



Spuren in der Vergangenheit lesen

28. August 2018 | Irene Bättig
Themen: Schadstoffe

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

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

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

Massenspektrometrie

filtered,.extbase-debugger-center .extbase-debug-proxy,.extbase-debugger-center .extbase-debug-ptype,.extbase-debugger-center .extbase-debug-visibility,.extbase-debugger-center .extbase-debug-scope{color:#fff;font-size:10px;line-height:12px;padding:2px 4px;margin-right:2px;position:relative;top:-1px}.extbase-debugger-center .extbase-debug-scope{background-color:#497AA2}.extbase-debugger-center .extbase-debug-ptype{background-color:#698747}.extbase-debugger-center .extbase-debug-visibility{background-color:#698747}.extbase-debugger-center .extbase-debug-dirty{background-color:#FFFFB6}.extbase-debugger-center .extbase-debug-filtered{background-color:#4F4F4F}.extbase-debugger-center .extbase-debug-seeabove{text-decoration:none;font-style:italic}.extbase-debugger-center .extbase-debug-property{color:#f1f1f1}.extbase-debugger-center .extbase-debug-closure{color:#9BA223;}Extbase Variable Dumparray(2 items) publications => '17075' (5 chars) libraryUrl => " (0 chars) Extbase Variable Dumparray(1 item) 0 => Snowflake\Publications\Domain\Model\Publicationprototypepersistent entity (uid=17075, pid=124) originalId => protected17075 (integer) authors => protected'Alygizakis, N. A.; Samanipour, S.; Hollender, J.; Ibáñez, M.; Kaserzon, S.; Kokkali, V.; van Leerdam, J. A.; Mueller, J. F.; Pijnappels, M.; Reid, M. J.; Sc hymanski, E. L.; Slobodnik, J.; Thomaidis, N. S.; T homas, K. V.' (326 chars) title => protected'Exploring the potential of a global emerging contaminant early warning network through the use of retrospective suspect screening with high-resolution mass spectrometry' (168 chars) journal => protected'Environmental Science and Technology' (36 chars) year => protected2018 (integer) volume => protected52 (integer) issue => protected'9' (1 chars) startpage => protected'5135' (4 chars) otherpage => protected'5144' (4 chars) categories => protected" (0 chars) description => protected'A key challenge in the environmental and exposure sciences is to establish experimental evidence of the role of chemical exposure in human and environmental systems. High resolution and accurate tandem mass spectrometry (HRMS) is increasingly being used for the analysis of environmental samples. One lauded benefit of HRMS is the possibility to retrospectively process data for (previously omitted) compounds that has led to the archiving of HRMS data. Archived HRMS data affords the possibility of exploiting historical data to rapidly and effectively establish the temporal and spatial occurrence of newly identified contaminants through retrospective suspect screening. We propose to establish a global emerging contaminant early warning network to rapidly assess the spatial and temporal distribution of contaminants of emerging concern in environmental samples through performing retrospective analysis on HRMS data. The effectiveness of such a network is demonstrated through a pilot study, where eight reference laboratories with available archived HRMS data retrospectively screened data acquired from aqueous environmental samples collected in 14 countries on 3 different continents. The widespread spatial occurrence of several surfactants (e.g., polyethylene glycols (PEGs) and C12AEO-PEGs), transformation products of selected drugs (e.g., gabapentin-lactam, metoprolol-acid, carbamazepine-10-hydroxy, omeprazole-4-hydroxy-sulfide, and 2-benzothiazole-sulfonic-acid), and industrial chemicals (3-nitrobenzenesulfonate and bisphenol-S) was revealed. Obtaining identifications of increased reliability through retrospective suspect screening is challenging, and

recommendations for dealing with issues such as broad chromatographic peaks, data acquisition, and sensitivity are provided.' (1797 chars) serialnumber => protected'0013-936X' (9 chars) doi => protected'10.1021/acs.est.8b00365' (23 chars) uid => protected17075 (integer) _localizedUid => protected17075 (integer)modified _languageUid => protectedNULL _versionedUid => protected17075 (integer)modified pid => protected124 (integer) Alygizakis, N. A.; Samanipour, S.; Hollender, J.; Ibáñez, M.; Kaserzon, S.; Kokkali, V.; van Leerdam, J. A.; Mueller, J. F.; Pijnappels, M.; Reid, M. J.; Schymanski, E. L.; Slobodnik, J.; Thomaidis, N. S.; Thomas, K. V. (2018) Exploring the potential of a global emerging contaminant early warning network through the use of retrospective suspect screening with high-resolution mass spectrometry, *Environmental Science and Technology*, 52(9), 5135-5144, [doi:10.1021/acs.est.8b00365](https://doi.org/10.1021/acs.est.8b00365), [Institutional Repository](#)

Kontakt



Juliane Hollender

Senior scientist / Gruppenleiterin

Tel. +41 58 765 5493

juliane.hollender@eawag.ch



Andri Bryner

Medienverantwortlicher

Tel. +41 58 765 5104

andri.bryner@eawag.ch

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