

Projektergebnisse WBA-NTS-ProTrink

Integration der Wirkungsbezogenen Analytik in die Non-Target-Screening basierte Bewertung von Prozessen der Trinkwassergewinnung

**33. Wasserhygienetage Bad Elster
05. Februar 2025**

**Markus Flörs
Landeswasserversorgung Stuttgart**

Übersicht

1. Ziele des Projekts
2. KOLa-Laboranlage
3. Machbarkeit neuer Endpunkte
4. Untersuchung von Realproben
5. Wirkungsbezogene Analytik & Non-Target-Analytik



Zweckverband Landeswasserversorgung
Langenau
Markus Flörs, Lena Betz



Technologiezentrum Wasser
Karlsruhe
Oliver Happel, Beat Schmutz



IWW ZENTRUM WASSER

IWW Zentrum Wasser
Mülheim an der Ruhr
Gerhard Schertzinger

Laufzeit: **01/2021** bis **02/2023**
Projektnummer: W202003
gefördert vom DVGW



Hintergrund, Aufgabenstellung und Ziele des Projekts

Herausforderung Trinkwasserversorgung

Komplexe Spurenstoffzusammensetzung der Rohwässer durch vielfältigen Einsatz unterschiedlicher Substanzen

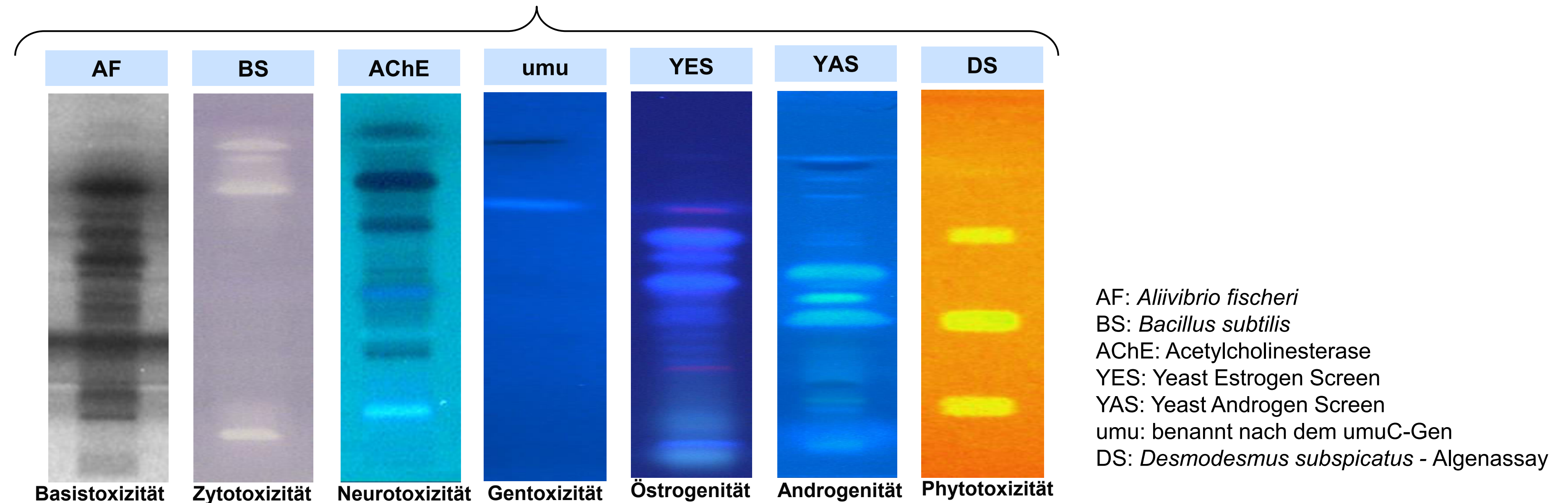
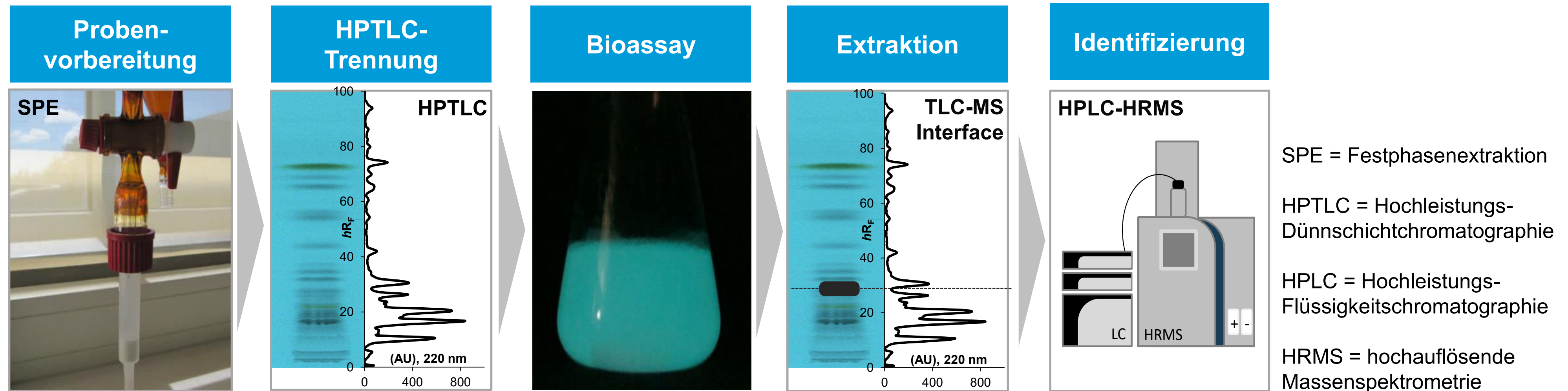
Übergeordnetes Ziel

- Sicherstellung der toxikologischen Unbedenklichkeit des Trinkwassers

Ziele des Projekts

- Methodische Erweiterung der Wirkungsbezogenen Analytik (WBA)
- Bewertung von Wasserproben und Aufbereitungsprozessen durch WBA

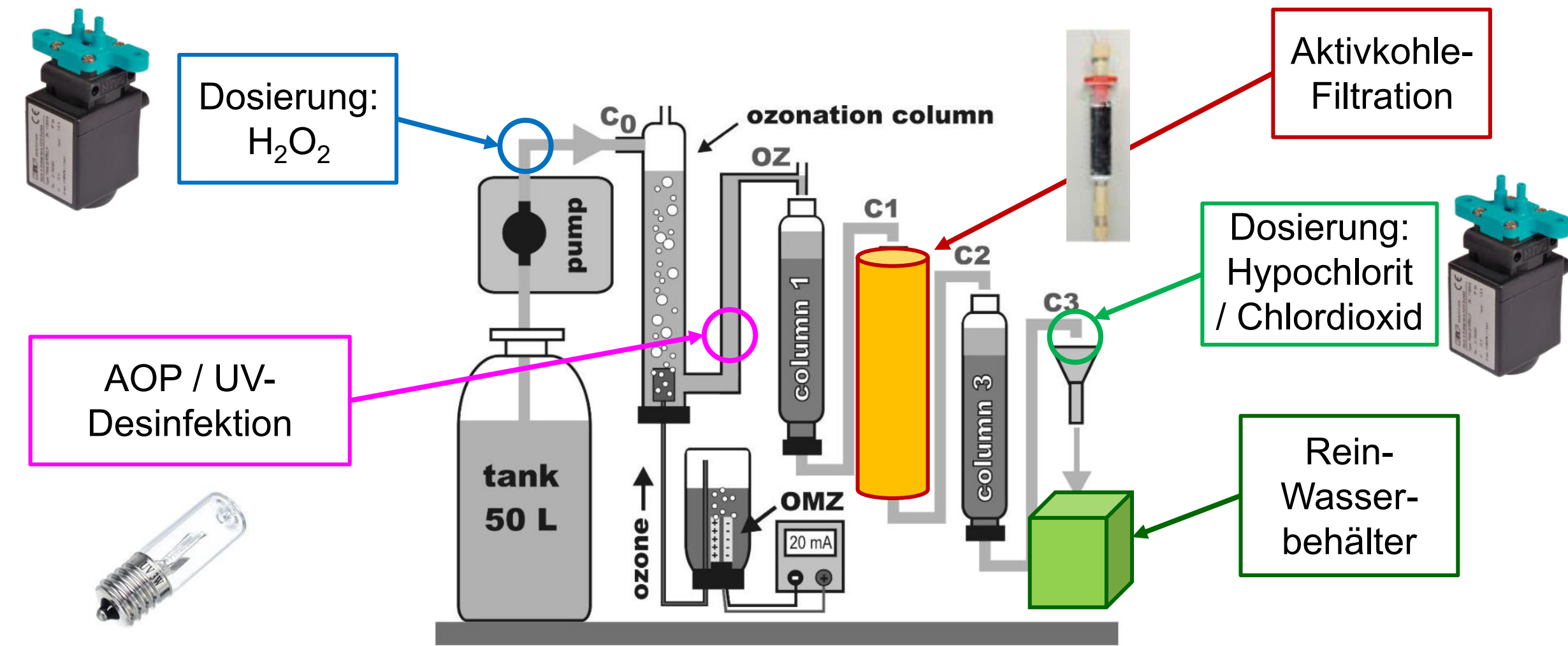
Übersicht Wirkungsbezogene Analytik mit HPTLC



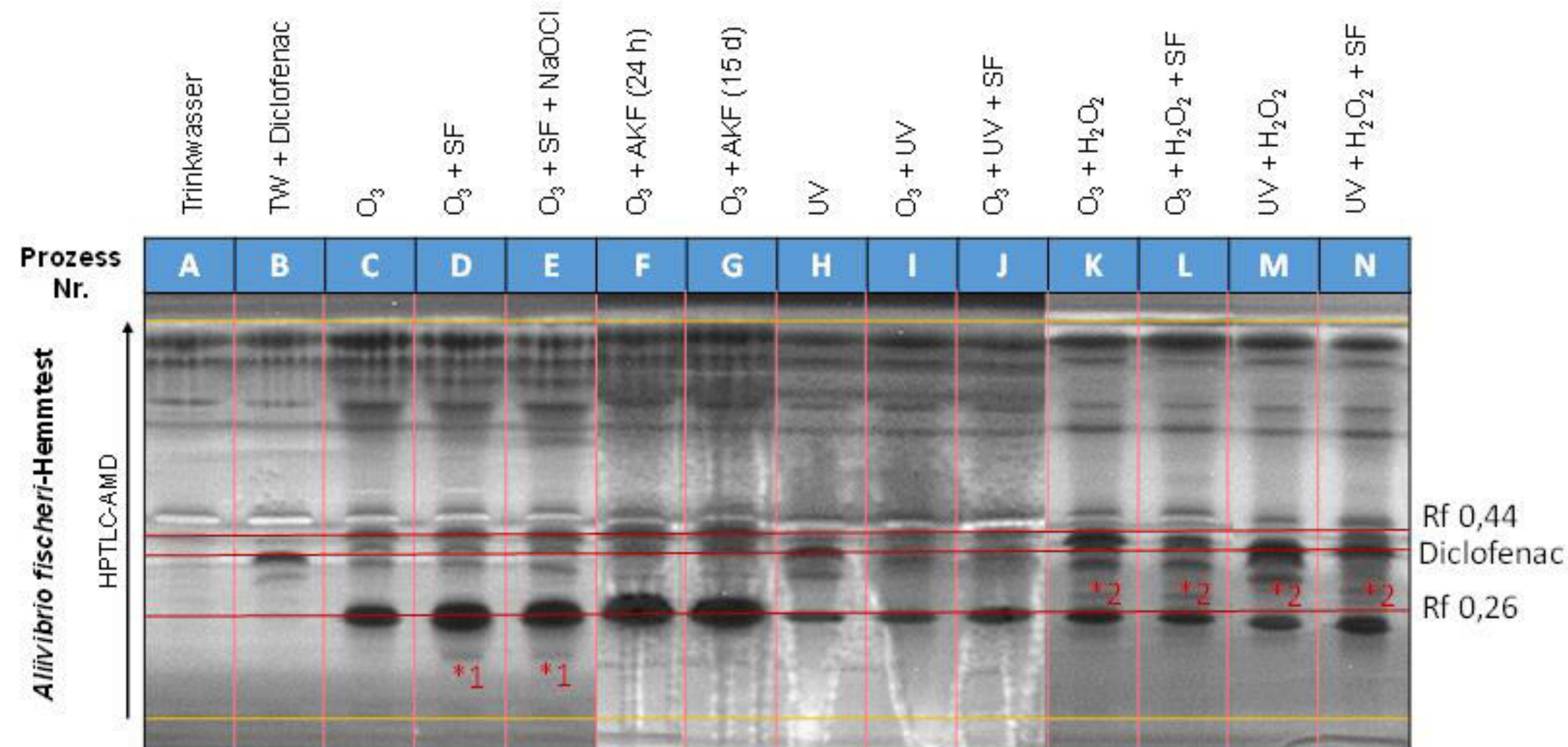
Laborversuchsanlage

- Advanced Oxidation Processes (AOP)
Ozon/H₂O₂, Ozon/UV, UV/H₂O₂
- Aktivkohlefiltration
- Chlorungs-Desinfektion mit
Reinwasserbehälter

KOLa = Kontinuierliche Ozonung mit Langsandsandfiltration



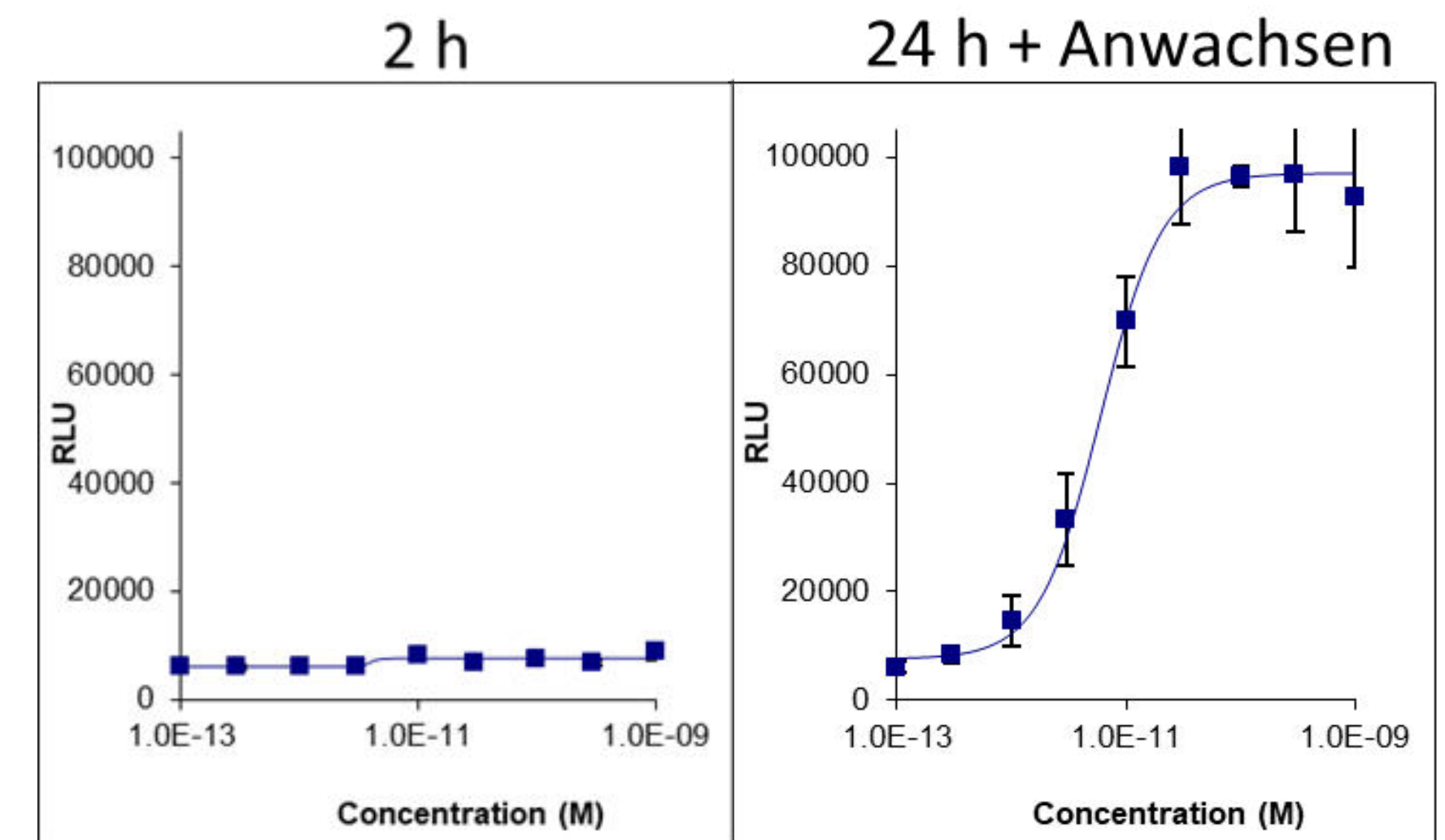
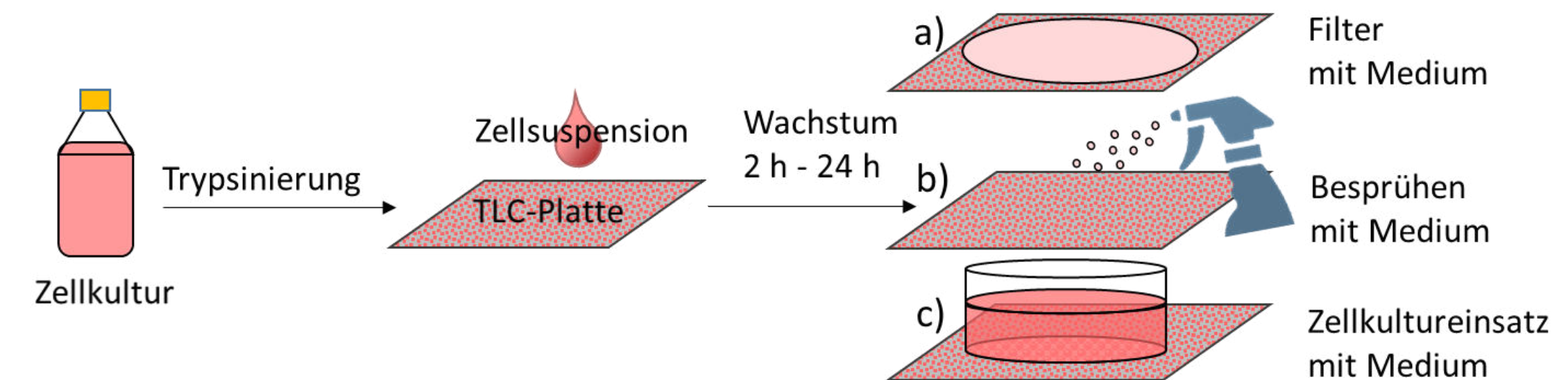
Zoumpouli et al. 2019, doi.org/ 10.1039/c8ew00855h



- Untersuchung der Prozesskombinationen mit WBA-Methoden
- Unterschiede zwischen Prozessen sichtbar (Modellsubstanz: Diclofenac)

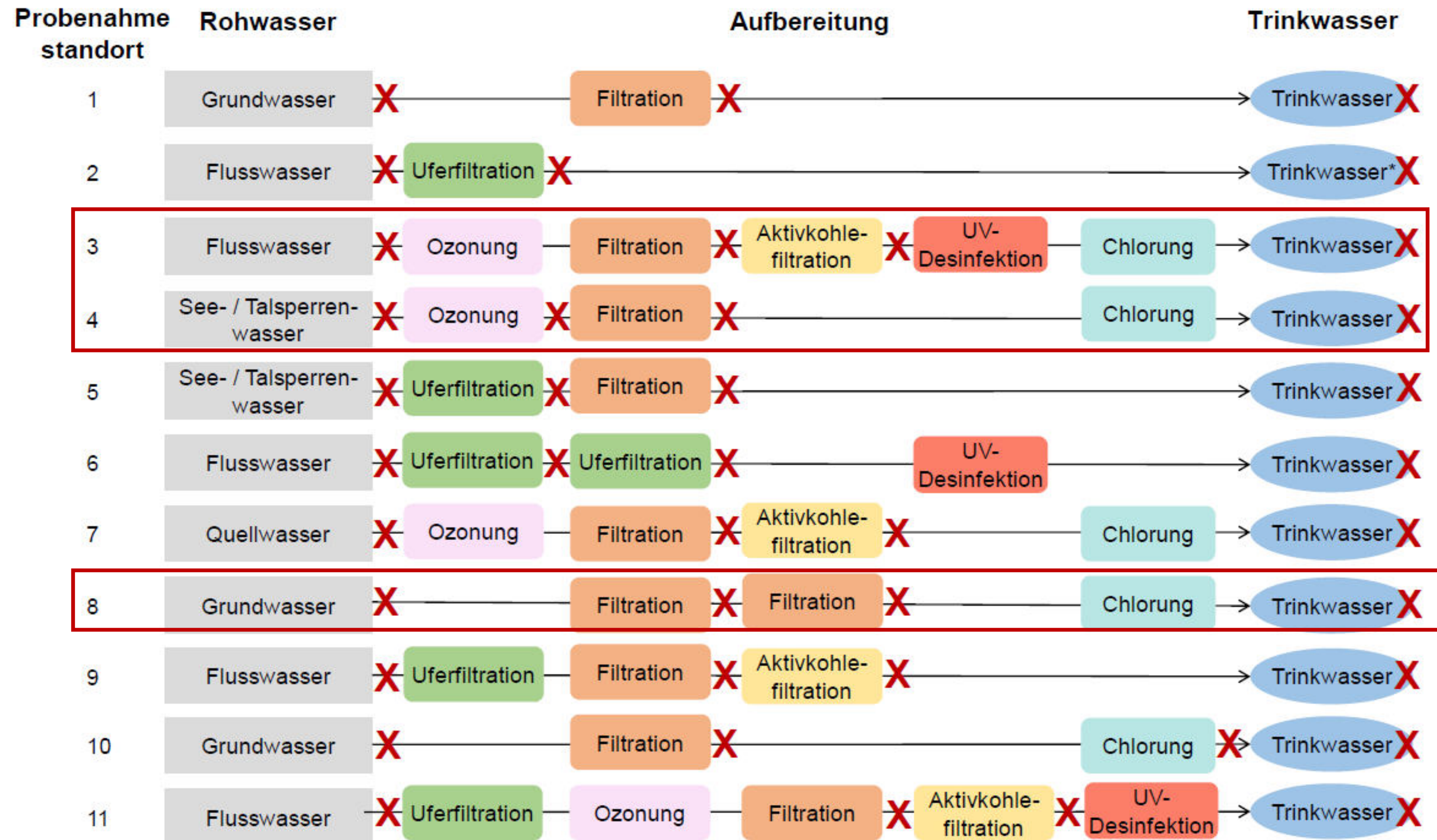
Kombination HPLTC mit humanzellbasierte Biotests:

- Herausforderung: Aufbringen und Anwachsen der humanen Zellen auf der HPTLC-Platte
- Versorgung der Zellen mit Nährmedium durch drei Methoden möglich, Besprühen bevorzugt
- Akklimatisierung der trypsinierten Zellen im Vergleich zum Mikroplate-Assay nötig
→ sonst deutlicher Sensitivitätsverlust



Untersuchung von Realproben

Untersuchung von 11 verschiedenen Wasserwerken mittels wirkungsbezogener Analytik und Non-Target Screening



(**X** = Orte der Probenahme)

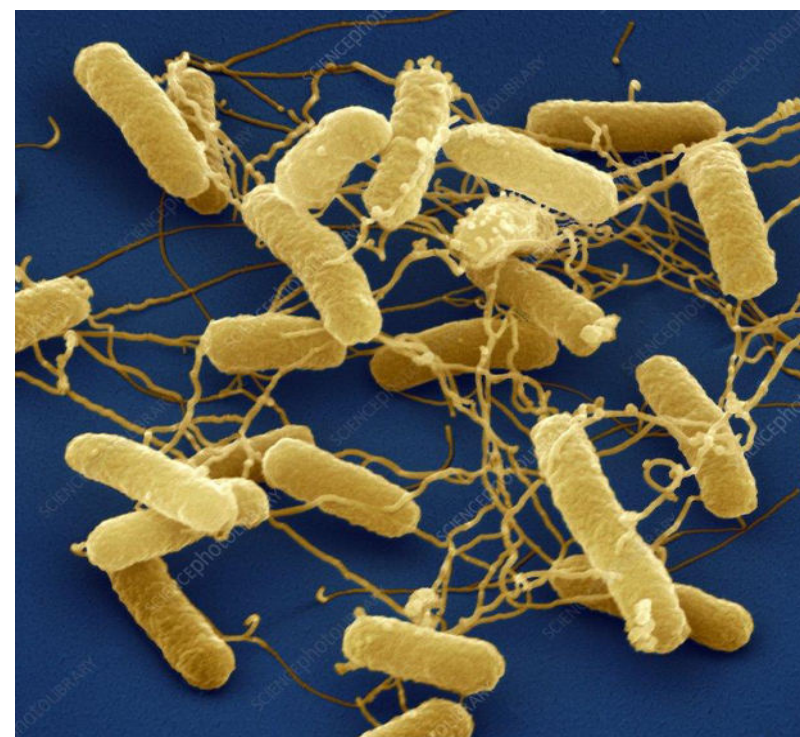


- **11 Wasserversorger aus Deutschland**
- **Roh-, Prozess- und TW-Proben**

Übersicht HPTLC-umu

Umu - Assay

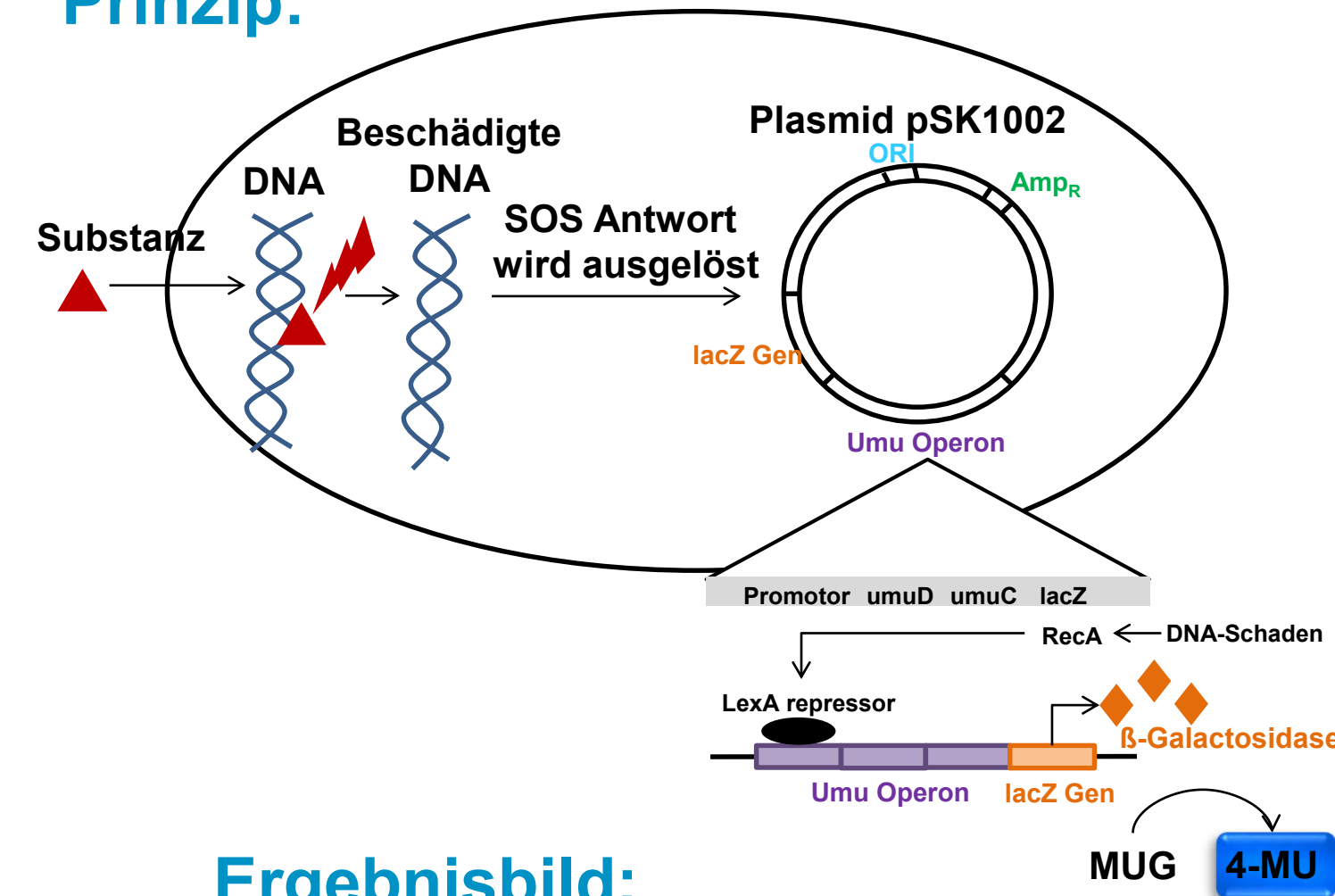
- genveränderte *Salmonella Typhimurium* TA1535/pSK1002
- gram-negativ, begeißelt
- **Endpunkt:** Gentoxizität
- **Nachweis:** Auslösen der SOS-Antwort



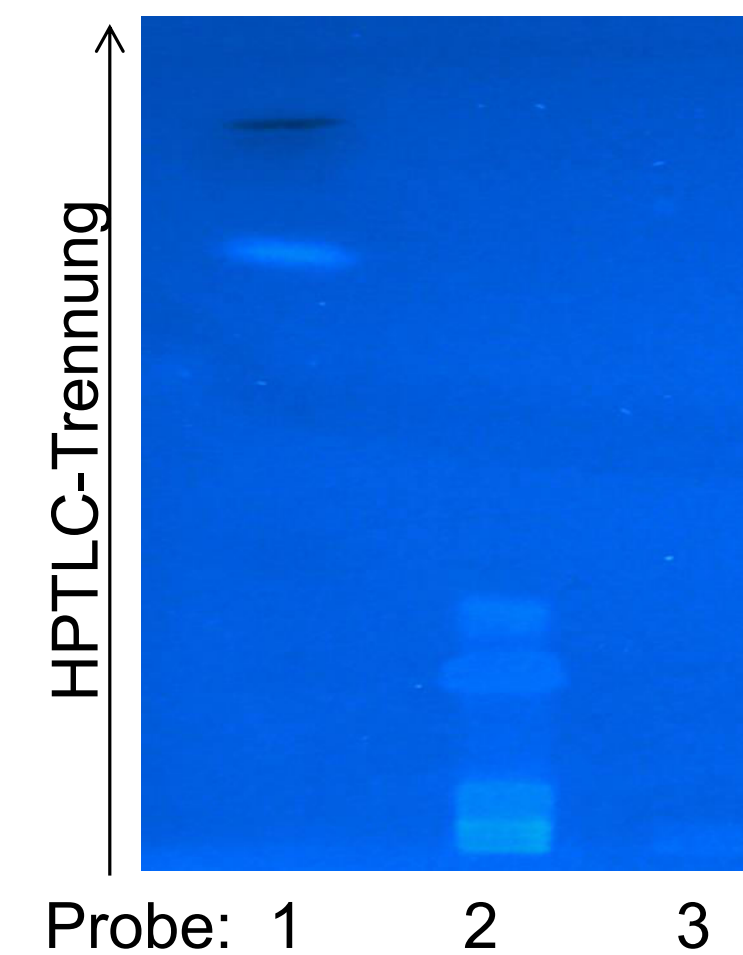
Salmonella Typhimurium

Quelle: <https://www.sciencephoto.com/media/12369/view/salmonella-typhimurium-bacteria-sem>

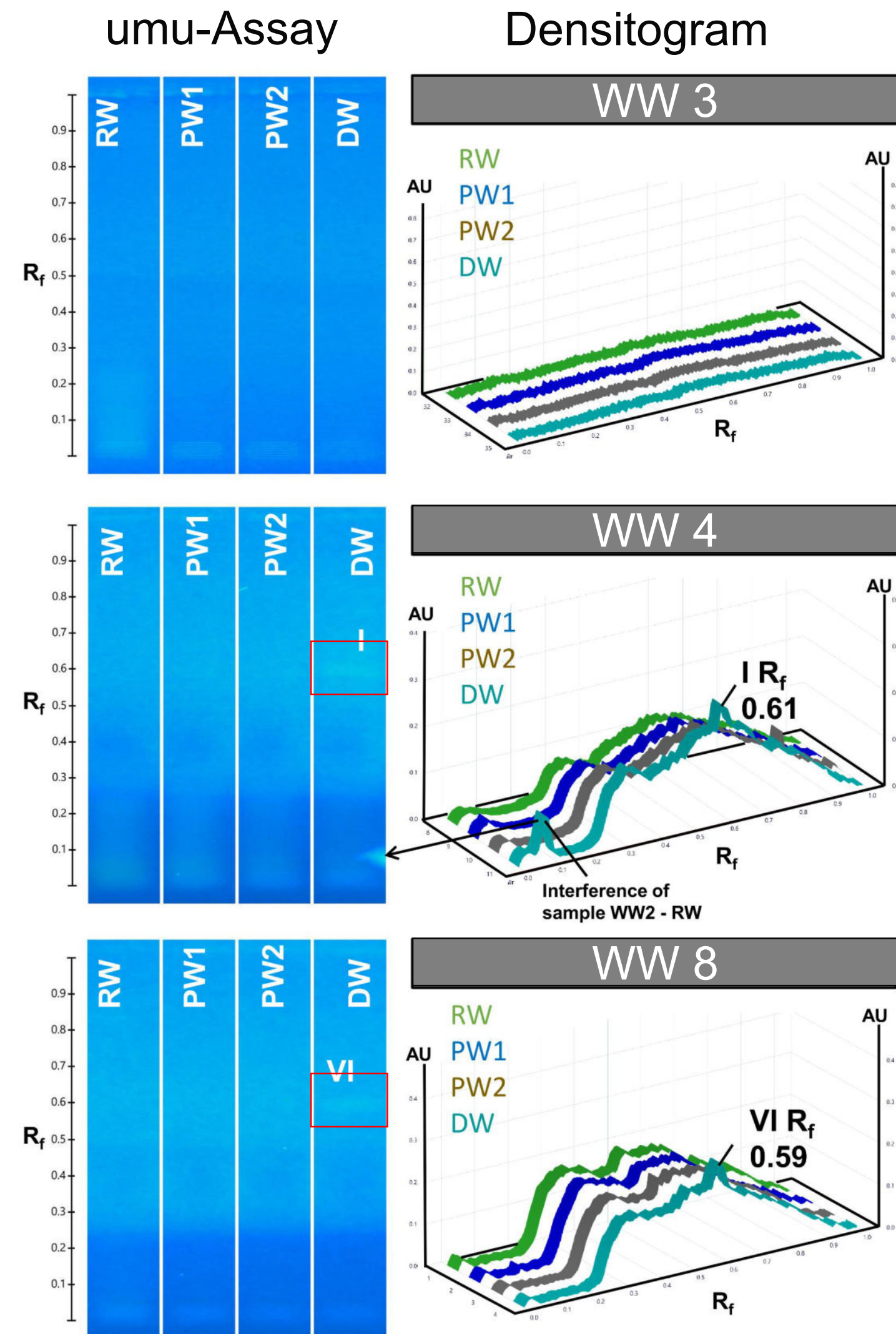
Prinzip:



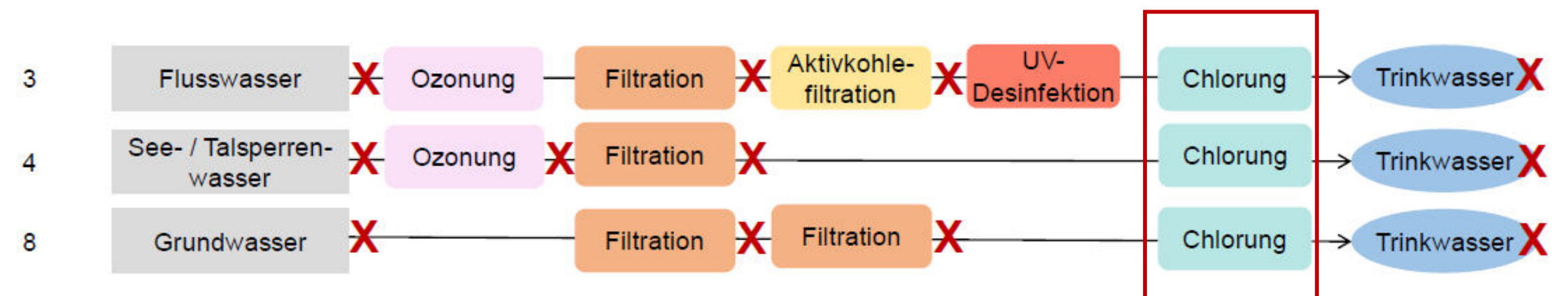
Ergebnisbild:



Ausschnitt der WBA-Ergebnisse



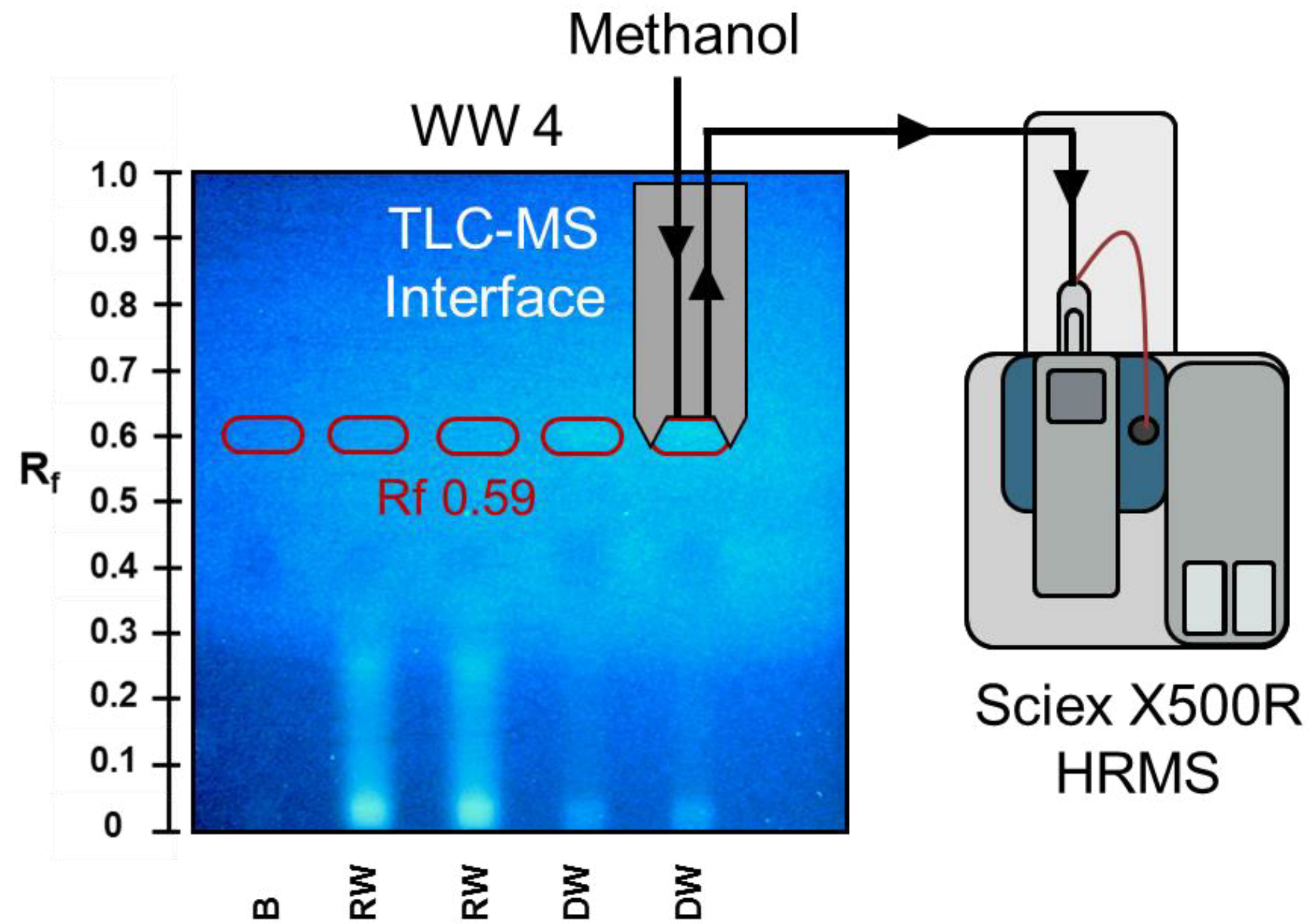
- Detektion von gentoxischen Wirkungen mittels HPTLC-umu Biotest
- WW4 und WW 8 zeigen sehr schwache gentoxische Wirkungen im Trinkwasser (4-NQO-EQ: 0,12 ng/L bzw. 0,17 ng/L)



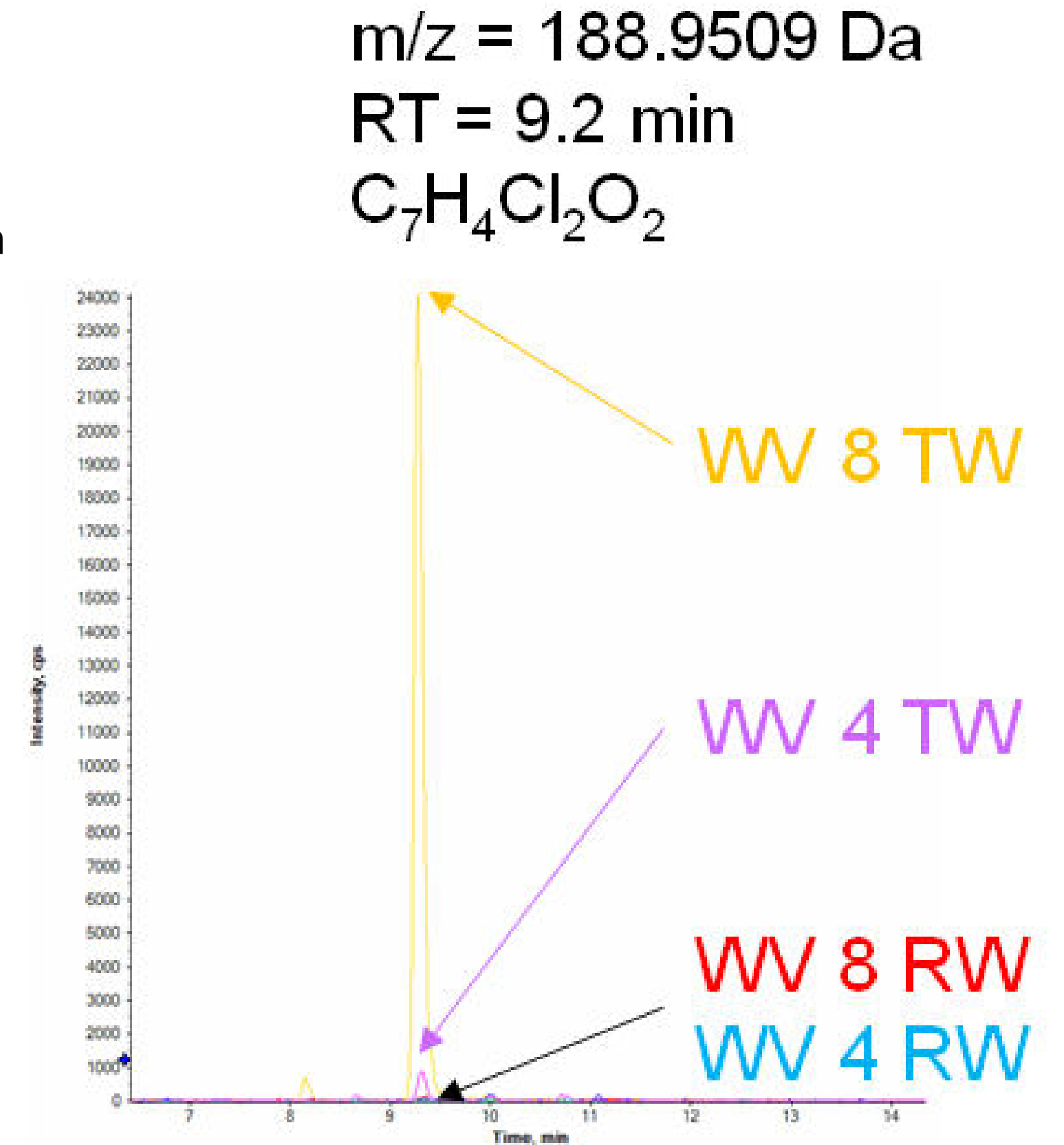
- WW 3, WW4 und WW8 benutzen Chlorung zur Desinfektion
 - WW3 benutzt ClO₂
 - WW4 und WW8 verwenden Cl₂
- Vermutung: gentox. Wirkung durch Chlorung verursacht

RW = Rohwasser
PW = Prozesswasser
DW = Trinkwasser
☐ = gentox. Effekt

Extraktionsexperimente

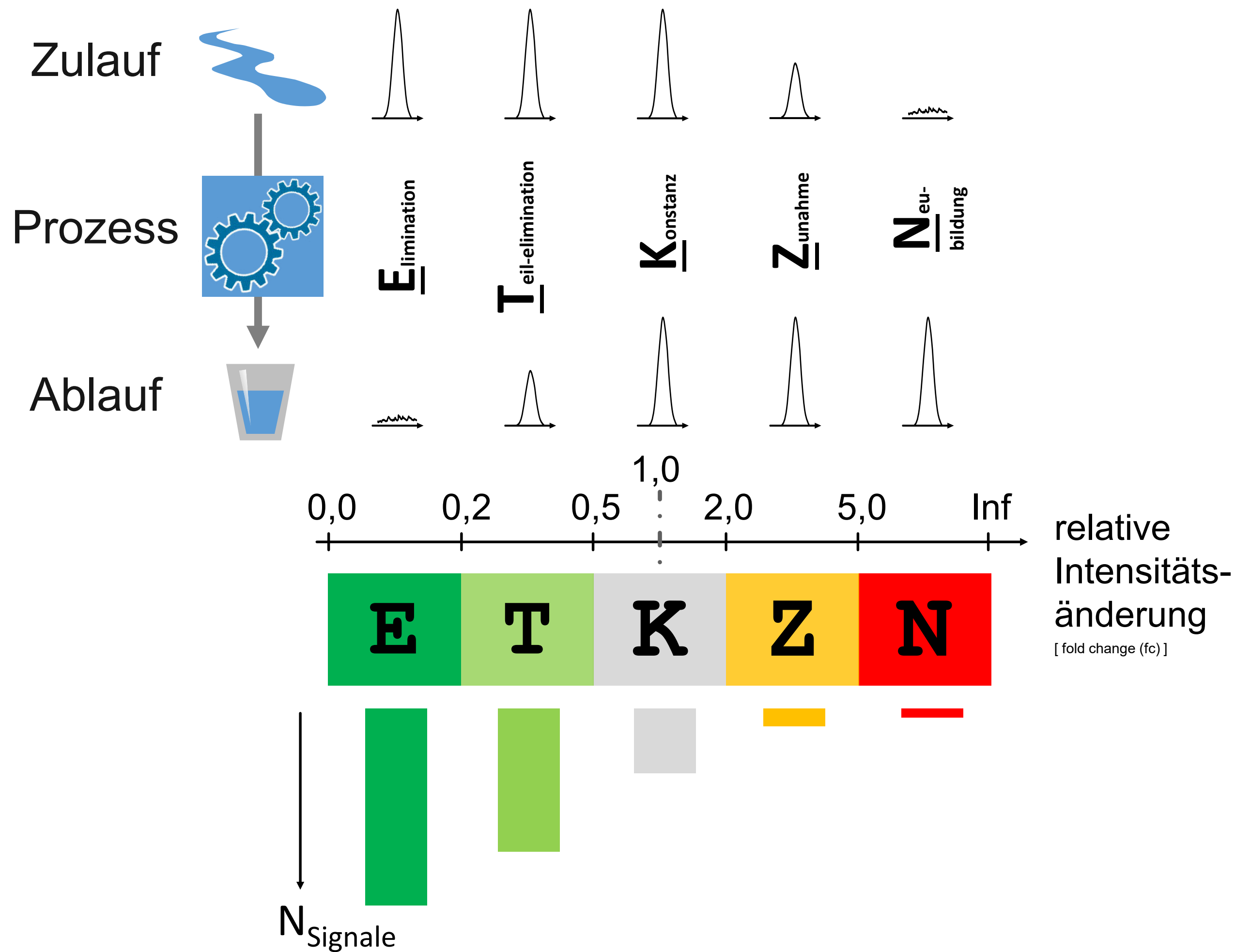


1. Extraktion der Banden bei R_f 0,59 auf der HPTLC-Platte
2. LC-HRMS-Analytik

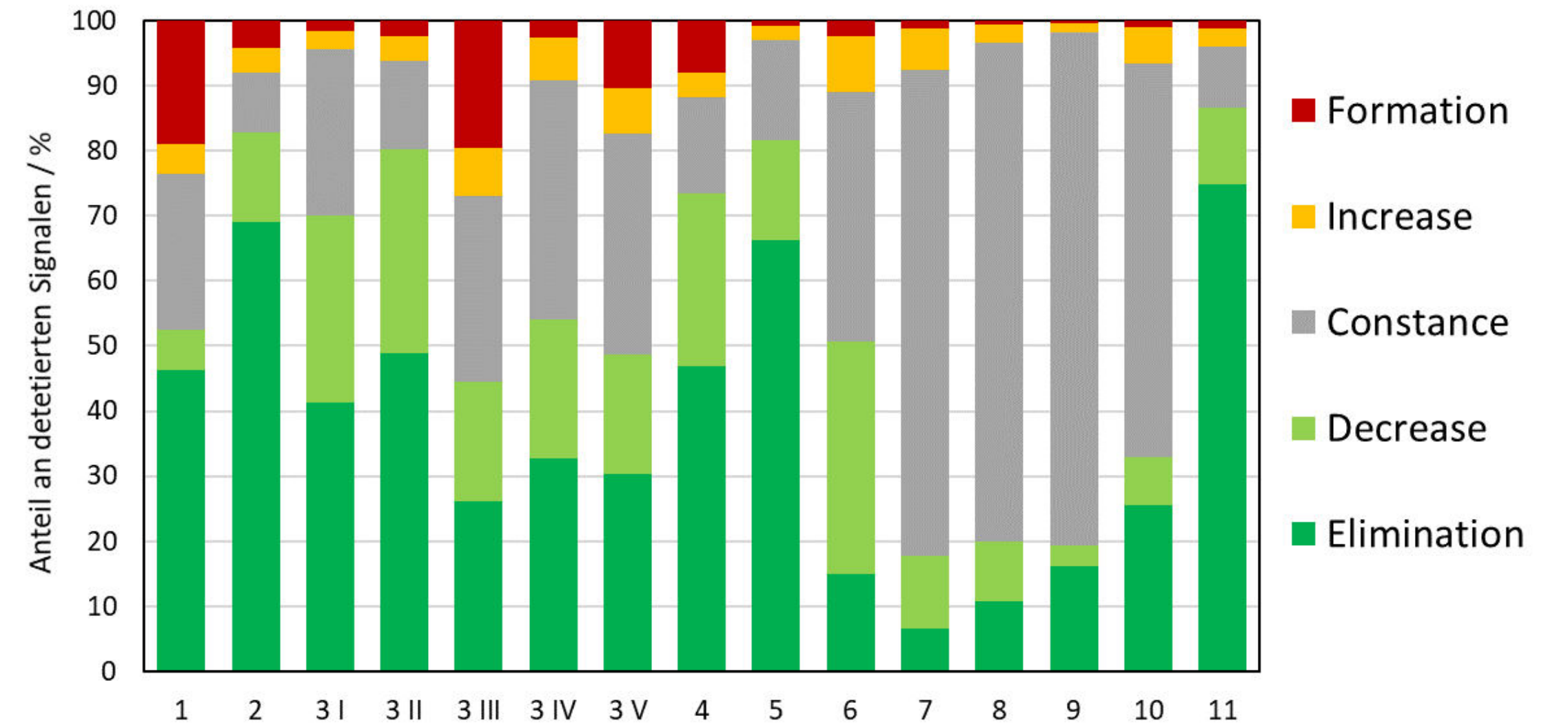


→ Identifizierung von TP188 bisher nicht erfolgreich
aber: starke Hinweise, dass gentox. Wirkung durch Chlorung verursacht wird

Non-Target-Analytik mit Realproben aus Wasserwerken



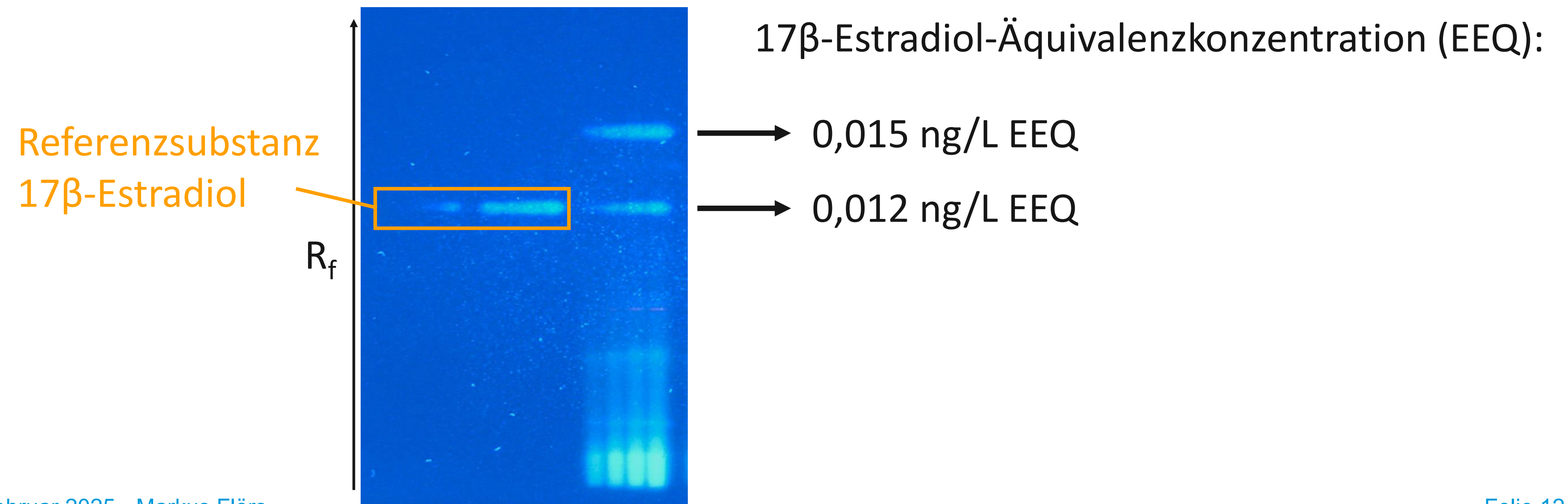
Vergleich: Erste Aufbereitungsstufe vs. Rohwasser



Weiterentwicklungen der WBA-Auswertung im Projekt

- Einführung der Berechnung bioanalytischer Äquivalenzkonzentrationen (BEQ)
 - Nutzung einer Referenzsubstanz
 - Quantifizierung der unbekanntesten Wirkung
 - Vergleich der Wirkung zwischen Probenserien möglich

Beispiel HPTLC-YES:

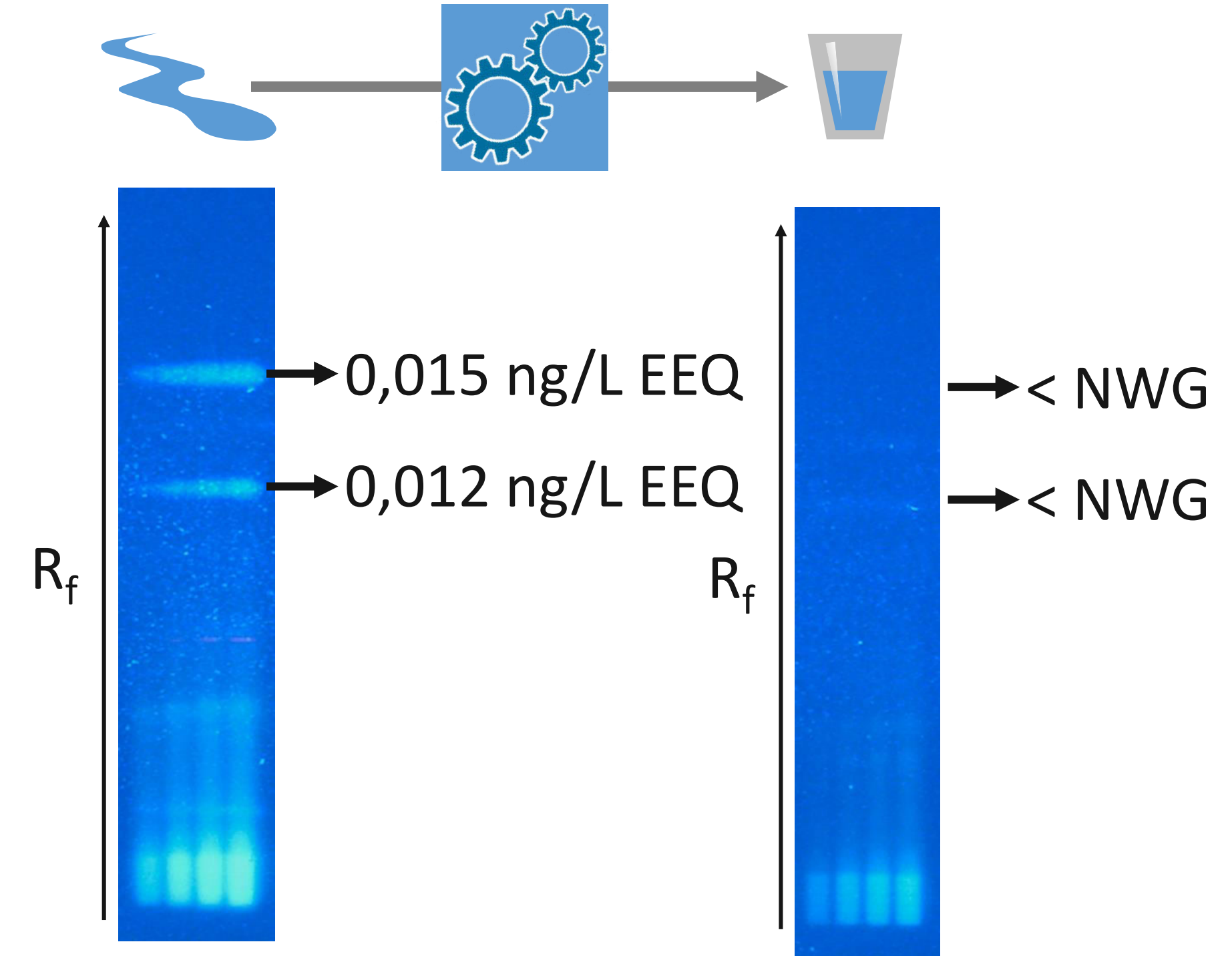
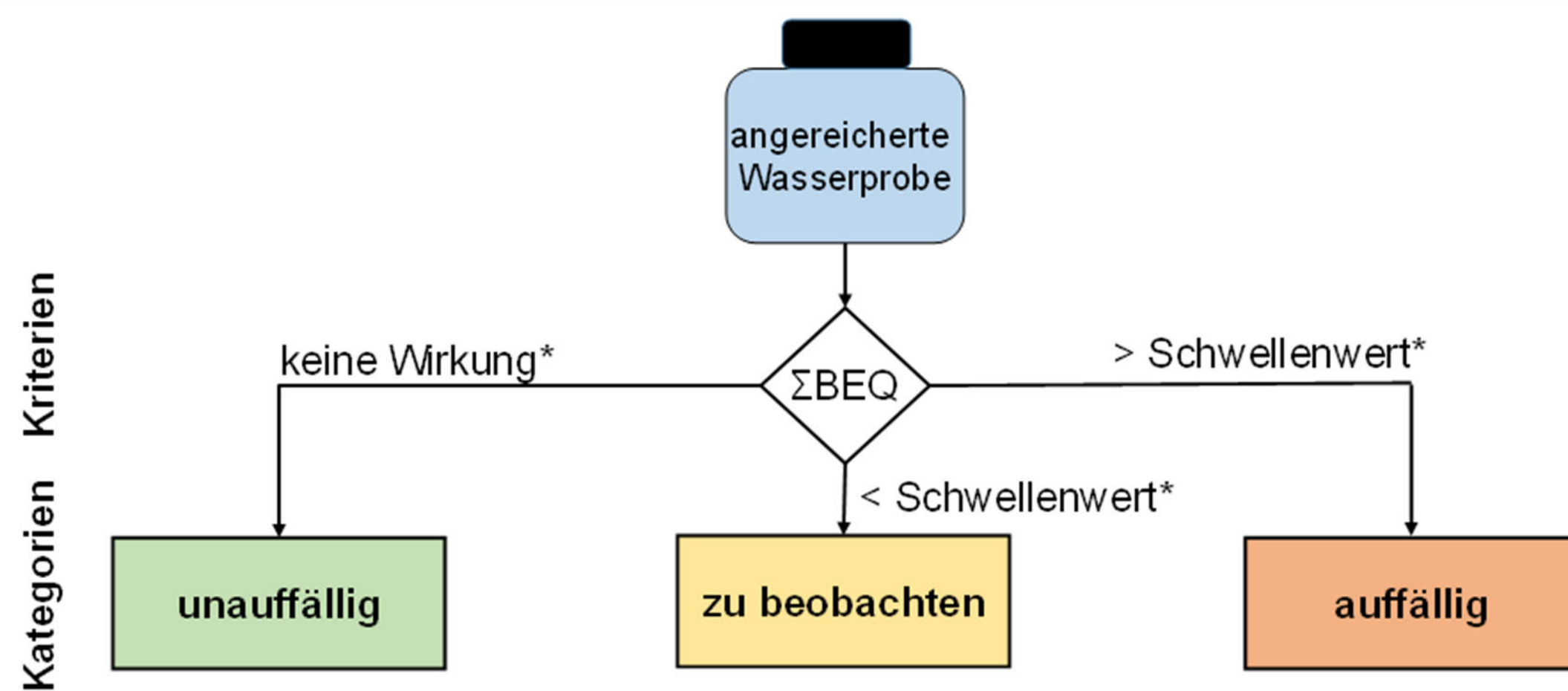


Vorschlag eines Konzepts zur Bewertung von Wässern & Prozessen

bioanalytische Äquivalenzkonzentration (BEQ)

↓
Zustandsbewertung

↓
Prozessbewertung



Zusammenfassung

- **Simulation der Wasseraufbereitung im Labormaßstab**
 - **Individuelle Kombination der Aufbereitungsstufen in der KOLa-Anlage möglich**
- **WBA mit mehreren Endpunkten ist sinnvolle Ergänzung zur Chemischen Analytik (z. B. NTS)**
 - **Kombination von Dünnschichtchromatographie und Humanzelltests prinzipiell möglich, jedoch bisher nicht aussichtsreich für die Praxis**
 - **Berechnung von bioanalytischen Äquivalenzkonzentrationen:**
Quantifizierung und Vergleichbarkeit der Ergebnisse
 - **HPTLC-umu sehr nachweisstark für gentoxische Substanzen**
 - **Gemeinsame Prozessbewertung durch Wirkungsbezogene Analytik und Non-Target-Screening**

**Vielen Dank für
ihre Aufmerksamkeit!**

Zweckverband
Landeswasserversorgung
Markus Flörs
floers.m@lw-online.de

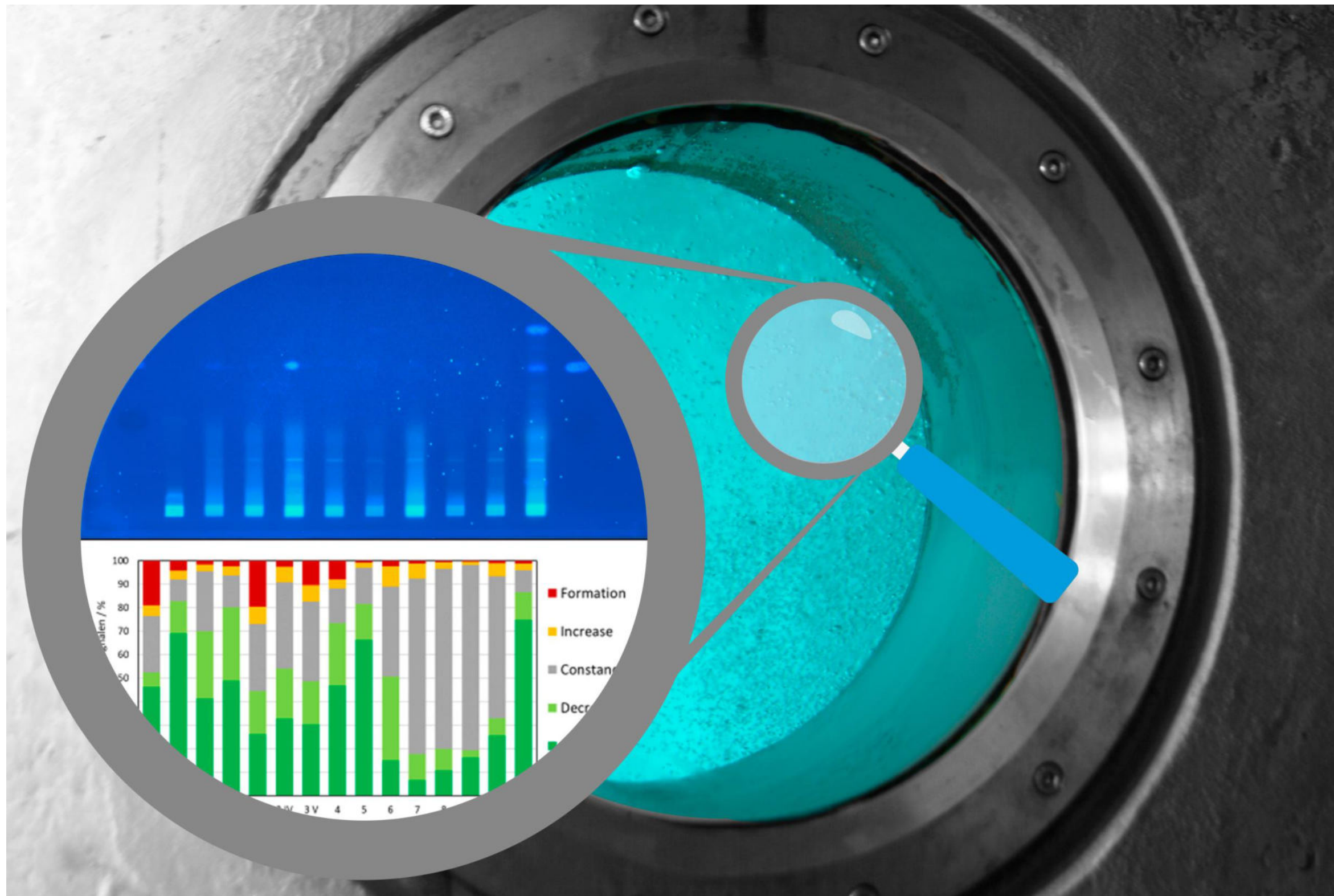


Foto der erweiterten KOLa-Laboranlage

