den Seitenstrukturen der Elbe auftreten können, kann aufgrund fehlender Messungen unter realen Bedingungen nur abgeschätzt werden. In fließenden Gewässern beträgt das Verhältnis der mittleren Strömungsgeschwindigkeit ein bis zwei Meter über dem Boden zur Schubspannungsgeschwindigkeit ca. 19:1 [7]. Damit würde ein hier maximal angelegtes u^* von 2,4 cm/s bei einer Fließgeschwindigkeit von ca. 1,65 km/h auftreten. Dies entspricht ungefähr der Fließgeschwindigkeit der Elbe während eines Niedrigwassers, würde also im Falle der Durchströmung einer Seitenstruktur noch deutlich überstiegen werden. Berücksichtigt man weiterhin die gemessenen Sedimentmächtigkeiten von mehr als einem Meter, dann liegt in den Seitenstrukturen teilweise ein erhebliches, unter Hochwasserbedingungen remobilisierbares Sedimentvolumen vor. Inwiefern dies zu einem Risiko für die Elbe werden kann, hängt jedoch primär von der Sedimentbelastung ab.

Sedimentbelastung

Die chemischen Analysen zeigten, dass alle Seitenstruktur-sedimente in einem erheblichen Maße mit verschiedenen Schadstoffen belastet waren. Geringere Belastungen (geringere Anzahl an Schadstoffen, die die oberen Schwellenwerte überschritten) wurden für Bleckede und einzelne Probenahmestationen in den Seitenstrukturen bei Sassendorf, Brandleben, Grippel und Damnatz verzeichnet. In den meisten Fällen wurden jedoch die oberen Schwellenwerte der IKSE-Klassifizierung der Sedimentqualität [8] um ein erhebliches Maß überschritten. In Abbildung 2 werden in verschiedenen Publikationen ermittelte Hintergrundkonzentrationen („BG“ – background) für toxische Metalle und Arsen [3, 9] dem oberen Schwellenwert der IKSE gegenübergestellt. Das Ausmaß der Überschreitungen des jeweiligen oberen Schwellenwertes in allen gemessenen Sedimentproben ist dargestellt. Insbesondere Cadmium, Quecksilber und Zink lagen teilweise weit über den oberen Schwellenwerten der IKSE (2013 gemessene Höchstwerte Cd: 39 mg/kg; Hg: 52 mg/kg; Zn: 3810 mg/kg). In einigen Proben lagen auch PCB in hohen Konzentrationen vor (Höchstwert Summe PCB: 292 µg/kg). p,p-DDT kam i.d.R. nur in Sedimenten von mehr als 10 cm Tiefe in signifikanter Konzentration vor. Häufig jedoch war die tiefste Schicht nicht notwendigerweise die am stärksten kontaminierte. Entgegen der Erwartung, dass sich

hohe historische Kontaminationen in den tiefen Schichten der Seitenstrukturen wiederfinden, waren diese trotz eines ähnlichen Feinkornanteils teilweise geringer belastet als die oberen 20 cm. In einigen Seitenstrukturen könnten bereits in

relativ geringen Tiefen bis 100 cm Sedimente vorliegen, die nicht an Resuspensionsprozessen teilnehmen und vor die Zeit der deutlichen Schadstoffemissionen des letzten Jahrhunderts (z.B. 60er Jahre für PCBs [10]) zu datieren sind.

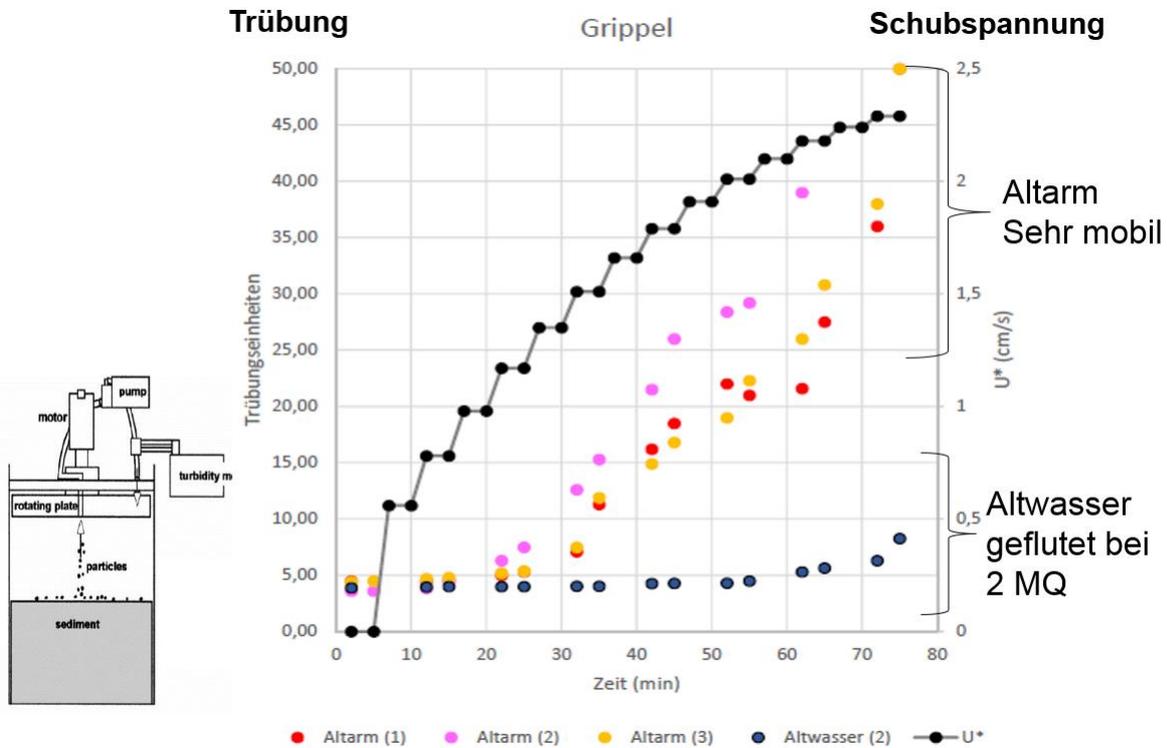


Abb. 1: Vergleich der Erodierungsprofile von drei Sedimentkernen aus einem Altarm und von einem Sedimentkern aus einem Altwasser bei Grippel.

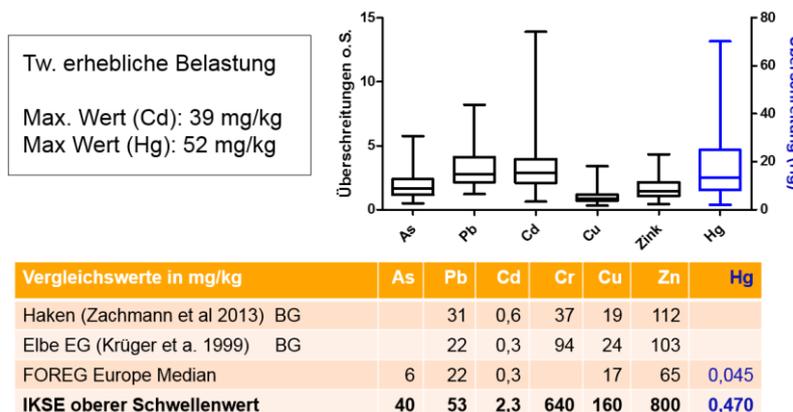


Abb. 2: Überschreitung der in den Seitenstruktursedimenten gemessenen Metall- und Arsen-Konzentrationen im Vergleich zum oberen Schwellenwert der IKSE. Zum Vergleich angegeben sind Abschätzungen von Hintergrundkonzentrationen für die Elbe und für Europäische Sedimente (FOREG).

4. Schlussfolgerung

Die Mächtigkeit der Sedimentschicht und die relativ leichte Erodierbarkeit der Oberfläche könnten auf einen potenziell hohen resuspendierbaren Anteil kontaminierten Materials hinweisen. In dieser Studie konnte nicht ermittelt werden, wie hoch die Sedimentdynamik in den betrachteten Seitenstrukturen war. Es konnten ebenfalls keine „typischen“ Eigen-

schaften von Seitenstrukturen identifiziert werden, die mit erhöhten Belastungen und leichter Erodierbarkeit einhergingen. Der gegenwärtige Wissensstand legt daher nahe, dass Seitenstrukturen individuell betrachtet werden müssen und zurzeit noch keine Verallgemeinerung bzw. Typisierung möglich ist. Zum anderen müssen weitere Daten gesammelt werden, um die Sedimentdynamik besser zu verstehen. Zu

diesem Zweck wurde eine zweite Studie zur Belastung von Seitenstrukturen im Frühjahr 2014 durchgeführt, während der auch einige der Altarme beprobt wurden, die bereits in 2013 Bestandteil der Untersuchung waren. Aufgrund des in der Zwischenzeit erfolgten extremen Hochwassers (Ende Mai/Anfang Juni 2013) erhoffen wir uns aus dem Vergleich der Daten weitere Erkenntnisse, um die dynamischen Prozesse in den Seitenstrukturen besser zu verstehen.

Danksagung

Diese Studie wurde gefördert vom ELSA-Programm der BSU Hamburg. Mein Dank geht weiterhin an alle Mitglieder der Arbeitsgruppe Angewandte Aquatische Ökotoxikologie und an viele Studierende, ohne die die Probennahmen nicht möglich gewesen wären.

Literaturverzeichnis

1. Heise, S., E. Claus, P. Heining, T. Krämer, F. Krüger, R. Schwartz, und U. Förstner, *Studie zur Schadstoffbelastung der Sedimente im Elbeeinzugsgebiet*. 2005, Hamburg: Im Auftrag der Hamburg Port Authority. 181 Seiten.
http://www.tideelbe.de/files/elbestudie_sedimente_i.pdf
2. Heise, S., F. Krüger, U. Förstner, M. Baborowski, R. Götz, und B. Stachel, *Bewertung der Risiken durch Feststoffgebundene Schadstoffe im Elbeeinzugsgebiet*. 2007, Im Auftrag der Flussgebietsgemeinschaft Elbe und Hamburg Port Authority, 349 Seiten.
http://www.tideelbe.de/files/elbestudie_ii_mai_2008_klein.pdf
3. Zachmann, D.W., A. van der Veen, and K. Friese, *Floodplain lakes as an archive for the metal pollution in the River Elbe (Germany) during the 20th century*. Applied Geochemistry, 2013. 35(0): p. 14-27.
4. Gust, G. and V. Müller. *Interfacial hydrodynamics and entrainment functions of currently used erosion devices*. 1994. Proceedings 4th Nearshore and Estuarine Cohesive Sediment Transport Conference, Intercoch '94. Wallingford, England.
5. Bohling, B., *Measurements of threshold values for incipient motion of sediment particles with two different erosion devices*. Journal of Marine Systems, 2009. 75(3-4): p. 330-335.
6. Humann, K., *Der Einfluss des Mikrophytobenthos auf die Sedimentstabilität und die Schwebstoffbildung aus Sedimenten im Elbe-Ästuar*, Dissertationsschrift 1996, Universität Hamburg: Hamburg. p. 168.
7. Porter, E.T., L. P. Sanford, G. Gusts, and F. S. Porter, *Combined water-column mixing and benthic boundary-layer flow in mesocosms: key for realistic benthic-pelagic coupling studies*. Marine Ecology Progress Series, 2004. 271: p. 43-60.
8. IKSE, *Sedimentmanagementkonzept der IKSE. Vorschläge für eine gute Sedimentmanagementpraxis im Elbegebiet zur Erreichung überregionaler Handlungsziele*. 2014, Internationale Kommission zum Schutz der Elbe. Magdeburg. p. 202.
http://www.ikse-mkol.org/fileadmin/download/Abschlussbericht-Sediment/IKSE_Abschlussbericht%20Sediment_web.pdf
9. Krüger, F. and B. Urban, *Heavy metal contaminants on the Elbe River floodplains - chances and limits to prediction of topsoil qualities*. European Geosciences Union General Assembly, Vienna, Austria, 2009. 11: p. 1-2.
10. Zennegg, M., et al., *The historical record of PCB and PCDD/F deposition at Greifensee, a lake of the Swiss plateau, between 1848 and 1999*. Chemosphere, 2007. 67(9): p. 1754-1761.

Korrespondenzadresse

Prof. Dr. Susanne Heise
Fakultät für Life Sciences
Arbeitsgruppe Angewandte Aquatische Toxikologie
Hamburg University of Applied Sciences
(HAW-Hamburg)
Ulmenliet 20
21033 Hamburg
Tel.: 040 42875 6217



Was kann die moderne massenspektrometrische in-situ-Analytik in der Umwelt- und Lebensmittelforschung leisten?

Sabine Schulz (sabine.schulz@anorg.chemie.uni-giessen.de),
Stefanie Gerbig (stefanie.gerbig@anorg.chemie.uni-giessen.de),
Bernhard Spengler (bernhard.spengler@anorg.chemie.uni-giessen.de)

Zusammenfassung

Biologische und umweltrelevante Proben stellen aufgrund ihrer Komplexität hohe Anforderungen an die Analytik. Meist ist eine aufwändige Probenvorbereitung notwendig um die enthaltenen Stoffe umfassend qualitativ und quantitativ zu charakterisieren. Da durch verbesserte instrumentelle Voraussetzungen eine immer größere Zahl von Verbindungen in immer kleineren Konzentrationen analysiert werden kann, reicht in einer umfassenden Qualitätssicherung die Zeit oft nur für stichprobenartige Kontrollen aus. Im Gegensatz dazu bietet die massenspektrometrische in-situ-Analytik verschiedene methodische Ansätze, um Proben ohne aufwendige Vorbereitung und sehr schnell qualitativ und teilweise auch quantitativ zu untersuchen. Anhand einiger Anwendungsbeispiele aus Umwelt- und Lebensmittelforschung soll die Leistungsfähigkeit unterschiedlicher Methoden aufgezeigt werden.

Einleitung

Die Umweltanalytik stellt sich seit jeher herausfordernden Aufgaben, da die verschiedenen Teilbereiche des Ökosystems immer in Verbindung miteinander stehen und wechselwirken. So ist es zum Beispiel nicht ausreichend, einen Schadstoff nur im Boden zu untersuchen, da er durch Regen ins Grundwasser und durch Verwehungen in die Luft gelangen kann. Weiterhin gelangen Schadstoffe durch die Aufnahme in Pflanzen auch in die Nahrungskette und von dort aus wieder zurück in den Boden. Hieraus ergibt sich eine Vielzahl an komplexen Fragestellungen, die wegen der unterschiedlichen Beschaffenheit der Proben eine ausgereifte Analytik erfordern.

In den letzten Jahrzehnten hat sich die Massenspektrometrie (MS) von einer komplizierten Spezialmethode zu einer vielseitigen Routinetechnik entwickelt. Durch die stetige Verbesserung der Massenanalytoren sind heute sehr sensitive und hochgenaue Bestimmungen von Molekülmassen und sichere Identifizierungen von Analyten möglich (Makarov 2000). Gleichzeitig kann eine Vielzahl von Stoffen parallel mit nur einer Messung erfasst werden, was eine immense Zeitersparnis mit sich bringt. Durch diese Eigenschaften hat die Massenspektrometrie einen wichtigen Platz in vielen Anwendungsbereichen wie zum Beispiel der Lebensmittel- und Umweltanalytik eingenommen. Wird diese Technik mit chromatographischen Methoden gekoppelt, kann eine große Zahl von verschiedenen Inhaltsstoffen einer Probe hoch-

empfindlich quantifiziert werden. Hierfür müssen die meisten Proben mehr oder weniger aufwändig vorbereitet werden, was einen Eingriff in deren ursprüngliche Beschaffenheit darstellt und Informationen zur räumlichen Verteilung der unterschiedlichen Moleküle unzugänglich macht.

Durch die Entwicklung von ambienten Ionisierungstechniken, die bei Umgebungsbedingungen und unter Atmosphärendruck angewendet werden können, sind Untersuchungen an der unbehandelten Oberfläche von Proben möglich geworden. Hierbei werden unterschiedliche Prinzipien zur Erzeugung der Ionen genutzt. Ein Beispiel sind Plasmen, die bei Raumtemperatur erzeugt werden (Low Temperature Plasma, LTP, Harper 2008) und deshalb auch zur Untersuchung z.B. der Hautoberfläche angewendet werden können. Andere Verfahren machen sich die Ionisierung mittels Laserstrahlung zunutze, wie zum Beispiel die Laser-Desorptions-Ionisation (LDI, Fenner 1966) oder ermöglichen die direkte Analyse der Probenoberfläche durch geschickte Ausrichtung eines Elektrosprays (Desorption Electrospray Ionization, DESI, Takats 2004). Mittlerweile gibt es über 50 verschiedene Methoden, die genutzt werden können, um einen Analyten zu ionisieren und in die Gasphase zu überführen.

Die beschriebenen Methoden bieten in ihrer Gesamtheit ein breites Anwendungsspektrum für die Analyse von polaren, flüchtigen bis hin zu unpolaren, wenig flüchtigen Analyten. Durch die direkte in-situ-Analyse fallen aufwändige Schritte zur Probenvorbereitung weitestgehend weg und es können sowohl gasförmige als auch flüssige und feste Proben untersucht werden. Zusätzlich kann bei festen Proben auch eine Analyse der räumlichen Verteilung der Komponenten durchgeführt werden. Dies sorgt zum einen für anschauliche Ergebnisse in diesem eher komplexen Themenfeld, zum anderen liefert es aber auch ergänzende Informationen zur reinen Massenbestimmung. Um einen generellen Überblick über die zahlreichen Möglichkeiten dieser in-situ-Techniken zu vermitteln, werden im Folgenden drei Methoden anhand ausgewählter Beispiele aus der Lebensmittel- und Umweltforschung vorgestellt.

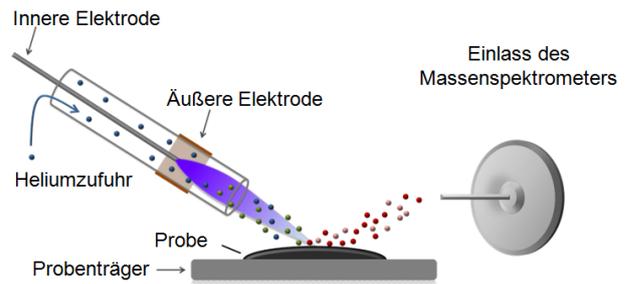
Methodik

Zur Gruppe der plasmabasierten Methoden gehört die Niedrigtemperaturplasma-Ionisation (LTP). Sie ist besonders für die Analytik von flüchtigen bis semiflüchtigen Verbindungen mit niedriger Polarität geeignet. Hierbei wird durch ein elektrisches Feld eine Gasentladung verursacht, welche ein Edelgas (meist Helium oder Argon) in einen plasmaartigen Zustand versetzt. Dieses Plasma wird dann auf die flüssige oder feste Probe gerichtet (Abbildung 1a). Die Ionisation der Analyten erfolgt über Protonen- oder Ladungstransfer, Ionen- oder Elektroneneinfang oder Penning-Ionisierung. Nicht selten handelt es sich bei den Ionisationsprodukten um Radikale. Ein großer Vorteil dieser Methode ist, dass das Plasma bei Raumtemperatur arbeitet und es auch auf empfindlichen Oberflächen, zum Beispiel der Haut, angewendet werden kann.

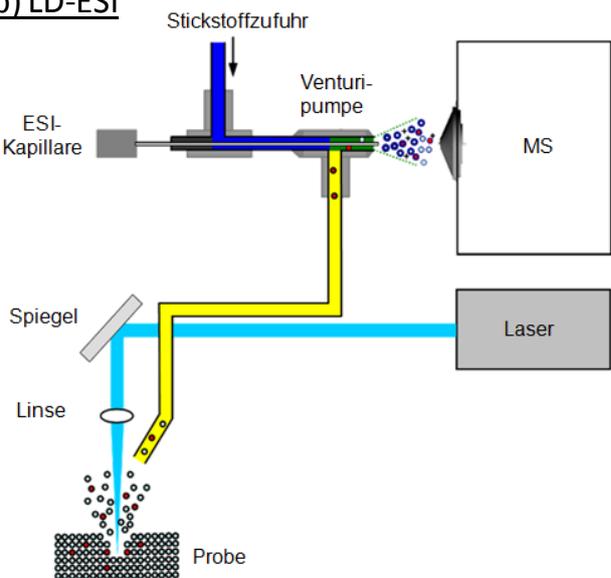
Zu den laserbasierten Methoden gehört die Laser-Desorptions-Elektrospray-Ionisation (LD-ESI, Berisha 2014). Sie erfasst insbesondere polare und semi-polare Analyten. Hierbei sind feste und flüssige Proben zugänglich. Bei der LD-ESI wird die Probe zunächst mit einem gepulsten Laser bestrahlt. Das desorbierte und teilweise ionisierte Material wird anschließend über eine Venturipumpe zum Massenspektrometer transportiert, wo mithilfe eines Elektrosprays ein weiterer Ionisierungsschritt stattfindet, der die Ionenausbeute deutlich erhöht (Abbildung 1b). Die Ionisation der Analyten erfolgt vornehmlich über Protonentransfer oder Ioneneinfang. Der experimentelle Aufbau ermöglicht vor allem eine flexible Beprobung auch großer unebener Proben.

Zur Gruppe der spraybasierten Techniken zählt die Desorptions-Elektrospray-Ionisation (DESI). Analog zur klassischen Elektrospray-Ionisation wird ein Lösungsmittel durch einen Gasstrom vernebelt und durch das Anlegen einer Hochspannung ein Strahl von geladenen Primärtröpfchen erzeugt. Diese Tröpfchen werden jedoch nicht direkt in den Einlass des Massenspektrometers gelenkt, sondern auf die Probenoberfläche gerichtet, um Interaktion zwischen den geladenen Spraytröpfchen und den Analyten auf der Probe zu ermöglichen (Abbildung 1c). Die Ionisation der Analyten erfolgt über Protonentransfer oder Ioneneinfang. Es werden bevorzugt polare Moleküle mit kleinem bis mittlerem Molekulargewicht aus festen sowie flüssigen Proben desorbiert und ionisiert. Über die Wahl des Lösungsmittels kann man die Extraktion bestimmter Analyten optimieren.

a) LTP



b) LD-ESI



c) DESI

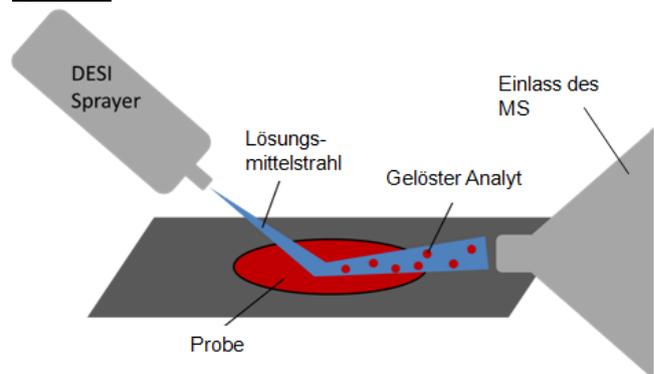


Abb. 1: Schematische Zeichnungen der Ionisierungstechniken LTP (Benassi 2013), LD-ESI (Berisha 2014) und DESI

Ergebnisse

Um die generelle Tauglichkeit der in-situ-Massenspektrometrie für die Umwelt- und Lebensmittelanalytik darzustellen, werden im Folgenden einige Beispiele wie die Analyse von Ölverunreinigungen im Boden, die Untersuchung von Mykotoxinen in Getreide und die räumlich aufgelöste Detektion von Pflanzenschutzmitteln in Blättern vorgestellt.

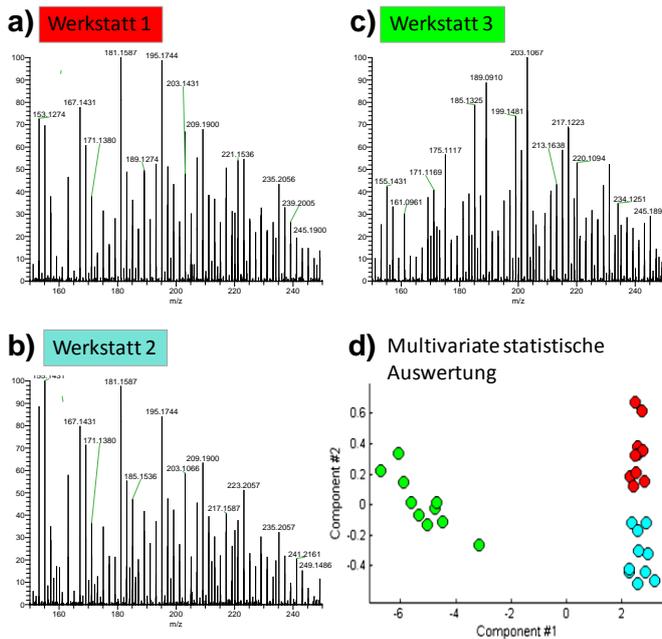


Abb. 2: LTP-Massenspektren von Bodenproben dreier Autowerkstätten in Ghana (a-c), (d) multivariate statistische Auswertung der Ähnlichkeit der Spektrenmuster

Erdöl und Erdölprodukte führen immer wieder zu Verschmutzungen von Gewässern und Böden, und nicht immer sind die Ursprünge der Verschmutzungen offensichtlich. Erdöle und deren Produkte sind Stoffgemische, die bis zu 50.000 verschiedene Kohlenwasserstoffverbindungen beinhalten können, was deren vollständige Analyse sehr schwierig macht. Oftmals werden deshalb lediglich Stoffklassen oder das Spektrenmuster für eine Charakterisierung herangezogen. So lässt sich der Ursprungsort verschiedener Ölproben mit Hilfe der durch die Niedrigtemperaturplasmalysation erhaltenen spezifischen Muster in den Massenspektren mit guter Signifikanz feststellen (Benassi 2013). Die experimentelle Probenvorbereitung beschränkt sich dabei auf das Auftragen der Ölprobe auf einen Objektträger, welcher dann mit dem Plasma in Kontakt gebracht wird. Die hochauflösende hochakurate massenspektrometrische Messung benötigt nur wenige Sekunden. Die Daten erlauben sowohl die Auswertung von charakteristischen Mustern als auch die Bestimmung der chemischen Zusammensetzung einzelne Signale im Massenspektrum anhand der genauen Masse. In ähnlicher Weise lassen sich auch mit Erdöl- und Erdölprodukten verschmutzte Bodenproben charakterisieren. Abbildung 2 zeigt die Spektrenmuster von drei Bodenproben, die in Ghana in Autowerkstätten genommen wurden und deren multivariate statistische Auswertung nach Musterähnlichkeit. Anhand der Muster lassen sich Proben eindeutig unterscheiden und ihrem Ursprungsort zuordnen.

Mykotoxine entstehen in Lebens- und Futtermitteln durch Schimmelbefall und können schon in geringen Mengen gesundheitsschädliche Auswirkungen haben. Routinemäßig werden Mykotoxine über chromatographische Methoden wie GC-MS und HPLC-MS bestimmt. Die Untersuchung von

Weizenkörnern im Hinblick auf Deoxynivalenol mittels LD-ESI MS ist ein Beispiel für die Detektion von Mykotoxinen in Nahrungsmitteln (Abbildung 3). Hierbei wurden ein mit *Fusarium graminearum* infiziertes Weizenkorn sowie eine Kontrollprobe gemessen (Berisha 2014). Das Signal des Mykotoxins Deoxynivalenol konnte direkt nach dem Einschalten des Lasers in den Massenspektren des infizierten Korns beobachtet werden, während die Kontrollmessung unauffällig war. Dieses Beispiel zeigt die schnelle und unkomplizierte Anwendung der in-situ-Massenspektrometrie in der Lebensmittelanalytik. Basierend auf hochakuratere Massenbestimmung kann die Zuordnung der Verbindungen schnell und mit hoher Sicherheit erfolgen.

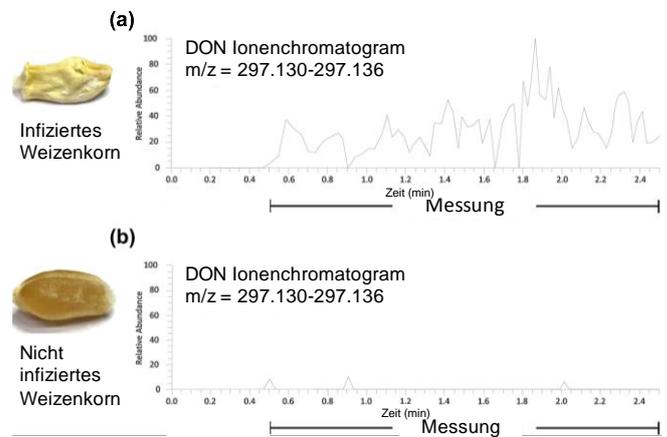


Abb. 3: a) Nachweis von Deoxynivalenol (DON) auf einem pilzbefallenen Weizenkorn mittels LD-ESI MS, b) auf dem Kontrollweizenkorn konnte DON nicht nachgewiesen werden (Berisha 2014).

Zusätzlich zur rein qualitativen Messung auf Probenoberflächen ist die Möglichkeit zur räumlich aufgelösten Analyse bei einigen in-situ-Methoden gegeben. Dies ist sowohl mit laserbasierten Techniken als auch mit spraybasierten Methoden mit einer räumlichen Auflösung $\leq 100 \mu\text{m}$ möglich, wie bereits an vielen Beispielen gezeigt wurde. Speziell der Nachweis von Pflanzenschutzmitteln ist für die Umwelt- und Lebensmittelforschung von hohem Interesse und wird seit langem intensiv betrieben.

Die Desorptions-Elektrospray-Ionisation kann hier durch den Nachweis von Pestiziden einen Beitrag zum besseren Verständnis der Aufnahme dieser Stoffe in die Pflanze leisten. Abbildung 4 zeigt das optische Bild eines Blattquerschnitts, der im Bereich des roten Rahmens mit DESI MS untersucht wurde, nachdem der Pflanze ein Pestizid über die Wurzeln verabreicht worden war. Die Verteilung des Pestizids ist im Abbildung 4c zu erkennen, es scheint innerhalb des Blattes eine ortsunabhängige Verteilung zu existieren. Außer dem gezeigten Pestizid wurden noch verschiedene andere Stoffe detektiert, wie zum Beispiel Aminosäuren (Abbildung 4b) und Zuckerbausteine.

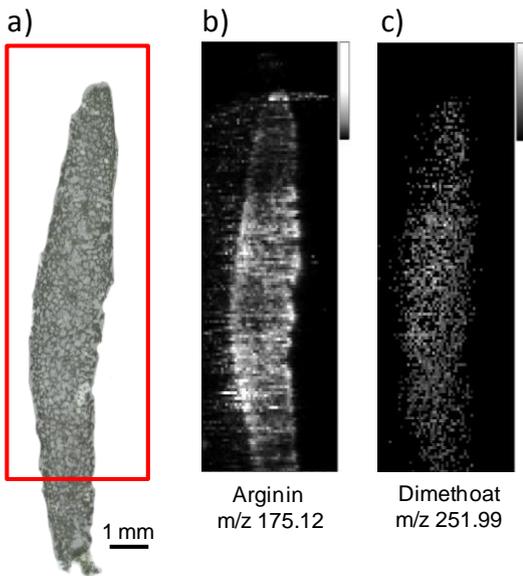


Abb. 4: a) Optisches Bild des Blattquerschnitts und DESI MS Verteilungsbilder einer Aminosäure b) und des Pestizids c).

Fazit

Die Entwicklung vieler verschiedener MS-basierter in-situ-Methoden bietet Zugang zu einer großen Anzahl sehr unterschiedlicher Analyten, gleichzeitig ist keine aufwendige Probenvorbereitung erforderlich. Dies vereinfacht und beschleunigt die Untersuchung und macht den potentiellen Einsatz der in-situ-Methoden für das Probenscreening deutlich. Allerdings sind die vorgestellten Methoden kein genereller Ersatz für die bisherige Analytik, da durch die fehlende Vorbehandlung der Probe insbesondere die Nachweisempfindlichkeit etablierter Verfahren nicht erreicht werden kann. Dennoch bietet die in-situ-Massenspektrometrie viele Vorteile und ist ein vielseitiges Werkzeug für die Untersuchung komplexer biologischer und umweltrelevanter Proben.

Danksagung

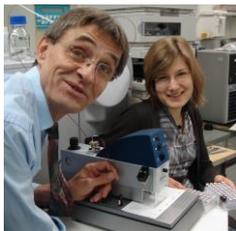
Die Autoren danken dem Landesbetrieb Hessisches Landeslabor für die Bereitstellung der Lebensmittelproben und Bedarfsgegenstände, sowie dem Hessischen Ministerium für Wissenschaft und Kunst (LOEWE Focus Ambiprobe) und der Deutschen Forschungsgemeinschaft (SP314/13-1) für die Finanzierung.

Literatur

- Benassi, M., A. Berisha, W. Romao, E. Babayev, A. Roempp, and B. Spengler. 2013. "Petroleum crude oil analysis using low-temperature plasma mass spectrometry." *Rapid Communications in Mass Spectrometry* 27(7):825-834.
- Berisha, A., S. Dold, S. Guenther, N. Desbenoit, Z. Takats, B. Spengler, and A. Roempp. 2014. "A comprehensive high-resolution mass spectrometry approach for characterization of metabolites by combination of ambient ionization, chromatography and imaging methods." *Rapid Communications in Mass Spectrometry* 28(16):1779-1791.
- Fenner, N.C. and N.R. Daly. 1966. "Laser used for mass analysis." *Review of Scientific Instruments* 37(8):1068-1070.
- Harper, J.D., N.A. Charipar, C.C. Mulligan, X.R. Zhang, R.G. Cooks, and Z. Ouyang. 2008. "Low-temperature plasma probe for ambient desorption ionization." *Analytical Chemistry* 80(23):9097-9104.
- Makarov, A. 2000. "Electrostatic axially harmonic orbital trapping: A high-performance technique of mass analysis." *Analytical Chemistry* 72(6):1156-1162.
- Takats, Z., J.M. Wiseman, B. Gologan, and R.G. Cooks. 2004. "Mass spectrometry sampling under ambient conditions with desorption electrospray ionization." *Science* 306(5695):471-473.

Korrespondenzadresse

Dr. Sabine Schulz
 Institut für anorganische und analytische Chemie
 Justus-Liebig-Universität Gießen
 Schuberstrasse 60, Haus 16
 35392 Gießen
 E-Mail: sabine.schulz@anorg.chemie.uni-giessen.de



Planare SPE und microliter flow injection analysis TOFMS – ein schnelles Pestizid-Screening für Obst und Gemüse

Claudia Oellig (claudia.oellig@uni-hohenheim.de), Hohenheim

Wolfgang Schwack (wolfgang.schwack@uni-hohenheim.de), Hohenheim

Zusammenfassung

Für ein schnelles Pestizid-Screening wurde das vor kurzem entwickelte, hocheffiziente High-Throughput Planar Solid Phase Extraction (HTpSPE) Clean-up mit der hochauflösenden Time-of-Flight Massenspektrometrie (TOFMS) kombiniert. Zur Kopplung wurde eine Mikroliter-Fließinjektionsanalyse (μL -FIA) ohne Chromatographie entwickelt, bei der nur ein einziger Probenpeak innerhalb weniger Minuten erhalten wird. Das resultierende Massenspektrum liefert die gesamte Probeninformation und ermöglicht die simultane Identifizierung aller Pestizide anhand ihrer genauen Massen. Das neue HTpSPE- μL -FIA-TOFMS Screening wurde erfolgreich für diverse dotierte pflanzliche Matrices sowie für Handelsproben eingesetzt. [1]

Einleitung

Die stetig wachsenden Anforderungen des Verbraucherschutzes zur Überprüfung der EU-weit festgelegten Rückstandshöchstgehalte (RHG) in Lebens- und Futtermitteln erfordern die ständige Weiterentwicklung analytischer Methoden. Um die kontinuierlich wachsende Anzahl an Wirkstoffen schneller und sensitiver bestimmen zu können, werden leistungsfähige Methoden benötigt, die vor allem die Analytik sogenannter non-target Substanzen mittels hochauflösender Massenspektrometern (HRMS) ermöglichen, da unbekannte Wirkstoffe oder Abbauprodukte mit den heute standardmäßig eingesetzten Target-MS/MS Methoden nicht erfasst werden.

Um sichere und robuste Ergebnisse in der Rückstandsanalytik von Pestiziden in pflanzlichen und tierischen Proben zu erhalten, ist zuallererst eine sorgfältige Reinigung der Extrakte die wichtigste Voraussetzung, um störende Matrixkomponenten zu entfernen, die in der Gaschromatographie (GC) und der Flüssigkeitschromatographie (LC) gekoppelt an die MS interferieren und zu den bekannten Matrixeffekten führen. Diese verursachen Signalverstärkung oder Signalunterdrückung, führen zu falsch-negativen und falsch-positiven Treffern und sind für unsichere quantitative Ergebnisse verantwortlich [2-5]. Zur Eliminierung dieser Effekte werden unterschiedliche Clean-up Techniken wie die Gelpermeationschromatographie [6] sowie die Kartuschen- oder die dispersive Festphasenextraktion (cSPE oder dSPE) [7-9] eingesetzt. Zusätzlich werden diverse Kalibriertechniken angewendet wie die matrix-matched Kalibrierung [5, 7-9], das Standardadditionsverfahren [5, 9] oder die Kalibrierung mit Stabilisotop-markierten Standards [4, 5].

Für das hier vorgestellte Pestizid-Screening wurde das bereits für Obst und Gemüse [10] sowie für Tee [11] erfolgreich eingeführte High-Throughput Planar Solid Phase

Extraction (HTpSPE) Clean-up zur effektiven und effizienten Extrakt-Reinigung eingesetzt und mit der HRMS gekoppelt. Mit der Zielsetzung eines einfachen und schnellen target und non-target Screenings wurden die HTpSPE-Extrakte mit einer völlig neuen Microliter-Flow Injection Analysis-Time-of-Flight MS (μL -FIA-TOFMS) Strategie analysiert - ohne eine chromatographische Trennung - und nachfolgend Datenbank-basiert ausgewertet.

Methode

Herstellung der Probenextrakte

Im Handel erhältliche Bio Obst- und Gemüse-Proben (Äpfel, Gurken, rote Trauben, Tomaten) wurden nach der QuEChERS-Methode [12] mit Acetonitril extrahiert. Für die Phasentrennung und zur Regulierung des pH-Wertes wurde ein Puffersalzgemisch bestehend aus Magnesiumsulfat (wasserfrei), Natriumchlorid, Trinatriumcitratdihydrat und Dinatriumhydrogencitratsequihydrat eingesetzt. Ein Aliquot der erhaltenen Probenextrakte wurden anschließend mittels HTpSPE Clean-up gereinigt oder einem dSPE Clean-up [12] unterzogen.

Herstellung der Pestizid-Standardlösungen

Die Probenextrakte wurden mit sieben repräsentativen Pestiziden auf 0,5 – 2,0 mg/kg dotiert: Acetamiprid, Azoxystrobin, Chlorpyrifos, Fenarimol, Mepanipyrim, Penconazol und Pirimicarb. Als interne Standards wurden zur Quantifizierung TDCPP und zur Sichtbarmachung der Pestizid-Zonen Sudan II verwendet.

HTpSPE Clean-up

DC Aluminiumfolien Kieselgel 60 NH₂ F254s (Merck), 20 x 20 cm, wurden zweimal mit Acetonitril vorgewaschen. Nach Schneiden entlang der Vorwaschrichtung auf der Breite von 10 cm ergaben sich zwei 20 x 10 cm Hälften, die für das Clean-up verwendet wurden. Vor der Auftragung wurde die Schicht 2 cm tief in eine 2%ige Ameisensäurelösung in Acetonitril getaucht und getrocknet. Die Probenauftragung (je 50 μL) erfolgte flächenförmig (3 mm x 4 mm) mit dem DC Probenautomat 4 (CAMAG). Das planare Festphasen Clean-up wurde anschließend in der automatischen Entwicklungskammer (CAMAG) durchgeführt. Es erfolgte eine 2-fache Entwicklung mit Acetonitril bis zu einer Laufstrecke von 75 mm und nach 180° Drehung der Folie mit Aceton in Rückwärtsrichtung bis zu einer Laufstrecke von 45 mm. Danach lagen alle Wirkstoffe fokussiert in einer Ziel-Zone vor. Die Plattenaktivität wurde vor beiden Entwicklungen auf 33% rel. Luftfeuchtigkeit eingestellt. Für die visuelle Dokumen-

tation des Clean-up kam der TLC Visualizer (CAMAG) unter 254 nm, 366 nm und Weißlicht-Beleuchtung zum Einsatz.

HTpSPE- μ L-FIA-TOFMS Kopplung

Nach dem HTpSPE Clean-up wurden alle Ziel-Zonen einer Schicht hintereinander mittels TLC-MS Interface (CAMAG) in Autosampler-Vials eluiert; Eluent: Aceto-nitril/10 mM Ammoniumformatpuffer (1/1, v/v), 0,2 mL/min. Jede Ziel-Zone wurde 60 Sekunden eluiert, gefolgt von der Elution an einer freien Stelle der Schicht, um Carryover-Effekte zu vermeiden.

Das μ L-FIA-TOFMS Messsystem bestand aus einer modularen HPLC Anlage (Agilent) mit einer Kapillarpumpe und einem Micro wellplate Autosampler, die ohne eine analytische Trennsäule über eine PEEK-Kapillare und ein nano-Electrospray Ionisation Interface (nano-ESI) an ein TOFMS (LECO) angeschlossen waren. Die direkte Aufgabe der Probe auf das TOFMS erfolgte mittels Fließinjektion in einen Fluss von 2 μ L/min mit einem Injektionsvolumen von 2 μ L. Der Eluent (Acetonitril/0.1% wässrige Ameisensäure, 1/1, v/v) enthielt zusätzlich fünf Substanzen für die Massenkali-
br/>brierung des TOFMS.

Ergebnisse und Diskussion

Die Planar-Chromatographie wurde als integraler Bestandteil der HTpSPE Reinigung eingesetzt, um Wirkstoffe und Matrixkomponenten quantitativ voneinander zu trennen. Durch eine 2-fache Entwicklung auf Amino-modifizierten Kieselgelschichten mit einer Gesamt-Entwicklungszeit von 20 min wurden alle Wirkstoffe quantitativ von der Matrix abgetrennt und in einer scharfen Zone fokussiert (gleicher RF-Wert) (Abb. 1).

Nach diesem planaren Clean-up wurden die Ziel-Zonen (Pestizide) einfach mittels TLC-MS Interface in Autosampler-Vials eluiert (Abb. 2 a) und die gereinigten Extrakte durch eine μ L-FIA direkt, ohne chromatographische Trennung, mit einem TOFMS analysiert (Abb. 2 b). Alle im Extrakt enthaltenen Substanzen eluieren somit in einem einzigen FIA-Peak im Full-scan Chronogramm. In dem resultierenden, einzigen Massenspektrum, das die gesamte Probeninformation enthält, werden die Pestizide eindeutig anhand der exakten Massen identifiziert (Abb. 2 c). Zudem werden in diesem Massenspektrum noch alle weiteren Substanzen des Extraktes aufgezeigt.

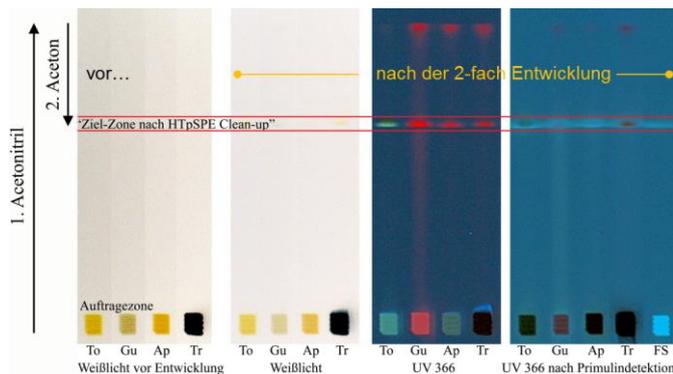


Abb. 1: HTpSPE clean-up von Tomaten (To)-, Gurken (Gu)-, Apfel (Ap)- und Trauben (Tr)-Extrakten, 50 μ L Auftragevolumen, 2-fach Entwicklung auf einer DC Aluminiumfolie Kieselgel 60 NH₂ F254s, Dokumentation unter Weißlicht, UV 366 nm und UV 366 nm nach Primulindetektion. Als eine v.a. in der GC-MS störende Matrixsubstanz wurde ein Fettsäurestandard (FS) aufgetragen.

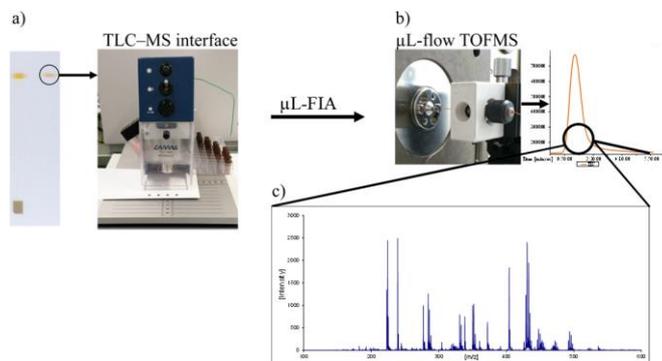


Abb. 2: Kopplung der HTpSPE mit μ L-FIA-TOFMS unter Verwendung des TLC-MS Interface; HTp-SPE und Elution der Ziel-Zone (a), nano-ESI und μ L-FIA-TOFMS Full-scan Chronogramm eines Gurken-Extraktes dotiert mit einem Pestizid-Mix aus verschiedenen Substanzklassen (b) und Massenspektrum des μ L-FIA-Probenpeaks bei Rt=1,5 min mit allen dotierten Pestizidmassen (c).

Die Massensignale im hochauflösenden Massenspektrum des FIA-Probenpeaks zeigen die Reinigungs-Effizienz der HTPSPE. In der Intensität und der Anzahl der Pestizid- und Hintergrundsignale unterschieden sich dotierte Gurken-Extrakte (Abb. 3) nach HTPSPE (Spektrum b) praktisch nicht von einem reinen Lösungsmittelstandard (Spektrum c). In dem Massenspektrum nach HTPSPE waren praktisch nur die dotierten Wirkstoffmassensignale enthalten. Im Vergleich zu den Extrakten nach dSPE (Spektrum a) waren die HTPSPE-Extrakte (Spektrum b) deutlich sauberer, hier wurden nahezu keine Interferenzen durch Matrixsignale beobachtet. Die erhebliche Matrixlast, die nach dSPE Clean-up noch vorhanden war, wurde durch die vielen Matrixsignale über den gesamten Massenbereich deutlich, die zu starken Interferenzen für alle Wirkstoffe führte. Für Tomaten-, Apfel- und Trauben-Extrakte lieferte die HTPSPE praktisch identische Ergebnisse hinsichtlich der Clean-up Effizienz.

Quantitativ wurde die Leistungsfähigkeit der Methode anhand der Wiederfindungen eines Pestizid-Mixes in dotierten Obst- und Gemüse-Extrakten ermittelt. Für die Berechnung wurden die Intensitäten der Massensignale im Massenspektrum des FIA-Peaks verwendet. Mittelwerte von 86 – 116% mit sehr geringen relativen Standardabweichungen von 1,5 – 10% (n=5) für die einzelnen Wirkstoffe bestimmt gegen reine Lösungsmittelstandards zeigten, dass das neue HTPSPE μ L-FIA TOFMS Screening reproduzierbar und verlustfrei arbeitet. Im Vergleich zu den Extrakten nach dSPE wurden Matrixeffekte nahezu vollständig eliminiert, Signalverstärkungen und Signalabschwächungen wurden nicht beobachtet (Abb. 4). Nach dSPE Clean-up traten hauptsächlich Signalverstärkungen auf, besonders starke Effekte wurden hier für Fenarimol und Chlorpyrifos erhalten.

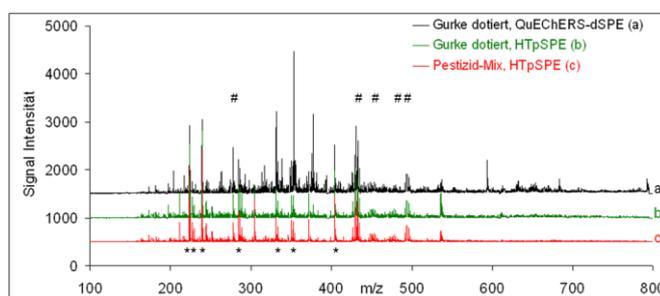


Abb. 3: μ L-FIA-TOFMS Massenspektren des FIA-Probenpeaks bei $R_t=1,5$ min eines dotierten Gurken-Extraktes (0,5; 1,0 und 2 mg/kg je Pestizid) nach dSPE (a), nach HTPSPE (b) und eines reinen Lösungsmittelstandards nach HTPSPE mit gleicher Konzentration (c), wobei alle dotierten Pestizidmassen (*) und ISTDs (#) sichtbar sind.

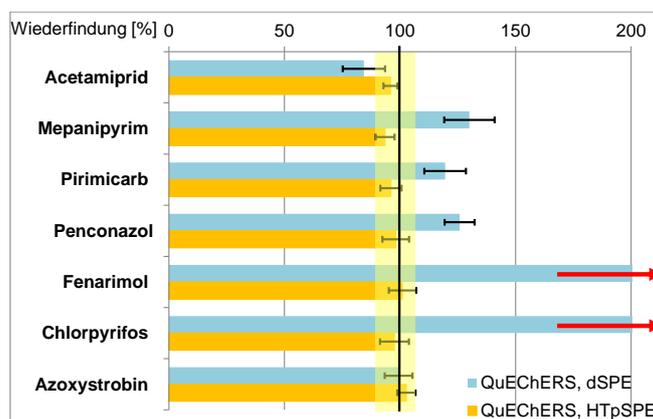


Abb. 4: Wiederfindungen aus gespikten QuEChERS-Extrakten von Apfel, Gurken, Tomaten, und Trauben (0,5 mg/kg, n = 5), nach HTPSPE und dSPE Clean-up, wirkstoffspezifische Mittelwerte über die vier untersuchten Matrices.

Grundlage für eine einfache Datenbank-basierte Suche für die neue Methode waren zwei EXCEL-Tabellen: eine Pestizid-Datenbanktabelle, die aus ~250 Wirkstoffdaten bestand, und die Ergebnistabelle der TOFMS-Messung. Diese wurden über eine ACCESS-Abfrage, die mehreren Suchkriterien unterlag, miteinander verknüpft.

Der entwickelte Datenbank-basierte target Suchprozess, der „bekannte“ Pestizide listete, wurde anhand des bereits erwähnten Wirkstoff-Mixes in den genannten Matrices über-

prüft. Bei dem Abgleich mit der Pestizid-Datenbank ergaben sich hier sehr erfolgreiche Ergebnisse für die HTPSPE gereinigten Extrakte (Abb. 5). Im Unterschied zu den dispersiv gereinigten Extrakten wurden nur 1-2 falsch positive Treffer in den Gurken- und Tomaten-Extrakten registriert. In den dotierten Apfel-, Trauben- und Gurken-Extrakten wurden alle Wirkstoffe wiedergefunden und eindeutig identifiziert, nur in den Tomaten-Extrakten konnte Fenarimol aufgrund einer recht großen Massenabweichung nicht korrekt identifiziert werden.

Nach dSPE clean-up konnten jedoch bis zu vier der sieben dotierten Wirkstoffe nicht korrekt identifiziert werden, wobei auch hier die Tomate die größten Probleme bereitete.

Ein zusätzlich entwickelter non-target Suchprozess lieferte ferner eine Liste aller „unbekannten“ Massen(-Bestandteile) der Probe, ohne die Wirkstoffmassen aus der Pestizid-Daten-

bank, die bereits durch die target Suche identifiziert wurden. Die Option dieses echten und einfach durchführbaren non-target Screenings beruht auf dem Vorliegen der gesamten Probeninformation, gesammelt in einem einzigen Massenspektrum.

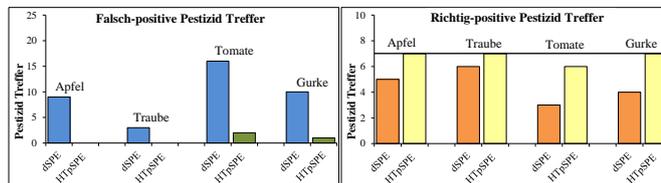


Abb. 5: Anzahl der falsch-positiven und richtig-positiven Pestizid-Treffer nach Anwendung des target Screenings auf dotierte Probenextrakte nach dSPE oder HTpSPE Clean-up.

Reale Proben

Die Anwendung des HTpSPE- μ L-FIA-TOFMS Screenings auf diverse Handelsproben lieferte ebenfalls hervorragende Ergebnisse. Die hierbei identifizierten Pestizide entsprachen denjenigen, die bei einer Vergleichsmessung mittels LC-MS/MS von dSPE-Extrakten in einem Handelslabor nachgewiesen wurden (Tab. 1). Der zuverlässige Nachweis der Wirkstoffe in den HTpSPE-Extrakten gelang zwar vorwiegend nur bei Wirkstoffgehalten $>0,5$ mg/kg, was allerdings allein auf die relativ geringe Sensitivität des verwendeten TOFMS-Gerätes zurückzuführen ist.

Probe	Pestizid	LC-MS/MS [mg/kg]	μ L-FIA-TOFMS [S/N] (n=2)
Bananen	Thiabendazol	0.76	2004
	Imazalil	0.73	1090
	Bifenthrin	<0.01	n.n.
	Chlorpyrifos	<0.01	n.n.
Brombeeren	Cyprodinil	0.86	2347
	Lambda-cyhalothrin	0.01	n.n.
	Thiacloprid	0.01	n.n.
Johannisbeeren	Cyprodinil	0.47	1373
	Boscalid	0.37	n.n.
	Pyraclostrobin	0.14	124
	Trifloxystrobin	0.06	121
Wirsing	Azoxystrobin	1.3	1770
	Difenoconazol	0.39	317
	Pymetrozin	0.2	n.n.
	Cyfluthrin	0.09	n.n.
	Indoxacarb	0.03	n.n.
	Thiacloprid	<0.01	n.n.
	Dimethomorph	<0.01	n.n.

Tab. 1: Untersuchung von Handelsproben: Ergebnisse der LC-MS/MS Messungen von QuEChERS dSPE-Extrakten im Vergleich zu den Ergebnissen des μ L-FIA-TOFMS Screenings von HTpSPE-Extrakten. Bei letzteren ist anstelle der Wirkstoffkonzentrationen das jeweilige Signal/Rauschverhältnis angegeben.

Fazit und Schlussfolgerung

Die μ L-FIA-TOFMS zeigte erneut die hohe Clean-up Effizienz der planaren SPE für Obst und Gemüsematrices, die schon bei der Einführung der HTpSPE erhalten wurde [10, 11]. Mit der Entwicklung eines μ L-FIA-TOFMS Konzeptes wurde hier ein einfaches und schnelles Screening für die Rückstandsanalytik von Pestiziden entwickelt. Unabdingbare Voraussetzung waren dabei die sehr sauberen und matrixfreien Pro-

ben-Extrakte, da alle Rückstände in einem einzigen Peak bzw. Massenspektrum erfasst wurden. Dadurch war ein einfaches und schnelles Datenbank-basiertes target Screening möglich, mit der zusätzlichen Option eines echten non-target Screenings. Das entwickelte Konzept wurde erfolgreich anhand repräsentativer Wirkstoffe in unterschiedlichen pflanzlichen Matrices geprüft. Durch die hohe Übereinstimmung mit den Ergebnissen von LC-MS/MS Messungen bei der Untersuchung realer Proben konnte die Leistungsfähigkeit des Screenings und die sehr gute Vergleichbarkeit der erhaltenen Ergebnisse gezeigt werden. Da selbst ein niedrig auflösendes TOFMS mit sehr präzisen Ergebnissen überraschte, wird ein leistungsfähiges HRMS die Trefferquoten sicher nochmals verbessern.

Über die gezeigten Anwendungen hinaus bietet das neue Konzept zahlreiche Möglichkeiten zur organischen Spurenanalytik von Umweltproben.

Literatur

- [1] Oellig, C., Schwack, W., J. Chromatogr. A 1351 (2014) 1
- [2] Hemmerling, C. et al., Deut. Lebensm. Rundsch. 105 (2009) 633
- [3] P.J. Taylor, Clin. Biochem. 38 (2005) 328
- [4] J. Hajslova, J. Zrostlikova, J. Chromatogr. A 1000 (2003) 181
- [5] A. Furey, M. Moriarty, V. Bane, B. Kinsella, M. Lehane, Talanta 115 (2013) 104
- [6] W. Specht, S. Pelz, W. Gilsbach, Fresenius J. Anal. Chem. 353 (1995) 183
- [7] F.J. Schenck, S.J. Lehotay, J. Chromatogr. A 868 (2000) 51
- [8] F.J. Schenck, S.J. Lehotay, V. Vega, J. Sep. Sci. 25 (2002) 883
- [9] M. Anastassiades, S. Lehotay, D. Stajnbaher, F. Schenck, J. AOAC Int. 86 (2003) 412.
- [10] Oellig, C., Schwack, W., J. Chromatogr. A 1218 (2011) 6540-6547
- [11] Oellig, C., Schwack, W., J. Chromatogr. A 1260 (2012) 42-53
- [12] www.quechers.com

Korrespondenzadresse:

Claudia Oellig
 Universität Hohenheim
 Institut für Lebensmittelchemie 170a
 Garbenstr. 28,
 70599 Stuttgart
 E-Mail: Claudia.Oellig@uni-hohenheim.de

Jahrestagung der SETAC GLB und der GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie beschreitet in Gießen neue Wege

„Mut zum Risiko“, so muss der Leitgedanke der Gastgeber der diesjährigen Umweltchemie- und Ökotoxikologie-Jahrestagung in Gießen, Prof. Rolf-Alexander Düring und Prof. Klaus Peter Ebke, gelautet haben, als sie sich dazu entschlossen, vom bisherigen, ausschließlich auf Vorträge und Poster aufbauenden Tagungskonzept abzuweichen und einen Tag für praktische Demonstrationen in Form von Freilandsessions vorzusehen. Der Mut wurde belohnt mit viel positiver Resonanz der knapp 300 registrierten Tagungsteilnehmer, die sich die Chance auf praktischen Anschauungsunterricht in Sachen ökotoxikologischer Testdesigns und Feldversuchen nicht entgehen ließen, zumal spätsommerliches Wetter dazu einlud, den Hörsaal gegen die „grüne Wiese“ des Forschungszentrums Neu-Ulrichstein einzutauschen. Die Feldsessions trugen wesentlich dazu bei, das Tagungsmotto „Grundlagen erforschen, Erkenntnisse anwenden, Wissen vermitteln“ in die Tat umzusetzen. Die zweite, nicht minder wichtige Komponente des Tagungserfolgs war die Fokussierung auf zentrale Themen der umweltchemischen und ökotoxikologischen Forschung, die durch zahlreiche Vorträge und Poster in ihrer Breite und Tiefe präsentiert wurden. Besondere Akzente setzten hierbei 4 Plenarvorträge sowie die Preisträgervorträge.

Die Tagungseröffnung am Montag, den 8. September, wurde eingeleitet von den beiden Gastgebern, gefolgt von den Repräsentanten der veranstaltenden wissenschaftlichen Gesellschaften, Dr. Dominik Kaiser für die SETAC-GLB und Prof. Andreas Schäffer für die GDCh-Fachgruppe. Die Oberbürgermeisterin der Stadt Gießen, Frau Grabe-Bolz, wies in ihrem anschließenden Grußwort auf die Prägung der Stadt durch die Universität und auf die enge Verzahnung von städtischem und universitärem Leben hin.

Den ersten Plenarvortrag hielt Prof. Thomas Scholten, Universität Tübingen und Präsident der Deutschen Bodenkundlichen Gesellschaft, zum Thema „Boden und Umwelt – Die Bedeutung der Bodenwissenschaften in der Umweltforschung“. Der Referent hob insbesondere auf die hohe Komplexität des Systems Boden und auf die Vielzahl an ökologischen Funktionen ab, die von ihm erfüllt werden. Da in Anbetracht der geringen Bodenneubildungsrate dieser eine endliche Ressource sei, habe der Schutz und die Sicherstellung der Bodenfunktionen, u.a. im Hinblick auf den Hoch- und Trinkwasserschutz sowie auf die Erzeugung kontaminationsfreier Nahrungsmittel eine hohe Bedeutung. Prof. Scholten erläuterte dies eingehender anhand einiger aktueller Forschungsfragen wie z.B. Auswirkungen von Pharmaka und deren Metabolite auf boden(mikro)biologische Prozesse. Damit stellte er Themen in den Vordergrund, die gegenwärtig Schnittstellen für die Zusammenarbeit unterschiedlicher umweltwissenschaftlicher Fachdisziplinen bilden und die in weiteren Vorträgen aufgegriffen wurden.

Stark analytisch-methodisch geprägt war der anschließende Plenarvortrag von Prof. Janusz Pawliszyn, Universität Waterloo, der sich mit „Solventless sampling/sample preparation technologies in on-site environmental investigations“ auseinandersetzte. Er unterstrich die Bedeutung moderner Probenahme- und Aufbereitungstechniken für das Umwelt- und Biomonitoring und legte damit wissenschaftliche Grundlagen für die anschließenden Sessions zu diesem Themenkreis.

Der Eröffnungstag wurde geprägt durch die Sessions „Bioverfügbarkeit und Bioakkumulation“, „Terrestrische Ökotoxikologie“, „Risikobewertung und Regulatorik“ sowie „Fort-schritte in der Umweltanalytik“. Da jeweils 3 Parallelsessions angeboten wurde, fiel die Teilnahmeentscheidung nicht leicht. Die 3 erstgenannten Sessions wiesen eine enge thematische Verknüpfung auf, die durch die Schlüsselbegriffe „Regulatorik, Risikoabschätzung und Modellierung“ definiert wird. Im Bereich der Bioverfügbarkeit lag der Schwerpunkt auf aquatischen Systemen und Organismen. Hier spielt nach wie vor die Ermittlung und Bewertung der Bioverfügbarkeit und der ökotoxikologischen Effekte von Metallen eine Rolle, wozu Heinz Rüdel, Schmallenberg, die Nutzung von Bioligandmodell-basierten Software-Applikationen vorstellte. Eigenschaften und Verhalten von Metallen, zumal in nanopartikulärer Form, wurden u.a. auch in den Vorträgen von Claus Wasmuth („Aquatisches Transformations- und Lösungsverhalten von Silbrenanopartikeln unter verschiedenen Bedingungen“) und Marco Kraas („Langfristige Wirkung von zwei Silbrenanomaterialien auf die Bodenmikroflora bei Eintrag über Klärschlamm“) beleuchtet. Das hochaktuelle Thema „Mikroplastik in aquatischen Systemen“ adressierte Christian Scherer mit seinem Vortrag „Charakterisierung der Aufnahme von Mikroplastik – Aufnahmestudien mit aquatischen Invertebraten“.

Im Bereich der Umweltanalytik bildeten neue Anwendungen der Massenspektrometrie einen Schwerpunkt. So referierte Sabine Schulz, Universität Gießen, über „Massenspektrometrie-basierte in-situ- und bildgebende Methoden in der Umweltanalytik“ (siehe Originalbeitrag in diesem Heft). Für die Vor-Ort-Analytik stellte Johannes Lang, ebenfalls Universität Gießen, einen neuen Typus von mobilen „Multiple-Reflection TOF-MS“-Geräten vor, der sich durch sehr hohe Massenauflösung, Massengenauigkeit und Nachweispemflichkeit auszeichnet. Die hochauflösende MS bildet auch die instrumentelle Grundlage für die „Nontarget“-Analytik, wie sie z.B. für die Bewertung der Effizienz von biologischen Abwasserreinigungsverfahren eingesetzt wird (Gudrun Nürnberg, BfG Koblenz). Das Pendant dazu, die „Target“-Analytik mittels LC-HRMS, wurde von Johanna Otto, EAWAG Dübendorf, zum Nachweis des möglichen Abbaus von knapp 500 relevanten Mikroverunreinigungen durch weitergehende

Verfahren der Abwasserreinigung herangezogen. Dieser Vortrag war in die Session „Chemikalienabbau“ eingegliedert, in der auch Neuentwicklungen der Nutzung des katalytischen Potentials von Palladium zum Schadstoffabbau präsentiert wurden. Der Fachgruppenvorsitzende, Prof. Andreas Schäffer, RWTH Aachen, fasste die Ergebnisse umfangreicher Forschungsarbeiten zum Langzeitverhalten von Chemikalien in Böden zusammen, wobei sich der Kreis zum Plenarvortrag von Prof. Scholten schloss. Schäffer plädierte für eine weitergehende Einbeziehung von „nicht-extrahierbaren Rückständen (NER)“ in die Umweltrisikobewertung von Chemikalien, wobei die Möglichkeit einer NER-Freisetzung und einer entsprechenden Metabolitenbildung zu berücksichtigen seien.



Areal mit „Aquatik“-Versuchsaufbauten auf dem Gelände des Forschungszentrums Neu-Ilsenburg



Vorstellung eines Makrophytentests zur Risikobewertung von Herbiziden

Der zweite Veranstaltungstag stand im Zeichen der Freiland-Sessionen in Form von praktischen Demonstrationen, die inhaltlich und räumlich in die Bereiche „Aquatik“ und „Terrestrik“ aufgeteilt waren. Den thematischen Rahmen hierzu spannte Prof. Christoph Schäfers, Schmallenberg, in seinem Plenarvortrag „Datengewinnung für die ausführliche Risikobewertung von Stoffen: Integrativ, wirklichkeitsnah, bewertungssicher...“ auf. Darin wurde problematisiert, inwieweit die Effekt-orientierte ökotoxikologische Datengewinnung auf das Datenbedürfnis, das sich aus regulatorischen

Stoffbewertungskonzepten und –modellen ergibt, abgestimmt ist.



Grüne Aussichten jenseits der Präsentationsflächen in Neu-Ulrichstein

Vor der Nachmittagssession waren Preisverleihungen und die Vorträge der Preisträger vorgesehen. Den SETAC-GLB Nachwuchsförderpreis für die beste Masterarbeit erhielt Regine Redelstein für ihre Untersuchung „Endokrine Disruptoren in Trinkwasser: Effekte von anthropogenen Spurenschadstoffen auf Hormonproduktion und Steroidgenexpression in H295R-Zellen“. Der SETAC-GLB Preis für die beste Dissertation wurde an Dr. Björn Scholz-Starke für seine Arbeit „Assessing the risks of pesticides in soil communities using terrestrial model ecosystems“ verliehen. Den von unserer Fachgruppe vergebenen Paul-Crutzen-Preis nahm Thorsten Hüffer für seine Publikation „How redox conditions and irradiation affect sorption of PAHs by dispersed fullerenes (nC60)“, erschienen 2013 in der Zeitschrift „Environmental Science & Technology“ (43[13], 6935-6942), entgegen.



Die Preisträgerin des SETAC-Nachwuchsförderpreises Regine Redelstein und der Dissertationspreisträger Dr. Björn Scholz-Starke (Mitte) umrahmt von Prof. Klaus Peter Ebke (links), Dr. Silvio Knaebe (rechts) und Dr. Dominik Kaiser (ganz rechts).

Themenschwerpunkte des Schlusstages bildeten die Sessions „Terrestrische Ökotoxikologie“, „Passive Sampling“, „Umweltmonitoring“, „Schadstoffe im Wasserkreislauf“ und

„Aquatische Ökotoxikologie“. Kläranlagen und die (In-) Effizienz ihrer Behandlungstechniken bildeten mehrfach den Untersuchungsgegenstand bei der Frage nach dem Eintrag von Schadstoffen in Gewässer und den Möglichkeiten, diesen zu reduzieren. Ein weiteres Programm-„Highlight“ war der Plenarvortrag von Dr. Thorsten Stahl, Hessisches Landeslabor Wiesbaden, zur Problematik „Perfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS): Untersuchungen zu Eintragungspfaden in Nahrungsketten und in Lebensmittel“. Hierin wurden u.a. neue Ergebnisse zum Zusammenhang zwischen molekularen Merkmalen, insbesondere der Kettenlänge, von PFAS und deren Umweltverhalten sowie Bioverfügbarkeit präsentiert.



Neues Testsystem mit Fließgewässer-Mesokosmen (Mesocosm GmbH)

Der erfolgreiche und inspirierende Tagungsverlauf mag dazu beigetragen haben, dass sich die austragenden Fachgesellschaften inzwischen darauf verständigt haben, ihre Jahrestagungen zukünftig generell gemeinsam abzuhalten.

Klaus Fischer, Trier (fischerk@uni-trier.de)

Bericht von der Mitgliederversammlung der GDCh FG Umweltchemie und Ökotoxikologie am 8. September 2014

Erfreulicherweise war die Mitgliederversammlung der Fachgruppe, die während der gemeinsamen Jahrestagung mit der SETAC GLB in Gießen stattfand, deutlich besser besucht als in den vergangenen Jahren: es waren ca. 30 Mitglieder anwesend.

Der Fachgruppenvorsitzende, Herr Andreas Schäffer, stellte die Aktivitäten des Vorstands im Zeitraum 2013-2014 vor. Das im vergangenen Jahr erstmals durchgeführte Doktoranden-seminar in Blomberg und eine gezielte Werbung bei Nachwuchswissenschaftlern hat zu einer positiven Mitgliederentwicklung geführt: eine fast 10-prozentige Steigerung im Vergleich zum Vorjahr. Die Bemühung, die Anzahl von Jungmitgliedern in der Fachgruppe noch weiter zu steigern, geht jedoch weiter: erstmals wird in diesem Jahr im November ein Doktorandentreffen bei einem Industrieunternehmen stattfinden, bei dem Gelegenheit zum Kennenlernen möglicher zukünftiger Arbeitsplätze und zur Netzwerkbildung geboten sein wird. Die bisherigen zahlreichen Anmeldungen zeigen, dass dieses Angebot mit großem Interesse aufgenommen wird.

Auch die Finanzentwicklung der Fachgruppe ist erfreulich und es konnte ein deutlich besserer Jahresstand als im Vorjahr berichtet werden. Dazu hat auch die strategische finanzielle Unterstützung der GDCh beigetragen.

Der Paul-Crutzen-Preis der FG (1500,-€) wurde an Dr. Thorsten Hüffer verliehen, der mit der ES&T Veröffentlichung „How redox conditions and irradiation affect sorption of PAHs by nC60 fullerenes“ die nach Meinung der Jury beste Veröffentlichung junger Wissenschaftler in diesem Jahr geschrieben hat. Auch die Entwicklung der früheren Preisträger ist erfreulich: Dr. Shiraiwa (Atmosphärenchemie, Preisträger 2012) ist seit 2013 Arbeitsgruppenleiter am MPI Mainz und Herr Moschet (Mikroschadstoffe Bodensee, Preisträger 2013) arbeitet seit 2013 als Doktorand an der EAWAG in Dübendorf.

Nach kontinuierlichen intensiven Gesprächen mit SETAC GLB wurde vereinbart, dass ab 2016 alle Jahrestagungen gemeinsam von den beiden Fachgesellschaften durchgeführt werden. Dieser Prozess hat viele Jahre gedauert und wir sind froh, hier einen Weg gefunden zu haben, terminliche und inhaltliche Überschneidungen bei getrennten Jahrestagungen zukünftig zu vermeiden. 2015 wird unsere Fachgruppe bei der Vorbereitung und Durchführung der internationalen ICCE eingebunden sein (20.-25. September 2015, Leipzig, <http://www.icce2015.org/>).

Abschließend wurde der Stand der Postgradualausbildung Fachökotoxikologie vorgestellt, bei dem sich SETAC GLB und unsere Fachgruppe engagieren: mit inzwischen fast 450 registrierten Teilnehmern und einer inhaltlichen Erweiterung der Kurse (Alternative Testmethoden, Prof. Braunbeck, Heidelberg, und Expositionsmodellierung, Prof. Matthies, Osnabrück) hat sich dieses Angebot seit der Einrichtung 2005 kontinuierlich weiter entwickelt.

Andreas Schäffer, Aachen

Bericht des AK Atmosphärenchemie (AKAC) für die Mitgliederversammlung der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie im Rahmen der Jahrestagung 2014 in Gießen

Im Jahr 2014 fand bisher eine Sitzung des AKAC im März bei der GDCh in Frankfurt/ Main statt. Die nächste Sitzung wird am 8.10. am gleichen Ort stattfinden.

In der letzten AK-Sitzung stellte Prof. A. Held von der Uni Bayreuth seine Arbeitsgruppe vor. Ein interessanter Schwerpunkt der Bayreuther Arbeiten sind Messungen an der Forschungsstation Waldstein, so dass der AKAC beschloss, dort eine gemeinsame Messkampagne zur Charakterisierung biogener gasförmiger Emissionen und Partikel zu organisieren. Diese Kampagne wurde dann im Zeitraum vom 7.-28. Juli 2014 am Waldstein durchgeführt. Teilnehmende Gruppen waren die Bayreuther Gruppe, die Gruppe von Prof. Thorsten Hoffmann (Universität Mainz, Analytische Chemie), die Gruppe von Prof. Hartmut Herrmann (TROPOS Leipzig) sowie Teilnehmer von KIT IMK Teilinstitut in Garmisch-Partenkirchen. Es wurden eine Reihe neuer Massenspektrometer eingesetzt und sehr interessante Messungen zur Bildung und Zusammensetzung biogener Aerosolpartikel durchgeführt. Erste Ergebnisse dazu sollen auf der kommenden AKAC-Sitzung vorgestellt werden. Zur Kampagne wurden Pressemitteilungen erstellt,

<http://idw-online.de/de/news596405>, die dann zu einer Reihe von Pressemeldungen führte wie <http://www.nordbayern.de/nuernberger-nachrichten/szene-extra/winzige-teilchen-aus-dem-wald-extra-forschung-1.3802067>.

Im weiteren hat der AKAC begonnen, Forschungsaktivitäten der Teilnehmer in Indien und China zusammenzustellen. Während diese für Indien eher punktuell sind, gibt es in China eine Vielzahl von Aktivitäten – eine Übersicht hierzu soll bei der nächsten Sitzung präsentiert werden. Die Kooperation und Synchronisierung von Aktivitäten wurde ebenfalls ausgiebig diskutiert – diese Diskussion wird beim kommenden „3rd Sino-French Workshop on Atmospheric Chemistry“ im Dezember in Lyon weitergeführt werden. Mitglieder des AKAC

waren in 2013 federführend wie beiträgend bei der ersten „Sino-European Summerschool on Atmospheric Chemistry (SESAC)“ in Taicang bei Shanghai beteiligt. Eine Folgeveranstaltung mit starker deutscher Beteiligung ist geplant.

Weitere Diskussionen im AKAC betrafen die Forschungsförderung für die Chemie der Atmosphäre in Deutschland und Europa. Gruppen des AKAC bringen sich hier aktiv in Konsultationen ein und haben Veranstaltungen zum Thema in Brüssel mitgestaltet.

Ein weiteres Thema ist das Zusammenwirken der einschlägigen Gremien, die sich neben dem AKAC mit der Chemie der Atmosphäre beschäftigen. Dieses sind der Processnet-Arbeitsausschuss Feinstaub bei der DECHEMA (gem. mit GDCh und KRdL) sowie der Gemeinschaftsausschuss Chemie, Luftqualität und Klima (CLK), der von GDCh, DECHEMA und DBG betrieben wird. Alle drei Gremien sollen in der Zukunft weitergeführt werden, jedoch stehen einige altersbedingte personelle Veränderungen an. Hierzu fand im Juli 2014 ein Abstimmungsgespräch bei der GDCh statt.

Prof. Herrmann wird im Nachrückverfahren ab Januar 2015 Mitglied des Fachkollegiums 313, so dass in diesem Gremium nach einiger Zeit auch wieder ein Atmosphärenchemiker vertreten sein wird.

Jahresbericht 2013/14 des Arbeitskreises Umweltmonitoring

Die Aktivitäten des AK Umweltmonitoring umfassen die Organisation von Sitzungen, die Begleitung von Sessions im Themenfeld des AK auf nationalen Tagungen und die Betreuung der Internetseiten des AK.

Sitzungen werden genutzt, um Fachvorträge durch Mitglieder des AK oder externe ReferentInnen zu präsentieren und aktuelle Themen des AK zu diskutieren. Schwerpunktthema auf der AK-Sitzung im Februar 2014, die im Umweltbundesamt in Berlin stattfand, war der Einsatz von Passivsammlern für prioritäre Stoffe und 'emerging substances' im Gewässermonitoring. Albrecht Paschke (UFZ, Leipzig) referierte über Passivsammler für die Wasserphase, Sabine Schäfer (BfG, Koblenz) präsentierte Ergebnisse zur Nutzung von Passivsammlern für Sedimentuntersuchungen und Peter Lepom (UBA, Berlin) diskutierte regulatorische Aspekte der Anwendung von Passivsammlern. Das ausführliche Protokoll der Sitzung kann auf Anfrage zur Verfügung gestellt werden (Kontakt siehe unten). Auf der Sitzung entstand auch die Idee, eine Session zum Thema „Passive Sampling“ auf der Fachgruppentagung zu organisieren.

Auf der gemeinsamen Tagung von SETAC-GLB und GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie in Gießen waren deshalb vom AK Umweltmonitoring zwei Sessions initiiert worden, neben einer allgemeineren Session zum „Umweltmonitoring“ auch eine spezielle zum Thema „Passive Sampling“. Zusätzlich wurden von AK-Mitgliedern auch Beiträge mit Bezug zum Umweltmonitoring in anderen Sessions präsentiert.

Informationen zu den im AK Umweltmonitoring behandelten Schwerpunkten sind über den Internetauftritt des AK auf den GDCh-Seiten abrufbar. Dort steht beispielsweise auch eine Link-Sammlung zu Datenportalen zum stoffbezogenen Umweltmonitoring zur Verfügung (u.a. Fachinformationssystem der FGG Elbe und Umweltprobenbank des Bundes).

Im Arbeitskreis Umweltmonitoring sind derzeit etwa 15 Mitglieder aktiv. Als eine wesentliche Aufgabe der nächsten Jahre wird die Gewinnung neuer Mitglieder angesehen. Dabei sollen auch verstärkt jüngere Mitglieder eingebunden werden. An einer Mitarbeit Interessierte können auf Anfrage Informationen zu den aktuellen Aktivitäten des AK Umweltmonitoring erhalten.



Demonstration der Anwendung von Passivsammlern während der AK-Sitzung im Februar 2014 (Foto: H. Rüdell)

Kontakt AK Umweltmonitoring: Dr. Heinz Rüdell, Fraunhofer IME, Schmallenberg; Tel. 02972 302 301;
E-Mail: heinz.ruedel@ime.fraunhofer.de



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER



Fachgruppe
**Umweltchemie &
Ökotoxikologie**

GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie

Paul-Crutzen-Preis

Die GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie verleiht einen Preis für eine herausragende wissenschaftliche Arbeit auf dem Gebiet der Umweltchemie und Ökotoxikologie.

Eingereicht werden kann – vom Autor selbst oder von Dritten – eine wissenschaftliche Veröffentlichung (aus den zurückliegenden zwei Jahren, peer-review Journal). Der Erst- bzw. Hauptautor darf bei Erscheinen nicht mehr als zwei Jahre nach der Promotion stehen.

Mit der Auszeichnung verbunden sind eine Verleihungsurkunde sowie ein von der GDCh-Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie gestiftetes Preisgeld in Höhe von 1.500 €, über das der Preisträger frei verfügen kann. Ein vom Vorstand der Fachgruppe benanntes Gutachtergremium entscheidet über die Preisvergabe. Die Preisverleihung erfolgt im Rahmen der ICCE 2015, die vom 20. bis 25. Sep. 2015 in Leipzig stattfindet.

Dem formlosen Vorschlag, der eine kurze Begründung enthalten soll, sind ein Lebenslauf, eine Publikationsliste sowie die Veröffentlichung selbst in elektronischer Form (pdf-Dokument) beizufügen. Vorschläge können bis zum 30. April 2015 bei der GDCh-Geschäftsstelle, Dr. Susanne Kühner, Varrentrappstr. 40-42, 60486 Frankfurt am Main, s.kuehner@gdch.de, eingereicht werden.



Lehrgebiet Wasserwesen in der Fakultät Bauingenieurwesen/Architektur an der Hochschule für Technik und Wirtschaft Dresden

Thomas Grischek (grischek@htw-dresden.de)

Lehre

An der Fakultät Bauingenieurwesen/Architektur der HTW Dresden beginnen jährlich mehr als 120 Studenten ein Bauingenieurstudium (Diplomstudiengang, 8 Semester, inkl. 1 Semester Praktikum). Das Lehrgebiet Wasserwesen ist für alle das Wasser betreffenden Ausbildungsaspekte zuständig. Die Ausbildung der Bauingenieure umfasst vor allem planerische und konstruktive Aspekte des Wasserbaus und der Siedlungswasserwirtschaft sowie Rohr-, Gerinne- und Geohydraulik, es werden aber auch einige Grundlagen der Wasserchemie und Grenzwertdiskussion (Trinkwasserverordnung, EU-Wasserrahmenrichtlinie) vermittelt. Zusätzlich werden Lehrveranstaltungen für Studenten des Chemieingenieurwesens/Umwelttechnik und des Wirtschaftsingenieurwesens angeboten. Der wahlobligatorische Kurs „Wasserwirtschaft“ mit 4 SWS für 20 – 30 Chemie- und Wirtschaftsingenieure wird gemeinsam mit Prof. Dr. Martin Socher, Referatsleiter Oberflächengewässer & Hochwasserschutz im Sächsischen Staatsministerium für Umwelt und Landwirtschaft, betreut. Ein Schwerpunkt ist dabei die Auswertung von Wasseranalysen mit Ionenbilanz, Plausibilitätskontrollen, Nutzung von Leitfähigkeitsmessungen und Kenntnissen zu Redoxprozessen im Grundwasserleiter. Grundlage dafür sind vor allem Arbeiten von A. Appelo, G. Mattheß und W. Kölle.

Jährlich wählen 4 – 8 Bauingenieurstudenten, 1 – 3 Chemieingenieure und 1 – 2 Wirtschaftsingenieure ein Diplom-, Bachelor- oder Masterarbeitsthema im Lehrgebiet Wasserwesen. Viele Arbeiten im Bereich Wasserversorgung laufen in Kooperation mit regionalen Wasserversorgern, Ingenieurbüros und dem DVGW-Technologiezentrum Wasser, Außenstelle Dresden. So liefen z. B. Arbeiten zur Nitratbelastung des Grundwassers in Trinkwasserschutzzonen in Sachsen, Phosphatfreisetzung bei Moornaturierungen, Ermittlung der Uferfiltratanteile im Förderwasser von Brunnen unter Nutzung der Fluoreszenzspektroskopie, in-line Elektrolyse von Chlor, Oxidationskinetik von Eisen in DOC-reichem Grundwasser, chemischen Brunnenregenerierung, Effizienz von Geothermieanlagen bei eisenreichem Grundwasser u.v.m.

Bei der Durchführung der Labor- und Feldmesspraktika in der Lehre, die technische Absicherung der Abschlussarbeiten und Forschungsprojekte wird viel Wert auf mobile Feldversuchstechnik und Eigenentwicklung von Probenahmetechnik gelegt. Für die Bestimmung der Sofortparameter T, pH, Eh, LF, O₂ sowie von KS_{4,3}, KB_{8,2}, Trübung, Fe_{ges}, Nitrat, Chlor und SAK₂₅₄ vor Ort werden Geräte von WTW und Hach-

Lange genutzt. Die Bestimmung weiterer Ionen mittels ICP-OES und IC erfolgt in Kooperation mit Prof. Feller, Bereich Chemieingenieurwesen. TOC-, DOC-Analysen sowie Spurenstoffuntersuchungen mittels LC-MS und GC-MS sind bei gemeinsamen Projekten mit Prof. Worch und Dr. Börnick im Institut für Wasserchemie an der TU Dresden möglich. Schwerpunkte sind die Untersuchung des Verhaltens organischer Spurenstoffe bei der Uferfiltration und die Nutzung von Spurenstoffen als Tracer zur Ermittlung von Fließwegen und Mischungsverhältnissen.

Im Rahmen des DAAD-Programms „A new passage to India“ bearbeiten jährlich 4 Studenten mehrmonatige Projekte bei einem Wasserversorgungsunternehmen im nordindischen Bundesstaat Uttarakhand. Die Themen reichen von der Wasserenthärtung über die Desinfektion des Brunnenwassers und Beschaffenheitsuntersuchungen (Abb. 1) bis zur Energieeffizienz von Pumpstationen.



Abb. 1: Bestimmung von Sofortparametern und Probenahme in Indien, oft mit viel Publikum

Forschung

Im Lehrgebiet gibt es 3 Forschungsschwerpunkte: Uferfiltration/Grundwasseranreicherung, unterirdische Enteisung/Entarsenung und Energieeffizienz in der Wasserversorgung. Laufende Projekte beschäftigen sich mit der Uferfiltration in Indien und dem Ausbau eines Kompetenzzentrums Uferfiltration in Indien, dem Einsatz der unterirdischen Enteisung bei hohen Eisgehalten und geringem pH-Wert, der Quantifizierung von Eiseneinträgen in Gewässer in der Lausitz (in Kooperation mit dem Institut für Wasser und Boden Dr. Uhlmann) und der Nutzung der in-line Elektrolyse zur Arsenoxidation (in Kooperation mit der AUTARCON GmbH). Insgesamt sind acht wissenschaftliche Mitarbeiter über Drittmittel beschäftigt, darunter drei Doktoranden.

Kurz vorgestellt

Ein Schwerpunkt ist die Verbreitung der Uferfiltration in Entwicklungs- und Schwellenländern durch eine sorgfältige hydrogeologische und hydrogeochemische Standorterkundung und Weiterbildung. Die in Deutschland seit mehr als 140 Jahren genutzte Technik ist in vielen Ländern kaum bekannt, als naturnahe, robuste und kostengünstige Technik der Wassergewinnung jedoch oft eine gute Alternative zur Oberflächenwasserentnahme. So wurde in Thailand ein Projekt zur Kolmation an potenziellen Uferfiltrationsstandorten durchgeführt. Veranlassung waren hohe Trübungswerte in den Flüssen Thailands (bis 800 NTU), die bei einer Uferfiltration eine starke Kolmation der Flusssohle erwarten lassen. Mit einer mobilen Versuchsanlage, dem Kolmationsgerinne (Abb. 2), wurde die Verringerung der Durchlässigkeit quantifiziert. Das mobile Gerinne eignet sich auch für die Untersuchung anderer Beschaffenheitsparameter bei der Infiltration.

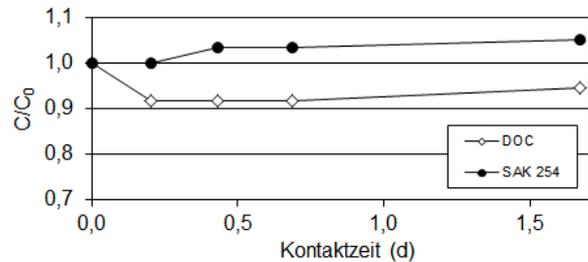


Abb. 2: Kolmationsgerinne am Ping River in Thailand

In Ägypten wird seit 2012 eine stärkere Nutzung der Uferfiltration in Kooperation mit dem staatlichen Wasserversorgungsunternehmen Holding Company for Water and Waste water und der GIZ unterstützt (Abb. 3). Testfilterversuche nach Sontheimer mit Nilwasser bei 20 °C und 30 °C ergaben nur einen sehr geringeren Abbau des gelösten organischen Kohlenstoffs (DOC) von <10% (Abb. 4). Von 30 in Deutschland relevanten organischen Spurenstoffen waren im Nilwasser nur wenige oberhalb der Bestimmungsgrenzen nachweisbar. Die Nilwasserbeschaffenheit ist günstig für eine Uferfiltratgewinnung, jedoch werden an vielen Standorten hohe DOC, Fe- und Mn-Konzentrationen im landseitigen Grundwasser beobachtet, woraus entsprechende Anforderungen an den Brunnenbau und -betrieb sowie die weitergehende Aufbereitung resultieren.



Abb. 3: Einschlagen einer Sonde zur Wasserprobenahme unterhalb einer Kanalsohle in Ägypten



$c_0 = 3,6 \text{ mg/l} \mid 5,8 \text{ m}^{-1}, T = 30^\circ\text{C}$

Abb. 4: Ergebnis eines Testfilterversuchs mit Nilwasser bei 30 °C

Weitere Informationen unter:

<http://www.htw-dresden.de/fakultaet-bauingenieurwesenarchitektur/bauingenieurwesen/lehrgebiete/wasserwesen.html>

Lehrgebiet Wasserwesen
Prof. Dr.-Ing. Thomas Grischek



EcoSSA ist ein unabhängiges ökotoxikologisches Forschungs- und Auftragslabor, das seinen Schwerpunkt im Bereich der ökologischen Qualitätsbewertung von Böden und aquatischen Sedimenten hat. EcoSSA hat sich dabei auf sehr kleine wirbellose Tiere spezialisiert, die zur Meiofauna bzw. Mesofauna gezählt werden: die Nematoden (Fadenwürmer). Zum Angebotsspektrum gehören Toxizitätstests (DIN ISO 10872), Mikrokosmenstudien für aquatische und terrestrische Systeme, sowie Freiland-Bewertung von Ökosystemen anhand von *in situ* Indices.

Nematoden



Fotos: Prof. Dr. Walter Traunspurger (Universität Bielefeld)

Freilebende, nicht-parasitäre Nematoden sind die häufigsten und eine der artenreichsten Vielzeller in Sedimenten und Böden und tragen wesentlich zu wichtigen Ökosystemleistungen bei. Durch die Evolution verschiedener Ernährungstypen haben Nematoden Schlüsselstellen in terrestrischen und benthischen Nahrungsnetzen besetzt. Dabei sind die Anwesenheit und die Struktur von Nematodenlebensgemeinschaften essentiell für die landwirtschaftliche Produktion und Nachhaltigkeit. Außerdem sind Nematoden geeignete Indikatoren zur Erfassung von schadstoffinduzierten Effekten in Böden und Sedimenten. Hierfür stehen Testsysteme auf allen organisatorischen und ökologischen Ebenen zur Verfügung: von molekularen Markern, über Single-Species-Tests, bis zu Modellökosystemen und Community-Indices zur Bioindikation. Nematoden sind auf Grund ihrer Häufigkeit besonders gut für kleine experimentelle Einheiten geeignet. In nur wenigen Gramm Boden oder Sediment, befinden sich genügend Individuen um die Struktur von Nematodenlebensgemeinschaften auf solider statistischer Basis zu analysieren.

Toxizitätstest mit *Caenorhabditis elegans* nach DIN ISO 10872

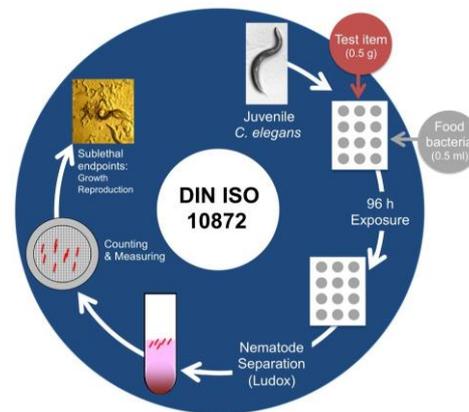
EcoSSA hat langjährige Erfahrung mit der Durchführung des standardisierten Toxizitätstest mit *Caenorhabditis elegans* (DIN ISO 10872). Der Test wurde von EcoSSA zur Testung von wässrigen Medien, Sedimenten, Boden und Abfall entwickelt.

Die Stärken des Tests:

- Nematoden sind Sediment- bzw. Bodenbewohner
- Test in festen und wässrigen Medien möglich
- kurze Testdauer: 96h
- chronischer Test, da ganzer Generationszyklus berücksichtigt wird
- subletale Endpunkte (Wachstum, Fertilität, Reproduktion)
- geringe Menge des Testsubstrats (nur 0,5 g)

Der Test findet Anwendung zur Untersuchung der Toxizität von:

- Umweltproben: Kontaminierte Sedimente (z.B. Baggergut), Böden (z.B. Altlasten), Grundwasser, Abwasser, Eluate, Abfall
- Chemikalien: Pestizide, Biozide, REACH-Chemikalien und Nanopartikel in Wasser, Sediment und Boden



Kleine Mikrokosmen-Systeme

In aquatischen und terrestrische Mikro- bzw. Mesokosmen (Modellökosystemen) können Effekte von Chemikalien auf Lebensgemeinschaften und Nahrungsnetze unter kontrollierbaren und replizierbaren Bedingungen erfasst werden. Studien in Mikro- bzw. Mesokosmen stellen daher ein Verbindungsglied zwischen Single-Species Toxizitätstests und Feldstudien dar und können unterstützende Daten liefern, um Assessment-Faktoren in der Umweltrisikobewertung von Chemikalien herabzusetzen.

Nematoden können im Rahmen größerer Mesokosmenstudien als zusätzliche Organismengruppe mit untersucht werden. Fokussiert man sich auf Mikro- und Meio- bzw. Mesofauna, können kostengünstige, kleine Mikrokosmen verwendet werden, da schon wenige Gramm Sediment oder Boden genügend Organismen für eine statistisch valide Untersuchung enthalten. Dies ermöglicht die Bewertung von Chemikalienwirkungen auf Nematodenlebensgemeinschaften in Miniatursystemen.

Kurz vorgestellt

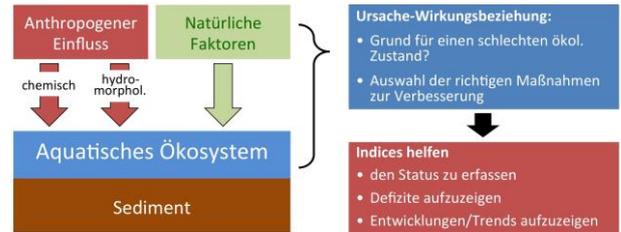


EcoSSa bietet an:

- Indoor Süßwasser-Mikrokosmen Studien: ca. 600 g Sediment
- Indoor Boden Mikrokosmen Studien: ca. 30 g Boden
- Analyse von Meiofauna- und Nematodenlebensgemeinschaften aus Mesokosmosstudien (taxonomische Bestimmung von Chironomiden und Nematoden auf Artniveau)

In Situ Bewertungssysteme

In Feinsedimenten (oft Hotspots für chemische Belastung) können herkömmliche Indizes (z.B. SPEAR[%]-Index; Saprobien-Index), die auf Makroinvertebraten basieren, selten verwendet werden, da in diesen Sedimenten nur wenige makrobenthische Arten vorkommen. Hier sollten meiobenthische Invertebraten, wie z.B. Nematoden, zur Bioindikation verwendet werden. Zu diesem Zweck wurde der Nema-SPEAR[%]-Index entwickelt, der den Anteil an gefährdeten Nematodenarten (Nematode Species at Risk: NemaSPEAR), die vor allem in gering belasteten und selten in belasteten Sedimenten vorkommen, als Indikator für chemische Belastung verwendet. Der Nema-SPEAR[%]-Index ist ein geeignetes Mittel um Schadstoff-induzierte Veränderungen in benthischen Lebensgemeinschaften zu detektieren.



EcoSSa bietet an:

- Probenahme in Weichsedimenten (Kajak Corer), Harts substraten (Periphyton; Brush-Sampler) und Böden (Bodenstecher)
- Quantitative Erfassen der wichtigsten Meio/Mesofauna-gruppen
- Analyse von Nematodenlebensgemeinschaften aus Böden, Sedimenten und Periphyton zur Qualitätsbewertung (taxonomische Bestimmung der Nematoden auf Art- bzw. Gattungsniveau)
- Berechnung relevanter ökologischer Indices: z.B. NemaSPEAR[%]-Index; Maturity Index
- Multivariate Analyse der Artzusammensetzung

Kontakt

Dr. Sebastian Höss
EcoSSa
Giselastr. 6
82319 Starnberg

E-Mail: mail@ecossa.de
Web: <http://www.ecossa.de>

Veranstaltungsankündigungen



The **ContaSed2015** Organizing Committee welcomes you to attend the conference "Contaminated Sediments: Environmental Chemistry, Ecotoxicology and Engineering" that will be held from **8 to 13 March, 2015** at the Conference Centre Monte Verità, Ascona, Switzerland, the venue of choice for Congressi Stefano Franscini, the international conference platform of ETH Zurich.

Conference Themes

- **Organic and Inorganic Contaminants:** Inputs, archives, fate and behaviour of persistent organic pollutants (POPs), semipolar and semivolatile compounds, emerging contaminants such as pharmaceuticals, bactericides and engineered nanomaterials, surfactants as well as polycyclic aromatic (PAH) and petroleum hydrocarbons, heavy metals and organometalics.
- **Effects and Risk Assessment:** Detection of bacteria with multiresistance genes. Developing scientific principles for sediment risk assessment as currently discussed on the European Union level in context with the Water Framework Directive and with sediment management activities.
- **Remediation and Engineering:** Recently developed innovative techniques. Accidentally contaminated locations e.g. after oil spills. Discussions with respect to naturally occurring processes such as biodegradation and sediment redistribution. Contaminated sediments in the urban water cycle.

Conference' Homepage: www.contased.org



3rd International Symposium on Green Chemistry
May 3-7, 2015 - La Rochelle - FRANCE

In May 2013, many scientists attended the 2nd International Symposium on Green Chemistry (ISGC-2). This scientific event was a real success with more than 550 participants (including 21% from industry) from 37 different countries. Through 150 conferences/oral communications and 330 posters, ISGC-2 provided a large focus on the past, future and challenges of Green Chemistry and received fantastic media coverage. As mentioned by Paul T. Anastas at the occasion of the symposium opening ceremony, ISGC-2 was the international rendez-vous for green chemistry in 2013.

Under the impulsion of many industrial and academic delegations, we decided to organize a novel edition. In this context, on the behalf of the International Advisory Board, the Organizing Committee warmly invites you to participate to the 3rd International Symposium on Green Chemistry that will be held from May **3rd-7th 2015 in La Rochelle, FRANCE**.

9 Topics

ISGC-2015 aims to encompass a large number of topics on the field of green chemistry. ISGC-2015 will cover 9 general topics related to :

1. biomass conversion
2. alternative solvents
3. clean hydrogen production
4. chemical valorization of waste
5. bio-based polymers and materials
6. atom-economy synthesis
7. eco-technology
8. predictive methods for green chemistry
9. environmental and ethical assessments

Conference' homepage: <http://www.isgc2015.com/>



Wasser 2015 – Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft in der GDCh, 11.-13.05.2015, Schwerin

Die "Wasser 2015" ist die zentrale Konferenz zu allen Themen der Wasserqualität mit neuesten Ergebnissen zu Stoffbelastungen Abwasser, Aufbereitung, Trinkwasser/Analytik, Meereschemie, Gewässer / Spurenstoffe, Sedimente, Kolloide / Wasserchemie und Industrie und findet im Mai 2015 in Schwerin statt. Raum für die "Wasser 2015" bietet dieses Mal die Sport- und Kongresshalle in Schwerin.



Ziel der Tagung

Die Jahrestagung ist ein willkommener Anlass, sich mit "Wasserchemikern" aus den verschiedensten Richtungen zu einem Erfahrungs- und Gedankenaustausch zu treffen. Die persönliche Begegnung und die Diskussion aktueller fachlicher Probleme stehen hierbei im Vordergrund.

Themenschwerpunkte:

- Abwasser
- Analytik
- Aufbereitung
- Gewässer / Grundwasser
- Meereschemie
- Mikrobiologie und Hygiene
- Sedimente/ Kolloide
- Spurenstoffe
- Trinkwasser
- Wasserchemie und Industrie

Tagungshomepage: <https://www.gdch.de/index.php?id=2527>



Atmospheric Chemistry - Multiphase Processes: Observations and Fundamentals, August 2-7, 2015, Waterville Valley Resort, Waterville Valley, NH

As is the tradition for this conference, the program will include a wide range of topics and new developments covering the field of atmospheric chemistry. The field is increasingly challenged by and in pursuit of improved understanding of multiphase processes, e.g. those involving gas interactions with cloud droplets, aerosol particles, ice, plant surfaces, urban surfaces, the sea surface, etc. Thus this conference will focus on new developments in our understanding of multiphase processes, and associated challenges. In general, the conference will provide a forum for discussion of a broad range of atmospheric chemistry topics, from Earth's surface to the stratosphere, the poles to the tropics, the fine scale to global. This meeting will specifically focus on new developments in aerosol phase chemistry and halogen chemistry, and the increasing role of satellite observations in many areas of atmospheric chemistry. We will also explore the rapid developments in our understanding of organic chemistry, in both the gas and aerosol phases. We will endeavor to make the conference exciting and engaging to all by encouraging presentations and discussions that connect theoretical and computational chemistry to laboratory kinetics and mechanistic studies and to field observations, testing our understanding with models. The conference will be attended by those participating in ACCESS XIII, the Thirteenth Atmospheric Chemistry Colloquium for Emerging Senior Scientists, which will be held at Brookhaven National Laboratory, New York immediately before the GRC.

Homepage: <http://www.grc.org/programs.aspx?id=10915>



Drinking Water Disinfection By-Products - Charting the Horizons of Interdisciplinary Research and Application in Water Disinfection, By-Products, Water Reuse and Public Health

August 9-14, 2015, Mount Holyoke College, South Hadley, MA

The 2015 Gordon Research Conference on Drinking Water Disinfection By-Products (DBPs) will present cutting-edge research on the purification of water and the generation of disinfection by-products. With the era of pristine source waters ending, vitally important issues confront scientists, engineers, water utilities, industry groups and public health professionals in the production and delivery of high quality potable water. Increasing demands on scarce water sources, drought, water pollution and an aging water delivery infrastructure are preeminent challenges for society. The Conference will feature a wide range of topics including DBP formation, occurrence, toxicity and its molecular mechanisms, engineering solutions, health effects and regulation. Keeping with the spirit of the GRC, this high impact Conference will assemble scientists at the forefront of their field and will provide a venue for graduate students, postdoctoral fellows and early career scientists to network, to learn and to plan future work together. A Gordon Research Seminar will expand the opportunities for graduate students and postdoctoral fellows to present their work and have it integrated into the general discussion of the Conference. Some poster presentations will be selected for short talks within program sessions. This Conference provides for session lectures with in depth discussions, program discussion sessions, poster presentations as well as for relaxed gatherings during the afternoons and evenings. A hallmark of the GRC is its informal and collegial atmosphere. This Conference will be a catalyst for scientists from different disciplines to gather, to converse, and to fully participate in the excitement of science in the promotion of interdisciplinary collaborations to devise future creative investigations and solutions to the global drinking water crisis.

Homepage: <http://www.grc.org/programs.aspx?id=13781>



European Aerosol Conference, Mailand, 6.-11. September 2015



The 2015 European Aerosol Conference (EAC 2015) will be held in the city of Milan, from September 6th to 11th 2015 under the auspices of the European Aerosol Assembly (EAA), a body that now represents 12 national or regional aerosol societies. This is the first time that the European Aerosol Conference is organized in Milan (Italy), under the umbrella of the Italian Aerosol Society (IAS). During the EAC 2015 the Italian Aerosol Society will celebrate the 8th anniversary and the 7th year of membership in the European Aerosol Assembly.

Scientific Topics

The field of aerosol science has grown rapidly and EAC 2015 will provide an important summary of the state of art. The programme of the conference will be arranged thematically according to the working groups of the EAA, namely:

- Aerosol-based Nanotechnology
- Aerosol Chemistry
- Aerosol Modelling
- Atmospheric Aerosols - Aerosol Processes and Properties
- Atmospheric Aerosols - Specific Aerosol Types
- Electrical Effects
- Fundamentals
- Combustion Aerosols
- Indoor and Working Place Aerosols
- Instrumentation
- Inhalation, exposures and health (formerly Particle-Lung Interactions)
- PM_x

In addition to regular sessions, a number of special topics are chosen for particular focus at the conference.

Conference' homepage: <http://www.eac2015.it/>



15 EuCheMS International Conference on Chemistry and the Environment 20 - 25 September 2015 • Leipzig, Germany



Conference Chairman: Thorsten Reemtsma

Organizing Committee

- Walter Giger, Switzerland
- Hartmut Herrmann, Germany
- Gerhard Lammel, Germany/Czech Republic
- Thorsten Reemtsma, Germany

Themes:

- Emerging contaminants (incl. new analytical methods)
- Water quality, wastewater treatment and reuse, drinking water
- Nanomaterials: from characterization to risk assessment
- Air pollution
- Tropospheric multiphase and heterogeneous chemistry
- Soils and bound residues
- Multimedia partitioning, transport and modeling
- Biodegradation of chemicals in natural and man-made ecosystems
- Isotope techniques and application (for process analysis)
- Predicting compound properties and effects
- Chemical risk and regulatory issues (REACH, biocides, pesticides, pharmaceuticals)
- Biological effects of chemicals
- Human exposure and toxicity

More Information: <http://www.icce2015.org/>

Conference Secretary: icce2015@fu-confirm.de



Kurznachrichten

Nanosicherheitsforschung – sind wir auf dem richtigen Weg?



Diese provokante Frage stellt Prof. Dr. Harald F. Klug, Mitglied der Geschäftsleitung der schweizerischen EMPA (Schweizer Forschungsinstitut für Materialwissenschaften und Technikentwicklung) in Band 126 der „Angewandten Chemie“ (2014), S. 12502 ff (Open Access, DOI: 10.1002/ange.201403367).

Der Anlass zu dieser Frage wird aus der Einleitung ersichtlich:

„Die Zahl der publizierten Studien zum Thema Nanosicherheit spricht für sich. Wir verzeichnen seit ungefähr 15 Jahren einen nahezu exponentiellen Anstieg bei den Publikationen zur „Nanotoxikologie“. Waren es bis zum Jahr 2000 noch wenige Hundert, so sind seit 2001 mehr als 10 000 Publikationen zum Thema „Nanomaterialien: Umwelt und Gesundheit“ veröffentlicht worden. Allein, eine Klarheit beider Aussage zur Sicherheit der Nanomaterialien bleiben die meisten dieser Studien schuldig. Im Gegenteil: Viele der Arbeiten widersprechen einander oder kommen auch zu völlig falschen Schlussfolgerungen.

Bereits vor drei Jahren haben wir an gleicher Stelle auf die Missstände bei den Studiendesigns und die Fehlerquellen in den Methoden hingewiesen. Auf der Basis einer umfassenden Literaturstudie und an ausgewählten toxikologischen Endpunkten soll aufgezeigt werden, wo die wesentlichen Schwachpunkte der Studien liegen und was wir in der Zukunft verbessern müssen“.

EFSA Risk Assessment Guidance for Plant Protection Products



Die European Food Safety Authority (EFSA) veröffentlichte kürzlich in ihrem Journal (2014; 12(10):3874; open

access: www.efsa.europa.eu/efsajournal) eine neue Guideline:

“Guidance on the assessment of exposure of operators, workers, residents and bystanders in risk assessment for plant protection products”.

Abstract.

Regulation (EC) No 1107/2009 ensures that the residues of plant protection products (PPPs), consequent to application consistent with good plant protection practice and having regard to realistic conditions of use, shall not have any harmful effects on human health. In 2010, the EFSA Panel on Plant Protection Products and their Residues (PPR) prepared a Scientific Opinion on “Preparation of a Guidance Document on Pesticide Exposure Assessment for Workers, Operators, Residents and Bystanders”, which highlighted some inconsistencies between the approaches adopted by regulatory authorities. Therefore, the PPR Panel proposed a number of changes to those practices in use (e.g. routine risk assessment for individual PPPs should continue to use deterministic methods, and a tiered approach to exposure assessment remains appropriate; there is a need to introduce an acute risk assessment for operators, workers and bystanders where PPPs are acutely toxic; for acute risk assessments, exposure estimates should normally be based on 95th percentiles of relevant datasets, whereas, for longer term risk assessments, the starting point should be a 75th percentile). To prepare a Guidance Document, an ad hoc working group was established to revise all available data and procedures to perform the operator, worker, resident and bystander risk assessment. In addition to the data reported in the PPR opinion, further data were made available to the working group which were analysed and considered. The opinion also identifies those scenarios for which exposure estimates are least satisfactory, and makes recommendations for further research that would reduce current uncertainties. An exposure calculation spreadsheet, reflecting the Guidance content, is annexed to this Guidance Document, to support stakeholders in performing the assessment of exposure and risk.



Weltweite integrierte Bewertung systemischer Pestizide

Die Bedenken über die Auswirkungen systemischer Pestizide auf eine Reihe nützlicher Arten haben in den letzten 20 Jahren beständig zugenommen. Während sich die Aufmerksamkeit hauptsächlich auf die wirtschaftlich bedeutsame Honigbiene richtete, haben Wissenschaftler und andere alarmiert den Rückgang auch vieler anderer Insektenarten festgestellt.

Das Hauptaugenmerk der Besorgnisse lag auf einer Gruppe von Chemikalien, die als Neonicotinoide bezeichnet werden und die als Pestizide in den 90er Jahren in die Landwirtschaft eingeführt wurden, wo sie mittlerweile breite Anwendung finden. Auch wenn zum Beispiel von der EU-Kommission einige Beschränkungen erlassen worden sind, sind doch viele Regierungen hinsichtlich der Aussagekraft der wissenschaftlichen Erkenntnisse zu unsicher, um Maßnahmen zu ergreifen.

Das *Worldwide Integrated Assessment* (WIA, weltweite integrierte Bewertung) durch die *Task Force on Systemic Pesticides* (Arbeitsgruppe Systemische Pestizide) zielt darauf ab, eine umfassende, unabhängige Analyse dieser Chemikalien und ihrer Auswirkungen auf die Ökosysteme und die Biodiversität vorzunehmen, um Informationen über angemessene zukünftige Maßnahmen zu liefern.

Die Ergebnisse der Bewertung wurden Mitte des Jahres auf verschiedenen Pressekonferenzen veröffentlicht. Die Pressemitteilung kann unter “THE TASK FORCE ON SYSTEMIC PESTICIDES” mediasupport@belga.be angefordert werden.

In “**Environmental Science and Pollution Research**” (DOI 10.1007/s11356-014-3229-5) erschien hierzu der Artikel “*Conclusions of the Worldwide Integrated Assessment on the risks of neonicotinoids and fipronil to biodiversity and ecosystem functioning*”



Geplantes Freihandelsabkommen (TTIP) in der Kritik – negative Konsequenzen für Umweltstandards befürchtet

Stellvertretend für viele kritische Stellungnahmen zu möglichen negativen Konsequenzen von TTIP für Umweltstandards sei auf die Position der Sprecherin Netzwerks Evangelischer Entwicklungspolitischer Organisationen in Europa (Aprodev), Karin Ulmer, verwiesen. Diese hat gegenüber dem Evangelischen Pressedienst die Befürchtung geäußert, das geplante Freihandelsabkommen TTIP zwischen der EU und den USA könne die Nachhaltigkeit gefährden, die die EU in den vergangenen Jahren mit ihren Agrarreformen angestrebt hat. Unakzeptabel sei auch der vorgesehene Investitionsschutz für Unternehmen und Konzerne. Sie können demnach Regierungen vor Schiedsgerichten verklagen, wenn Gesetze zu einer wirtschaftlichen Belastung werden. Dies untergrabe die nationale Gerichtsbarkeit, bestehende Rechtssysteme und demokratische Strukturen, kritisierte Ulmer. Zur Aprodev gehören 16 evangelische Entwicklungsorganisationen, unter anderem "Brot für die Welt". (<http://m.zeitzeichen.net/index.php?id=12719&MP=9-8938>)

Weitere kritische Stellungnahmen u.a. von Greenpeace (<http://www.greenpeace.org/luxembourg/fr/news/STOPP-TTIP/>), und dem BUND (http://www.bund.net/fileadmin/bundnet/pdfs/publikationen/bund_magazin/2014/01/140212_bundmagazin_kommentar.pdf)



EuCheMS drängt auf Maßnahmen gegen den Klimawandel

In the beginning of November, Prof. Rajendra Pachauri from the Intergovernmental Panel on Climate Change presented the results of the IPCC latest Assessment Report at the European Parliament.

On the occasion of this report, EuCheMS has sent a letter to President Schulz and President Juncker urging the Parliament and the Commission to do all in their power to reduce the emissions of greenhouse effect gases in the EU.

In the words of Prof. Pachauri, "We really need action on climate change now", and EuCheMS is certain that chemistry research will significantly contribute to achieve this goal, not only through analysing the current problems but also in finding sustainable answers.

Access to the original document:

http://www.euchems.eu/fileadmin/user_upload/news/EuCheMS_letter_greenhouse.pdf

Public Consultation on the Ratification by the EU of the Minamata Convention on Mercury

EuCheMS has submitted its input to the public consultation on the Ratification by the EU of the Minamata Convention on Mercury.

In June 2014, the European Commission launched a public consultation to solicit stakeholders' input on specific issues related to the implementation of the Minamata Convention on Mercury. The results of the consultation will be used as input for the preparation of the Impact Assessment covering specific key areas where EU legislation may need to be amended such as:

- Import restrictions for metallic mercury from non-Parties to the Convention;
- Export ban for certain products containing mercury;
- Mercury use in new products and processes;
- Restrictions on certain processes where mercury is used;
- Mercury use in Artisanal and Small-scale Gold Mining (ASGM);
- Environmentally sound storage of non-waste mercury stocks.

Downloadable file:

http://www.euchems.eu/fileadmin/user_upload/Publications/Minamata.pdf

EU Joint Research Centre (JRC): Chemical pollutant mixtures: how safe are they?

The JRC recently published the results of a co-authored study on the risks posed by chemical pollutant mixtures in the environment. This work is part of the first EU-wide campaign to test the use of biological based assay (bioassays) for assessing water quality in Europe, following the recommendations of the communication of the European Commission on the effects of chemicals (COM(2012) 252), calling for a greater effort to understand and assess the risks associated with chemical mixtures.

Results of the study highlighted the need of precautionary actions even in cases where individual toxicants are present at seemingly harmless concentrations. Some of the observed effects of chemical pollutant mixtures included: changes in marine microbial composition, microalgae toxicity, fish embryo toxicity and increased presence of genes linked to stress response.

The effects of complex chemical mixtures on wildlife and humans have rarely been analysed under environmentally relevant scenarios. To address this issue, the study proposes an innovative approach bridging the gap between ecological and chemical monitoring. Two mixtures were tested, composed of 14 and 19 substances of concern, each present at its safety limit concentration as imposed by European legislation: pesticides, pharmaceuticals, heavy metals, polyaromatic hydrocarbons, surfactants and plasticisers. The effects of the mixtures were assessed in 35 bioassays, among them in vivo studies, based on eleven organisms all having a different position in the food chain.

Effects of this chemical mixture have been also investigated as gene expression changes in four different organisms. The objective is to identify biomarkers that could be used as early warnings of exposure, even before other adverse outcomes become visible.

Further work will be needed to evaluate the performances and harmonise the different bioassays currently available.

Scientific Publication:

[Toxicol. Sci.\(2014\)doi: 10.1093/toxsci/kfu118](http://dx.doi.org/10.1093/toxsci/kfu118)



UBA-Texte 72/2014: Environmental hazard of selected TiO₂ nanomaterials under consideration of relevant exposure scenarios

This project investigated the ecotoxicological hazard of two different sized TiO₂ nanomaterials and one non-nano sized TiO₂ reference material to organisms inhabiting different environmental compartments. Following standardized tests (OECD guidelines) were used to investigate the influence of these materials on several test organisms: Daphnia sp. acute immobilization test (Test No. 202), Fish embryo acute toxicity (FET) test (Test No. 236), Activated sludge, respiration inhibition test (Test No. 209), Earthworm, acute toxicity test (Test No. 207), Earthworm, reproduction test, (Test No. 222). Thereby, different organisms and effect levels (respiration, mobility, mortality, reproduction, embryonic development) were considered. Main focuses of the study were tests under relevant exposure scenarios. Therefore, Daphnia sp. acute immobilization tests and activated sludge tests were performed with solar radiation. Mixture experiments with nano-TiO₂ and an organic contaminant were conducted with the acute and chronic earthworm and activated sludge respiration tests.

Download at:

<http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/environmental-hazard-of-selected-tio2-nanomaterials>

European Environmental Agency Technical Report No 20/2014:



Costs of air pollution from European industrial facilities 2008–2012 — an updated assessment

This report presents an updated assessment of the cost of damage to health and the environment in monetary terms from air pollution released in the years 2008 to 2012 by industrial facilities in the EU-27, Norway and Switzerland. The approach employed to estimate damage costs is again based upon existing standard policy tools and methods, such as those originally developed under the EU's Clean Air for Europe (CAFE) programme for the main air pollutants and since updated during the recent review of the European Union's (EU) air pollution policies performed by the European Commission. The assessment also uses other existing models and approaches used to inform policymakers about the damage costs for other pollutants. Together, the methods are used to quantify the impacts and associated damage costs caused by a number of pollutants emitted from industrial facilities, including:

- the main air pollutants: ammonia (NH₃), nitrogen oxides (NOX), non-methane volatile organic compounds (NMVOCs), particulate matter (PM10) and sulphur oxides (SOX);
- heavy metals: arsenic, cadmium, chromium, lead, mercury and nickel;
- organic compounds: benzene, dioxins and furans, and polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs);
- carbon dioxide (CO₂).

Each of these pollutants can harm human health, the environment or both. Certain of them contribute to forming ozone and particulate matter in the atmosphere. There are significant differences in terms of the extent of current knowledge between the selected pollutants and the methods available to estimate their respective impacts.

Downloadable from:

<http://www.eea.europa.eu/publications/costs-of-air-pollution-2008-2012>

Unsere neuen Mitglieder

Neuaufnahmen Umweltchemie und Ökotoxikologie vom 13.08.2014 bis 24.11.2014

Bahlmann, Arnold (Dipl. Chem.)

Eintrittsdatum FG: 11.09.2014

Schaffer, Mario; Dr.

Eintrittsdatum FG: 25.09.2014

Becker, David

Eintrittsdatum FG: 20.10.2014

Schmied Tobies, Maria

Eintrittsdatum FG: 29.10.2014

Boeck, Miriam

Eintrittsdatum FG: 14.11.2014

Schulze Spüntrup, Frederik

Eintrittsdatum FG: 14.11.2014

Drewes, Marc

Eintrittsdatum FG: 22.09.2014

Stark, Lukas

Eintrittsdatum FG: 14.10.2014

Eisenhofer, Martin

Eintrittsdatum FG: 22.10.2014

Wüstmann, Daniel Joachim

Eintrittsdatum FG: 08.10.2014

Gottwald, Andreas (Dipl. Chem.)

Eintrittsdatum FG: 15.09.2014

Zeegers, Guido

Eintrittsdatum FG: 06.11.2014

Hauswald, Jessica

Eintrittsdatum FG: 17.10.2014

Zierke, David

Eintrittsdatum FG: 28.10.2014

Heyl, Denise

Eintrittsdatum FG: 14.10.2014

Hofmann, Josef; Prof. Dr.

Eintrittsdatum FG: 09.10.2014

Koehler, Thomas; Dr.

Eintrittsdatum FG: 09.10.2014

Kühner, Susanne ; Dr.

Eintrittsdatum FG: 15.09.2014

Kusebauch, Björn; Dr.

Eintrittsdatum FG: 12.11.2014

Lorenz, Joachim

Eintrittsdatum FG: 03.09.2014

Mai, Alexander

Eintrittsdatum FG: 15.10.2014

Neitsch, Julia

Eintrittsdatum FG: 21.10.2014

Noack, Sandra; Dr.

Eintrittsdatum FG: 09.10.2014

Rommel, Dimitri

Eintrittsdatum FG: 14.11.2014

Geburtstage

Der Vorstand und die Redaktion der Mitteilungen unserer Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie gratulieren unseren Jubilaren aufs herzlichste

Geburtstagsliste Januar bis März 2015

60 Jährige

Dr. Karl Heinz Kühnemund

Merseburg, Geburtstag: 04.01.1955

Dr. Reinhard Beck

Greifenberg, Geburtstag: 06.01.1955

Gerhard Beck

Sanitz, Geburtstag: 10.01.1955

Dr. Walter Sterzel

Düsseldorf, Geburtstag: 10.01.1955

Arnold Schmidts

Basel, Geburtstag: 13.01.1955

Thomas Münch

Laaber, Geburtstag: 11.03.1955

Prof.- Dr. Hans Gerd Löhmannsröben

Potsdam, Geburtstag: 12.03.1955

Merten, Hans; Dr.

Karlsruhe, Geburtstag: 24.03.1955

65 Jährige

Dr. Eberhard Winkler

Zittau, Geburtstag: 26.01.1950

Dr. Franz Saykowski

Köln, Geburtstag: 16.02.1950

70 Jährige

Prof. Dr. Cornelius Zetzsch

Bayreuth, Geburtstag: 25.02.1945

- Vorsitzender AK Atmosphärenchemie (01.01.1999 31.12.2004)

Parlar, Harun; Prof .Dr .Dr.

Freising, Geburtstag: 29.03.1945

- 1987 Secotox Preis der von der OECD getragenen International Academy of Environmental Safety (IAES)
- Goldene Ehrennadel 1988 des Internationalen Forums für Umweltfragen e.V. und der International Academy of Environment Safety (IAES)
- Varan Award 1994 of the Centre Analytical and Environmental Chemistry, Ottawa/Canada
- 2008 Heinz Maier Leibnitz Medaille der TU München (NCH 02/08)