



Departement für Wirtschaft, Soziales und Umwelt des Kantons Basel-Stadt

Amt für Umwelt und Energie

Überwachung des Rheins - Non-Target-Screening mit LC-HRMS

Team - AUE Basel-Stadt, Steffen Ruppe plus IKSR-Projektgruppe

Rhein

Kennzahlen

Basel- Abfluss durchschnittlich 1050 m³/s
80% der Schweizer Bevölkerung über den Rhein
20 Millionen Menschen beziehen nach Basel

Rheinüberwachungsstation

Erste von insgesamt sieben Stationen
Internationale Kommission zum Schutz des Rheins
Überwachung von Trends und Störfällen
Warn- und Alarmmeldungen werden über den Rhein
-> Grenzen für Meldungen liegen bei 0.1/ 0.5
bzw. bei 1/ 3 µg/L bei sonstigen Chemikalien



Rheinmonitoring in Basel

Basic Parameter

pH, Temp., O₂, TOC,...

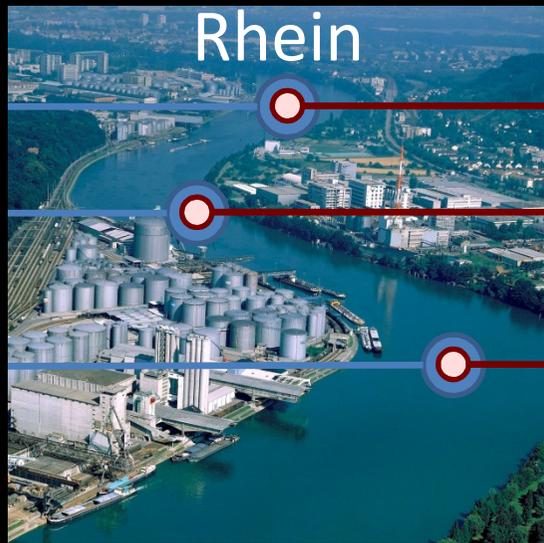
Organik

GC/GC-MS and LC-HRMS

Anorganik

Metalle, Nährstoffe, Ionen

CH-Ufer



Deutsche Ufer

Birs, Birsig

Industrie/
Kommunale ARA

RÜS
Weil am Rhein

Wiese (Fluss)
Industrie/
Kommunale ARA

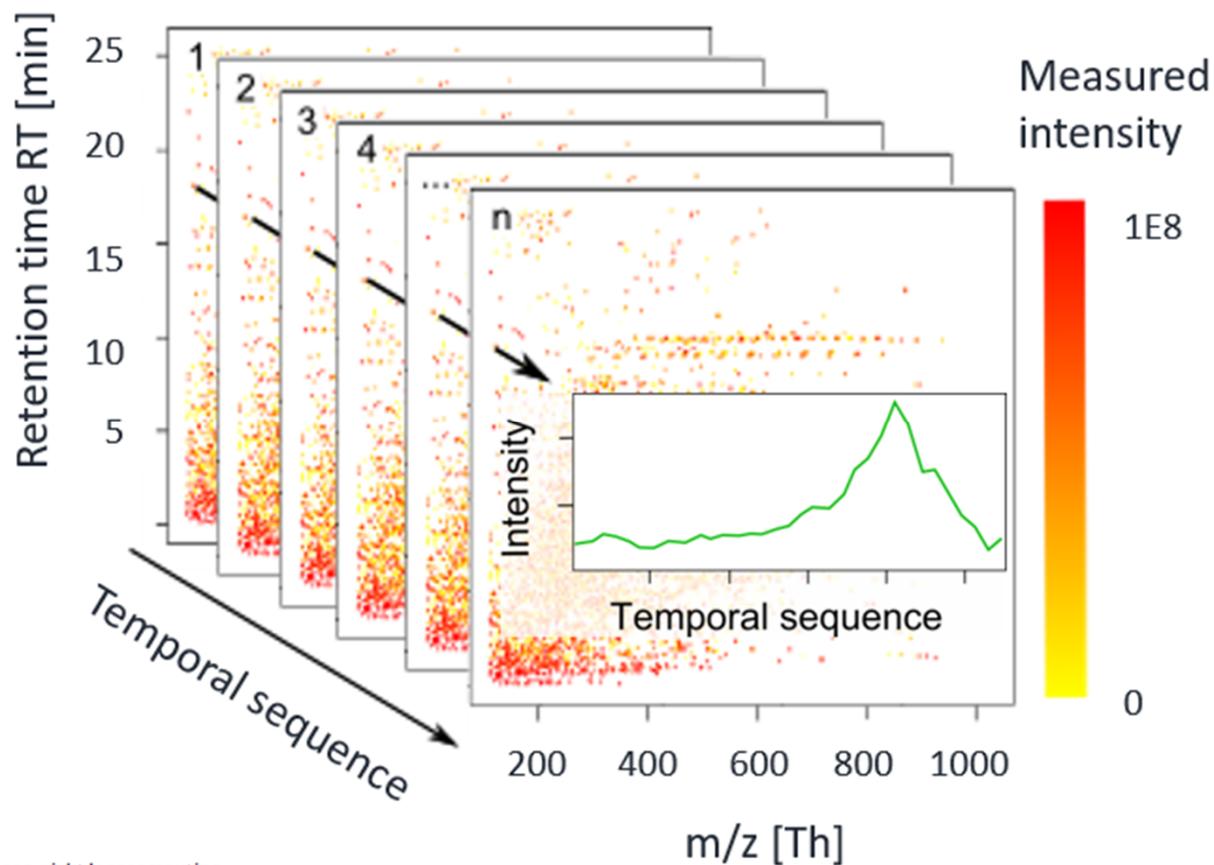
Rhein aufwärts

Analytische Methode

Ziel: Am Messtag müss

- 0,5 L Wasser, pH-We
- ca. 150 interne Stan
- offline-Aufarbeitung
- Messung mit QExact von 120000 ($m/z = 2$
- Auswertung der Dat
- a) 55 Leitsubstanzen
- b) ca. 330 Substanze

**c) Nontarget-Screen
Envimass**



Non-Target-Screening

Masse - $[M]^+ = 150.1036$



Informationsstand

Summenformel: C₇H₁₄NO₂; Retentionszeit 1.1 min

→ Proben der IWB und aus NADUF-Programm grenzten Einleitort ein.

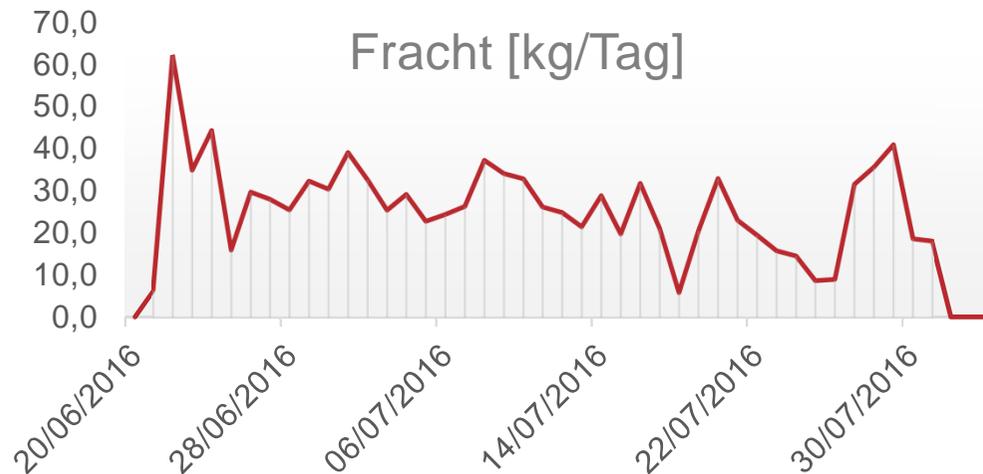
→ kein Einleiter gemeldet

→ Kläranlagenmuster führte zum Einleiter (Bereich)

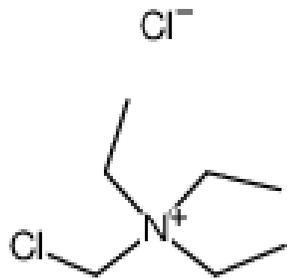
Rote Markierung = pos. Befund, blaue Markierung = neg. Befund

Non-Target-Screening

Masse - $[M]^+ = 150.1036$



N-(Chlormethyl)-triethylammoniumchlorid



- unbekanntes Nebenprodukt
- Standard war nicht verfügbar
- Gesamtfracht über 1 Tonne
- AUE-Aargau und Industrieunternehmen waren sehr kooperativ
→ 20 Tage nach Meldung wurde die Substanz aufgeklärt

Non-Target-Screening

Non-Target-Screening liefert wertvolle Informationen

Relevante Einleitungen sind teilweise nur durch diese nichtzielgerichtete Analytik erfassbar

LC-HRMS wird am Rhein an vielen Stationen eingeführt

- NTS ist sehr aufwendig/ braucht viele Ressourcen beim Personal und bei der IT
- Zusammenarbeit/ Austausch von Informationen ist ein Schlüssel, um diese Technik effizient anzuwenden

Projekt mit dem Lead bei der IKSR aufgeglegt (EU finanziert)

IKSR - Projekt

Start April 2021

Projektleiter Dr. Pavel Ondruch

Basel, Karlsruhe, Koblenz,
Bad Honnef, Bimmen-Lobith

IKSR- SANA-Gruppe ist
beratetes Gremium



26.04.2022



Organisation und Ziele des Projektes

Entwicklung eines Tools für:

eine automatisierte Erkennung von Emissionen

schnelle Identifizierung von Schadstoffquellen

eine einfacheren und effizienteren Identifizierung bisher unerkannter Stoffe

Beschreibung der Aufgaben: The Grant Agreement

Aufteilung in Arbeitspakete:

AP1 Analytische Methoden

AP2 IT Infrastruktur

AP3 Vergabe und Entwicklung des Softwares

AP4 Berichte und Verbreitung der Ergebnisse



Analytische Methoden



Messdaten sind von Probenahme, Aufarbeitung und auch von der Messung am LC-HRMS abhängig

- möglichst harmonisierte Methoden an den RÜS
- Methoden-Test laufen aktuell mit Direktinjektion-Technik, Säule Zorbax Eclipse, Messung mindestens mit Zykluszeiten < 1s
- Daten möglichst hochaufgelöst, MS/MS-Typ noch nicht endgültig geklärt

Infrastruktur:

Server bereitgestellt von LUBW

Datei zentral prozessiert

Vergabe und Entwicklung des Softwares

Übergeordnetes Ziel :

Entwicklung der Software für die Auswertung, die Aggregation und die Visualisierung der Daten



Aufgaben:

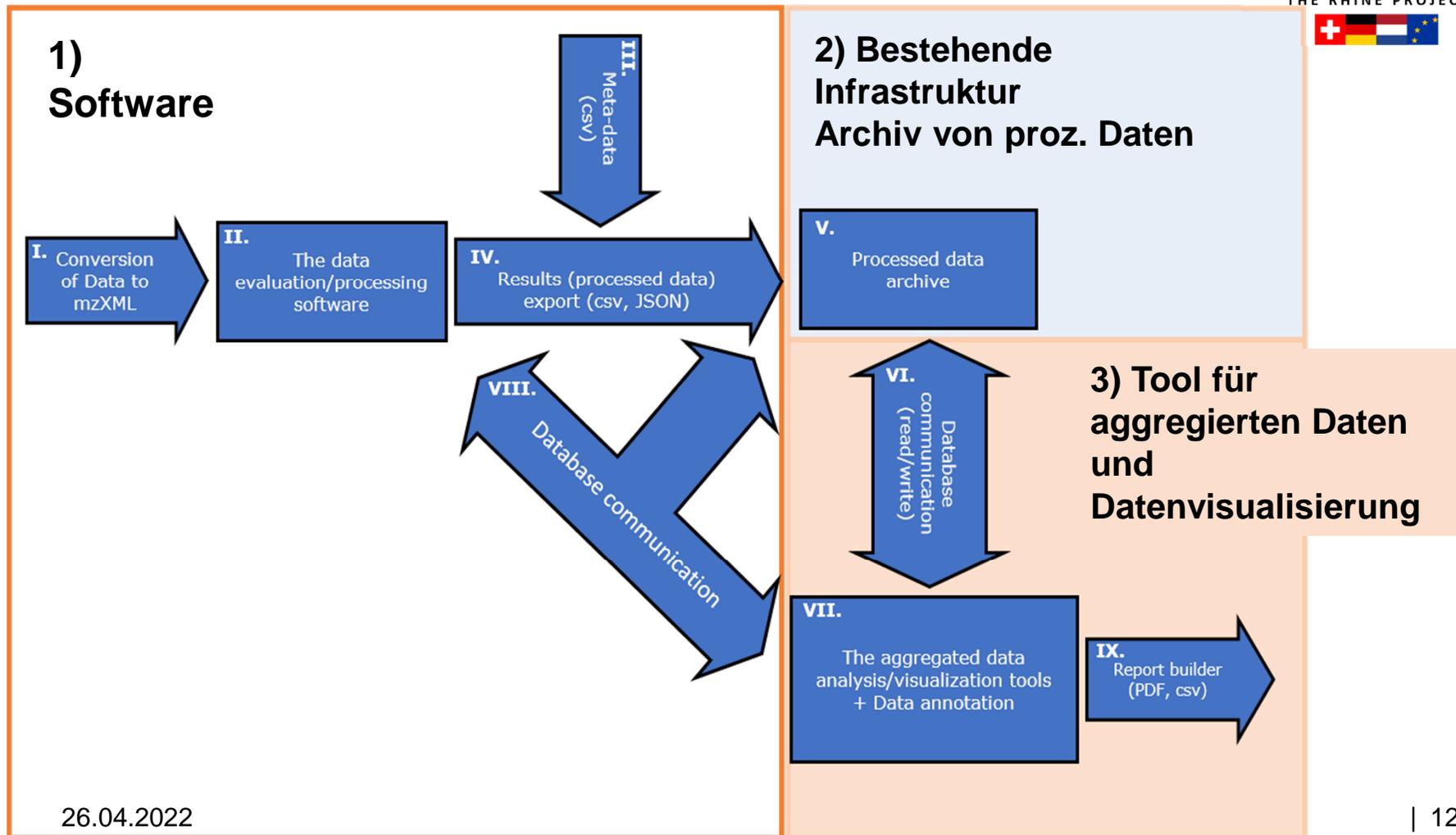
Auswahl einer externen Unterstützung beim Vergabeverfahren

- (Bird & Bird LLP) Juristische Analyse
- europaweite Vergabeverfahren (für unser Projekt ungünstig) **X**
- Verhandlungsvergabe ohne Teilnehmerwettbewerb
einfach, zügig und möglicherweise auch billiger

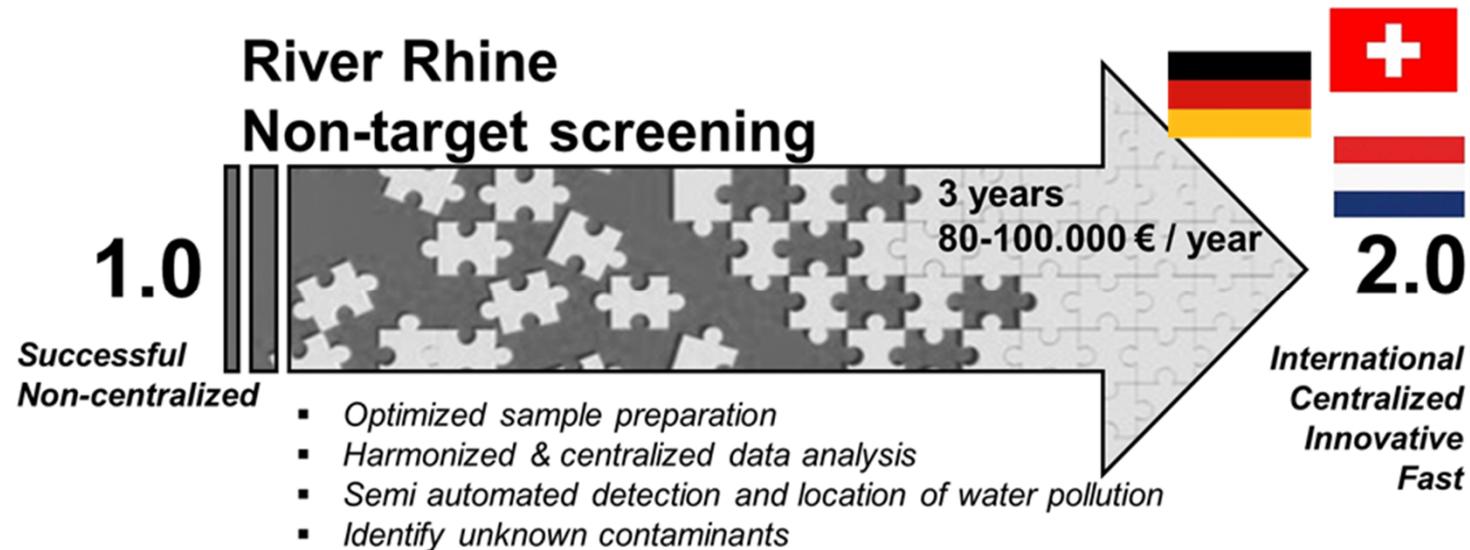
Detaillierte technische Beschreibung des Gesamt-IT-Konzeptes **✓**
→ Einigung auf technischer Aufbau und Funktionen

Umfangreiche Marktanalyse ...

Technische Beschreibung des IT-Konzeptes



Weitere Entwicklungen



EU-Projekt zur Weiterentwicklung des LCMS-Screenings am Rhein (2021-2023)

→ Daten werden zentralisierte gelagert und ausgewertet

→ Einleitquellen können sehr schnell gefunden werden

→ Methoden- und Erfahrungsaustausch auf neuen Level

Zusammenfassung

Nontarget-Screening mit LC-HRMS ist auch in der Routineüberwachung möglich.

Das LC-MS-Screening liefert relevante Ergebnisse mit hohen Frachten.

NTS ist sehr aufwendig – Zusammenarbeit und Datenaustausch ist wichtig

IKSR-Projekt aufgegleist – 5 Stationen messen mit harmonisierter Methode

Software-Envimass (Firma envibee) wird eingesetzt

Nächsten zwei Jahre werden zeigen, was möglich ist!!

→ ähnliche Projekte laufen bei den Trinkwasserversorgern und bei den Schweizer-Umweltämtern