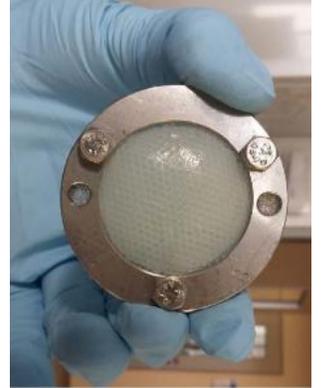
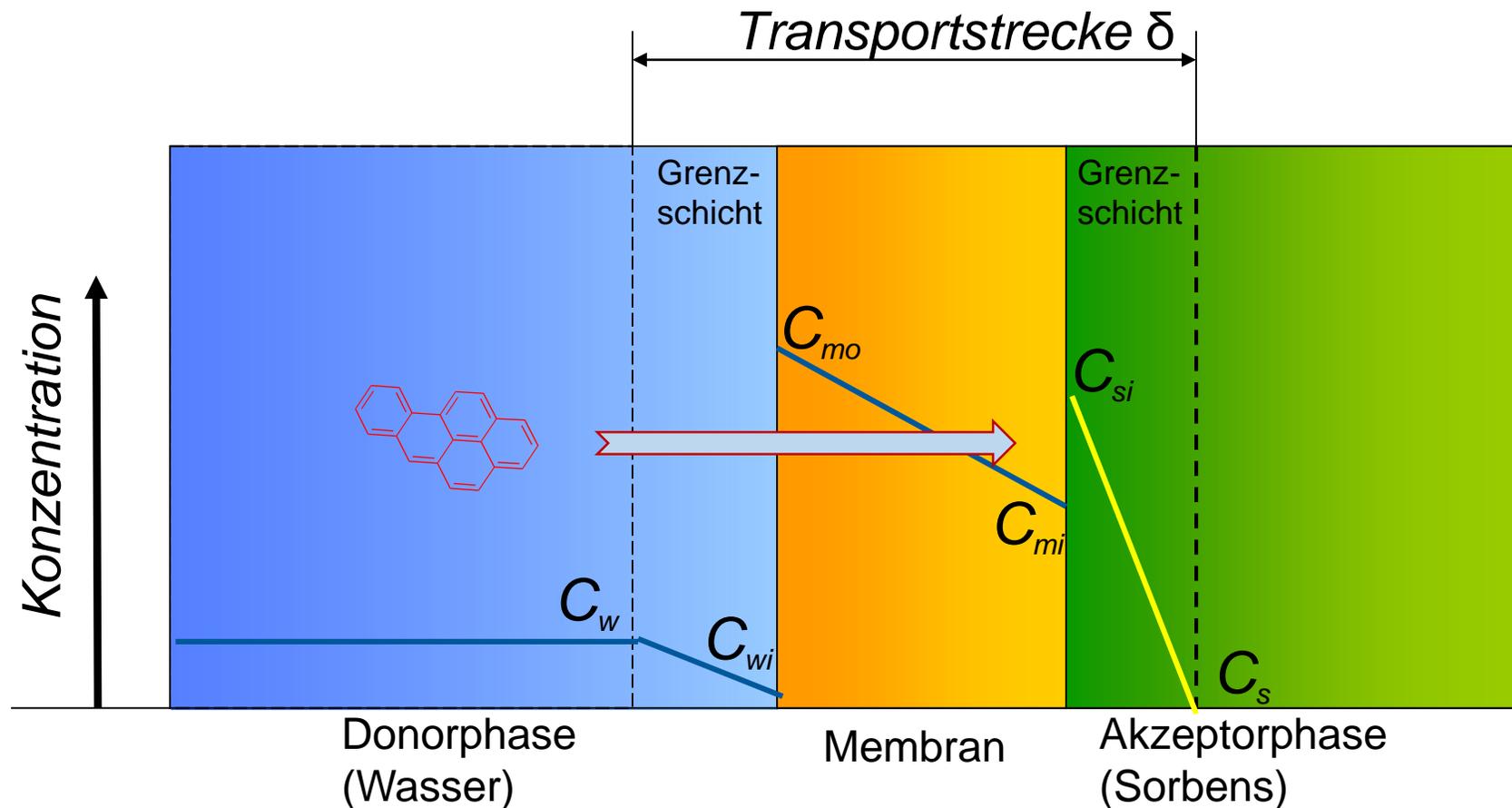


Passivsammler zur zeitgemittelten Erfassung polarer organischer Spurenstoffe im Wasser

- **Funktionsweise** von Passivsammlern
- **Praxistaugliche Passivsammler** für polare organische Substanzen in Oberflächengewässern
- **Anwendungsbeispiele**
- **Literaturhinweise**



Konzentrationsprofil beim stationären Stofftransport in einen Passivsammler



Stoffübergang in einen Passivsammler

(mit permeabler Membran zwischen Wasser und Sorbens)

$$(1) \quad j_i = k_i \Delta C_i$$

$$(2) \quad \frac{dC_s}{dt} = \frac{A k_o}{V_s} \left(C_w - \frac{C_s}{K_{sw}} \right)$$

$$(3) \quad \frac{1}{k_o} = \frac{1}{k_w} + \frac{1}{k_m K_{mw}} + \frac{1}{k_s K_{sm}}$$

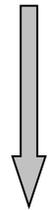
$$(4) \quad \frac{1}{k_o} = \frac{\delta_w}{D_w} + \frac{\delta_m}{D_m K_{mw}} + \frac{\delta_s}{D_s K_{sm}}$$

j_i ... Stoffstrom durch eine Schicht i
 k_i ... Stoffübergangskoeffizient in Schicht i
 k_o ... Gesamtstoffübergangskoeffizient
 c_i, c_s, c_w ... Konzentrationen in den Phasen
 A ... Austauschfläche (Sammleroberfläche)
 K_{sw}, K_{mw}, K_{sm} ... Verteilungskoeffizienten
 $\delta_w, \delta_m, \delta_s$... Diffusionsschichtdicken
 D_w, D_m, D_s ... Diffusionskoeffizienten

$$k_i \approx \frac{D_i}{\delta_i}$$

Stoffakkumulation nach kurzer Expositionszeit („kinetischer Sammler“)

$$\frac{dC_s}{dt} = \frac{Ak_o}{V_s} \left(C_w - \frac{C_s}{K_{sw}} \right) \quad (2)$$



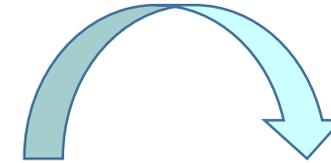
für $t \ll t_{eq} \rightarrow C_s \ll K_{sw} C_w$

$$dC_s \approx \frac{Ak_o}{V_s} C_w dt \quad (5)$$

$$\int dC_s \approx \frac{Ak_o}{V_s} \int C_w dt = \frac{Ak_o}{V_s} C_{w(TWA)} t \quad (6)$$

$$C_s = \frac{C_{w(TWA)} R_s t}{V_s} \quad \text{mit } R_s = A k_o \quad (7)$$

„Sammelrate“

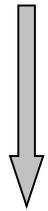


$$C_w \approx \frac{N_s}{R_s t}$$

Mittlere Konzentration über die gesamte Expositionszeit des Sammlers

Stoffakkumulation nach sehr langer Expositionszeit („Gleichgewichtssammler“)

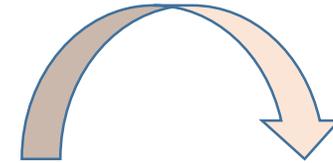
$$\frac{dC_s}{dt} = \frac{Ak_o}{V_s} \left(C_w - \frac{C_s}{K_{sw}} \right) \quad (2)$$



für $t \approx t_{eq} \rightarrow C_s \approx \text{konst.}$, dh. $dC_s/dt = 0$

$$0 = C_w - \frac{C_s}{K_{sw}} \quad (8)$$

$$C_s = C_{w(TWA)} K_{sw}$$



$$C_w \approx \frac{N_s}{K_{sw} V_s}$$

(9)

Momentane Konzentration
zum Zeitpunkt der
Sammler-Rückholung!

Dauer der kinetischen Aufnahmephase eines Sammlers (und Wert der Sammelrate) werden beeinflusst durch:

Molekulare Stoffeigenschaften (D_w , D_m , K_{mw} , ...)

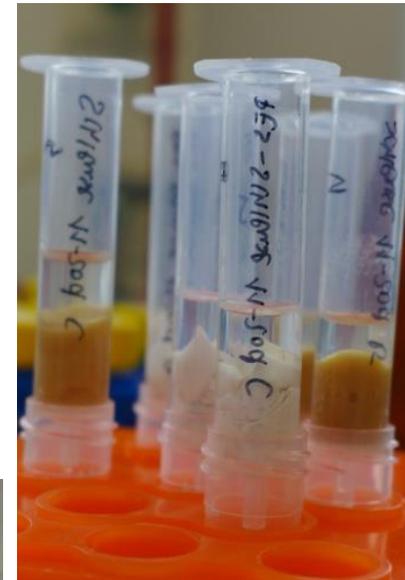
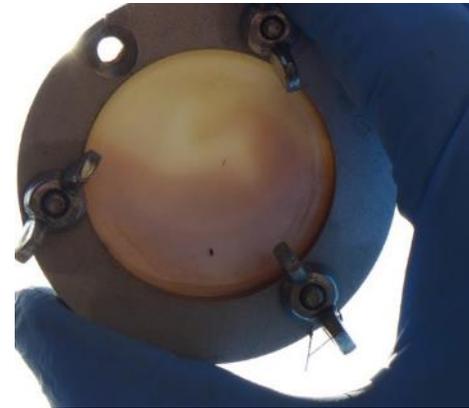
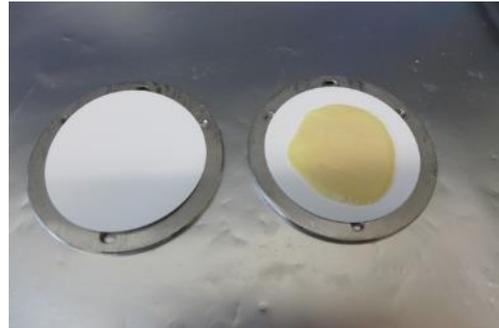
Sammlerdesign (A , α , l_m , ...)

Milieubedingungen:

- Wassertemperatur
- Aufwuchs (Biofilm) und Belag auf der Membran
- Strömungsgeschwindigkeit des Wassers
- Gasaustausch durch die Membran

Polar Organic Compounds Integrative Sampler (POCIS)

entwickelt von D. Alvarez, J. Huckins, *et al.*, U.S. Geological Survey, ~ 2000



D.A. Alvarez, 2010, Guidelines for the use of the semipermeable membrane device (SPMD) and the polar organic chemical integrative sampler (POCIS) in environmental monitoring studies: U.S. Geological Survey, Techniques and Methods 1–D4, 28 p.

DGT (= Diffusive Gradients in Thin-films)



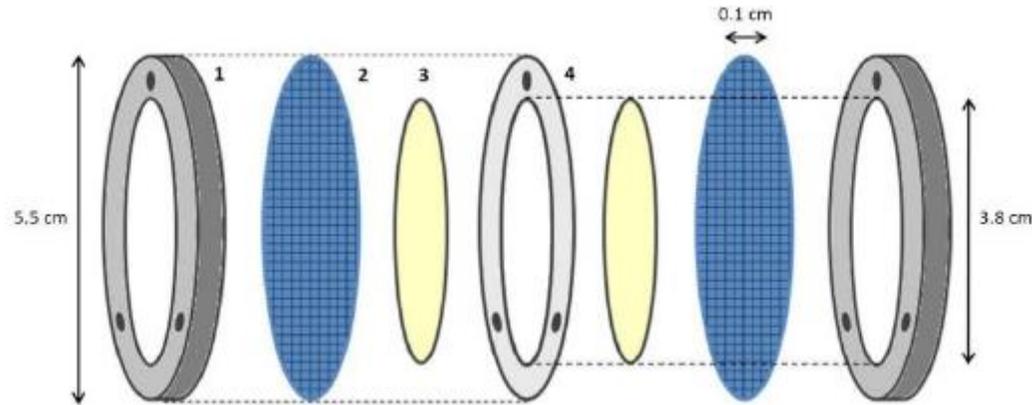
- entwickelt von W. Davison und H. Zhang, Lancaster Univ., UK, ~ 1993,
- ursprünglich als Passivsammler (PS) für Metall-Ionen,
- modifizierte Varianten auch für organische Verbindungen (→ „o-DGT“)
- Technische Informationen zu DGT: → <https://www.dgtresearch.com/>

W. Davison (Ed.), Diffusive Gradients in Thin-Films for Environmental Measurements, Cambridge University Press, 2016, Cambridge, UK.

C. Chen, H. Zhang, K.C. Jones. *J. Environ. Monit.* 14 (2012) 1523–1530

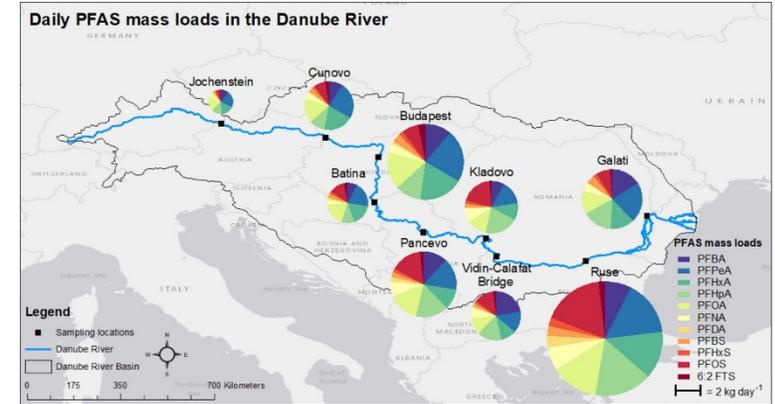
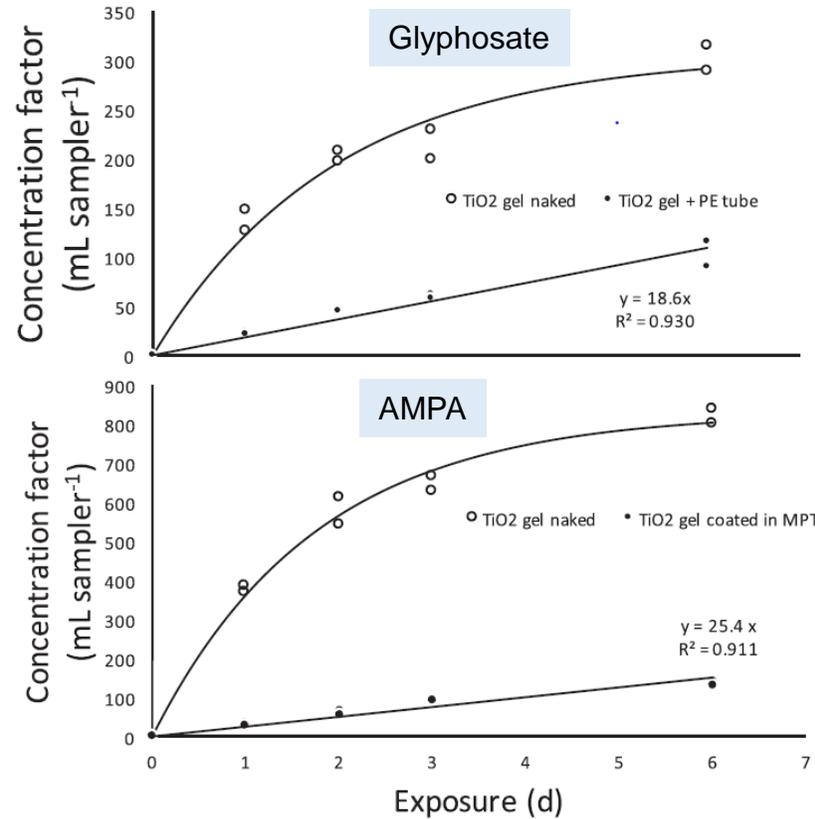
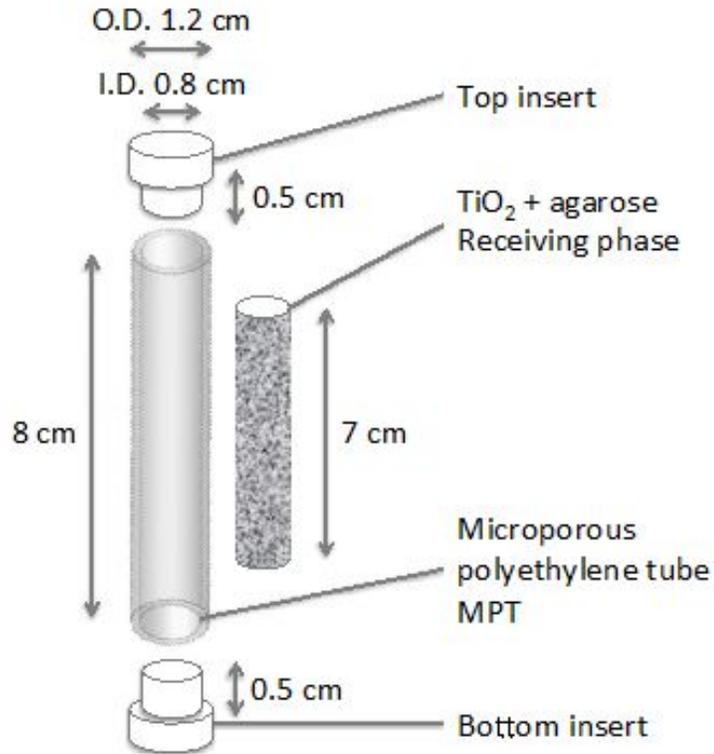
Hydrogel-Sammler (RECETOX)

entwickelt von J. Urik & B. Vrana, RECETOX, Masaryk Uni. Brno, CZ, ~ 2017

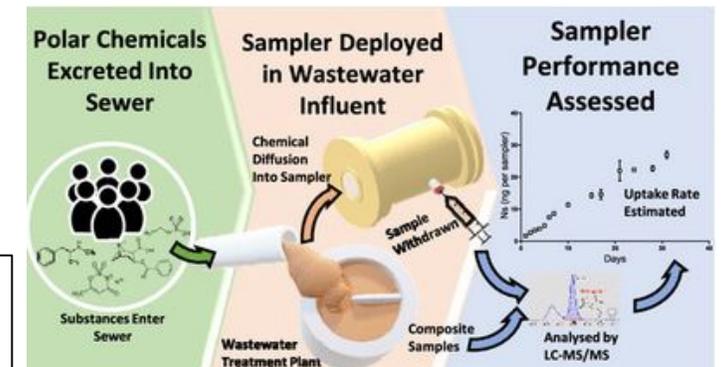


MPT-Sammler (Microporous Polyethylene Tube)

entwickelt von S. Kaserzon *et al.*, Univ. of Queensland, Australien (~ 2015)



Modifikationen und neue Anwendungen für
 → PFAS
 → Pharmaka & Drogen
 → → „Abwasser-basierte Epidemiologie“



V. Fauvelle, N. Montero, J.F. Mueller, A. Banks, N. Mazzella, S.L. Kaserzon. *Chemosphere* 188 (2017) 241-248.
 R. Verhagen, S.L. Kaserzon, B.J. Tschärke *et al. Environ. Sci. Technol. Lett.* 7 (2020) 848-853.
 C. Beggs, R. Mackie, B. Vrana, *et al. Sci. Total Environ.* 892 (2023) 164458.

Chemcatcher® Passivsammler

entwickelt von R. Greenwood & G.A. Mills, Univ. of Portsmouth, UK (~ 2000) (→ <https://en.wikipedia.org/wiki/Chemcatcher>)

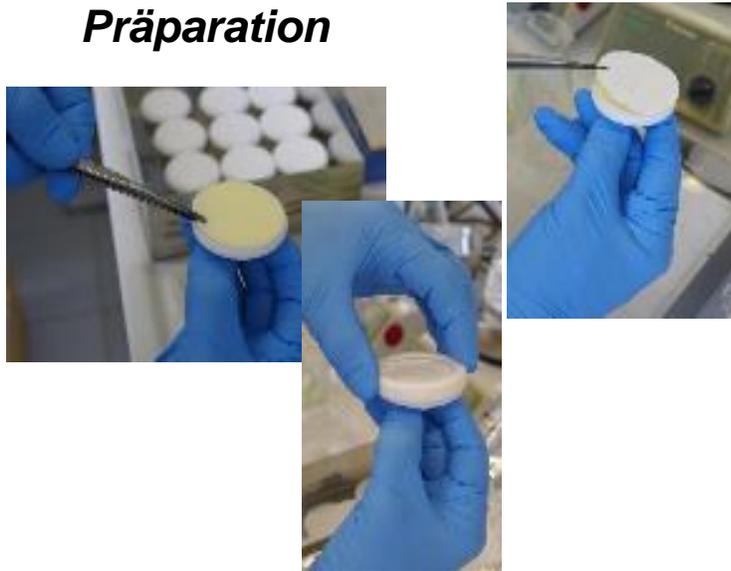


Materialien

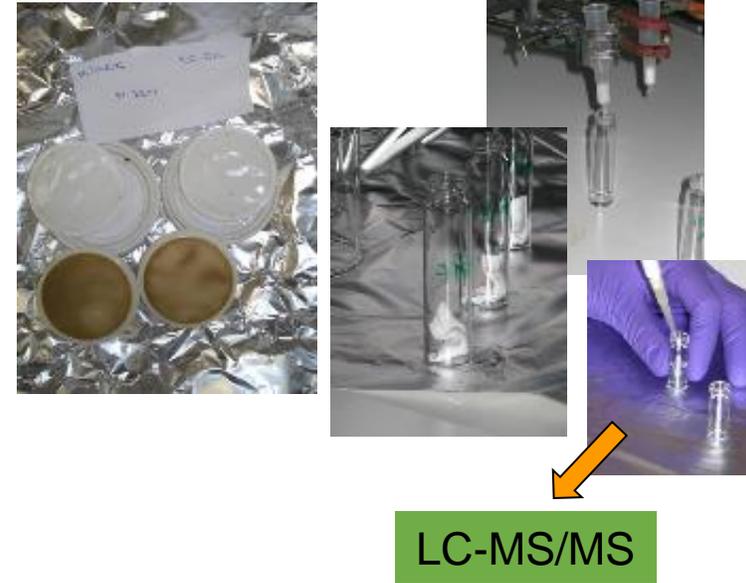
- Teflon-Körper
- Sammelphase (Disk): AttractSPE™ SDB-RPS oder -XC, Atlantic HLB-L
- Schutzmembran: Polyethersulfon 0.45 µm, PTFE, Nylon, CA, ...



Präparation

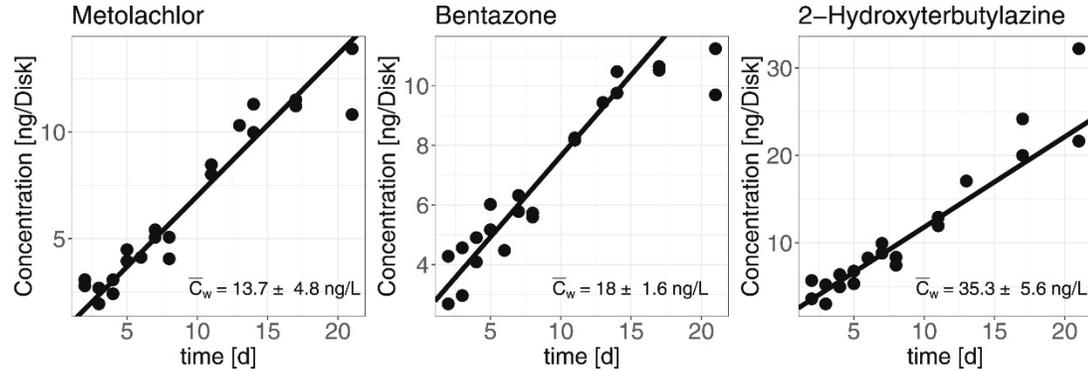
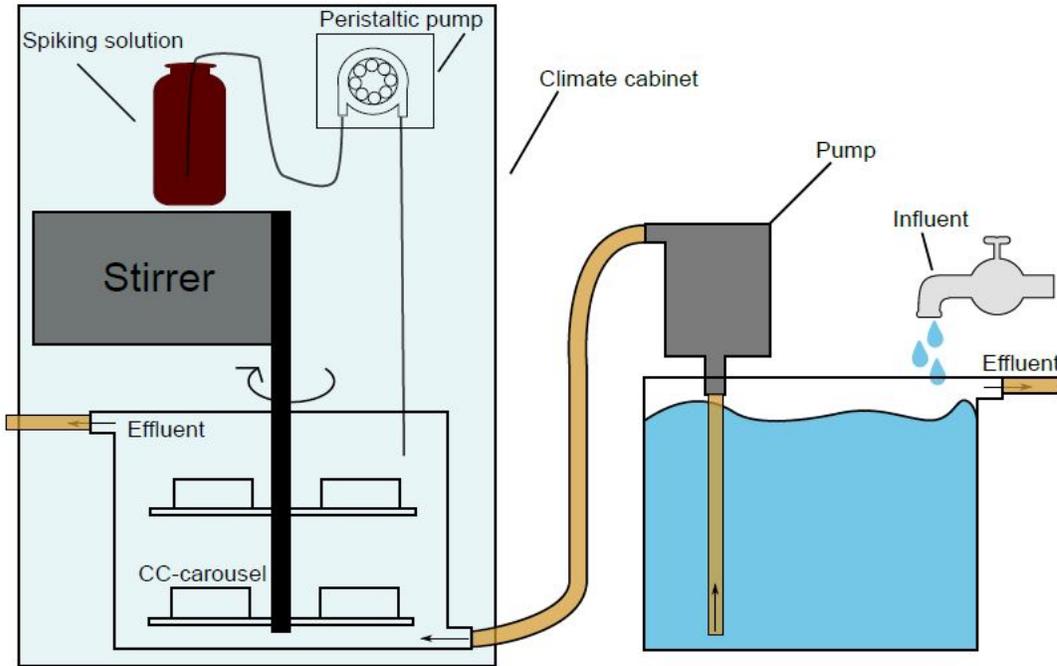


Aufarbeitung & Analyse

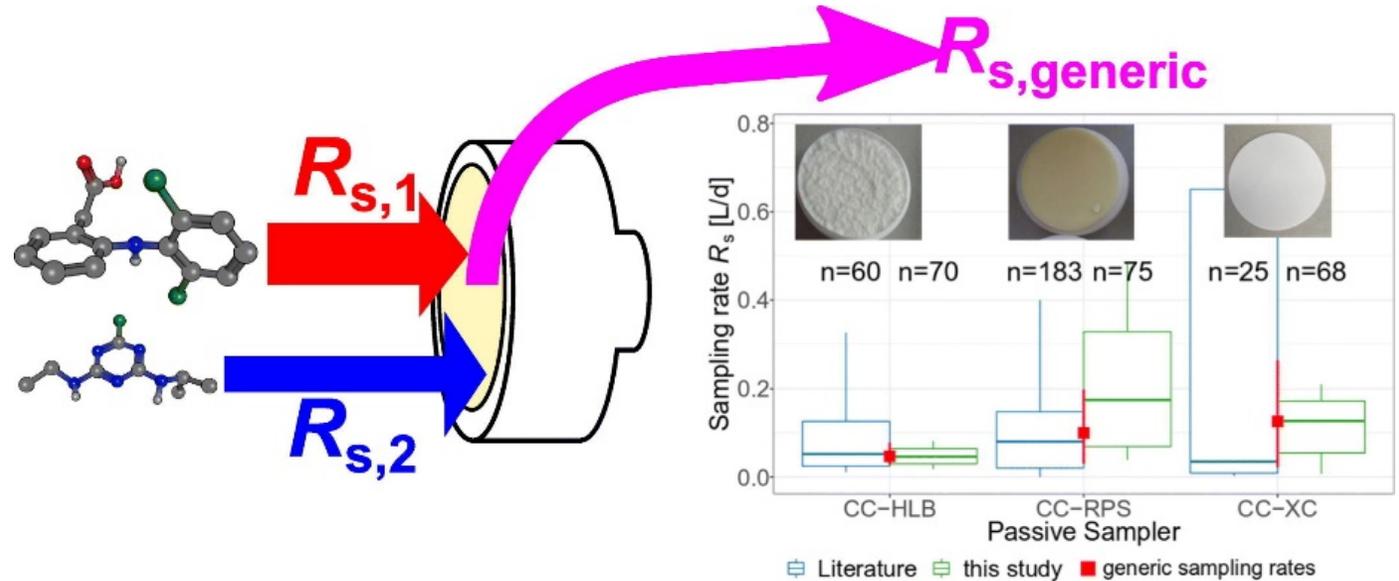


Versionen u.a. auch für unpolare Organika und Metall-Ionen
(→ <https://chemcatcher.ie/de/#what>)

Chemcatcher® Sammelraten (R_s) für PSM und Arzneistoffe



R_s aus eigenen Kalibrierversuchen und Literaturdaten

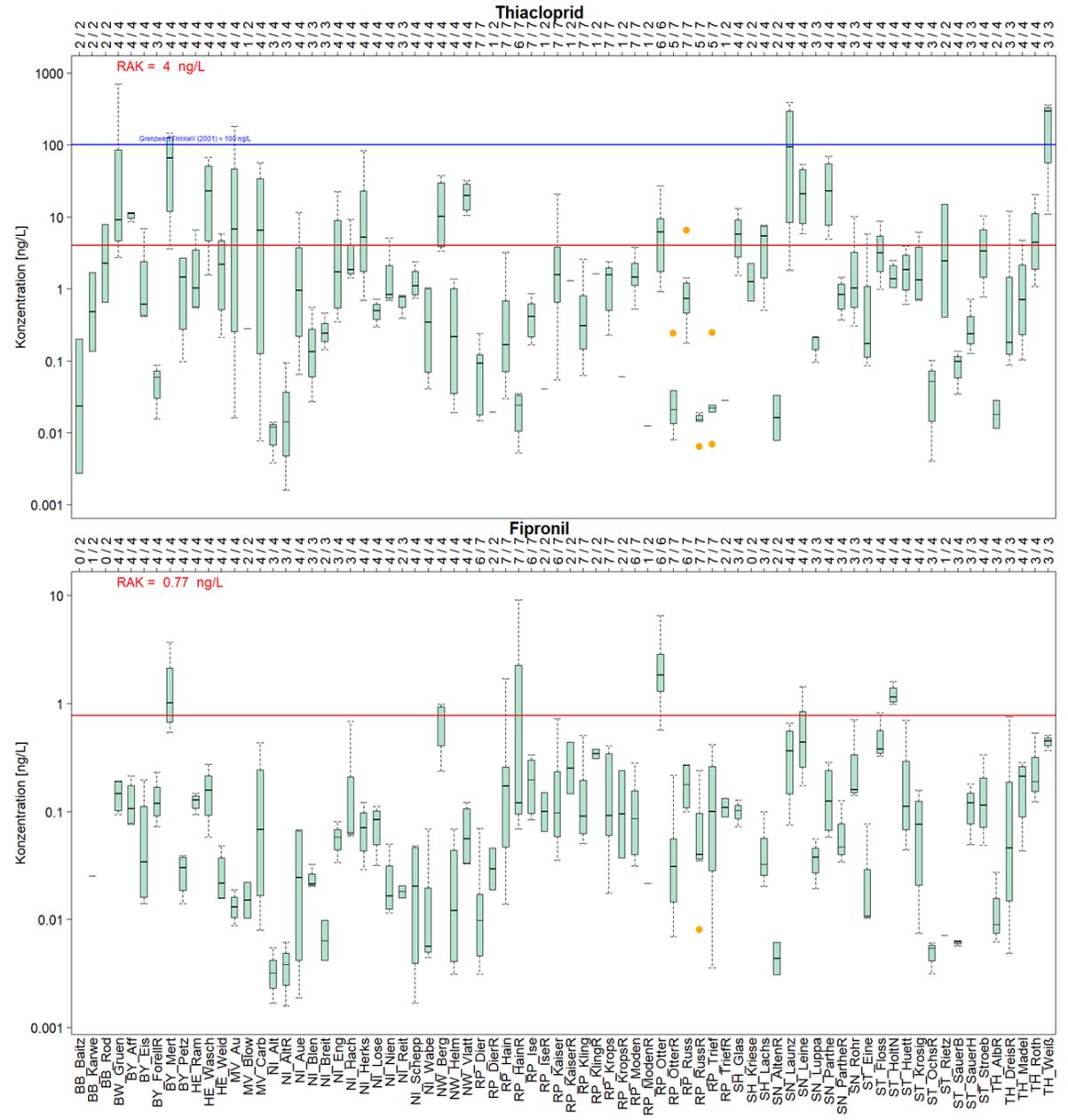


M. Römerscheid, A. Paschke, S. Schneider, M. Blaha, J. Harzdorf, G. Schüürmann. *Sci. Total Environ.* 871 (2023) 16193

Kleingewässermonitoring 2018

Zwei polare PSM an 76 Meßstellen in Deutschland

Zeitgemittelte PSM-Konzentrationen basierend auf 2-7 jeweils dreiwöchigen Expositionen von Chemcatcher-Passivsammlern

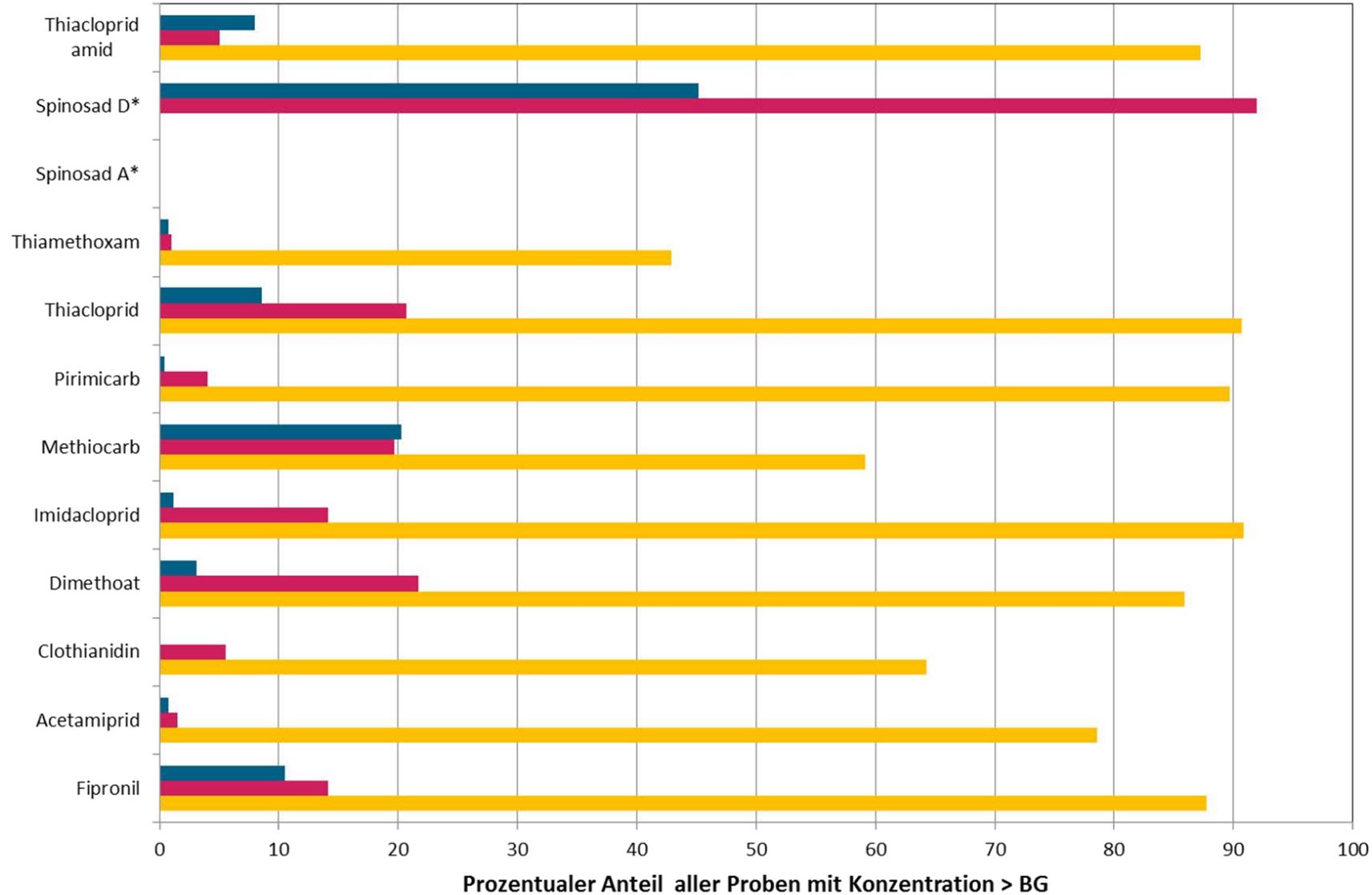


siehe auch UBA Texte 07/2022 unter <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen>

Kleingewässermonitoring 2018

aus: UBA Texte 07/2022

Insektizide

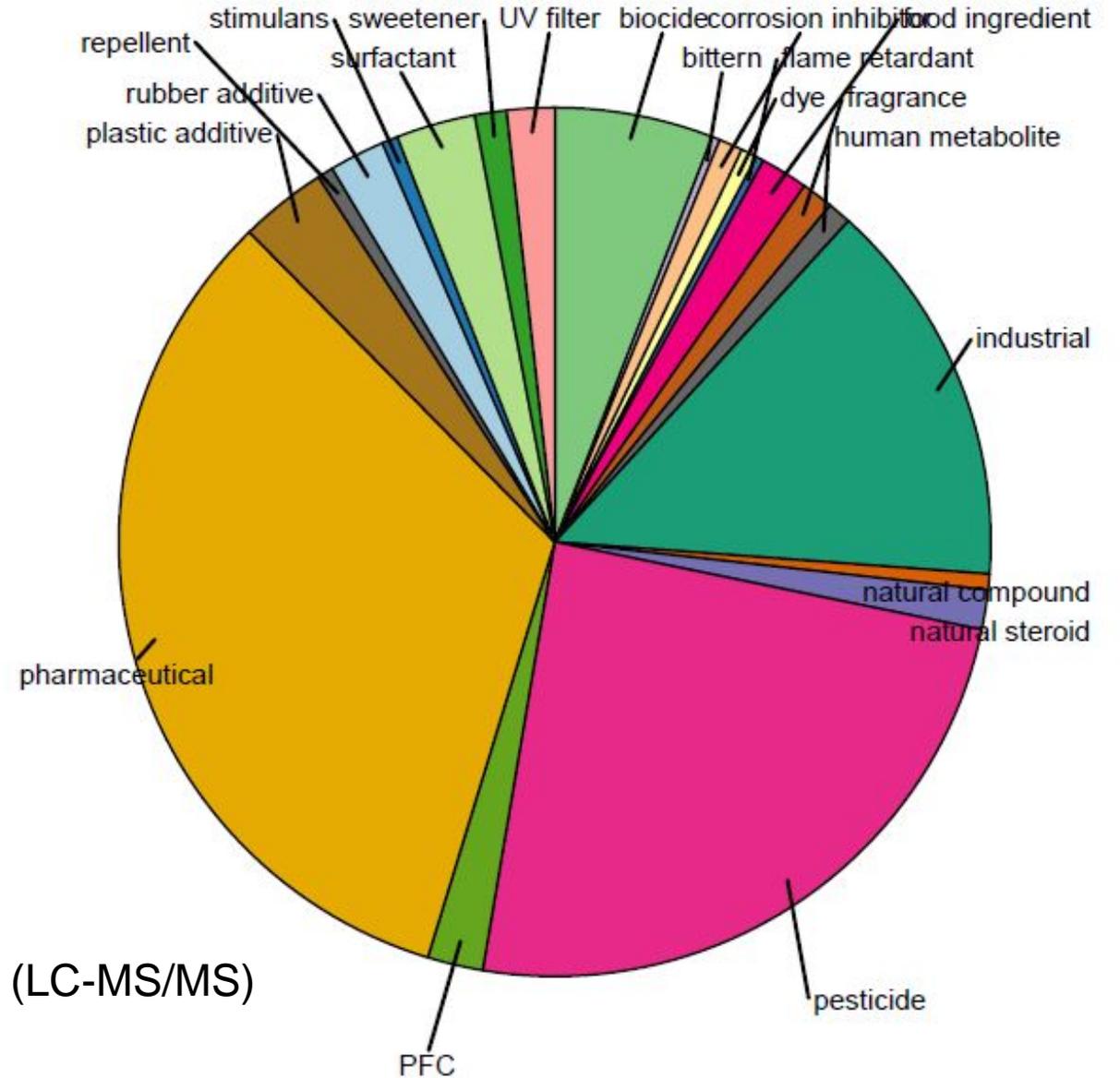


■ "schöpf"
(n=257)
■ "event"
(n=198)
■ CC
(n=602)

Chemcatcher im Templiner See (Havel/Potsdam, 2 x 21d, 07-08/2019)



Extended Target Screening (LC-MS/MS)



Literaturhinweise

Vrana B., Mills G.A., *et al.*: Passive sampling techniques for monitoring pollutants in water. *Trends Anal. Chem.* 24 (2005) 845-867.

Greenwood R., Mills, G.A., Vrana, B. (eds.): *Passive Sampling Techniques in Environmental Monitoring*, Vol. 48 of *Wilson & Wilson's Comprehensive Analytical Chemistry* (ed. by D. Barceló), Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 2007.

Schulze T., Streck G., Paschke A.: Sampling and Conservation, in: *Water Chemistry and Microbiology* (ed. by F. Frimmel), Vol. 3 of *Treatise on Water Science* (ed. by P. Wilderer), Academic Press, Oxford, U.K., 2011, pp. 132-152.

DIN EN ISO 5667-23:2011 Wasserbeschaffenheit – Probenahme - Teil 23: Anleitung zur Anwendung von Passivsammlern in Oberflächengewässern.

Vrana B., Smedes F., *et al.*: An interlaboratory study on passive sampling of emerging water pollutants. *Trends Anal. Chem.* 76 (2016) 153-165.

Taylor A.C., Fones G.R., Mills G. A.: Trends in the use of passive sampling for monitoring polar pesticides in water. *Trends Environ. Anal. Chem.* 27 (2020) e00096.

Robinson R.F.A., Mills G.A., Fones G.R.: Monitoring of polar organic compounds in fresh waters using the Chemcatcher passiv sampler. *MethodsX* 10 (2023) 102054.

Römerscheid M., Paschke A., *et al.*: Calibration of the Chemcatcher® passive sampler and derivation of generic sampling rates for a broad application in monitoring of surface waters. *Sci. Total Environ.* 871 (2023) 16193.

Robinson F.A.R., Mills, G. A., *et al.*: Quantification and risk assessment of polar organic contaminants in two chalk stream in Hampshire, UK using the Chemcatcher passive sampler. *Sci. Total Environ.* 939 (2024) 173316.

Römerscheid M., Paschke A., Schüürmann G.: Survey of Appearance and temporal concentrations of polar organic pollutants in Saxon waters. *Heliyon* 10 (2024) e23378.

DEUTSCHE NORM		Juni 2011
	DIN EN ISO 5667-23	
ICS 13.060.45		
Wasserbeschaffenheit – Probenahme – Teil 23: Anleitung zur Anwendung von Passivsammlern in Oberflächengewässern (ISO 5667-23:2011); Deutsche Fassung EN ISO 5667-23:2011		
Water quality – Sampling – Part 23: Guidance on passive sampling in surface waters (ISO 5667-23:2011); German Version EN ISO 5667-23:2011		
Qualité de l'eau – Échantillonnage – Partie 23: Lignes directrices pour l'échantillonnage passif dans les eaux de surface (ISO 5667-23:2011); Version allemande EN ISO 5667-23:2011		
		Gesamtumfang 34 Seiten
Normenausschuss Wasserwesen (NAW) im DIN		
<small>© DIN Deutsches Institut für Normung e. V. - Jede Art der Vervielfältigung, auch auszugsweise, nur mit Genehmigung des DIN Deutsches Institut für Normung e. V., Berlin, gestattet. Alleinverkauf der Normen durch Beuth Verlag GmbH, 10772 Berlin</small>		<small>Preisgruppe 15 www.din.de www.beuth.de</small>



Vielen Dank

für

Ihre Aufmerksamkeit