

Zusammenfassung

Das Auftreten von organischen Spurenstoffen in der aquatischen Umwelt stellt eine weltweite Herausforderung dar. Wenngleich die Konzentrationen dieser Substanzen auch vergleichsweise niedrig sind, gibt es große Bedenken über mögliche negative gesundheitliche Auswirkung im Zusammenhang mit Spurenstoffen. Aus diesem Grund haben viele Länder begonnen, Strategien zum Umgang mit Spurenstoffen umzusetzen. Diese Strategien werden häufig auf örtliche Gegebenheiten zugeschnitten und sind an die entsprechenden Belastungssituationen, aber auch die Umwelt oder geographische und ökonomische Situationen angepasst. Somit erscheinen verschiedene Strategien sehr unterschiedlich und wenig vergleichbar. Einige Strategien konzentrieren sich auf die Kontrolle von wenigen toxikologisch bewerteten Substanzen, wohingegen andere eine generelle Verminderung des Spurenstoffeintrags in Gewässer verfolgen. Unabhängig von der Ausrichtung der jeweiligen Strategie spielen analytische Techniken eine große Rolle für die Erfassung und Bewertung der Wasserqualität und den Nachweis von Spurenstoffen.

Ziel dieser Arbeit war es, die grundlegenden Prinzipien der vorgeschlagenen oder bereits umgesetzten Managementstrategien zu untersuchen, die jeweiligen analytischen Anforderungen zu identifizieren und zu evaluieren, wie zukünftige analytische Techniken zur Einführung von ganzheitlicheren Managementstrategien und somit zum verbesserten Schutz von Umwelt und Gesundheit beitragen können.

Im ersten Schritt wurden die Managementstrategien aus den Vereinigten Staaten von Amerika (USA), Australien, der Europäischen Union (EU) und der Schweiz untersucht. Die Motivationen der Strategien wurden bewertet und die grundlegenden Paradigmen identifiziert. Es konnte gezeigt werden, dass die Strategien toxizitätsbasierte und/oder emissionsvermeidende Prinzipien nutzen. In den Strategien der USA, Australiens und der EU wurden toxizitätsbasierte Prinzipien in unterschiedlichen Ausprägungen gefunden. Die Strategien der Schweiz und der EU beinhalten (zum Teil) emissionsvermeidende Ansätze. Toxizitätsbasierte Prinzipien sind gut zur Kontrolle einer begrenzten Anzahl risikobewerteter Substanzen geeignet, aber weniger zum Management von unerwarteten Risiken, verbunden mit Substanzgemischen, sowie nicht bewerteten oder unbekanntem Substanzen. Emissionsvermeidende Prinzipien können unerwartete Risiken einschränken, jedoch ist eine generelle Eintragsvermeidung von Spurenstoffen in Gewässerkörper, auf Grund der vielfältigen Quellen nur schwer umsetzbar. Eine Kombination von beiden Prinzipien wurde als am besten geeignet eingeschätzt um das Auftreten von Spurenstoffen in Gewässern zu kontrollieren. Toxizitätsbasierte Prinzipien würden zur Kontrolle von bekannten und gefährlichen Substanzen eingesetzt und emissionsvermeidende Prinzipien könnten den Eintrag von Spurenstoffen limitieren und somit unerwartete Risiken verringern.

Zur Überwachung von Spurenstoffen in Gewässern, zum Nachweis der Einhaltung von Qualitätsstandards und zur Identifizierung neuer Spurenstoffe werden in allen Strategien schlagkräftige analytische Methoden eingesetzt. Ein Vergleich der jeweiligen Ansprüche der Strategien an die Analytik zeigte, dass alle Managementstrategien die gleichen analytischen Strategien nutzen (wenn auch in unterschiedlichem Umfang). Dies sind Target-, Suspects und Non-Target-Screening. Die verwendeten analytischen Techniken basieren hauptsächlich auf Umkehrphasen-Flüssigchromatographie (reversed phase liquid chromatography (RPLC)) mit massenspektrometrischer Detektion. Diese Technik ist sehr gut etabliert und eignet sich für die Trennung und den Nachweis von mittel- bis unpolaren Substanzen. Mit zunehmendem Verständnis für die Herkunft und das Umweltverhalten von Spurenstoffen wurde klar, dass das chemische Spektrum von Spurenstoffen größer ist, als der Bereich von Substanzen, die mittels RPLC erfasst werden können. Besondere Limitierungen weist die RPLC für die Trennung von sehr polaren Substanzen auf. Um diese analytische Lücke zu schließen wurden zwei vielversprechende, fortschrittliche Trenntechniken auf ihre Anwendbarkeit für die Gewässeranalytik hin untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass die serielle Kopplung von RPLC mit hydrophiler Interaktions-Flüssigchromatographie (HILIC) und die superkritische Fluidchromatographie (SFC), beide mit massenspektrometrischer Detektion, ein signifikant breiteres Spektrum an Substanzen trennen können als RPLC alleine. Die Anwendbarkeit der beiden Techniken für das Screening nach Spurenstoffen in Gewässerproben konnte ebenfalls nachgewiesen werden. Die Komplementarität und Orthogonalität der beiden Techniken bietet große Vorteile für die Überwachung bekannter Substanzen und die Identifizierung unbekannter Substanzen. Die Anwendung beider polaritätserweiterter Trenntechniken erlaubt es die Gewässerqualität umfassender zu bewerten und weitere relevante Spurenstoffe zu identifizieren, die ein Risiko für Umwelt und Gesundheit darstellen können. Dadurch ergibt sich die Chance zur Umsetzung ganzheitlicherer Managementstrategien, die ein breiteres Spektrum an Spurenstoffen betrachten und somit den Schutz der Umwelt und der Trinkwasserressourcen verbessern.