

Multikomponenten-Screening für den Rhein bei Basel

in Zusammenarbeit mit dem Bundesamt für Umwelt BAFU

Heinz Singer, Sebastian Huntscha, Juliane Hollender, Eawag, Dübendorf
Jan Mazacek, Amt für Umwelt und Energie, Basel

Dübendorf, Januar 2009

Abschlussbericht

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung.....	4
	<i>Motivation</i>	<i>4</i>
	<i>Tandem-Massenspektrometrie</i>	<i>5</i>
	<i>Hochauflösende Hybrid-Massenspektrometrie.....</i>	<i>6</i>
	<i>Multikomponenten-Methoden</i>	<i>7</i>
2	Zielsetzung	8
3	Material und Methoden.....	9
3.1	Chemikalien	9
3.2	Standardlösungen.....	9
3.3	Probenahme	10
3.4	Probenaufarbeitung und Anreicherung mittels Festphasen-extraktion	12
3.5	Flüssigchromatographie	14
3.6	Massenspektrometrie	14
3.6.1	Ablauf der Datenakquisition und -auswertung.....	15
3.6.2	Allgemeine MS-Parameter	17
3.6.3	HR-MS-Chromatogramme	18
3.6.4	HR-MSMS-Chromatogramme	18
3.7	Quantifizierung.....	19
4	Resultate und Diskussion	20
4.1	Auswahl der Zielverbindungen.....	20
4.1.1	Mikroverunreinigungen.....	20
4.1.2	Industriechemikalien	22
4.2	Entwicklung und Optimierung der Analysenmethode.....	25
4.2.1	Flüssigchromatographie	25
4.2.2	Massenspektrometrie.....	26
4.2.3	SPE-Extraktion und Extrakteinengung	28
4.2.4	Ergebnis der Methodenoptimierung.....	32

4.3	Kenndaten der Gesamtmethode	34
4.4	Messergebnisse in Rhein- und Kläranlagenproben	36
4.4.1	Mikroverunreinigungen.....	36
	<i>Rhein</i>	36
	<i>Kläranlagen</i>	42
	<i>Fallbeispiel</i>	46
4.4.2	Industriechemikalien	48
	<i>Rhein</i>	48
	<i>Kläranlagen</i>	48
	<i>Fallbeispiel</i>	49
4.4.3	Nachweis von Mikroverunreinigungen und Industriechemikalien ohne Probenanreicherung.....	51
5	Schlussfolgerungen und Handlungsempfehlungen.....	52

Literatur

Anhang

1 Einleitung

Motivation

Die Rhein-Überwachungsstation Weil am Rhein wurde entsprechend den Beschlüssen der Ministertreffen als Folge des Brandes bei Schweizerhalle von 1986 eingerichtet. Ziel ist die frühzeitige Erkennung erhöhter Konzentrationen von möglicherweise toxischen Stoffen. Dies dient dem Schutz der Trinkwasserefassungen unterhalb und oberhalb der Stadt Basel, dem Schutz der Ökosysteme in und am Rhein und der Alarmierung im Rahmen der Hauptwarnzentrale Basel (HWZ1 des Warn- und Alarmdienstes Rhein der IKSР). Folgende Aufgaben sind damit verbunden:

- Überwachung des Rheins in Bezug auf alle gemeldeten und nicht gemeldeten Havarien bzw. Fehleinleitungen im Raum Nordwestschweiz und auf deutscher Seite des Hochrheins. (Grundlage für die Aufgaben der HWZ1, Eruiierung und Schliessen der Quellen, Förderung des Vorsorgeprinzips bei den Verursachern durch umfassende Kontrollen).
- Langfristige Qualitätskontrolle (Trendüberwachung) des Rheins nach dem Programm der IKSР im Verbund mit anderen Überwachungsstationen in Deutschland, Frankreich und den Niederlanden.

Die Erfassung von Stoffen aus Havarien bzw. Fehleinleitungen bedingt Analysenverfahren, die unerwartete und unbekannte Stoffe möglichst voll umfänglich erfassen. Die langfristige Trendüberwachung von organischen Mikroverunreinigungen erfordert eine Messmethodik, mit welcher unerwünschte Schadstoffe bis in den tiefen Konzentrationsbereich (ng/L) detektiert und quantifiziert werden können.

In der Analytik für die Rheinüberwachungsstation Weil a.R. wird aktuell ein Screening mittels Gaschromatographie-Massenspektrometrie (GC-MS) durchgeführt [1]. Das damit definierte Analysenfenster beschränkt sich auf Stoffe, die weitgehend unpolar sind und sich beim Erhitzen im GC nicht zersetzen. Mit dem aktuellen Analysenprogramm werden damit nur ein Teil der für das Einzugsgebiet relevanten Stoffe erfasst. Kenntnisse über Stoffe im Rhein, die bisher noch nicht erfasst werden können, sind deshalb essentiell. Zur Erweiterung des Analysenfensters im Bereich der polaren organischen Verbindungen bieten sich vor allem flüssigchromatographische Verfahren an.

Tandem-Massenspektrometrie

Aufgrund der guten Selektivität und Nachweisempfindlichkeit sowie der breiten Erfassbarkeit von polaren und unpolaren Substanzen ist für die Identifizierung von organischen Mikroverunreinigungen die Flüssigchromatographie gekoppelt mit der Tandem-Massenspektrometrie (Triple-Quad-Geräte) heutzutage die Methodik der Wahl. In Kombination mit einer Anreicherung der Analyten mittels der Festphasenanreicherung (Solid Phase Extraktion = SPE) auf polymeren funktionalisierten Adsorbermaterialien können in der Regel organische Stoffe bis in den tiefen ng/l-Bereich quantifiziert werden. Der Analyse entziehen sich hierbei lediglich Substanzen, welche durch ihre extreme Flüchtigkeit, wie z.B. Freone, oder durch ihre fehlenden Protonen-Akzeptor/-Donor-Eigenschaften (z.B. Hexachlorbenzol) im Elektrospray-Interface (ESI) zwischen LC und MS kein ionisiertes Molekulation (protoniert bzw. deprotoniert) bilden. Damit ist der Grossteil der polaren wasserlöslichen organischen Schadstoffe mittels ESI-LC-MSMS erfassbar. Um eine eindeutige Identifizierung dieser Stoffe in Umweltproben zu gewährleisten, wird mittlerweile die EU-Richtlinie 2002/657/EC herangezogen, obwohl diese ursprünglich für Rückstände in lebenden Tieren und tierischen Erzeugnissen konzipiert war [2]. In dieser Richtlinie werden Identifizierungspunkte (IP) für massenspektrometrische Verfahren vergeben (siehe Tabelle 1). Für einen eindeutigen Nachweis müssen 3 IPs vom eingesetzten Verfahren erreicht werden. Dies bedeutet für die Verwendung eines Tandemmassenspektrometers (Triple Quad), dass mindestens 2 Ionenübergänge mit Einheitsauflösung pro Substanz gemessen werden müssen. Zusätzlich ist die Kontrolle der Verhältnisse der Ionenübergänge und der Retentionszeiten erforderlich.

Tabelle 1 Anzahl an erreichbaren Identifizierungspunkten in Abhängigkeit vom gewählten massenspektrometrischen Verfahren nach EU Kommissions-Richtlinie 2002/657/EG

MS-Verfahren	Erzielte Identifizierungspunkte pro Ion
Niedrig auflösende Massenspektrometrie (LR-MS)	1.0
LR-MS ⁿ Vorläufer-Ion	1.0
LR-MS ⁿ Produkt-Ion	1.5
HRMS	2.0
HR-MS ⁿ Vorläufer-Ion	2.0
HR-MS ⁿ Produkt-Ion	2.5

Voraussetzung: Mindestens ein Ionenverhältnis muss gemessen werden, wobei die maximale Abweichung der Ionenverhältnisse zwischen Probe und Standard bei $\pm 20\%$ für relative Ionenverhältnisse von $>50\%$, 25% für relative Ionenverhältnisse von $20-50\%$, $\pm 30\%$ für relative Ionenverhältnisse von $10-20\%$ und $\pm 50\%$ für relative Ionenverhältnisse von $<10\%$ betragen darf

HRMS: High Resolution Mass Spectrometry - Auflösung $>10\,000$

LRMS: Low Resolution Mass Spectrometry - Einheitsauflösung

Trotz der Vorteile der LC-MSMS-Methode sind dem Verfahren eindeutige Grenzen gesetzt. In der Praxis werden vorwiegend TripleQuad-Geräte eingesetzt. Diese Gerätetechnik kann im so genannten Selected Reaction Monitoring (SRM) Mode zu einem Zeitpunkt lediglich einen Ionenübergang aufnehmen. Dies hat zwar den Vorteil, dass ein Signal mit hoher Intensität erhalten wird, aber bei der Messung von mehreren Substanzen viele Experimente hintereinander durchgeführt werden müssen. Bei einer gängigen Peakbreite von etwa 30 sec für einen LC-Peak und einer Messzeit pro Ionenübergang von minimal 20 msec können maximal 75 Substanzen gleichzeitig gemessen werden. Dies gilt für die Annahme, dass der eluierende Substanzpeak mit mindestens 10 Datenpunkten erfasst und pro Substanz zwei SRM-Übergänge akquiriert werden. Üblicherweise kann der LC-Lauf darüber hinaus in mehrere Akquisitionsfenster unterteilt werden. Rechnerisch ergeben sich damit bei 3 Zeitfenstern etwa 225 Substanzen, die pro Lauf gemessen werden können [3]. Diese Zahl wird jedoch in der Praxis selten erreicht und ist mit erheblichem Aufwand bei der Methodenentwicklung vor allem bei der Wahl der Zeitfenster verbunden. Eine zweite Limitierung der Technik ist, dass die Ionenübergänge vorher anhand von Referenzstandards für jede Substanz einzeln ermittelt werden müssen und in der der Akquisition nachgelagerten Datenaufbereitung nur die aufgenommen SRM-Spuren ausgewertet werden können. Eine nachträgliche Auswertung anderer Substanzen ist damit nicht möglich. Diese als Target-Analytik benannte Technik lässt damit nicht die Suche nach unbekannten Verbindungen (Non-Target-Analytik) zu.

Hochauflösende Hybrid-Massenspektrometrie

Hier erweitern hoch auflösende Massenspektrometer die Möglichkeiten. Durch die kontinuierlich Aufnahme von hoch aufgelösten Fullscan-Spektren über den gesamten LC-Lauf mit einer physikalischen Massenauflösung von $> 10'000$ und einer Massengenauigkeit von < 10 ppm, können im Nachgang die Chromatogramme von beliebig vielen Substanzen aus den HR-Spektren (HR = high resolution) extrahiert werden. Da trotz der enormen Massentrennung diese extrahierten Ionenchromatogramme (XIC = extracted ion chromatograms) aber keine absolute zweifelsfreie Identifizierung der Substanzen zulassen - nach der EU Richtlinie 2002/657/EC werden hierfür 2 IPs erhalten - werden HR-Massenspektrometer meist mit einem niedrig auflösenden Massenspektrometer (Einheitsauflösung) gekoppelt. Diese Hybridmassenspektrometer erlauben es Produktionspektren (MSMS-Spektren) zu generieren, welche abhängig von den Informationen der HR-Spektren vorgenommen werden (data dependent acquisition). In den letzten Jahren wurden hierfür vor allem Time-of-Flight (TOF) Massenspektrometer mit einem

vorgeschaltetem Quadrupol-Massenspektrometer (Quad = Q) eingesetzt. Die grössten Einschränkungen bei der Verwendung dieser Q-TOF-Geräte für Multikomponent-Methoden lagen bisher bei der mangelnden Nachweisempfindlichkeit und dem eingeschränkten Linearitätsbereich, was insbesondere bei der Quantifizierung grosse Einschränkungen mit sich bringt [4-8].

Diese Limitierungen wurden mit der Markteinführung des Hybrid-Massenspektrometers bestehend aus der linearen Ionenfalle LTQ und des neuen HR-Massenspektrometers Orbitrap aufgehoben [9-14]. Dieser HR-Hybridmassenspektrometer weist nahezu vergleichbare Nachweisempfindlichkeiten wie TripleQuad-Geräte auf mit dem Unterschied, dass die Chromatogramme aus HR-Spektren isoliert werden, die mit einer Massenauflösung von bis zu 100'000 (~ 0.002 mmu Massendifferenz) und einer Massengenauigkeit von < 5 ppm aufgezeichnet werden können. Gleichzeitig können zur eindeutigen Identifizierung informationsabhängige MS-MS-Spektren in Einheits- oder Hochauflösung generiert werden. Damit vereint diese Technologie die Vorteile von TripleQuad- und HR-Hybrid-Massenspektrometern. Das LTQ-Orbitrap eignet sich somit für das Screening, die Quantifizierung, die Identifizierung und die Strukturaufklärung gleichermassen.

Multikomponenten-Methoden

Neben der LC-Trennung, der ESI-Ionisierung und der massenspektrometrischen Detektion hat vor allem auch die Anreicherung der Analyten einen entscheidenden Einfluss auf die Leistung der Gesamtmethode [15, 16]. Bei einer Multikomponenten-Methode besteht die Schwierigkeit darin neutrale, kationische und anionische Moleküle, welche sich zudem hinsichtlich ihrer Substanzeigenschaften wie Molekülgrösse und Polarität stark unterscheiden können, in einem Anreicherungsschritt bis um den Faktor 1000 gemeinsam aufkonzentrieren zu können [17]. In eine umfassende Multikomponenten-Methode für das Rheinwasser-Monitoring sollten heutzutage organische Wirkstoffe wie Pestizide, Arzneimittel, Biozide, Korrosionsschutzmittel, UV-Filter und Körperpflegeprodukte sowie deren Transformationsprodukte aufgenommen werden. Bisher in der Literatur beschriebene Screening-Methoden beinhalten meist nur Wirkstoffe aus einer Substanzgruppe und häufig unter Nicht-Berücksichtigung von Transformationsprodukten. Viele dieser Methoden wurden für die Lebensmittelanalytik entwickelt. Gruppenspezifische Screeningmethoden von Wasserproben mit einer Analytenzahl von einigen wenigen bis mehreren hundert Wirkstoffen sind jeweils getrennt für Pestizide [5, 17-21], Arzneimittel [22-30] und Biozide [31-33] zu finden. Methoden die mehr als zwei Gruppen wie z.B. Pestizide und Arzneimittel in einem Analysengang trennen und detektieren sind kaum in der Literatur zu finden [4, 34-40]. Keine

dieser Multikomponenten-LC-MSMS-Methoden analysiert dabei mehr als 3 Gruppen von Wirkstoffen und beinhaltet gleichzeitig die Detektion von mehr als 50 Wirkstoffen.

Eine Analysenmethode bestehend aus SPE, LC und LTQ-Orbitrap bietet damit im Prinzip die Möglichkeit sowohl eine Identifizierung und Quantifizierung von polaren Zielanalyten im tiefen Spurenbereich als auch die Strukturaufklärung von unbekannten Schadstoffen [41, 42] durchzuführen, was zwei der wesentlichen Anforderungen an eine Analysenmethodik für die Rheinüberwachungsstation sind.

2 Zielsetzung

Ziel der Studie war es die Eignung einer SPE-LC-Orbitrap-Methode für ein Multikomponenten-Screening von Rheinwasser anhand von ausgewählten polaren Verbindungen zu testen. Inwieweit diese Methodik die beiden Hauptziele der Rheinüberwachungsstation ‚langfristige Qualitätskontrolle‘ sowie ‚Alarmierung von Fehleinleitungen und Havarien‘ abdecken kann, wurde in zwei Teilschritten untersucht.

Im ersten Schritt sollte eine Analysenmethodik mit Anreicherungsschritt für bekannte, polare Mikroverunreinigungen (120 - 170 Substanzen) entwickelt werden. Mit der entwickelten Methodik sollte in ausgewählten Rheinproben abgeklärt werden, ob sich die Methodik für eine langfristige Qualitätsüberwachung im Rhein eignet und welche Rolle bislang nicht erfasste polare Stoffe für die Belastung des Rheins spielen. Die Zielsubstanzen wurden aus der Substanzgruppe der Pestizide, Biozide, Korrosionsschutzmittel, Veterinär- und Humanpharmaka ausgewählt. Zusätzlich wurden Umwandlungsprodukte dieser Stoffe bei der Auswahl mit berücksichtigt.

Im zweiten Schritt sollte getestet werden, ob die LC-Orbitrap-Methode, gegebenenfalls ohne eine Probenaufkonzentrierung, für die Identifizierung von höher konzentrierten, polaren Industriechemikalien, die zum Beispiel aus Fehleinleitungen herrühren, ebenfalls geeignet ist. Hierzu wurden Rheinproben und das gereinigte Abwasser von Kläranlagen (kommunal und industriell) auf ausgewählte Industriechemikalien untersucht. Die Auswahl der Substanzen erfolgte nach Rücksprache mit Kantonen, Rheinüberwachungsstation (AUE BS), Industrie, Landesanstalt für Umwelt, Messungen und Naturschutz Baden-Württemberg (LUBW) und Regierungspräsidium Freiburg im Br..

3 Material und Methoden

3.1 Chemikalien

Folgende Chemikalien wurden für die Probenvorbereitung, die LC- und MS-Messung sowie für die Standardherstellung benutzt (Tabelle 2). Die Herstellung der Referenzstandardlösungen unter Angabe der eingesetzten Reinsubstanzen ist im Kapitel 3.2 beschrieben.

Tabelle 2 Reinheit und Hersteller der verwendeten Chemikalien

Substanz	Hersteller
Reinstwasser	Millipore
Wasser, HPLC-Reinheit	Acros Organics
Methanol, HPLC-Reinheit	Acros Organics
Acetonitril, HPLC-Reinheit	Acros Organics
Isopropanol, HPLC-Reinheit	Acros Organics
Ameisensäure 98-100 % p.a.	Merck
Ethanol p.a.	Merck
Essigsäure-ethylester, HPLC-Reinheit	Fluka
Ammoniak 25%	Merck
Stickstoff 99.999 %	Carbagas
Ammoniumacetat p.a.	Merck

3.2 Standardlösungen

Für die zu untersuchenden Substanzen wurden Referenzstandards mit einer Reinheit von mindestens 97% von folgenden Herstellern verwendet: Dr. Ehrenstorfer GmbH, Sigma-Aldrich, Acros, Fluka, Chemos GmbH, Enamine, ReseaChem, Interchim und TRC Canada. Aus den festen oder flüssigen Reinsubstanzen wurde für jede Substanz eine Stammlösung mit einer Konzentration von 1 mg/ml hergestellt. In Abhängigkeit von der Löslichkeit der Substanz wurden die Reinsubstanzen in Ethanol, Methanol, Methanol/0.1 M HCl (V:V= 2/3), Isopropanol oder Acetonitril gelöst. Aus den Einzel-Stammlösungen wurden 7 Mischstandardlösungen jeweils mit einer Konzentration von 10 µg/ml, 1 µg/ml und 0.1 µg/ml angesetzt. Die Mischstandardlösungen wurden nach Substanzgruppen und Löslichkeiten zusammengestellt. Als Lösungsmittel für die Mischstandardlösungen wurde ausschliesslich Ethanol verwendet. Die Standardlösungen wurden bei -20°C im Dunkeln aufbewahrt. Um Substanzausfällungen zu vermeiden wurden diese vor jeder Benutzung ins Ultraschallbad gestellt und anschliessend über 2 Stunden bei Raumtemperatur stehen gelassen. Als interner Standard wurden zwei Mischlösungen, welche insgesamt 59 isotope markierte Substanzen enthielten, mit einer Konzentration von 2 bzw 5 µg/ml verwendet. Weitere Details zu den untersuchten Substanzen und der eingesetzten internen Standards können dem Anhang B ‚Substanzsteckbriefe‘ entnommen werden.

3.3 Probenahme

Von der Rheinüberwachungsstation Weil am Rhein wurden im Herbst 2007 durch Mitarbeiter des AUE-Labors Basel (Amt für Umwelt und Energie Basel) zwölf Tages- bzw. 2-Tages-Mischproben aus dem Rhein entnommen. Die Proben wurden abgefüllt in zwei 2 L-Glasflaschen gefroren an die Eawag transportiert und dort bei -20°C bis zur Aufarbeitung gelagert. Die Abflussdaten für den Rhein im Jahr 2007 und die Probenahmetermine sind aus der Abbildung 13 (Kapitel 4.4.1) zu entnehmen.

Ebenso wurden Anfang Oktober Proben aus dem Ablauf von 7 Kläranlagen entnommen, die bei Basel in den Rhein einleiten. Die genauen Probenahmetermine sind in der Tabelle 13 festgehalten. Es wurde bei allen Kläranlagen 24-Stunden Sammelmischproben entnommen mit Ausnahme der ARA Basel, der ARA Chemie und der ARA Rhein AG, bei welchen Stichproben gezogen wurden. Tabelle 3 gibt einen Überblick über die wichtigsten Parameter der beprobten Kläranlagen. Die Lage der Rheinüberwachungsstation (RüS) und der untersuchten Kläranlagen bei Basel sind schematisch in der Abbildung 15 dargestellt (Kapitel 4.4.1).

Von den 7 beprobten Kläranlagen bereitet eine Anlage rein kommunales Abwasser, drei Anlagen rein gewerbliches/industrielles Abwasser und drei Anlagen gemischtes Abwasser auf. Die Kläranlagen mit den höchsten Einwohnergleichwerten sind die kommunale ARA Basel mit einem Wert von 270'000 sowie die ARA Rhein AG mit 271'000 und einem grossen industriellen Abwasseranteil. Dem Anhang A sind Schemata einiger Anlagen zu entnehmen.

Tabelle 3 Wichtige Daten und Parameter zu den beprobten Kläranlagen

	ARA Rhein AG	ARA DSM	ARA Grenzach Ciba	ARA Birs	ARA S.T.E.I.H.	ARA Chemie Basel	ARA Basel
Angeschlossene Gemeinden mit Gewerbe	Augst, Pratteln, Arisdorf, Giebenach, Olisberg	keine	Grenzach	Birsfelden	keine	keine	Basel
Angeschlossene Industriebetriebe	Novartis, Ciba SC, Syngenta, Clariant, Rohrer u.a.	DSM	Ciba	keine	Ciba SC, Clariant, Novartis	Ciba SC, Huntsman, Novartis, Pharma, Roche, Syngenta	keine
Einleitung bei Rhein km	156.8	160.19	161.35	164.1	168.2	169.3	169.3
Angeschlossene Einwohner/-gleichwerte	271'065	260'000 (Basis CSB)	120'000	120'000	213'000	120'000 (Basis BSB 60 g/d)	270'000 (Basis BSB 60 g/d)
Durchfluss - Gesamt - Anteil Gewerbe	16500 m³/d 40% Industrie	8300 m³/d 100% Industrie	5000 bis 17500 m³/d 75% Ciba	30'000 m³/d ca. 30% Gewerbe	4732 m³/d 100% Industrie	4'954 m³/d 100% Industrie	94'095 m³/d < 10% Gewerbe
TOC (Zulauf/Ablauf)	1187/280mg/L (Industrie) 81/64 mg/L (kommunal)	1714/97.3 mg/L	700/80 mg/L	200/20 mg/L	838/35 mg/L(DOC)	951/99 mg/L	129/9 mg/L
CSB (Zulauf/Ablauf)	-	6025/361 mg/L	-	600/20 mg/L	2860/141 mg/L	4000/450 mg/L	400/30 mg/L
BSB (Zulauf/Ablauf)	1840/123 mg/L (Industrie) 116/14 mg/L (kommunal)	3068/15.5 mg/L	-	300/8 mg/L	1360/14 mg/L	1430/8 mg/L	171/6 mg/L
Schlammalter	ca. 5 Tage (Industrie) ca. 2-3 Tage (kommunal)	13 - 15 Tage	17-25 Tage	15 Tage	15 Tage	3.0 Tage	1.7 Tage
vorhandene Reinigungsstufen	Schema der Anlage siehe Anhang und http://www.ararhein.ch	Vorklärung; 1. Biostufe Tropfkörper; 2. Biostufe 2 Biotanks mit alternierendem Belüftungsregime zwecks Nitrifikation+Denitrifikation, Möglichkeit zu Phosphatfällung mit Fe(II)chlorid bei Bedarf; Nachklärung.	Getrennte Vorbehandlung für Industrie- und Kommunalabwasser. Gemeinsame biologische Behandlung (Nitrifikation/Denitrifikation + simultane Phosphatfällung)	Nitrifikation, Denitrifikation, Phosphorelimination (SBR Verfahren)	Schema der Anlage siehe Anhang und http://www.aue.bs.ch/fachbereich/abwasser/kläranlagen/ara-steh.htm	Schema der Anlage siehe Anhang und http://www.protheno.ch	Schema der Anlage siehe Anhang und http://www.protheno.ch

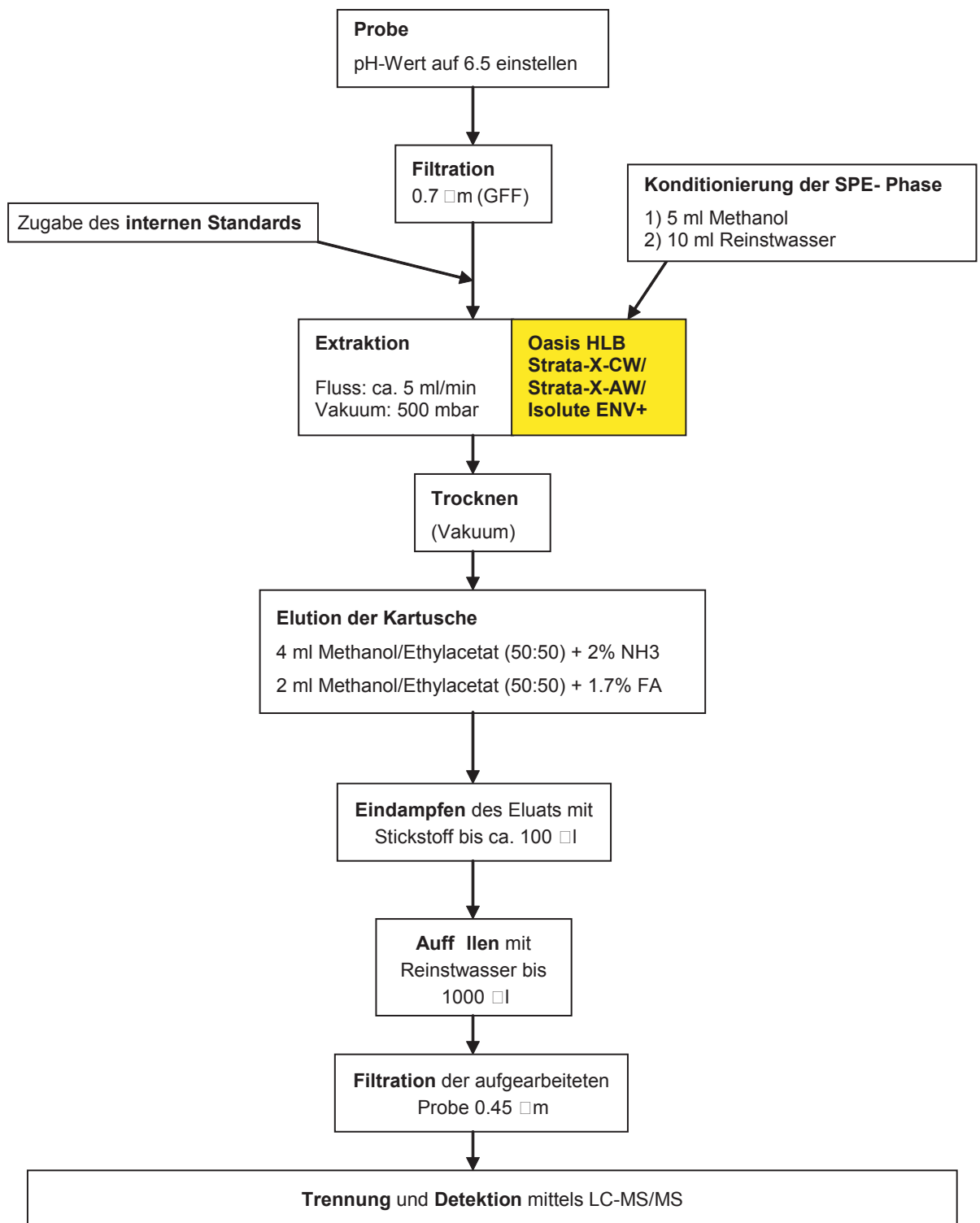
3.4 Probenaufarbeitung und Anreicherung mittels Festphasenextraktion

Für die Aufarbeitung wurde jeweils eine Probenflasche pro Probenahmestelle bei Raumtemperatur aufgetaut und 500 ml (Rhein) bzw. 100 ml (Abwasser) der Probe mit einem Ammoniumacetatpuffer (1M) und Ameisensäure auf pH 6.5 eingestellt. Anschliessend wurde die Probe mit einem Glasfaser-Membranfilter (GFF; ca. 0.7 µm Porengrösse, Whatman) in einer Druckfiltrationsapparatur (Schleicher&Schuell) filtriert. Die filtrierte Probe wurde mit 20 µl bzw. 50 µl der internen Mischstandardlösungen versetzt, so dass sich 100 ng jeder Substanz in der Probe befand. Für die Extraktion wurden „Mixed Bed“-Kartuschen aus folgenden Materialien selbst hergestellt: 200 mg Oasis HLB, 100 mg Strata-X-AW (schwacher Anionenaustauscher), 100 mg Strata-X-CW (schwacher Kationenaustauscher) und 150 mg Isolute ENV+. Dabei wurden die letzten drei Materialien zusammengemischt, in eine Kartusche gefüllt und durch eine Fritte getrennt das Oasis-Material darüber gepackt.

Nach Konditionierung der SPE-Kartuschen mit 5 ml Methanol und 10 ml H₂O nanopur wurden die Proben mit Hilfe einer Vakuum-Extraktionsbox (Supelco) bei einem Fluss von ca. 5 ml/min auf den Kartuschen angereichert. Der nötige Unterdruck wurde mit einer Wasserstrahlpumpe erzeugt. Es wurde darauf geachtet, dass die Kartusche während der Extraktion nicht trocken lief. Nach der Extraktion wurde etwa 60 Minuten lang Luft durch die Kartuschen gesaugt, um diese möglichst vollständig vom Wasser zu befreien.

Die Elution der getrockneten Kartuschen erfolgte nacheinander mit 4 ml Methanol/Ethylacetat (50:50, V:V) + 2% NH₃ und 2 ml Methanol/Ethylacetat (50:50, V:V) + 1.7% Ameisensäure (FA). Bei der Beaufschlagung der Elutionsmittel wurde ein leichter Überdruck erzeugt, um eine gute Benetzung des Adsorbentmaterials zu gewährleisten. Das Eluat wurde durch Einblasen eines leichten Stickstoffstroms bis auf ca. 100 µl eingeeengt und mit Reinstwasser auf 1 ml Endvolumen exakt aufgefüllt. Während des Einengvorganges mittels Stickstoffstrom wurden die Innenwände der Elutionsgefässe mehrmals mit Methanol abgespült, um eventuell daran adsorbierte Substanzen in das Eluat zurückzuführen. Abschliessend wurde das Extrakt durch einen 0.45 µm RC-Spritzenfilter (RC=Reg. Cellulose) direkt in ein 2 ml Vial filtriert, mit einem Deckel (Teflonseptum) verschlossen und bis zur Messung gekühlt bei 4°C gelagert.

In Abbildung 1 sind die Arbeitsschritte der optimierten Anreicherungs-methode zusammengefasst.

**Abbildung 1** Schematische Darstellung der Probenaufarbeitung

3.5 Flüssigchromatographie

Zur Trennung der extrahierten und angereicherten Substanzen wurden 20 µl des Extraktes in den Flüssigchromatographen eingespritzt. Als Autosampler wurde ein HTS PAL von der CTC Analytics AG verwendet. Für die Substanztrennung wurde eine XBridge C-18 HPLC-Säule von Waters (2.1x50 mm, Partikelgrösse 3.5 µm) mit einer Vorsäule des gleichen Materials (2.1x10 mm) eingesetzt. Als HPLC-Pumpe kam ein quaternäres Niederdruckgradientensystem vom Typ Rheos 2200 der Firma Flux Instruments zum Einsatz. Die Laufmittel bestanden aus Wasser und Methanol, jeweils in HPLC-Reinheit. Beide Eluenten wurden jeweils mit 0.1 Vol% konzentrierter Ameisensäure versetzt. Die Säule wurde in einem Säulenofen auf 30°C temperiert.

Tabelle 4 Verwendeter Laufmittelgradient zur chromatographischen Trennung

Zeit	Laufmittel A	Laufmittel B	Fluss
[min]	[%]	[%]	[µl/min]
0	90	10	200
4	50	50	200
17	5	95	200
23	5	95	200
23.1	90	10	200
28	90	10	200

Laufmittel A: Wasser mit 0.1% Ameisensäure

Laufmittel B: Methanol mit 0.1% Ameisensäure

Anmerkung: Der Laufmittelgradient wurde sowohl im negativen als auch im positiven MS-Aufnahmemodus verwendet

3.6 Massenspektrometrie

LTQ-Orbitrap

Für die Detektion der mittels Flüssigchromatographie getrennten Substanzen wurde ein LTQ (Linear Trap Quadrupole) Orbitrap Massenspektrometer von Thermo Fisher Scientific Corporation verwendet. Das System besteht aus einer linearen Ionenfalle und dem hoch auflösenden Orbitrap-Massenanalysator, einer elektrostatischen Ionenfalle (siehe Abbildung 2). Mit diesem Hybrid-Massenspektrometer können sowohl niedrig aufgelöste MSⁿ-Spektren als auch MSⁿ-Spektren mit einer Auflösung von bis zu 100'000 (bei 400 m/z) aufgenommen werden.

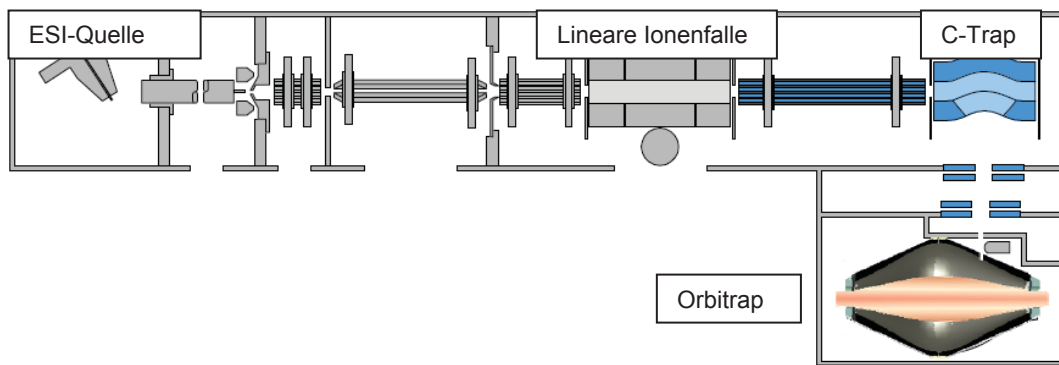


Abbildung 2 Schematischer Aufbau der LTQ-Orbitrap

3.6.1 Ablauf der Datenakquisition und -auswertung

Abbildung 3 zeigt das Ablaufschema für die Messung und Auswertung der Daten. Im ersten Schritt wurden hoch aufgelöste Orbitrap-Massenspektren mit einer Massenauflösung (R) von 60'000 akquiriert, um daraus für ein erstes Substanz-Screening Orbitrap-Chromatogramme für alle Zielanalyten zu extrahieren.

Bei einem positiven Substanznachweis in den extrahierten Orbitrap-Chromatogrammen (HR-MS) aufgrund der exakten Masse ($<10\text{ppm}$) und des Retentionzeitenvergleichs wurden in einem zweiten Analysengang von allen nachgewiesenen Substanzen hoch aufgelöste Produktions-Spektren im Orbitrap (HR-MSMS) aufgenommen. Für einen eindeutigen Nachweis müssen die gefundenen Konzentrationen sowohl in den HR-MS- als auch in den HR-MSMS-Chromatogrammen über der Bestimmungsgrenze liegen und die Ionenverhältnisse den Vorgaben der EU Kommissions-Richtlinie 2002/657/EG entsprechen. Dieses Vorgehen ergibt gemäss der EU Kommissions-Richtlinie 2002/657/EG insgesamt 5.5 IPs und übertrifft damit die geforderte Mindestanzahl von 3 IPs für einen zuverlässigen und eindeutigen Nachweis um einiges.

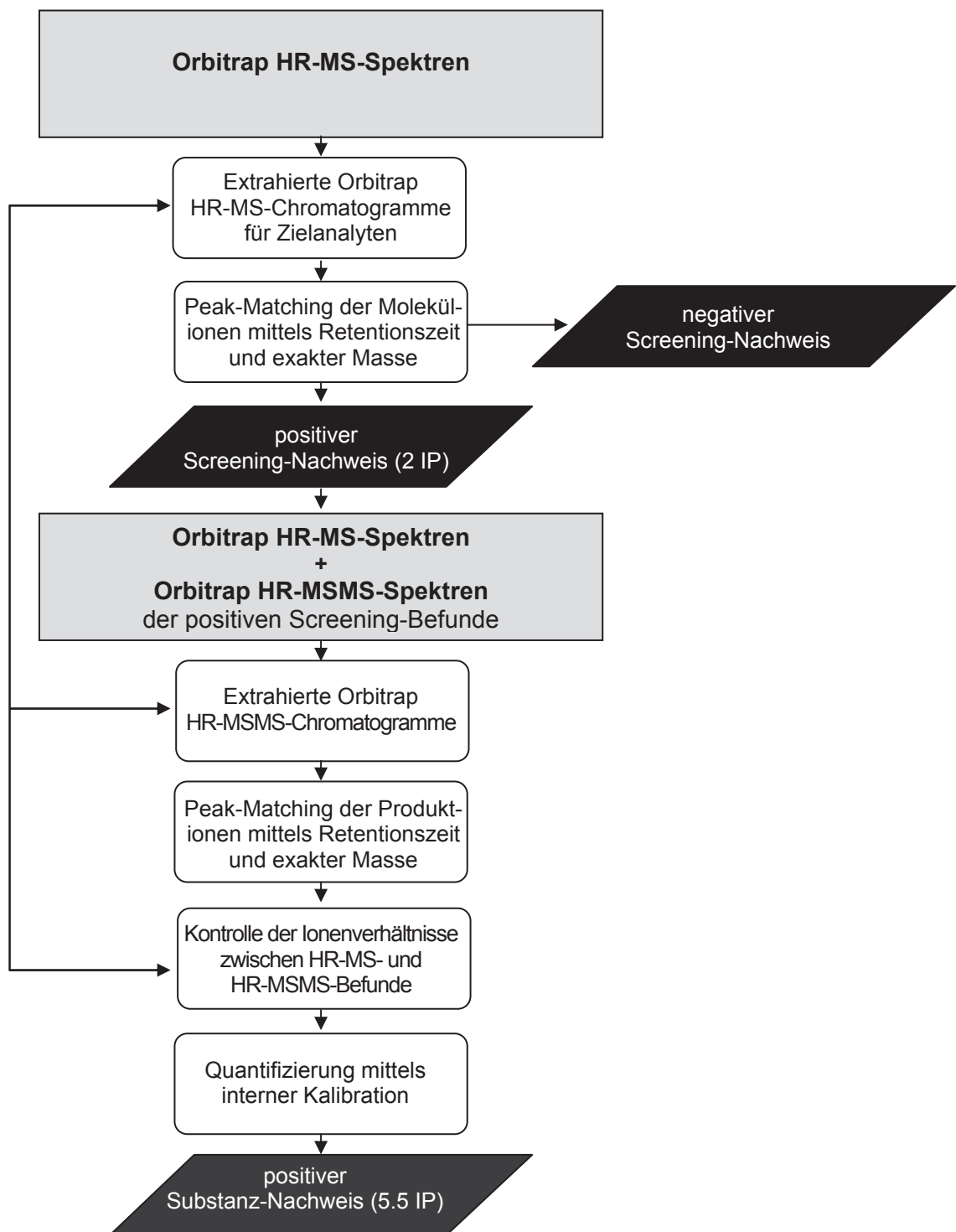


Abbildung 3 Ablaufschema für die Identifizierung und Quantifizierung der Zielanalyten. Das gesamte Prozedere muss für die Messung im negativen und positiven MS-Modus jeweils getrennt durchlaufen werden.

3.6.2 Allgemeine MS-Parameter

Die Ionisierung der Substanzen erfolgte mittels Elektrospray-Ionisation (ESI) im negativen und positiven Ionisationsmodus. Es wurde experimentell durch Einspritzen von Standardlösungen ermittelt, welche der Substanzen im positiven ($[M+H]^+$ Ionen) und welche im negativen ($[M-H]^-$ Ionen) Betriebsmodus der ESI-Quelle höhere Ionisierungseffizienz und damit bessere Nachweisempfindlichkeiten zeigten. Jedes Probenextrakt wurde jeweils im positiven und im negativen Modus gemessen nach vorangegangener chromatographischer Trennung (siehe Kapitel 3.5). In Tabelle 5 sind die ESI- und MS-Parameter zusammengestellt, welche sowohl für das Substanz-Screening mittels extrahierter HR-MS-Chromatogramme als auch für Identifizierung der positiven Screening-Nachweise anhand von HR-MSMS-Chromatogramme benutzt wurden.

Tabelle 5 Quellenparameter für das LTQ-Orbitrap

Ionenquelle ESI	
Sheath Gas Flow	0,6 l/min
Aux Gas Flow	1,5 l/min
Capillary Temperature	350 °C
Source Voltage	-4000 V bzw. 5000 V
Source Fragmentation	-10 V bzw. 10 V
Tube Lens	-60 V bzw. 60 V
Capillary Voltage	-25 V bzw. 25 V
Orbitrap MS	
Mass Range	50-2000 m/z
Full Scan AGC Target (max. Ionenzahl)	1'000'000
Injection Waveform	off
Data Type	centroid
Mass Calibration	extern
Orbitrap MS-MS	
Maximum Ion Time	200 ms
Injection Waveform	off
Data Type	centroid
MSMS AGC Target (max. Ionenzahl)	100000
Parent Isolation Width	3 m/z
HCD setting *	pos. 125, neg. 100
MSMS Activation Time	30 ms

* HCD Higher Energy Collision Dissociation (C-Trap fragmentation)

3.6.3 HR-MS-Chromatogramme

Für das Screening der ausgewählten Zielsubstanzen wurden im Orbitrap Full-Scan Spektren von 50-2000 m/z mit einer Massenauflösung von 60'000 (bei 400 m/z) im negativen und positiven Ionisierungsmodus aufgezeichnet (siehe Abbildung 4). Zur Auswertung wurden aus den HR-MS-Orbitrapspektren mit einem Massenfilter von 10 ppm die Chromatogramme der Zielanalyten extrahiert. Zur Substanzidentifikation wurden die Retentionszeiten der resultierenden Peaks mit denen der Standards verglichen. Zur eindeutige Peakzuordnung bei isobaren HR-MS-Substanzsignalen wurden die zeitgleich erzeugten informationsabhängigen HR-MSMS-Orbitrapspektren (Massenauflösung 7'500) herangezogen. Eine Aufnahme von HR-MSMS-Spektren im informationsabhängigen Modus wird dadurch erreicht, dass nur dann ein HR-MSMS aufgezeichnet wird, wenn eine Masse der Zielanalyten im HR-MS-Scan gefunden wird (siehe Abbildung 4).

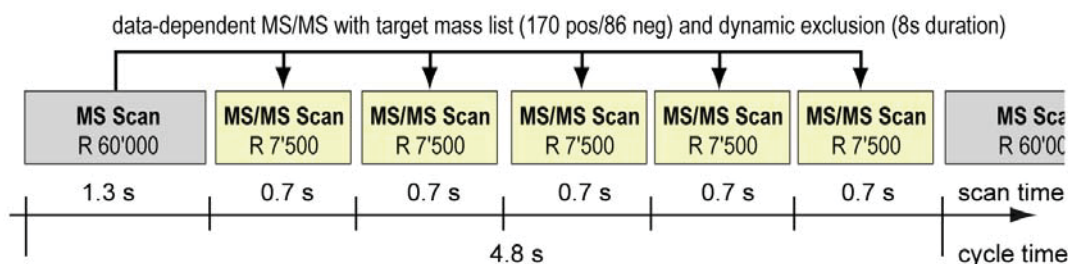


Abbildung 4 Experimentelles Setup für das Orbitrap-Screening mit kontinuierlichen HR-MS-Scans und informationsabhängigen HR-MSMS-Spektren

Dieser Aufzeichnungsmodus generiert nur wenige HR-MSMS-Spektren und eignet sich mit der derzeit vorhandenen Quantifizierungs-Software nicht für die quantitative Auswertung. Aus diesem Grund wurde für alle positiven Screening-Resultate eine weitere Messung durchgeführt, bei welcher kontinuierlich über den gesamten Chromatographielauf die entsprechenden HR-MSMS-Spektren aufgezeichnet wurden. Dies ist im nachfolgenden näher erläutert.

3.6.4 HR-MSMS-Chromatogramme

Zur Bestätigung der in den extrahierten HR-MS-Orbitrap-Chromatogrammen nachgewiesenen Zielanalyten wurden zusätzlich zum HR-MS-Scan hoch aufgelöste MSMS-Orbitrap-Spektren mit einer Massenauflösung von 7500 in einem weiteren Analysengang jeweils getrennt für den negativen und positiven Ionisierungsmodus kontinuierlich aufgezeichnet (siehe Abbildung 5). Hierzu wurden die $[M+H]^+$ Ionen bzw. $[M-H]^-$ Ionen im LTQ isoliert und anschliessend in der C-Trap mit einer HCD-Einstellung von 125 (positiver Mode) bzw. 100 (negativer Mode) fragmentiert. Anhand von Einzeleinspritzungen der

Standardlösungen konnten die substanzspezifischen Fragmente der Zielanalyten ermittelt und diese mit einem Massenfiter von 10 ppm aus den HR-MSMS-Spektren herausextrahiert werden. Zusätzlich wurden die Retentionszeiten der Standardlösung aus den extrahierten HR-MS- und HR-MSMS-Chromatogrammen für die Verifizierung der korrekten Substanzzuordnung in den Proben herangezogen.

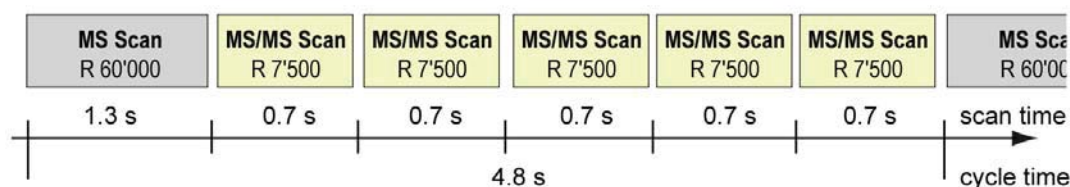


Abbildung 5 Experimentelles Setup für die Bestätigung von Zielverbindungen mit kontinuierlichen HR-MS- und HR-MSMS-Spektren auf der Orbitrap

3.7 Quantifizierung

Zur quantitativen Konzentrationsbestimmung der Zielanalyten wurden Standardlösungen in Nanopurwasser in den Konzentrationen 0.1, 1, 5, 10, 50, 100, 300 und 500 ng/l (letzterer nur bei Messung der Kläranlagen-Proben) angesetzt, mit 20 µl bzw. 50 µl interner Standardlösung versetzt, nach dem im Kapitel 3.4 beschriebenen Verfahren aufkonzentriert und am LC-LTQ-Orbitrap (Kapitel 3.5 und 3.6) gemessen. Die Auswertung erfolgte nach dem Prinzip der internen Kalibration. Dabei wurden zur Erstellung der Kalibrationsgeraden für jede Substanz die Peakflächenverhältnisse zwischen Analyt und internem Standard gegenüber der Konzentration für die gemessenen Standardlösungen aufgetragen. Jedem Analyten wurde der jeweilige strukturidentische, isotoopenmarkierte interne Standard zugeordnet. Substanzen, für die kein entsprechender isotoopenmarkierter interner Standard vorhanden war, wurde einer der vorhandenen 59 internen Standards mit ähnlicher Retentionszeit und Struktur zugeordnet. Zur Ermittlung der Analytkonzentration in der Probe wurde das Peakflächenverhältnisse von Substanz und internem Standard in der gemessenen Probe auf die erstellte Kalibrationsgerade abgetragen.

Die so erhaltenen Ergebnisse müssen nicht mehr um die substanz- und matrixspezifischen SPE-Wiederfindungen, die Eindampfverluste oder die Ionensuppression bei der Messung korrigiert werden. Die Bestimmungsgrenzen des Gerätes können dem Kapitel 4.2.2 entnommen werden. Die Bestimmungsgrenzen der Gesamtmethodik wurden für den Rhein und eine Kläranlage jeweils über eine aufgestockte Probe abgeschätzt und sind ebenso wie die Analytkonzentrationen in den untersuchten Proben der Tabelle 12 und Tabelle 15 zu entnehmen.

4 Resultate und Diskussion

4.1 Auswahl der Zielverbindungen

4.1.1 Mikroverunreinigungen

Um eine umfassende Qualitätskontrolle und eine langfristige Trendüberwachung des Rheins gewährleisten zu können, sollten eine möglichst breite Auswahl von Schadstoffen, die möglicherweise selbst in sehr geringen Konzentrationen adverse Effekte auf Mensch und Umwelt - sogenannte Mikroverunreinigungen - besitzen können, in eine Analysenmethode für die Rheinüberwachungsstation Weil am Rhein (RÜS) aufgenommen werden. Basierend auf den bisherigen Befunden der RÜS und unter Einbezug von Eawag-Expertenwissen sowie unter Berücksichtigung von nationalen und internationalen Befunden in Monitoringstudien von Oberflächen-, Grund- und Abwasser wurden insgesamt 211 Substanzen in die Multikomponenten-Screeningliste aufgenommen. Für die Aufnahme in die Liste der Zielanalyten waren insbesondere Kriterien wie Einsatzmengen, Persistenz und Mobilität in der Umwelt entscheidend. Wirkstoffe mit einem möglichen Schädspotential standen hierbei im Vordergrund. Etwa 95% der Substanzen sind Pestizide, Biozide und Arzneimittel sowie deren Metabolite. Ungefähr 5% sind Wirkstoffe aus dem Bereich der *Personal Care* Produkte, der Korrosionsschutzmittel, der Weichmacher und der Additive. Bei ca. 30% der untersuchten Verbindungen handelte es sich um Abbauprodukte. Die Abbildung 6 gibt einen Überblick über die Anzahl und Verteilung der ausgewählten Substanzen.

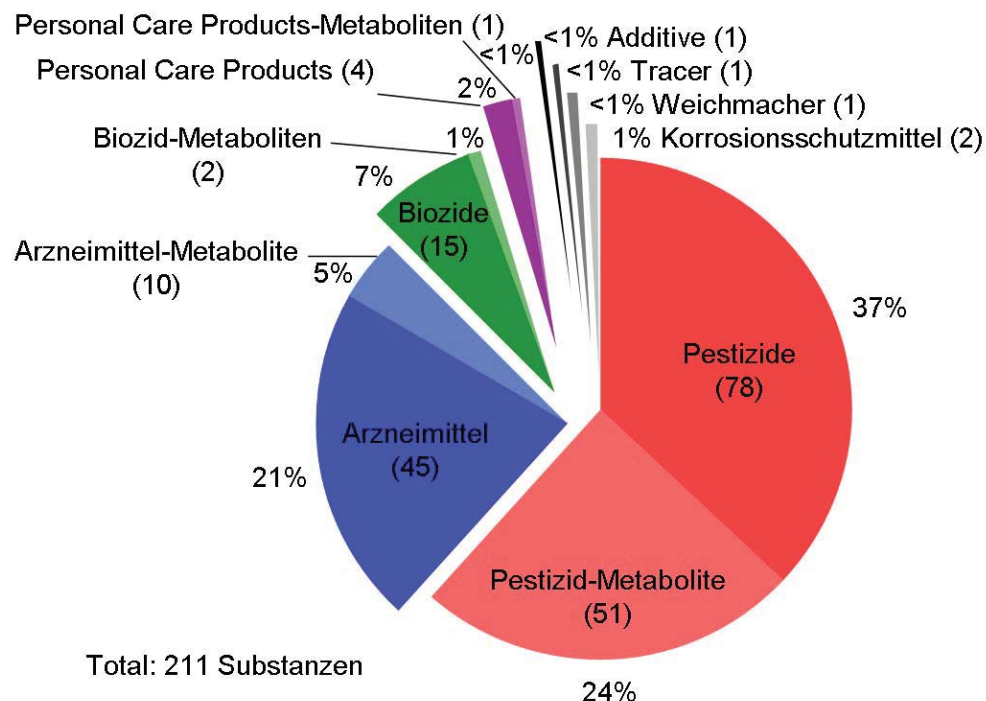


Abbildung 6 Verteilung und Charakterisierung der ausgewählten Substanzen

In der Abbildung 7 sind einige wichtige Subanzeigenschaften der ausgewählten Verbindungen aufgetragen. Hierzu wurden der Oktanol-Wasser-Koeffizient K_{ow} , die Molekülspezifizierung und die Molmasse für die Zielanalyten aus der Literatur gesammelt oder mit Hilfe von Vorhersagemodellen abgeschätzt. Die Abschätzung des K_{ow} für die neutrale Molekülform erfolgte mit dem Programm kow-win (EPI Suite; http://www.syrres.com/esc/est_kowdemo.htm). Zur Vorhersage der Spezifizierung in Wasser wurde mit dem Programm SPARC (<http://ibmlc2.chem.uga.edu/sparc/>) die pKs Werte und darauf basierend die dominierende Molekülspezifizierung bei pH 7 ermittelt.

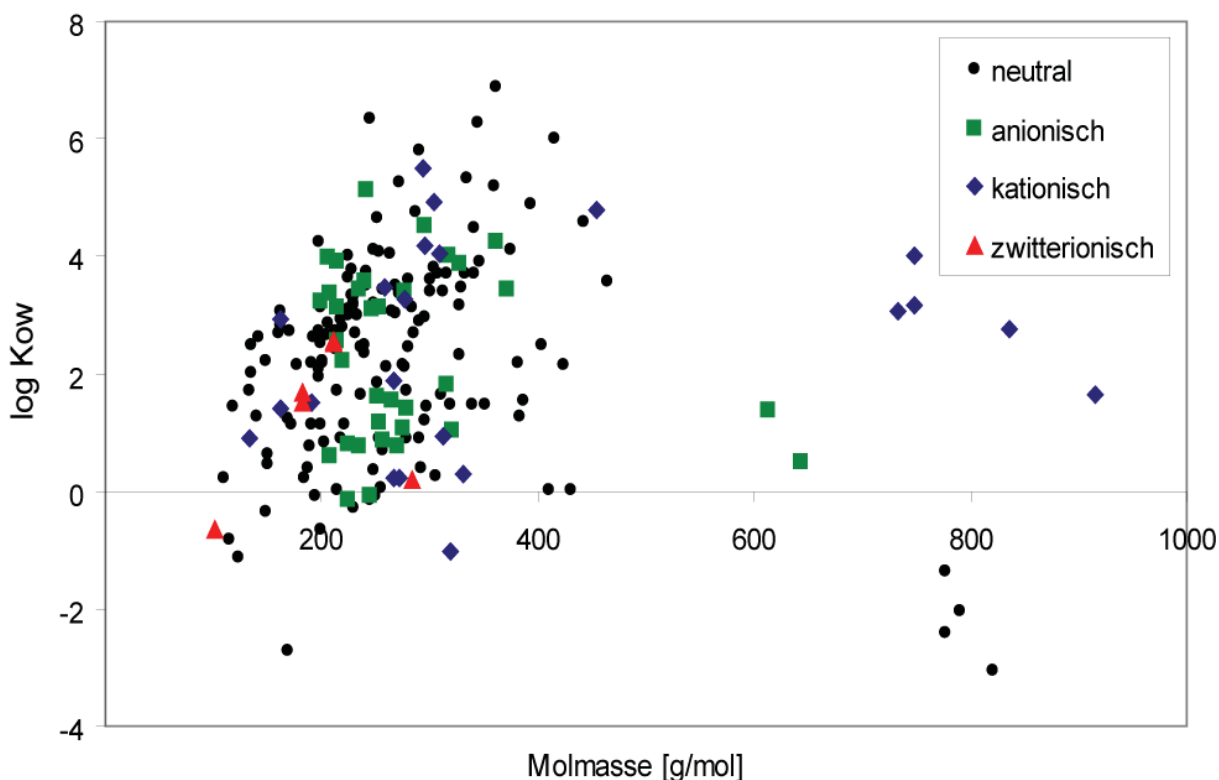


Abbildung 7 Zusammenhang zwischen $\log K_{ow}$ -Wert, Masse und Spezifizierung bei pH 7 für die ausgewählten 211 Substanzen

Anmerkung: Der $\log K_{ow}$ wurde für die neutrale Form berechnet, da eine Abschätzung des $\log K_{ow}$ für ionische Moleküle stark fehlerbehaftet ist. Die Spezifizierung wurde für die jeweilige Hauptspezies beim pH-Wert 7 berechnet.

Die überwiegende Mehrheit der untersuchten Substanzen hat eine Molmasse zwischen 100 und 500 g/mol. Die Ausnahme bilden die Röntgenkontrastmittel Diatrizoat, Iohexol, Iomeprol, Iopamidol, Iopromid, Ioxitalaminsäure und die Makrolid-Antibiotika Azithromycin, Clarithromycin, Erythromycin, Roxithromycin und Tylosin, die zwischen 614 und 916 g/mol liegen. Mit $\log K_{ow}$ -Werten von -3 bis 7 sind sowohl sehr polare als auch sehr

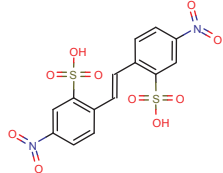
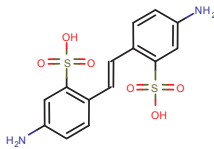
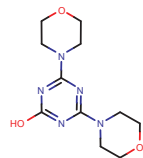
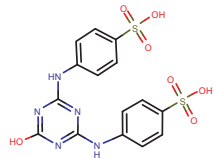
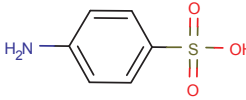
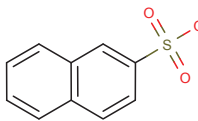
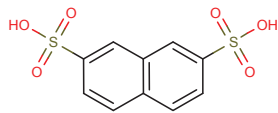
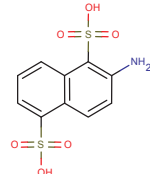
unpolare Substanzen vertreten. Die Mehrzahl der Wirkstoffe besitzen einen $\log K_{ow}$ zwischen 0 bis 4. Beispiele für sehr polare, hydrophile Substanzen sind die Röntgenkontrastmittel, Norfloxacin und N,N-Dimethylsulfamid ($\log K_{ow}$ -Werte von -1 bis -3). Mit Clotrimazol, Diflufenican, Fenofibrat, Fenpropimorph, Octocrylen, 2-Ethylhexyl-trans-4-methoxycinnamat, Prosulfocarb, Tonalid, Triclosan und Trifluralin, welche $\log K_{ow}$ -Werte von 4.5 bis 7 aufweisen, sind auch eine Reihe von sehr unpolaren, lipophilen Substanzen vertreten, deren Eintrag ins Gewässer jedoch wegen des grossen Adsorptionvermögens als sehr gering eingestuft werden muss.

Bei einem umweltrelevanten pH-Wert von 7 liegen 147 Substanzen in neutraler, 36 in anionischer, 22 in kationischer und 6 in zwitterionischer Form vor. Insbesondere ionische Moleküle mit einem niedrigem $\log K_{ow}$, wie zum Beispiel die anionischen ESA- und OXA-Metaboliten der Chloracetanilide, die kationischen beta-Blocker oder die zwitterionischen Hydroxy-Metaboliten der Triazinherbizide, sind in der aquatischen Umwelt als besonders mobil einzuschätzen. Detaillierte Informationen zu der Substanzspezifizierung finden sich im Anhang *„Substanzsteckbriefe“*.

4.1.2 Industriechemikalien

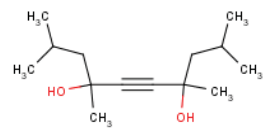
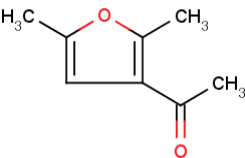
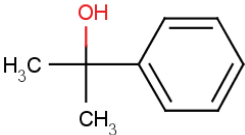
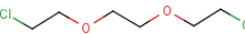
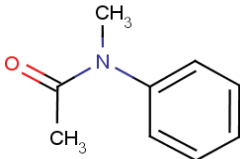
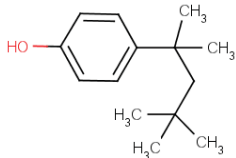
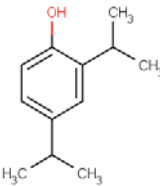
Inwieweit mittels LC-MS eine Identifizierung von polaren Industriechemikalien möglich ist, die entweder in der Kläranlage nicht oder unzureichend eliminiert oder durch Fehleinleitungen in den Rhein gelangen, sollte beispielhaft an ausgewählten Substanzen geklärt werden. Die Informationsbeschaffung bezüglich Art und Menge von abwassergängigen Industriechemikalien (Edukte, Produkte und Zwischenprodukte), welche durch das BAFU seit Beginn des Projektes durch Anfragen bei der Schweizer Gesellschaft der Chemischen Industrie (SGCI) und bei Industrievertretern (Arbeitsgruppe, Beirat RÜS) vorangetrieben wurde, ergab durch ablehnende Antworten entgegen der vor Projektbeginn zugesagten Unterstützung keine verwertbaren Angaben. Lediglich für einen Industriebetrieb aus dem Bereich der Farbstoffsynthese wurden Informationen zum Vorkommen von wasserlöslichen Zwischen- und Nebenprodukten geliefert, welche bei der Aufreinigung der Prozessabwässer nicht vollständig entfernt werden können. Die in der Tabelle 6 aufgelisteten Benzol- und Naphthalin-Sulfonate sowie Triazinderivate wurden in die Screening-Methode als Leitsubstanzen für anionische, wasserlösliche Zwischen- und Nebenprodukte aus der industriellen Produktsynthese aufgenommen. Hierzu wurden auch existierende Messungen zu weiteren aromatischen Sulfonaten im Rhein von der Landesanstalt für Umwelt, Messungen und Naturschutz des Bundeslandes Baden-Württemberg aus dem Jahr 2000 ausgewertet.

Tabelle 6 Auswahl von Benzol- und Naphthalin-Sulfonate sowie Triazinderivate als Leitsubstanzen für Industriechemikalien aus der Farbstoffsynthese

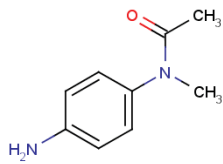
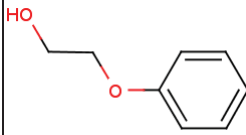
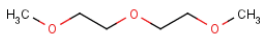
Name	CAS-Nr	Summenformel	Strukturformel	Log Kow
4,4'-Dinitrostilben-2,2'-disulfonsäure (DNS)	128-42-7	C ₁₄ H ₁₀ N ₂ O ₁₀ S ₂		0.05 (Syracus)
BDD-PEO		Substanzdaten sind vertraulich		
4,4'-Diaminostilben-2,2'-disulfonsäure (DAS)	81-11-8	C ₁₄ H ₁₄ N ₂ O ₆ S ₂		-1,42 (Syracus)
2-Hydroxy-4,6-bis-morpholino-1,3,5-triazin	19899-85-5	C ₁₁ H ₁₇ N ₅ O ₃		-3.910 ± 0.695
2-Hydroxy-4,6-bis-sulfanilino-1,3,5-triazin	50602-56-7	C ₁₅ H ₁₃ N ₅ O ₇ S ₂		-0.869 ± 0.643
Sulfanilsäure (4-amino-benzol-sulfonsäure,)	121-57-3	C ₆ H ₇ NO ₃ S		-0.512 ± 0.217
2-Naphthalin-sulfonsäure	120-18-3	C ₁₀ H ₈ O ₃ S		0.63
2,7-Naphthalin-disulfonsäure	92-41-1	C ₁₀ H ₈ O ₆ S ₂		-0.94
2-Amino-naphtalin-1,5-disulfonsäure	117-62-4	C ₁₀ H ₉ NO ₆ S ₂		-1.85

Da der Fokus bei der Substanzauswahl auf der Evaluation der methodischen Möglichkeiten und nicht auf der detaillierten Untersuchung von einzelnen Industriebetrieben oder -branchen lag, wurden weitere bereits im GC-MS-Screening des AUE-Labors detektierte Industriechemikalien dem zu untersuchenden Substanzdatensatz hinzugefügt. Basierend auf der bisherigen Nachweishäufigkeit im Rhein wurden aus 60 Verbindungen etwa 10 Wirkstoffe mit möglichst unterschiedlichen chemisch-physikalischen Eigenschaften ausgewählt. Diese Substanzen sind in der Tabelle 7 aufgeführt.

Tabelle 7 Auswahl von häufig detektierten Chemikalien im Rhein bei Basel als Leitsubstanzen für die Methodenentwicklung mit dem LC-HRMSMS

Name	CAS-Nr	Summenformel	Strukturformel	Log Kow
Surfynol 104A (2,4,7,9-Tetramethyl-5-decyne-4,7-diol)	126-86-3	C ₁₄ H ₂₆ O ₂		3.62
(3,5-Dimethyl-2-furyl)-methyl-keton	10599-70-9	C ₈ H ₁₀ O ₂		1.7
2-Phenyl-2-propanol	617-94-7	C ₉ H ₁₂ O		2
1,2-bis(2-Chloroethoxy)-ethan	112-26-5	C ₆ H ₁₂ Cl ₂ O ₂		1.2
N-Methyl-N-phenyl-acetamid	579-10-2	C ₉ H ₁₁ NO		1.1
4-(1,1,3,3-Tetramethylbutyl)-phenol	140-66-9	C ₁₄ H ₂₂ O		5.2
bis-(2,4-Isopropyl)-phenol	2934-05-6	C ₁₂ H ₁₈ O		4.2

Fortsetzung der Tabelle 7

Name	CAS-Nr	Summenformel	Strukturformel	Log K _{ow}
N-(4-Aminophenyl)-N-methyl-acetamid	119-63-1	C ₉ H ₁₂ N ₂ O		0.4
2-Phenoxy-ethanol	122-99-6	C ₈ H ₁₀ O ₂		1.2
Diglyme (Diethylen glycol dimethyl ether)	111-96-6	C ₆ H ₁₄ O ₃		-0.4

4.2 Entwicklung und Optimierung der Analysenmethode

4.2.1 Flüssigchromatographie

Abbildung 8 zeigt die Verteilung der im Massenspektrometer detektierbaren Substanzen anhand ihrer Retentionszeiten im Chromatogramm. Wie schon an den log K_{OW}-Werten festgestellt wurde, decken die Substanzen einen grossen Polaritätsbereich ab. Je höher der log K_{OW}-Wert einer Substanz, desto länger die Zeit bis diese die Säule wieder verlässt. Der grösste Anteil der Substanzen eluiert im Bereich zwischen 4 und 13 Minuten.

Neben dem gewählten Eluenten Methanol und Wasser mit 0.1% Ameisensäure wurden auch Eluenten mit 5mM Ammonium-Acetat getestet. Durch den Ammonium-Acetat-Puffer vergrösserten sich zwar die Signal-Intensitäten einiger weniger Substanzen im negativen Ionisierungsmodus, wie z.B. Ibuprofen und Bisphenol A, die Signal-Intensitäten der meisten anderen Substanzen verringerten sich jedoch (im Durchschnitt um 40%). Zugunsten einer besseren Empfindlichkeit für eine Mehrzahl der Substanzen wurden daher die Eluenten mit 0.1% Ameisensäure gewählt.

Obwohl die gewählten flüssigchromatographischen Bedingungen nicht für alle Verbindungen das Optimum darstellen, können ausnahmslos alle Wirkstoffe aus der Gruppe der Mikroverunreinigungen und Industriechemikalien mit der entwickelten LC-Methode erfasst werden.

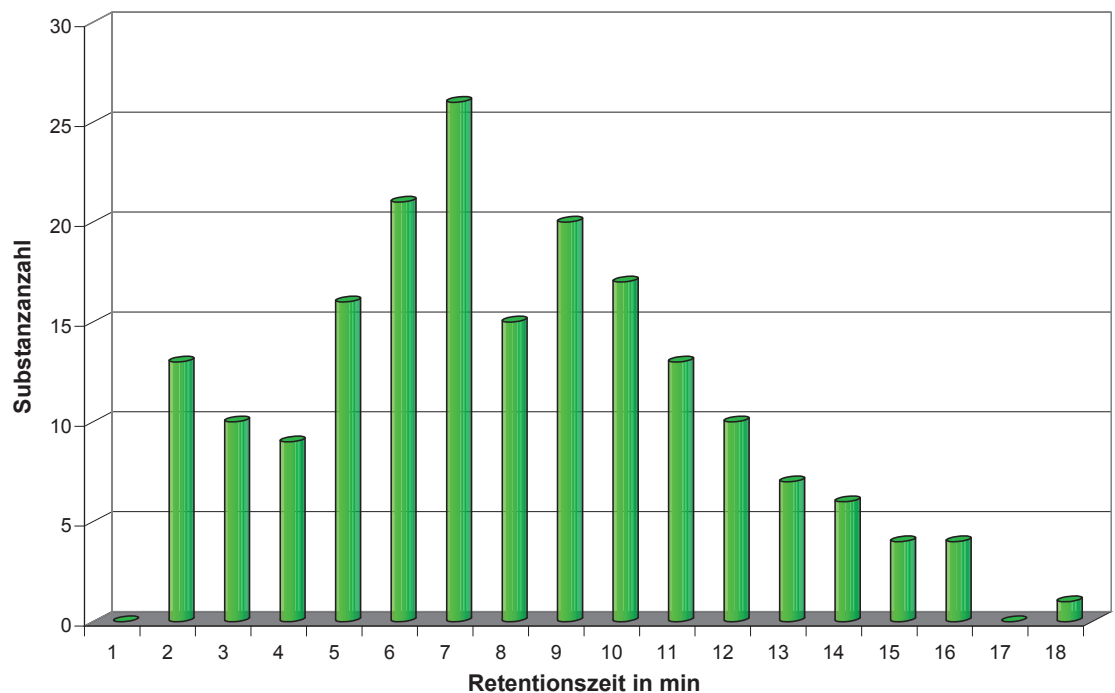


Abbildung 8 Verteilung der gemessenen Substanzen im Chromatogramm.

4.2.2 Massenspektrometrie

Die Nachweisempfindlichkeit des Gerätes (Instrument Detection Limit - IDL) wurde durch Einspritzung von niedrig konzentrierten Mischstandards ermittelt. Im Gegensatz zur Nachweisempfindlichkeit der Gesamtmethode (Bestimmungsgrenze - BG) gibt die IDL lediglich die Nachweisempfindlichkeit der Substanzen im Massenspektrometer an. Substanzverluste bei der Anreicherung, beim Eindampfen der Extrakte und bei der Ionisierung im ESI-Interface des Massenspektrometers werden mit der IDL nicht berücksichtigt.

Mikroverunreinigungen: Von den 211 getesteten Mikroverunreinigungen reichte für etwa die Hälfte eine Menge von < 20 pg (absolut auf der LC-Säule) aus, um noch mit dem Massenspektrometer detektiert werden zu können. Für 15 Substanzen konnten entweder sehr schlechte oder überhaupt keine Messsignale erhalten werden. Eine substanzspezifische Optimierung der MS-Parameter durch Direktinjektion von Standardlösung erbrachte für diese Substanzen keine Verbesserung. Die schlechte Nachweisempfindlichkeit ist vermutlich auf eine unzureichende Ionisierungseffizienz dieser Substanzen in der ESI-Quelle zurückzuführen, was mit den fehlenden H-Donor-/H-Akzeptor-Eigenschaften dieser Moleküle erklärt werden kann. Damit sind folgende Substanzen generell ungeeignet für eine Detektion mittels ESI-LC-MSMS und konnten deshalb nicht erfasst werden: 2,4-Dichlorphenol, 3,4-

Dichloraniline, 3-Aminophenol, 4-(Trifluoromethyl)-phenol, Aclonifen, Bisphenol A, Chlorothalonil, Cypermethrin, Dichlobenil, Ibuprofen, Metribuzin-DADK, Norfluoxetin, Trifluralin, Trinexapacsäure und 2-Imidazolidinethion (ETU).

Im Vergleich mit TripleQuad-Geräten, die die gleichen Limitierungen für die nicht-ionisierbaren Substanzen aufweisen, besitzt das LTQ-Orbitrap eine in der Grössenordnung ähnliche Nachweisempfindlichkeit.

Von den 196 MS-gängigen Substanzen, die in Form eines Mischstandards auf die HPLC-Säule aufgegeben wurden, konnten fast alle Wirkstoffe bereits aus den extrahierten HR-MS-Chromatogrammen eindeutig zugeordnet werden. In einigen Fällen traten in der Standardlösung isobare Interferenzen auf. Ein Teil dieser Interferenzen konnten jedoch eindeutig durch den Vergleich der Retentionszeiten mit den Standards den jeweiligen Substanzen zugeordnet werden. Dies ist bei Simazin und Terbutylazin-desethyl, Simeton und Atrazin-2-hydroxy, Simazin-2-hydroxy und Terbutylazin-desethyl-2-hydroxy der Fall.

Isobare Substanzen, die zur gleichen Retentionszeit eluieren, können nur anhand der hoch aufgelösten Produktionenspektren (HR-MSMS-Spektren) unterschieden werden. Eine erfolgreiche Identifizierung mittels HR-MSMS-Spektren konnte bei den isobaren Substanz-Paaren Alachlor und Acetochlor, Prometryn und Terbutryn, Alachlor-ESA und Acetochlor-ESA, Terbutylazin und Sebuthylazin, Propazin-2-hydroxy und Terbutylazin-2-hydroxy erfolgen.

Sind auch die Fragmente in den MSMS-Spektren zweier Substanzen gleich, können sie mittels LC-MSMS nicht eindeutig identifiziert werden. Dazu bräuchte es entweder eine Auftrennung bei der Chromatographie oder einen anderen Detektor. Dieser Fall trat bei Terbumeton und Secbumeton auf. Daher werden diese Substanzen als Summe dargestellt.

Für die Isobarenpaaren Iomeprol und Iopamidol, Desmedipham und Phenmedipham welche identische Retentionszeit besaßen und keine HR-MSMS-Spektren bildeten war ebenfalls keine eindeutige Substanzordnung möglich; diese Substanzen werden im Folgenden als Summe dargestellt.

Industriechemikalien: Von den Industriechemikalien ergaben bei Aufgabe über die LC-Säule 13 von 19 Substanzen ein auswertbares Messsignal. Darunter sind vor allem die Benzol- und Naphthalin-Sulfonate sowie die Triazinderivate (Tabelle 6), welche alle im negativen Ionisierungsmodus detektiert wurden. Von den Substanzen aus dem GC-MS-Screening des AUE-Labors (Tabelle 6) sind nur vier von zehn Substanzen im positiven Ionisierungsmodus detektierbar. Vor allem bei Substanzen mit einer Phenol- oder Hydroxyl-Gruppe scheint die Ionisierungseffizienz im ESI-Interface deutlich erniedrigt zu sein. Demnach können folgende Substanzen mit dieser Methode nicht nachgewiesen werden: (3,5-

Dimethyl-2-furyl)-methyl-ke-ton, 2-Phenyl-2-propanol, 1,2-bis(2-Chloroethoxy)-ethan, 4-(1,1,3,3-Tetramethylbutyl)-phenol, bis-(2,4-Isopropyl)-phenol und 2-Phenoxy-ethanol.

4.2.3 SPE-Extraktion und Extrakteinengung

Sowohl für die Anreicherung der Mikroverunreinigungen als auch für die Industriechemikalien wurde eine „Mixed-Bed“-Kartusche aus dem Polymeradsorbens Oasis HLB und einer Mischung aus dem schwachen Anionenaustauscher Strata-X-AW, dem schwachen Kationenaustauscher Strata-X-CW und dem Polymeradsorber-Material Isolute ENV+ verwendet.

Mikroverunreinigungen: Während Oasis HLB bereits eine Vielzahl von Substanzen extrahiert, hält der Anionenaustauscher vor allem die Phenoxy-carbonsäuren und Triketone (anionische Pestizide), der Kationenaustauscher vor allem die Betablocker und Isolute ENV+ die Röntgenkontrastmittel zurück. Die Summe aller vier Materialien ergab ein gutes Gesamtergebnis bei der Extraktion. Bei 170 Substanzen wurde eine absolute Kartuschen-Wiederfindung (SPE-Wiederfindung) von über 20% erreicht. Für einen Grossteil der Substanzen (118 Substanzen) wurden absolute SPE-Wiederfindungen zwischen 80 und 120% ermittelt (vergleiche Abbildung 9 - Abbildung 11). Die Substanzen mit schwankenden Kartuschen-Wiederfindungen sind in den Abbildungen am Ende der jeweiligen Substanzgruppe aufgeführt (getrennt durch eine gestrichelte Linie). Für 10 nachträglich der Methode hinzugefügte Substanzen wurden die absoluten Kartuschen-Wiederfindung lediglich qualitativ abgeschätzt. Diese Werte sind nicht in den entsprechenden Abbildungen dargestellt. Die korrekte Quantifizierung dieser Substanzen ist allerdings durch die Verwendung von isoto-penmarkierten internen Standards gewährleistet.

Folgende Substanzen ergeben eine gute bis mässige Kartuschen-Wiederfindung in Nanopurwasser, in Umweltproben jedoch sinkt die Wiederfindung aufgrund der erhöhten Matrixbestandteile auf Null: Trinexapac-ethyl, Atrazin-2-hydroxy, Clotrimazol, Ioxitalaminsäure, N,N-Dimethylsulfamid. Keine Anreicherung in allen Matrices weisen die Fluorchinolone Ciprofloxacin und Norfloxacin auf.

Weitere Versuche ergaben, dass 3 Substanzen bei der Herstellung der wässrigen Standards und 6 Substanzen beim Einengen des SPE-Extraktes hydrolysierten oder an der Glaswand der Eindampfgefässe adsorbierten (vergleiche Tabelle 8).

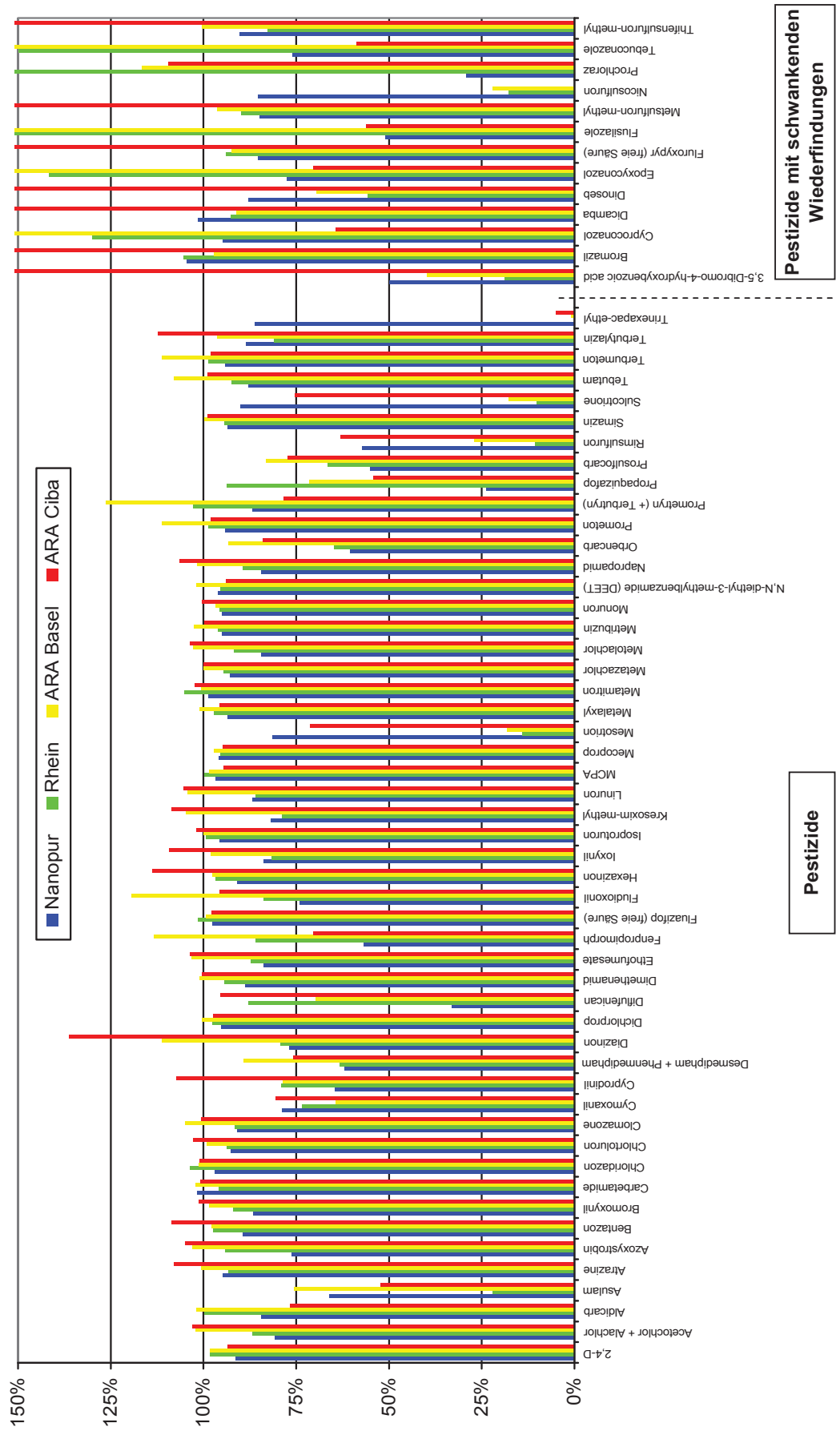


Abbildung 9

Absolute Kartuschen-Wiederfindungen in Prozent für die Gruppe der Pestizide

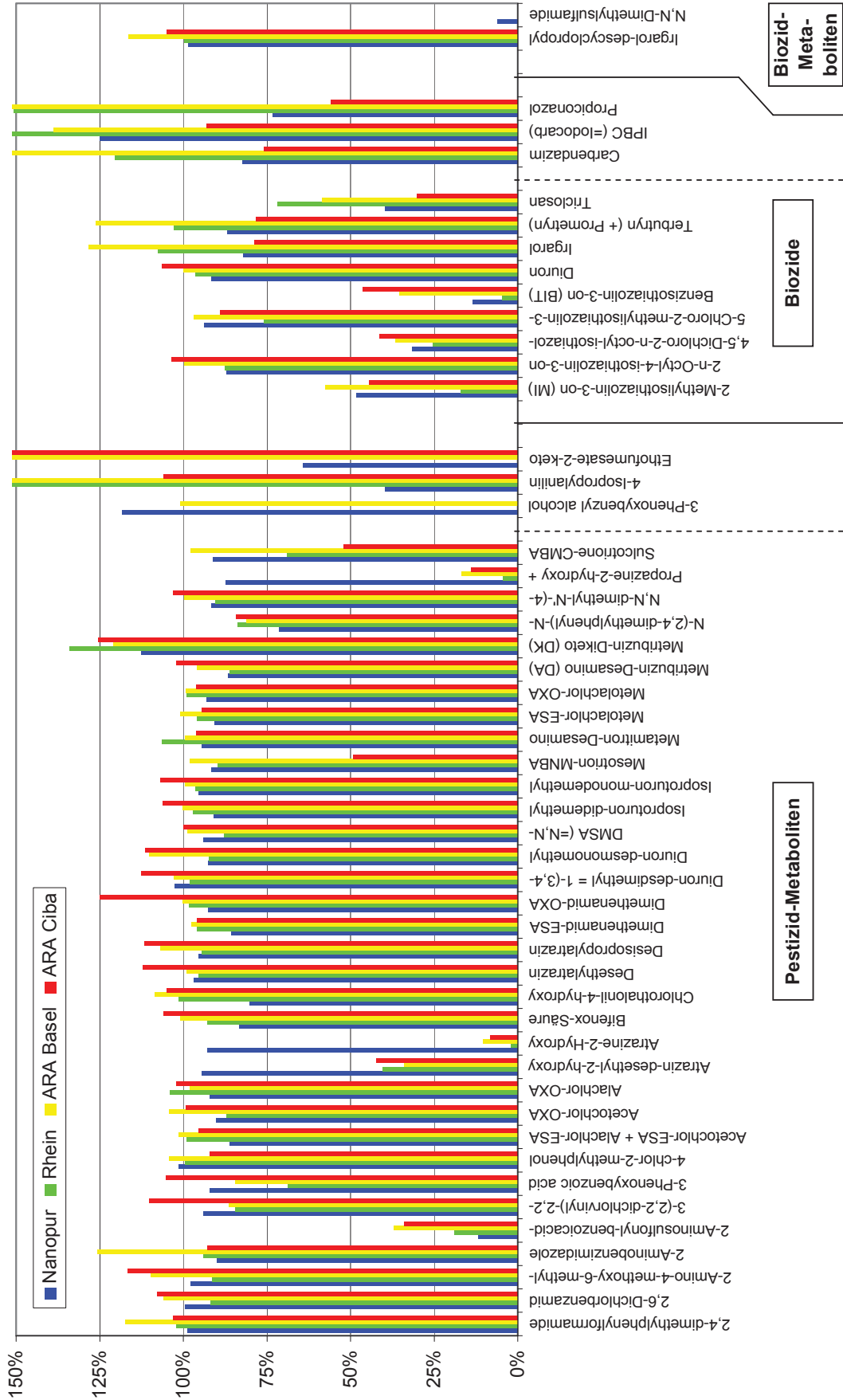


Abbildung 10

Absolute Kartuschen-Wiederfindungen in Prozent für die Gruppen der Pestizidmetaboliten, Biozide und Biozidmetaboliten (gestrichelt abgetrennt: schwankende Wiederfindungen)

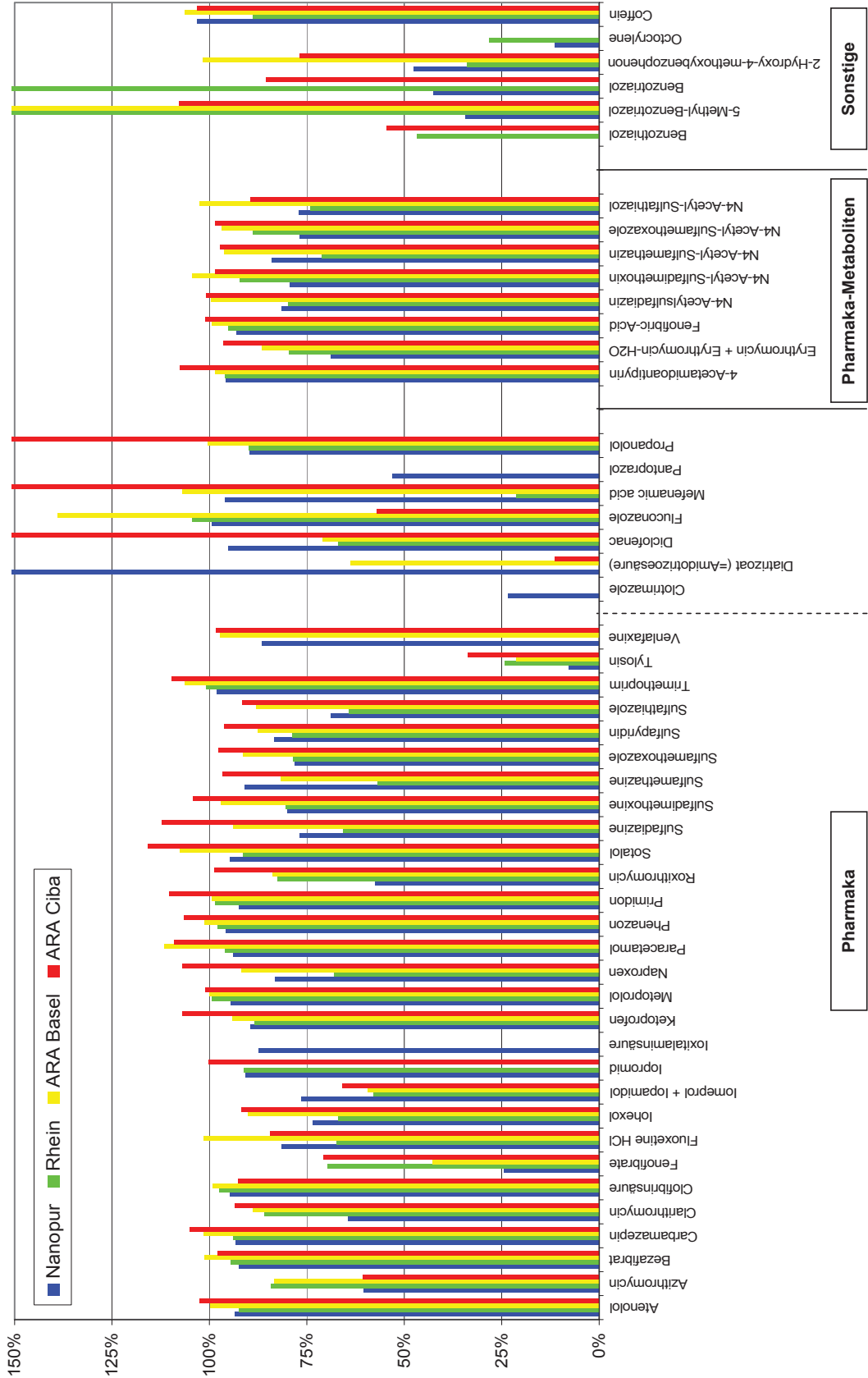


Abbildung 11

Absolute Kartuschen-Wiederfindungen in Prozent für Gruppen Pharmaka (gestrichelt abgetrennt: schwankende Wiederfindungen), Pharmaka-Metaboliten und Sonstige

Industriechemikalien: Von den 13 im Massenspektrometer detektierbaren Industriechemikalien konnten 11 Substanzen mittels der Mischbett-Kartusche angereichert werden. Nicht anreicherbar sind 2-Hydroxy-4,6-bis-sulfanilino-1,3,5-Triazin und 2-Hydroxy-4,6-bis-morpholino-1,3,5-Triazin. In Abhängigkeit von der Probenmatrix wurden Kartuschen-Wiederfindungen von 25-125% erreicht (siehe Abbildung 12). Fehlende Balken zeigen an, dass die Kartuschen-Wiederfindung für diese Probenmatrix nicht bestimmbar war, z.B. weil die bereits in der Probe vorhandene Substanzmenge deutlich höher als die zugespikte Substanzmenge war.

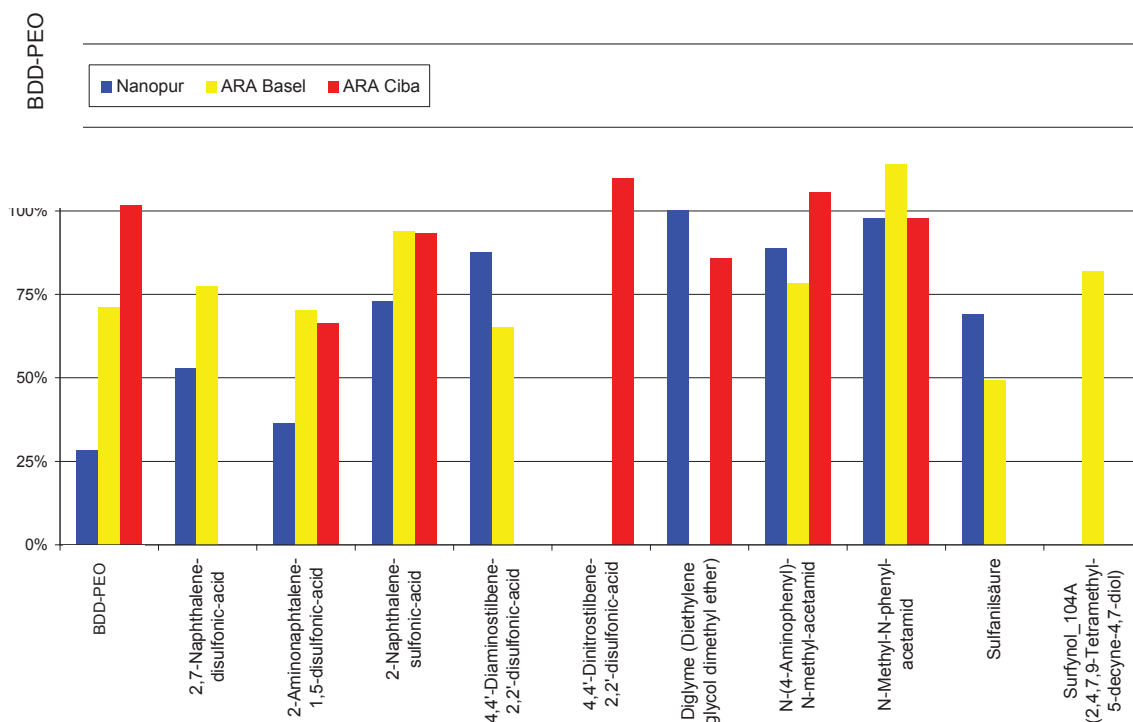


Abbildung 12 Absolute Kartuschen-Wiederfindungen für die im MS detektierbaren Industriechemikalien

4.2.4 Ergebnis der Methodenoptimierung

Nach Optimierung der einzelnen Methodenschritte können mit der entwickelten Methodik insgesamt 185 Mikroverunreinigungen und 11 Industriechemikalien nachgewiesen werden. Je nach Probenmatrix treten bei einigen Substanzen erhöhte Bestimmungsgrenzen in Umweltproben auf (vergleiche Tabelle 13). Tabelle 8 gibt einen Überblick, welche der ausgewählten Substanzen mit der optimierten Methode analysiert werden können bzw. sich dem Nachweis entziehen.

Tabelle 8 Zusammenstellung der mit der optimierten Methode analysierbaren bzw. nicht analysierbaren Substanzen.

Mikroverunreinigungen		
Ausgewählte Substanzen	211	
Analysierbare Substanzen	185	
Nicht analysierbare Substanzen	26	
Standardherstellung	3 Substanzen	
Dichlofluanid	Hydrolyse	
Tolyfluanid	Hydrolyse	
Bronopol	Hydrolyse	
SPE-Anreicherung	2 Substanzen	
Ciprofloxacin	keine bzw. sehr geringe Anreicherung	
Norfloxacin	keine bzw. sehr geringe Anreicherung	
Extrakt-Einengung	6 Substanzen	
Amitraz	Hydrolyse	
Dazomet	Hydrolyse	
Tonalid	Verflüchtigung/Sorption	
Octyl-4-methoxycinnamate	Verflüchtigung/Sorption	
Fluazinam	Verflüchtigung/Sorption	
Bifenox	Verflüchtigung/Sorption	
LITQ-Orbitrap	15 Substanzen	
Bisphenol A	keine Ionisierung in Eluent mit Ameisensäure	
Ibuprofen	keine Ionisierung in Eluent mit Ameisensäure	
2,4-Dichlorphenol	zu geringe Ionisierung	
3,4-Dichloraniline	keine Ionisierung	
3-Aminophenol	keine Ionisierung	
4-(Trifluoromethyl)-phenol	keine Ionisierung	
Aclonifen	keine Ionisierung	
Chlorothalonil	keine Ionisierung	
Cypermethrin	keine Ionisierung	
Dichlobenil	keine Ionisierung	
Metribuzin-Desamino-Diketo (DADK)	keine Ionisierung	
Norfluoxetine	keine Ionisierung	
Trifluraline	keine Ionisierung	
Trinexapac-acid	keine Ionisierung	
2-Imidazolidinethion (ETU)	schlechter LITQ-Orbitrap-Transfer	
Industriechemikalien		
Ausgewählte Substanzen	19	
Analysierbare Substanzen	11	
Nicht analysierbare Substanzen	8	
SPE-Anreicherung	2 Substanzen	
2-Hydroxy-4,6-bis-sulfanilino-1,3,5-Triazin	keine Anreicherung	
2-Hydroxy-4,6-bis-morpholino-1,3,5-Triazin	keine Anreicherung	
LITQ-Orbitrap	6 Substanzen	
(3,5-Dimethyl-2-furyl)-methyl-keton	keine Ionisierung	
2-Phenyl-2-propanol	keine Ionisierung	
1,2-bis(2-Chloroethoxy)-ethan	keine Ionisierung	
4-(1,1,3,3-Tetramethylbutyl)-phenol	keine Ionisierung	
bis-(2,4-Isopropyl)-phenol	keine Ionisierung	
2-Phenoxy-ethanol	keine Ionisierung	

4.3 Kenndaten der Gesamtmethode

In der Tabelle 9 sind die Bestimmungsgrenzen für die verschiedenen Probenmatrizes (Nanopur, Rhein, gereinigtes kommunales und industrielles Abwasser) eingeteilt in Klassen dargestellt. In Nanopur-Wasser sind die meisten Substanzen zwischen 0.1 und 1 ng/l bestimmbar (64%). Im Vergleich dazu wurden die Bestimmungsgrenzen im Rhein durch die höhere Probenmatrix nur geringfügig beeinflusst. Um die Matrixbelastung der Messextrakte bei den hoch belasteten Kläranlagenproben möglichst gering zu halten, wurde ein 5 mal geringeres Probenvolumen bei der SPE-Anreicherung verwendet, was zu entsprechend schlechteren Bestimmungsgrenzen bei den Kläranlagenproben führt.

Tabelle 9 Übersicht über die Bestimmungsgrenzen in den verschiedenen Probenmatrizes (Anzahl Substanzen in Klasse (Anteil in %))

Mikroverunreinigungen	Nanopur	Rhein	ARA Basel
0.1-1 ng/L	119 (64%)	67 (36%)	3 (2%)
1-10 ng/L	42 (23%)	75 (41%)	23 (12%)
10-100 ng/L	18 (10%)	28 (15%)	88 (48%)
100-300 ng/L	1 (1%)	5 (3%)	25 (14%)
>300 ng/L	-	4 (2%)	41 (22%)
nicht bestimmbar	5 (3%)	6 (3%)	5 (3%)
Industriechemikalien			
0.1-1 ng/L	2	2	0
1-10 ng/L	2	2	0
10-100 ng/L	2	2	2
100-300 ng/L	2	2	2
>300 ng/L	0	1	3
nicht bestimmbar	3	2	4

In Tabelle 10 sind die absoluten Kartuschen-Wiederfindungen für die verschiedenen Probenmatrizes eingeteilt in Klassen dargestellt. Mehr als 60% der Substanzen wiesen eine Wiederfindung von über 80% auf.

Tabelle 10 Übersicht über die Kartuschen-Wiederfindungen in den verschiedenen Probenmatrizes (Anzahl Substanzen in Klasse (Anteil in %))

Mikroverunreinigungen	Nanopur	Rhein	ARA Basel	ARA Ciba
nicht bestimmbar	1 (1%)	6 (3%)	8 (5%)	7 (4%)
0-20%	7 (4%)	16 (9%)	9 (5%)	10 (6%)
20-50%	15 (8%)	9 (5%)	10 (6%)	8 (5%)
50-80%	33 (19%)	31 (18%)	13 (7%)	28 (16%)
80-120%	119 (67%)	101 (58%)	121 (68%)	110 (62%)
>120%	2 (1%)	12 (7%)	16 (9%)	14 (8%)
Industriechemikalien				
nicht bestimmbar	2	1	2	4
0-20%	0	3	0	0
20-50%	2	1	0	0
50-80%	3	2	6	1
80-120%	4	4	3	6
>120%	0	0	0	0

Durch Zugabe von Standardlösungen zu den Proben vor der Aufarbeitung wurde die relativen Wiederfindungen der gespikten Analytkonzentrationen über die Gesamtmethodik bestimmt. In Tabelle 11 sind die relativen Wiederfindungen für den Rhein und die ARA Basel in Gruppen eingeteilt dargestellt. Es wurden 150 ng jeder Substanz in eine Rheinprobe und 300 ng jeder Substanz in eine ARA-Probe gespikt. Die höhere Matrixbelastung in der ARA-Probe wirkte sich negativ auf die relative Wiederfindung aus. Der Anteil der Substanzen, welche einen Wert zwischen 80 und 120% aufwiesen, nahm im Vergleich zum Rhein deutlich ab (46% zu 68%). Trotzdem konnten in beiden Probenmatrices gute Werte für die Mikroverunreinigungen erzielt werden, obwohl nur für ca. ein Drittel der Substanzen der dazugehörige isotoopenmarkierte Standard zur Verfügung stand. Aufgrund fehlender isotoopenmarkierter interner Standards waren die relativen Wiederfindungen für die Industriechemikalien meist unbefriedigend.

Tabelle 11: Übersicht über die relativen Wiederfindungen über die Gesamtmethodik (Anzahl Substanzen in Klasse (Anteil in %))

Mikroverunreinigungen	Rhein	ARA Basel
0-20	11 (6%)	13 (7%)
20-50	2 (1%)	14 (8%)
50-80	12 (6%)	15 (8%)
80-120	125 (68%)	86 (46%)
120-150	12 (6%)	21 (11%)
>150	22 (12%)	29 (16%)
nicht bestimmbar	1 (1%)	7 (4%)
Industriechemikalien		
0-20	3	1
20-50	0	2
50-80	0	0
80-120	2	0
120-150	0	1
>150	0	3
nicht bestimmbar	6	4

Die Ionensuppression in den Proben aus dem Rhein und der ARA Basel lag für 70% der Substanzen unter 35%. Lediglich in der ARA Ciba war für fast 70% der Substanzen eine deutliche Ionensuppression von über 30% festzustellen.

4.4 Messergebnisse in Rhein- und Kläranlagenproben

4.4.1 Mikroverunreinigungen

In Tabelle 12 und Tabelle 13 sind die nachgewiesenen Substanzen für die untersuchten Proben aufgelistet. Die farblich hinterlegten, fett gedruckten Nachweise wurden durch HR-MSMS-Spektren bestätigt und erreichen somit gemäss EU-Richtlinie 2002/657/EC 5.5 Identifikationspunkte (IP). Sie gelten demnach als eindeutig nachgewiesen. Die kursiv dargestellten Nachweise stammen aus den extrahierten HR-MS-Spektren und konnten nicht durch HR-MSMS-Spektren bestätigt werden. Sie erreichen somit nur 2 Identifikationspunkte. Leere Felder bedeuten, dass der Wert unter der Bestimmungsgrenze liegt. Die abgeschätzten Bestimmungsgrenzen für den HR-MS-Scan und die HR-MSMS-Spektren sind ebenfalls in der Tabelle 12 und Tabelle 13 aufgelistet.

Rhein

Insgesamt gab es in den zwölf Proben 657 positive Befunde, von denen 346 (53 %) durch MSMS-Spektren eindeutig (5.5 IP nach EU-Richtlinie 2002/657/EC) bestätigt werden konnten. Für 311 Befunde konnte ein Substanznachweis lediglich mit 2 IPs durchgeführt werden, da bei den sehr tiefen Substanzkonzentrationen im tiefen ng/L-Bereich eine Bestätigung durch die HR-MSMS-Spektren aus folgenden Gründen oft nicht möglich war:

- Für etwa 10% der 311 Befunde wurden keine HR-MSMS-Spektren erhalten, da bei der gewählten Fragmentierungsenergie (HCD von 100 bzw. 125) die Produktionenausbeute zu gering ausfiel. Dies war vor allem bei höhermolekularen Substanzen der Fall. Durch eine Nachmessung mit einer erniedrigten HCD-Einstellung (HCD von 50) konnte die Anzahl der bestätigten Befunde für diese Substanzen geringfügig erhöht werden.
- Für ungefähr 40% der 311 Befunde war die Nachweisempfindlichkeiten in den extrahierten HR-MSMS-Chromatogrammen schlechter als in den HR-MS-Chromatogrammen, so dass eine Bestätigung der HR-MS-Befunde bei niedrigen Konzentrationen mittels HR-MSMS-Daten nicht möglich war.
- Etwa 50% der 311 Befunde konnten nicht bestätigt werden, da die in der EU-Richtlinie 2002/657/EC zulässigen Höchsttoleranzen der Ionenverhältnisse zwischen dem Molekül- und Produktion nicht eingehalten wurden.

In den 12 untersuchten Rheinproben wurden durch die extrahierten HR-MS-Spektren insgesamt 81 Substanzen, darunter 23 Pestizide, 17 Pestizidmetabolite, 8 Biozide, 1 Biozidmetabolit, 26 Arzneimittel, 1 Arzneimittelmetabolit, 1 Korrosionsschutzmittel,

1 Naturstoff-Alkaloid (Coffein), 1 Personal Care Produkt, 1 Personal Care Produkt-Metabolit, 1 Additiv und 1 Lebensmittelzusatzstoff oberhalb der Bestimmungsgrenze mit 2 IP nachgewiesen. Ein eindeutiger Substanznachweis mit 5.5 IP war für 43 Substanzen möglich.

Die höchsten Konzentrationen in den Rheinproben traten bei den Röntgenkontrastmitteln, den Korrosionsschutzmitteln und dem Tracer Coffein auf. Substanzen anderer Substanzgruppen, die Befunde über 30 ng/L aufwiesen sind: Venlafaxin, N,N-diethyl-3-methylbenzamid (DEET), Galaxolidon, N-Acetyl-4-Aminoantipyrin, Mecoprop, Metolachlor-ESA. Die Konzentrationen der übrigen Substanzen lagen überwiegend in einem Bereich zwischen 0.1 und 10 ng/L.

Tabelle 12 Nachgewiesene Mikroverunreinigungen in den Rhein-Proben

Substanz	Substanzgruppe	BG [ng/L]		Konzentration [ng/L]											
		HR-MS	HR-MS/MS	Rhein 22.-23.8.2007	Rhein 27.-28.8.2007	Rhein 31.08.2007	Rhein 3.-4.9.2007	Rhein 6.-7.9.2007	Rhein 9.-10.9.2007	Rhein 16.09.2007	Rhein 17.-18.9.2007	Rhein 20.09.2007	Rhein 21.09.2007	Rhein 2.10.2007	Rhein 3.10.2007
2,4-D	Pestizid	6.0	n.g.												
3,5-Dibromo-4-hydroxybenzoic acid	Pestizid	42	n.g.												
Acetochlor	Pestizid	4.2	7.5												
Alachlor	Pestizid	4.2	4.7												
Aldicarb	Pestizid	24	n.g.												
Asulam	Pestizid	3.9	7.0			8.9	7.6	7.9	7.7		8.6		8.1	8.7	8.7
Atraton	Pestizid	0.1	n.g.												
Atrazin	Pestizid	0.6	0.4	5.0	5.0	9.0	3.2	3.6	2.2	3.1	2.7	3.4	3.4	3.1	2.7
Azoxystrobin	Pestizid	0.5	1.6			2.6									
Bentazon	Pestizid	0.3	1.5	0.5	0.6	0.9	0.6	0.6	0.4	0.4	0.4	0.7	0.5	0.5	0.5
Bromazil	Pestizid	4.4	n.g.												
Bromoxynil	Pestizid	0.8	n.g.												
Carbetamide	Pestizid	8.6	n.g.												
Chloridazon	Pestizid	0.5	1.6					0.6							
Chlortoluron	Pestizid	0.5	n.g.												
Climazone	Pestizid	0.7	0.2			3.2			0.9	1.0	0.9	1.7	1.4		
Cymoxanil	Pestizid	24	n.g.												
Cyproconazol	Pestizid	2.2	5.2				3.0	3.1	2.7	3.2	2.8	3.2	2.6	3.8	
Cyprodinil	Pestizid	1.6	n.g.												
Desmedipham + Phenmedipham	Pestizid	1.5	n.g.												
Diazinon	Pestizid	1.0	k.F.	7.9	7.9	8.2	8.0	7.8	7.9			8.4	8.8		
Dicamba	Pestizid	44	n.g.												
Dichlorprop	Pestizid	5.0	n.g.												
Diffufenican	Pestizid	130	n.g.												
Dimethenamid	Pestizid	0.5	0.7												
Dinoseb	Pestizid	1.1	2.5			15			19	6.3					
Epoxiconazol	Pestizid	5.4	n.g.												
Ethofumesate	Pestizid	6.0	n.g.												
Fenpropimorph	Pestizid	0.3	n.g.												
Fluazifop (freie Säure)	Pestizid	2.8	n.g.												
Fludioxonil	Pestizid	1.9	n.g.												
Fluroxypyr (freie Säure)	Pestizid	24	n.g.												
Flusilazole	Pestizid	10	n.g.												
Hexazinon	Pestizid	0.4	n.g.												
Ioxynil	Pestizid	0.5	0.2												
Isoproturon	Pestizid	0.3	0.4	1.0	1.1	2.9	0.9	0.9	1.0	0.9	1.0	1.8	1.9	1.1	0.8
Kresoxim-methyl	Pestizid	2.8	n.g.												
Linuron	Pestizid	1.9	1.9		2.9	2.9		2.0							
MCPA	Pestizid	2.4	1.0	2.4	2.8	28	3.2	3.5		3.0	4.7	5.2	7.8	3.7	2.9
Mecoprop	Pestizid	3.4	0.7	5.0	3.8	32	4.3	6.0	4.6	4.4	4.9	21	19	4.6	4.0
Mesotrion	Pestizid	62	n.g.												
Metalaaxyl	Pestizid	0.3	2.1	1.1											
Metamitron	Pestizid	1.7	n.g.												
Metazachlor	Pestizid	0.6	0.3		1.0	5.0	1.3	1.9	1.3	2.8	1.5	1.8	2.4	1.3	1.0
Metolachlor	Pestizid	0.5	0.4	2.1	3.3	2.6	6.7	3.5	2.7	1.8	1.8	1.5	1.8	0.8	0.7
Metribuzin	Pestizid	0.8	n.g.												
Metsulfuron-methyl	Pestizid	13	n.g.												
Monuron	Pestizid	0.7	n.g.												
N,N-diethyl-3-methylbenzamid (DEET)	Pestizid	0.3	0.3	12	10	19	9.4	9.1	110	61	8.9	15	9.8	10	9.1
Napropamid	Pestizid	0.3	0.9			13	2.2	1.5	1.7			3.4	3.0		
Nicosulfuron	Pestizid	380	n.g.												
Orbencarb	Pestizid	4.4	n.g.												
Prochloraz	Pestizid	48	n.g.												
Prometon	Pestizid	0.1	0.5	0.1	0.1										
Prometryn	Pestizid	0.4	1.0	0.6	0.6	0.8	0.6	0.5	0.6	0.8	0.7	0.7	1.3	0.8	0.7
Propaquizafop	Pestizid	11	n.g.												
Prosulfocarb	Pestizid	3.8	n.g.												
Rimsulfuron	Pestizid	320	n.g.												
Sebutylazine	Pestizid	2.8	n.g.												
Simazin	Pestizid	0.7	0.9	1.5	1.6	4.0	1.6	1.5	1.4	1.4	1.6	1.7	2.0	1.4	1.1
Simeton	Pestizid	0.1	1.7				0.5	0.4							
Sulcotrione	Pestizid	96	n.g.												
Tebuconazole	Pestizid	5.6	n.g.												
Tebutram	Pestizid	0.2	0.3												
Terbumeton + Sebumeton	Pestizid	0.1	0.2	0.1	0.1										
Terbutylazin	Pestizid	0.8	n.g.												
Thifensulfuron-methyl	Pestizid	18.0	n.g.												
Trinexapac-ethyl	Pestizid	n.b.	n.g.												
2,4-dimethylphenylformamide	Pestizid-Metabolit	0.2	0.7												
2,6-Dichlorbenzamid	Pestizid-Metabolit	1.8	0.6	4.3	5.0	6.0	4.4	4.3	4.2	4.3	3.6	4.2	4.3	4.6	4.0
2-Amino-4-methoxy-6-methyl-1,3,5-triazin	Pestizid-Metabolit	1.7	n.g.												
2-Aminobenzimidazole	Pestizid-Metabolit	0.1	23												
2-Aminosulfonyl-benzoicacid-methylester	Pestizid-Metabolit	74	n.g.												
3-Phenoxybenzoic acid	Pestizid-Metabolit	42	n.g.												
3-Phenoxybenzyl alcohol	Pestizid-Metabolit	140	n.g.												
4-chlor-2-methylphenol	Pestizid-Metabolit	20	k.F.												
4-Isopropylanilin	Pestizid-Metabolit	14	n.g.												
Acetochlor-ESA	Pestizid-Metabolit	0.3	33	0.3											
Acetochlor-OXA	Pestizid-Metabolit	13	n.g.												
Alachlor-ESA	Pestizid-Metabolit	0.3	52	0.3											
Alachlor-OXA	Pestizid-Metabolit	5.5	5.6	5.9	7.9		17	17	16						
Atrazin-Desethyl-2-hydroxy (=Prometon-Hydroxy-Desisopropyl)	Pestizid-Metabolit	7.4	1.2												
Atrazine-2-Hydroxy	Pestizid-Metabolit	0.1	0.9	2.9	2.7	5.4	2.0			2.6		1.9	2.1		1.5
Bifenox-Säure	Pestizid-Metabolit	7.0	n.g.												
Desethylatrazin	Pestizid-Metabolit	1.7	0.6	6.3	5.9	9.1	6.6	5.6	4.9	5.6	5.9	5.8	6.0	5.8	5.3
Desisopropylatrazin	Pestizid-Metabolit	2.6	4.0		4.8										
Dimethenamid-ESA	Pestizid-Metabolit	3.2	n.g.												
Dimethenamid-OXA	Pestizid-Metabolit	4.6	n.g.												
Diuron-desdimethyl (=1-(3,4-Dichlorophenyl)urea)	Pestizid-Metabolit	7.6	n.g.												
Diuron-desmonomethyl (DCPMU)	Pestizid-Metabolit	4.0	n.g.												
Ethofumesate-2-keto	Pestizid-Metabolit	n.b.	n.g.												
Flufenacet-ESA	Pestizid-Metabolit	2.4	n.g.												
Flufenacet-OXA	Pestizid-Metabolit	3.1	n.g.												
Isoproturon-didemethyl	Pestizid-Metabolit	1.2	n.g.												
Isoproturon-monodemethyl	Pestizid-Metabolit	0.7	n.g.												
Mesotrion-MNBA	Pestizid-Metabolit	72	n.g.												
Metamitron-Desamino	Pestizid-Metabolit	0.7	0.9	1.2	1.2	1.2	1.0	1.2	0.9	1.1	0.9	0.9	0.9	1.2	0.9

Substanz	Substanzgruppe	BG [ng/L]		Konzentration [ng/L]											
		HR-MS	HR-MS/MS	Rhein 22-23.8.2007	Rhein 27.-28.8.2007	Rhein 31.08.2007	Rhein 3.-4.9.2007	Rhein 6.-7.9.2007	Rhein 9.-10.9.2007	Rhein 16.09.2007	Rhein 17.-18.9.2007	Rhein 20.09.2007	Rhein 21.09.2007	Rhein 2.10.2007	Rhein 3.10.2007
Metolachlor-ESA	Pestizid-Metabolit	3,2	4,3	5,8	4,9	30	10	8,1	5,3	5,8	5,4	6,1	9,3	5,4	6,0
Metolachlor-OXA	Pestizid-Metabolit	1,5	15	2,1	1,8	5,4	3,2	3,6	2,4	2,6	3,9	2,6	3,6	4,9	3,6
Metribuzin-Desamino (DA)	Pestizid-Metabolit	0,5	n.g.												
Metribuzin-Diketo (DK)	Pestizid-Metabolit	320	n.g.												
N-(2,4-dimethylphenyl)-N-methylformamidin	Pestizid-Metabolit	0,4	n.g.												
N,N-Dimethylaminosulfanilid	Pestizid-Metabolit	2,0	1,2	3,4	2,6		1,6	4,8	4,8		4,7			4,2	
N,N-dimethyl-N'-(4-methylphenyl)-sulfamid	Pestizid-Metabolit	1,3	0,5	2,7											
Propachlor-ESA	Pestizid-Metabolit	3,9	7,1			5,6									
Propachlor-OXA	Pestizid-Metabolit	4,6	4,9									9,8			
Propazine-2-hydroxy (Prometon-Hydroxy)	Pestizid-Metabolit	0,5	1,3	2,1	3,5	3,1	1,3	1,2	1,1	1,7	2,0	2,5	2,2	2,2	0,8
Simazin-2-hydroxy	Pestizid-Metabolit	0,8	n.g.												
Sulcotrione-CMBA	Pestizid-Metabolit	30	n.g.												
Terbutylazine-desethyl	Pestizid-Metabolit	0,3	0,3	3,8	3,9	4,1	3,7	3,4	3,2	3,5	3,5	3,4	3,4	3,7	3,5
Terbutylazine-desethyl-2-hydroxy	Pestizid-Metabolit	1,0	0,7			3,5	2,1	1,8	2,2				2,8	2,3	
Terbutylazin-2-hydroxy	Pestizid-Metabolit	0,6	1,0	2,1	3,5					1,7	2,0				0,8
2-Methylisothiazolin-3-on (MI)	Biozid	3,0	n.b.	3,5											
2-n-Octyl-4-isothiazolin-3-on (OIT)	Biozid	0,7	0,4		0,9										
4,5-Dichloro-2-n-octyl-isothiazol-3(2H)-one (DCOIT)	Biozid	19	n.g.												
5-Chloro-2-methylisothiazolin-3-on (CMI)	Biozid	3,2	15											7,9	
Benzisothiazolin-3-on (BIT)	Biozid	10	15												
Carbendazim	Biozid	0,9	0,4	3,9	4,8	4,9	3,2	2,6	2,7	4,7	4,4	6,0	5,7	4,1	3,8
Diuron	Biozid	1,1	1,5	2,3	2,8	7,0	3,1	4,4	3,1	3,3	4,0	4,3	5,5	3,9	3,6
IPBC (=Iodocarb)	Biozid	17	n.g.												
Irgarol	Biozid	0,5	0,6	1,8			1,9			1,8	1,8	1,7	1,9	1,8	2,0
Propiconazol	Biozid	5,4	n.g.												
Terbutryn	Biozid	0,4	0,5	0,6	0,6	0,8	0,6	0,5	0,6	0,8	0,7	0,7	1,3	0,8	0,7
Triclosan	Biozid	110	k.F.									9,0			
Irgarol-desocyclopropyl	Biozid-Metabolit	0,5	0,4	0,9	1,1	1,0	0,7	0,7		1,1			0,8	0,7	0,9
N,N-Dimethylsulfamid	Biozid-Metabolit	n.b.	n.g.												
Atenolol	Pharmazeutika	0,7	1,2	3,8	2,8	4,1	3,4	3,9	3,4	5,4	4,8	9,9	6,5	6,0	5,0
Azithromycin	Pharmazeutika	0,5	0,9							1,6					
Bezafibrat	Pharmazeutika	0,6	4,6			0,9					1,0	1,0	1,0	0,8	
Carbamazepin	Pharmazeutika	0,6	0,2	21	23	15	9,5	10	11	15	16	23	16	16	16
Clarithromycin	Pharmazeutika	0,8	1,1	1,5	1,2	1,3	1,7	1,2	1,0	2,6	2,1	4,1	2,3	3,9	3,7
Clindamycin	Pharmazeutika	0,8	n.g.												
Clofibrinsäure	Pharmazeutika	4,6	n.g.												
Clotrimazole	Pharmazeutika	520	n.g.												
Diazlozoat (=Amidotrizoesäure)	Pharmazeutika	n.b.	n.g.												
Diclofenac	Pharmazeutika	5,1	30	8,1	5,6	12	5,8	7,9	5,4	9,5	9,0	17	12	10	7,5
Exemestane	Pharmazeutika	0,4	4,6				10								
Fenofibrate	Pharmazeutika	24	n.g.												
Fluconazole	Pharmazeutika	2,4	5,9	77											
Fluoxetina	Pharmazeutika	0,3	8,7	0,5	0,4	0,7	2,0	2,6	1,4	1,0	1,1	1,1	0,9	0,6	
Iohexol	Pharmazeutika	120	n.g.												
Iomeprol+Iopamidol	Pharmazeutika	50	120		62		60	70	98	100	140	140	95	160	68
Iopromid	Pharmazeutika	25	30	38	27	40	25	50	40	54	50	89	62	63	50
Ioxitalaminsäure	Pharmazeutika	n.b.	n.g.												
Ketoprofen	Pharmazeutika	0,4	0,8												
Meifenamic acid	Pharmazeutika	2,8	20			4,0	3,1	3,8	3,1	3,7	3,7	5,1	5,4	4,0	3,3
Metoprolol	Pharmazeutika	0,5	4,4	5,4	3,5	4,9	3,7	2,7	4,3	6,8	5,4	9,4	6,7	19	18
Naproxen	Pharmazeutika	5,5	k.F.	6,1											
Oseltamivir	Pharmazeutika	0,5	2,8				1,7	2,7	2,9	1,9	1,7	9,4		2,9	5,1
Pantoprazol	Pharmazeutika	52	k.F.			>BG		>BG	>BG	>BG	>BG	>BG		>BG	>BG
Paracetamol	Pharmazeutika	1,6	1,6												
Phenazon	Pharmazeutika	0,3	2,9	0,5	0,5	0,4		0,4	0,5	0,5	0,4		0,5	0,5	0,3
Primidon	Pharmazeutika	8,2	n.g.												
Propanolol	Pharmazeutika	0,5	4,0							0,9		0,9	0,8		
Roxithromycin	Pharmazeutika	1,3	n.g.												
Sotalol	Pharmazeutika	1,4	0,9	2,3	1,9	2,5	2,2	2,2	2,6	3,9	3,9	4,7	3,1	3,3	3,6
Sulfadiazine	Pharmazeutika	12	n.g.												
Sulfadimethoxine	Pharmazeutika	2,2	n.g.												
Sulfamethazine	Pharmazeutika	2,5	3,3			3,0							2,6		
Sulfamethoxazole	Pharmazeutika	1,5	1,4	3,8	3,1	1,9	3,3	4,2	3,0	3,1	2,4	2,8	2,2	5,0	4,0
Sulfapyridin	Pharmazeutika	2,2	4,0		2,4		2,7							2,9	3,3
Sulfathiazole	Pharmazeutika	2,8	8,5	5,2	8,0	3,6	8,0	4,6	6,1	22	29	7,9	20	8,2	7,7
Trimethoprim	Pharmazeutika	0,6	1,9				0,6	1,1	0,6	0,9	1,1	1,1	1,2	1,9	1,7
Tylosin	Pharmazeutika	28	n.g.												
Venlafaxine	Pharmazeutika	0,1	1,6	14	26	38	40	18	22	62	69	220	110	50	40
Verapamil hydrochloride	Pharmazeutika	0,2	n.g.												
Erythromycin + Erythromycin-H2O	Pharmazeutika + -metabolit	1,4	12												
Oseltamivir-Carboxylat	Pharmazeutika-Metabolit	4,1	25												
Fenofibrat-acid	Pharmazeutika-Metabolit	4,2	n.g.												
N4-Acetyl-Sulfadiazin	Pharmazeutika-Metabolit	10	12												
N4-Acetyl-Sulfadimethoxin	Pharmazeutika-Metabolit	3,0	n.g.												
N4-Acetyl-Sulfamethazin	Pharmazeutika-Metabolit	4,0	n.g.												
N4-Acetyl-Sulfamethoxazole	Pharmazeutika-Metabolit	3,6	n.g.												
N4-Acetyl-Sulfathiazol	Pharmazeutika-Metabolit	14	n.g.												
N-Acetyl-4-Aminoantipyrin	Pharmazeutika-Metabolit	0,7	2,1	18	17	14	15	15	18	20	27	34	23	30	23
Benzothiazol	Additiv	n.b.	n.b.	>600	470	>600	>600	>600	83	>600	230	>600	>600	370	>600
5-Methyl-Benzotriazol	Korrosionsschutzmittel	4,0	n.g.												
Benzotriazol	Korrosionsschutzmittel	3,8	140	80	94	140	98	170		180		190		270	140
Sucralose	Lebensmittelzusatzstoff	2,0	n.g.	10	12	9	10	11	10	15	15	17	13	14	12
Benzophenon 3 (=2-Hydroxy-4-methoxybenzophenon)	Personal Care Product	0,5	2,1	0,9				0,6	5,4	2,2	1,8				
Octocrylene	Personal Care Product	120	n.g.												
Galaxolidon	Personal Care Product-Metabolit	1,0	1,6	9,4	5,7	13	6,5	6,8	12	30	8,3	35	7,8	11	5,7
Coffein	Tracer	3,6	1,1	12	10	12	18	14	30	41	15	65	26	22	19

BG = Bestimmungsgrenze; n.b. = nicht bestimmbar; n.g. = nicht gemessen; k.F. = kein Fragment bei gegebener HCD-Energie; **00** = Befunde mit 5.5 IP; **00** = Befunde mit 2 IP

In Abbildung 13 und Abbildung 14 sind für ausgewählte Substanzen die zeitlichen Konzentrationsverläufe im Rhein dargestellt. Die Proben wurden alle nach dem grossen Hochwasser von Anfang August 2007 genommen, welches ein Abflussereignis mit einer Jährlichkeit von ca. 30 Jahren darstellt.

Die Abbildung 13 zeigt für die Pestizide Metolachlor, Atrazin und dessen Abbauprodukt Desethylatrazin die Konzentrationsdynamik im Rhein zwischen Ende August und Anfang Oktober. Es wurde bereits in vielen Feldstudien gezeigt, dass Pestizide vor allem während der ersten Regenereignisse nach deren Applikation auf den landwirtschaftlichen Nutzflächen erhöhte Konzentrationen in Oberflächengewässer aufweisen. Die Konzentrationsdynamik ist dabei eng mit dem Wasserabfluss korreliert. Dies trifft nicht nur für kleine Fliessgewässer sondern mit gewissen Einschränkungen auch auf den Rhein zu [43]. Da die Probeentnahmen im Rhein bereits ausserhalb der Applikationsperiode für Pestizide erfolgten, sind die für Metolachlor, Atrazin und dem Atrazinabbauprodukt Desethylatrazin gemessenen Konzentrationen mit Werten zwischen 0.7 und 9 ng/L sehr tief und weisen nur noch einen geringen Anstieg mit steigendem Abfluss auf (vergleiche Abbildung 13). Die hier gemessenen Pestizidkonzentrationen im Rhein sind dabei vergleichbar mit den Werten, die mittels GC-MS im AUE-Labor gemessen wurden [1].

In der Abbildung 14 sind die Konzentrationen für das Antiepilektikum Carbamazepin, für das Antidepressivum Venlafaxin und für den Metaboliten des Schmerzmittels Metamizol N-Acetyl-4-Aminoantipyrin in den untersuchten Rheinproben dargestellt. Diese Arzneimittel werden in der Regel über gereinigtes Abwasser in Oberflächengewässer eingetragen. Dieser Sachverhalt wird durch die hohen Konzentrationswerte in den beprobten Kläranlagenablaufproben bestätigt (siehe Tabelle 13). Je nach Anwendungsmuster und Abbau in der Kläranlage kann die Eintragsdynamik und damit der Konzentrationsverlauf von Arzneimittelwirkstoffen im Gewässer stark variieren. Wie aus der Abbildung 14 zu erkennen ist, besteht für die gezeigten Substanzen kein direkter Zusammenhang zwischen der gemessenen Konzentration und dem Abfluss im Rhein. Die Konzentrationen für Carbamazepin, Venlafaxin und N-Acetyl-4-Aminoantipyrin im Rhein bewegen sich zwischen 10 und 220 ng/L und liegen damit etwa eine Grössenordnung über den Pestizidkonzentrationen während des Untersuchungszeitraums. Die hier ermittelten Konzentrationen decken sich mit dem vom AUE-Labor gemessenen Werten. Die Konzentrationsspitze für Venlafaxin in den Rheinproben vom 20. und 21. September 2008 könnte auf eine Punkteinleitung für diesen Wirkstoff hindeuten.

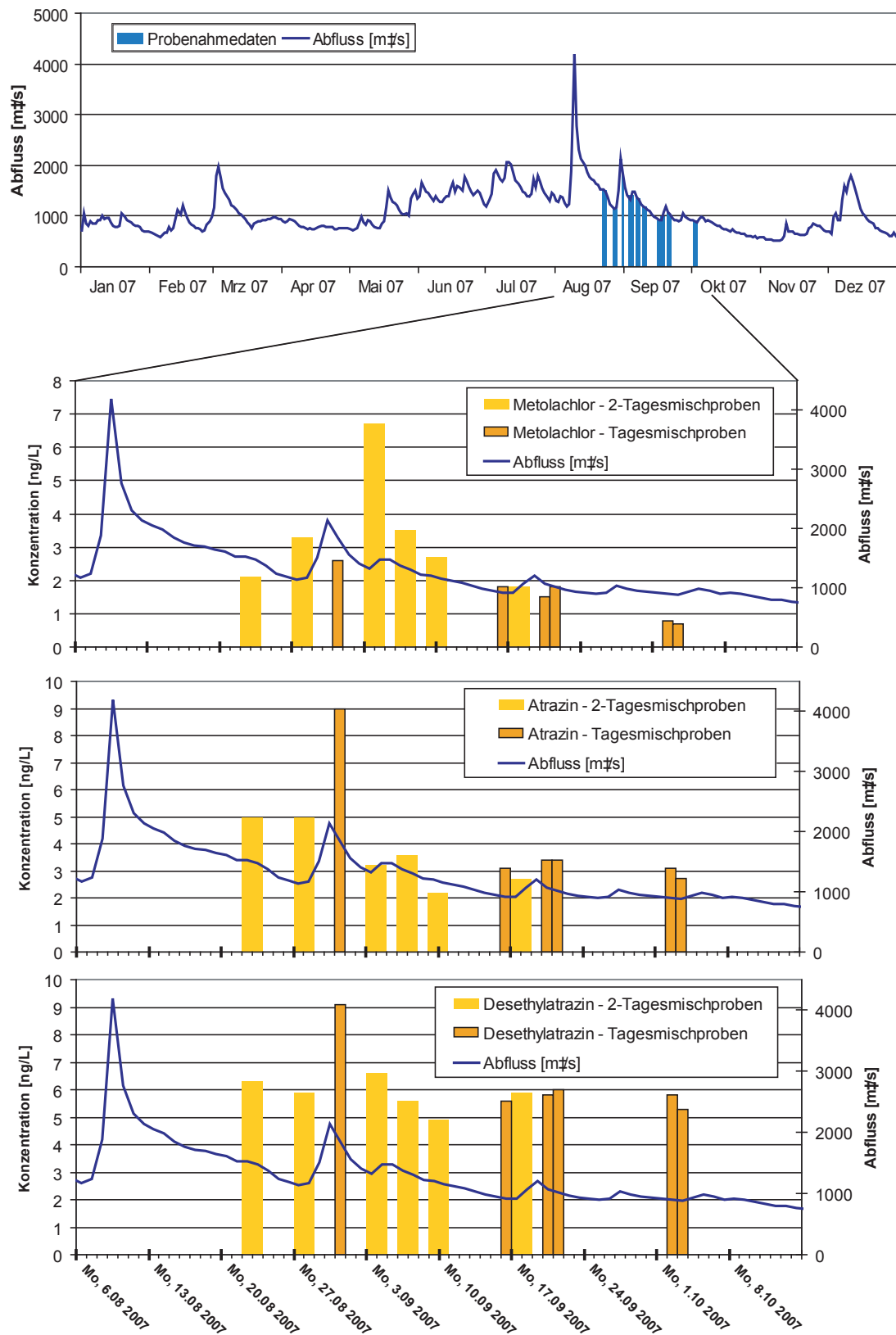


Abbildung 13 Abflusskurve des Rheins 2007; Probenahmedaten; Konzentrationen für Metolachlor, Atrazin und Desethylatrazin in den Rheinproben

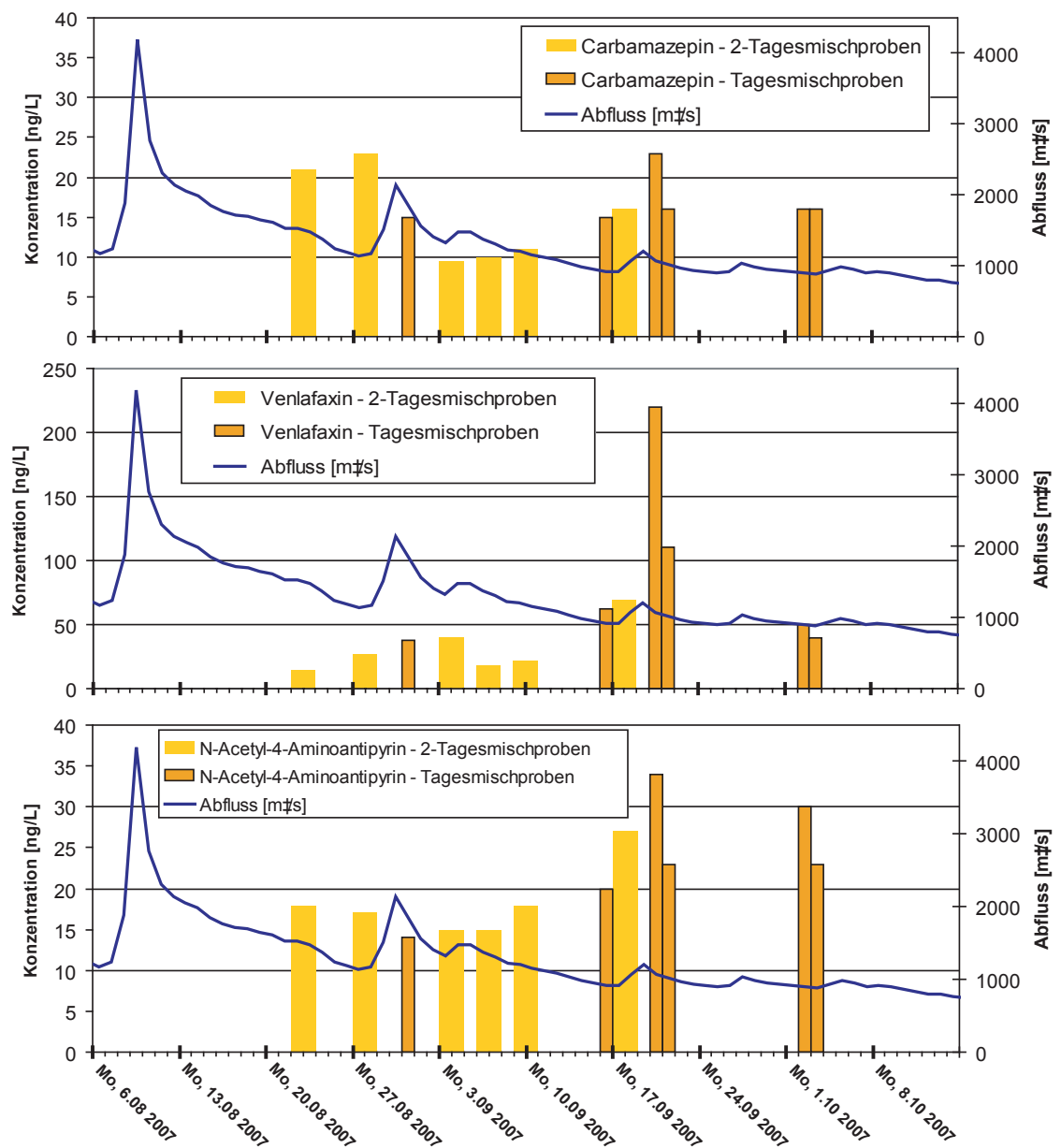


Abbildung 14 Konzentrationen für Carbamazepin, Venlafaxin und N-Acetyl-4-Aminoantipyrin in den Rheinproben

Kläranlagen

Insgesamt wurden in den 7 Kläranlagen-Ablaufproben 187 positive Befunde getätigt, von denen 139 (74%) durch HR-MSMS-Spektren bestätigt werden konnten. Der Anteil der bestätigten Werte liegt bei den Kläranlagen-Proben aufgrund der zum Teil hohen Substanzkonzentrationen höher als bei den Rheinproben.

In den 7 Kläranlagenproben wurden durch die extrahierten HR-MS-Spektren insgesamt 73 Substanzen, darunter 19 Pestizide, 5 Pestizidmetabolite, 8 Biozide, 31 Arzneimittel, 4 Arzneimittelmetabolite, 1 Korrosionsschutzmittel, 1 Naturstoff-Alkaloid (Coffein), 1 Personal Care Produkt, 1 Personal Care Produktmetabolit, 1 Additiv und 1 Lebensmittelzusatzstoff über der Bestimmungsgrenze mit 2 IP nachgewiesen. Ein eindeutiger Substanznachweis mit 5.5 IP war für 59 Substanzen möglich.

Am meisten Substanzen wurden in der ARA Basel gefunden (44 Substanzen mit 2 IP, 8 Substanzen mit 5.5 IP) und am wenigsten in der ARA DSM (2 Substanzen mit 2 IP). In den anderen 5 Kläranlagen wurden jeweils zwischen 10 und 36 Substanzen nachgewiesen. Die höchsten durch HR-MSMS-Spektren bestätigten Befunde ergeben sich bei den Bioziden für Benzisothiazolin-3-on (>5000 ng/L, ARA Ciba), bei den Pestiziden für Cyproconazol (>5000 ng/L, ARA Rhein AG), bei den Pestizidmetaboliten für Metolachlor-OXA (880 ng/L, ARA Rhein AG), bei den Pharmazeutika für Oseltamivir (>>5000 ng/L, ARA Chemie und ARA Basel) und Trimethoprim (>5000 ng/L, ARA Chemie) und bei den Pharmazeutika-Metaboliten für Oseltamivir-Carboxylat (>5000, ARA Chemie) und N-Acetyl-4-Aminopyrin (2000 ng/L, ARA Ciba). Ausserdem wurde Coffein in der ARA Rhein AG mit 2300 ng/L und Sucralose in der ARA Birs mit 500 ng/L und in der ARA Basel mit 260 ng/L bestimmt.

Tabelle 13 Nachgewiesene Mikroverunreinigungen in den ARA-Auslaufproben

Substanz	Substanzgruppe	BG [ng/L]		Konzentration [ng/L]						
		HR-MS	HR-MS/MS	ARA Birs 2.-3.10.07	ARA Steinh 2.-3.10.07	ARA DSM 2.10.07	ARA Rhein AG 2.10.07	ARA Chemie 3.10.07	ARA Basel 3.10.07	ARA Ciba G.-W. 2.-3.10.07
2,4-D	Pestizid	10	10		320				15	50
3,5-Dibromo-4-hydroxybenzoic acid	Pestizid	630	n.g.							
Acetochlor	Pestizid	22	52							
Alachlor	Pestizid	22	35							
Aldicarb	Pestizid	360	k.F.							
Asulam	Pestizid	30	36							
Atraton	Pestizid	1.7	1.9					2.9		
Atrazin	Pestizid	19	19	20				2000	32	
Azoxystrobin	Pestizid	12	25				19		13	
Bentazon	Pestizid	2.5	10							
Bromazil	Pestizid	210	n.g.							
Bromoxynil	Pestizid	1.5	8.3							
Carbetamid	Pestizid	390	290							
Chloridazon	Pestizid	29	n.b.							
Chlortoluron	Pestizid	19	n.g.							
Clomazone	Pestizid	22	n.g.							
Cymoxanil	Pestizid	100	k.F.							
Cyproconazol	Pestizid	140	48				>5000	360		
Cyprodinil	Pestizid	72	n.g.							
Desmedipham + Phenmedipham	Pestizid	64	k.F.							
Diazinon	Pestizid	25	n.g.							
Dicamba	Pestizid	1100	k.F.							
Dichlorprop	Pestizid	140	n.g.							
Diflufenican	Pestizid	>5000	n.g.							
Dimethenamid	Pestizid	19	n.g.							
Dinoseb	Pestizid	29	7							
Epoxyconazol	Pestizid	390	n.g.							
Ethofumesate	Pestizid	180	n.g.							
Fenpropimorph	Pestizid	13	7.8	14						
Fluazifop (freie Säure)	Pestizid	100	n.g.							
Fludioxonil	Pestizid	110	n.g.							
Fluroxypyr (freie Säure)	Pestizid	830	60							
Flusilazole	Pestizid	1400	35							
Hexazinon	Pestizid	17	n.g.							
Ioxynil	Pestizid	1	1.6						1.0	
Isoproturon	Pestizid	12	3.9	13			42		24	23
Kresoxim-methyl	Pestizid	110	170							
Linuron	Pestizid	14	15		26					
MCPA	Pestizid	110	6.2							
Mecoprop	Pestizid	7.3	5.2	53			71		31	
Mesotrion	Pestizid	750	n.b.							
Metalaxyl	Pestizid	11	13						18	
Metamitron	Pestizid	62	n.g.							
Metazachlor	Pestizid	27	n.g.							
Metolachlor	Pestizid	3.3	3.5				1500	75	8.5	
Metribuzin	Pestizid	28	n.g.							
Metsulfuron-methyl	Pestizid	390	n.g.							
Monuron	Pestizid	21	7.1				24			
N,N-diethyl-3-methylbenzamid (DEET)	Pestizid	2.4	2.6	180	2.6	2.8	800	9.7	280	880
Napropamid	Pestizid	11	6.6				18			
Nicosulfuron	Pestizid	200	n.b.							
Orbencarb	Pestizid	160	n.g.							
Prochloraz	Pestizid	>5000	n.g.							
Prometon	Pestizid	0.5	3.8				3.0			
Prometryn	Pestizid	16	19							
Propaquizafop	Pestizid	1100	n.g.							
Prosulfocarb	Pestizid	150	n.g.							
Rimsulfuron	Pestizid	4300	n.g.							
Sebuthylazin	Pestizid	7.4	27							
Simazin	Pestizid	24	6.4	17					26	
Simeton	Pestizid	11	14							
Sulcotrione	Pestizid	1200	n.b.							
Tebuconazole	Pestizid	400	n.g.							
Tebutam	Pestizid	13	2.9							
Terbuteton + Secbumeton	Pestizid	0.5	1.5				3.0			
Terbutylazin	Pestizid	25	2.7					120		
Thifensulfuron-methyl	Pestizid	300	n.b.							
Trinexapac-ethyl	Pestizid	180	82							
2,4-dimethylphenylformamide	Pestizid-Metabolit	3.0	5.7							
2,6-Dichlorbenzamid	Pestizid-Metabolit	20	5.8							
2-Amino-4-methoxy-6-methyl-1,3,5 triazin	Pestizid-Metabolit	78	n.g.							
2-Aminobenzimidazole	Pestizid-Metabolit	10	190							
2-Aminosulfonyl-benzoicacid-methylester	Pestizid-Metabolit	500	n.b.							
3-Phenoxybenzoic acid	Pestizid-Metabolit	620	n.g.							
3-Phenoxybenzyl alcohol	Pestizid-Metabolit	5000	k.F.							
4-chlor-2-methylphenol	Pestizid-Metabolit	1900	n.g.							
4-Isopropylanilin	Pestizid-Metabolit	2000	n.b.							

Substanz	Substanzgruppe	BG [ng/L]		Konzentration [ng/L]							
		HR-MS	HR-MSMS	ARA Birs 2.-3.10.07	ARA Steh 2.-3.10.07	ARA DSM 2.10.07	ARA Rhein AG 2.10.07	ARA Chemie 3.10.07	ARA Basel 3.10.07	ARA Ciba G.-W. 2.-3.10.07	
Acetochlor-ESA	Pestizid-Metabolit	15	250								
Acetochlor-OXA	Pestizid-Metabolit	15	250								
Alachlor-ESA	Pestizid-Metabolit	15	250								
Alachlor-OXA	Pestizid-Metabolit	20	25								
Atrazin-desethyl-2-hydroxy (=Prometon-Hydroxy-Desisopropyl)	Pestizid-Metabolit	330	n.g.								
Atrazine-2-Hydroxy	Pestizid-Metabolit	350	n.g.								
Bifenox-Säure	Pestizid-Metabolit	200	n.g.								
Desethylatrazin	Pestizid-Metabolit	56	4.5								
Desisopropylatrazin	Pestizid-Metabolit	83	25								
Dimethenamid-ESA	Pestizid-Metabolit	11	17						18		
Dimethenamid-OXA	Pestizid-Metabolit	11	60								
Diuron-desdimethyl (=1-(3,4-Dichlorophenyl)urea)	Pestizid-Metabolit	330	n.g.								
Diuron-desmonomethyl (DCPMU)	Pestizid-Metabolit	120	n.g.								
Ethofumesate-2-keto	Pestizid-Metabolit	4300	n.g.								
Flufenacet-ESA	Pestizid-Metabolit	13	31								
Flufenacet-OXA	Pestizid-Metabolit	23	30								
Isoproturon-didemethyl	Pestizid-Metabolit	40	n.g.								
Isoproturon-monodemethyl	Pestizid-Metabolit	14	n.b.								
Mesotrion-MNBA	Pestizid-Metabolit	550	760								
Metamitron-Desamino	Pestizid-Metabolit	5.0	4.0					15			
Metolachlor-ESA	Pestizid-Metabolit	20	24				290	77			
Metolachlor-OXA	Pestizid-Metabolit	9.7	85				880				
Metribuzin-Desamino (DA)	Pestizid-Metabolit	17	n.g.								
Metribuzin-Diketo (DK)	Pestizid-Metabolit	>5000	n.g.								
N-(2,4-dimethylphenyl)-N-methylformamidine	Pestizid-Metabolit	20	3.6								
N,N-Dimethylaminosulfanilid	Pestizid-Metabolit	8.8	9.6		110					49	
N,N-dimethyl-N'-(4-methylphenyl)-sulfamide	Pestizid-Metabolit	8.0	4.0								
Propachlor-ESA	Pestizid-Metabolit	19	38								
Propachlor-OXA	Pestizid-Metabolit	33	n.b.								
Propazine-2-hydroxy (Prometon-Hydroxy)	Pestizid-Metabolit	34	n.g.								
Simazin-2-hydroxy	Pestizid-Metabolit	16	n.g.								
Sulcotriene-CMBA	Pestizid-Metabolit	80	1300								
Terbutylazine-desethyl	Pestizid-Metabolit	3.6	k.F.								
Terbutylazine-desethyl-2-hydroxy	Pestizid-Metabolit	14	6.1								
Terbutylazin-2-hydroxy	Pestizid-Metabolit	34	n.g.								
2-Methylisothiazolin-3-on (MI)	Biozid	97	350	390	190				110	270	
2-n-Octyl-4-isothiazolin-3-on (OIT)	Biozid	15	3.1	18							
4,5-Dichloro-2-n-octyl-isothiazol-3(2H)-one (DCOIT)	Biozid	800	n.g.								
5-Chloro-2-methylisothiazolin-3-on (CMI)	Biozid	66	110	73							
Benzisothiazolin-3-on (BIT)	Biozid	470	280					580		>5000	
Carbendazim	Biozid	48	5.5				61		405		
Diuron	Biozid	17	14	20					34		
IPBC (=Iodocarb)	Biozid	220	n.g.								
Irgarol	Biozid	20	n.g.								
Propiconazol	Biozid	400	n.g.								
Terbutryn	Biozid	16	3.2		17		24		29	19	
Triclosan	Biozid	200	k.F.						210	830	
Irgarol-descyclopropyl	Biozid-Metabolit	18	2.8								
N,N-Dimethylsulfamide	Biozid-Metabolit	n.b.	n.g.								
Atenolol	Pharmazeutika	26	10	330			540		1100	330	
Azithromycin	Pharmazeutika	10	k.F.	49					88		
Bezafibrat	Pharmazeutika	180	39				250		440	310	
Carbamazepin	Pharmazeutika	26	4.9	490	47		310	>>5000	1100	440	
Clarithromycin	Pharmazeutika	2.6	k.F.	61			110		240	150	
Clindamycin	Pharmazeutika	13	k.F.				230	66	33	68	
Clofibrinsäure	Pharmazeutika	10	50							10	
Clotrimazole	Pharmazeutika	n.b.	n.g.								
Diatrizoat (=Amidotrizoesäure)	Pharmazeutika	>5000	n.g.								
Diclofenac	Pharmazeutika	90	630	1800				1000	760	1000	
Exemestane	Pharmazeutika	4.8	n.g.								
Fenofibrate	Pharmazeutika	3500	n.g.								
Fluconazole	Pharmazeutika	26	46						46		
Fluoxetine	Pharmazeutika	28	k.F.	33							
Iohexol	Pharmazeutika	3000	n.g.								
Iomeprol+Iopamidol	Pharmazeutika	900	k.F.	1100					>5000		
Iopromid	Pharmazeutika	80	k.F.	89					>5000		
Ioxitalaminsäure	Pharmazeutika	n.b.	k.F.						1300		
Ketoprofen	Pharmazeutika	19	6.1				110		160	20	
Mefenamic acid	Pharmazeutika	42	48	99			1300		1900	62	
Metoprolol	Pharmazeutika	13	46	450			280	260	790	760	
Naproxen	Pharmazeutika	170	140				960		750	200	
Oseltamivir	Pharmazeutika	7.7	56					>>5000	>5000		
Pantoprazol	Pharmazeutika	3000	k.F.								
Paracetamol	Pharmazeutika	160	9.3						270		
Phenazon	Pharmazeutika	8.4	25	9.9					52	30	
Primidon	Pharmazeutika	40	19	120					50		
Propanolol	Pharmazeutika	23	36	29					68		
Roxithromycin	Pharmazeutika	26	k.F.							53	
Sotalol	Pharmazeutika	50	6.8	230			150		150	550	

Substanz	Substanzgruppe	BG [ng/L]		Konzentration [ng/L]						
		HR-MS	HR-MS/MS	ARA Birs 2.-3.10.07	ARA Steih 2.-3.10.07	ARA DSM 2.10.07	ARA Rhein AG 2.10.07	ARA Chemie 3.10.07	ARA Basel 3.10.07	ARA Ciba G.-W. 2.-3.10.07
Sulfadimethoxine	Pharmazeutika	67	n.g.							
Sulfadiazine	Pharmazeutika	65	n.g.							
Sulfamethazine	Pharmazeutika	120	n.g.							
Sulfamethoxazole	Pharmazeutika	23	16	820					53	51
Sulfapyridin	Pharmazeutika	40	80	110			80			43
Sulfathiazole	Pharmazeutika	120	62						470	
Trimethoprim	Pharmazeutika	29	20	340			110	>5000	190	
Tylosin	Pharmazeutika	1100	n.g.							
Venlafaxine	Pharmazeutika	14	24	380	48	41	290	21	520	170
Verapamil	Pharmazeutika	2.8	18	34				23	34	26
Erythromycin + Erythromycin-H2O	Pharmazeutika + -metabolit	21	k.F.	340	22			74	80	160
Oseltamivir-Carboxylat	Pharmazeutika-Metabolit	35	22					>5000	960	
Fenofibric-acid	Pharmazeutika-Metabolit	7.3	13	34			160		1100	
N4-Acetyl-Sulfadiazin	Pharmazeutika-Metabolit	320	n.g.							
N4-Acetyl-Sulfadimethoxin	Pharmazeutika-Metabolit	48	100							
N4-Acetyl-Sulfamethazin	Pharmazeutika-Metabolit	110	n.g.							
N4-Acetyl-Sulfamethoxazole	Pharmazeutika-Metabolit	29	38	170			350		190	150
N4-Acetyl-Sulfathiazol	Pharmazeutika-Metabolit	360	n.g.							
N-Acetyl-4-Aminoantipyrin	Pharmazeutika-Metabolit	36	53	620			410		2000	1000
Benzothiazol	Additiv	1000	3100	>BG	>BG		>BG	>BG	>BG	>BG
5-Methyl-Benzotriazol	Korrosionsschutzmittel	n.b.	n.g.							
Benzotriazol	Korrosionsschutzmittel	300	970				>5000			
Sucralose	Lebensmittelzusatzstoff	10	12	500					260	
Benzophenon 3 (=2-Hydroxy-4-methoxybenzophenon)	Personal Care Product	78	16						100	
Octocrylene	Personal Care Product	n.b.	n.g.							
Galaxolidon	Personal Care Product-Metabolit	6	8.5	>5000			36	24	960	22
Coffein	Tracer	33	11				2300		480	140

BG = Bestimmungsgrenze; n.b. = nicht bestimmbar; n.g. = nicht gemessen; k.F. = kein Fragment bei gegebener HCD-Energie; **00** = Befunde mit 5.5 IP; **00** = Befunde mit 2 IP

Fallbeispiel

Zur Veranschaulichung der Messwerte und um die Plausibilität der Befunde aufzeigen zu können, sind als Fallbeispiel in der Abbildung 15 die gemessenen Konzentrationen des Lebensmittelzusatzstoffes Sucralose im Rhein und in den untersuchten Kläranlagen für den 2./3. Oktober 2007 dargestellt. Zusätzlich beinhaltet die Abbildung 15 die geographische Lage der Rheinüberwachungsstation Weil a.R. (RüS) und der sieben beprobten Kläranlagen. Sucralose wird als künstlicher Süsstoff vor allem in Erfrischungsgetränken eingesetzt. Sucralose wird vom menschlichen Körper nicht aufgenommen und unverändert wieder ausgeschieden. Da ein Abbau in der Kläranlage nicht stattfindet, ist Sucralose eine anthropogene, konservative Tracersubstanz, welche vor allem aus kommunalem Abwasser stammt [44]. Dies wird durch die gefundenen Konzentrationen bestätigt, da Sucralose mit Konzentrationen von 260 und 500 ng/L lediglich in der kommunalen Kläranlage Basel und Birs detektiert wurde. In den Kläranlagen Steih, Rhein AG, Grenzach Ciba, Chemie Basel und DSM, welche überwiegend Industrieabwässer aufbereiten, konnte Sucralose nicht nachgewiesen werden (BG < 10 ng/L). Trotz der hohen Sucralose-Konzentrationen in den kommunalen Kläranlagen konnte durch die Verdünnung der grossen Wassermasse des Rheins bei der RüS nur noch eine Konzentration von 12 ng/L ermittelt werden. Der

Konzentrationsverlauf von Sucralose im Rhein bei Weil ist in der Abbildung 16 zusammengestellt.

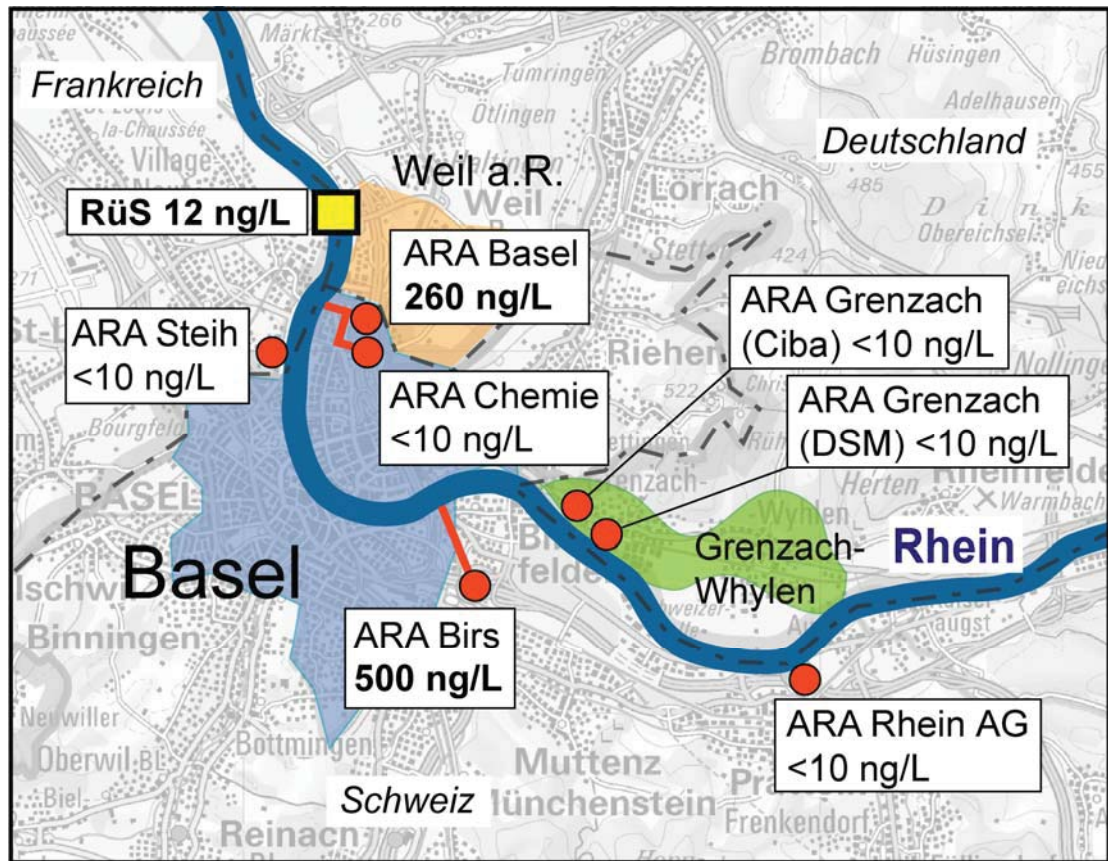


Abbildung 15 Konzentration von Sucralose im Rhein bei Weil und in 7 Kommunal- und Industrie-Kläranlagen am 2./3. Oktober 2008

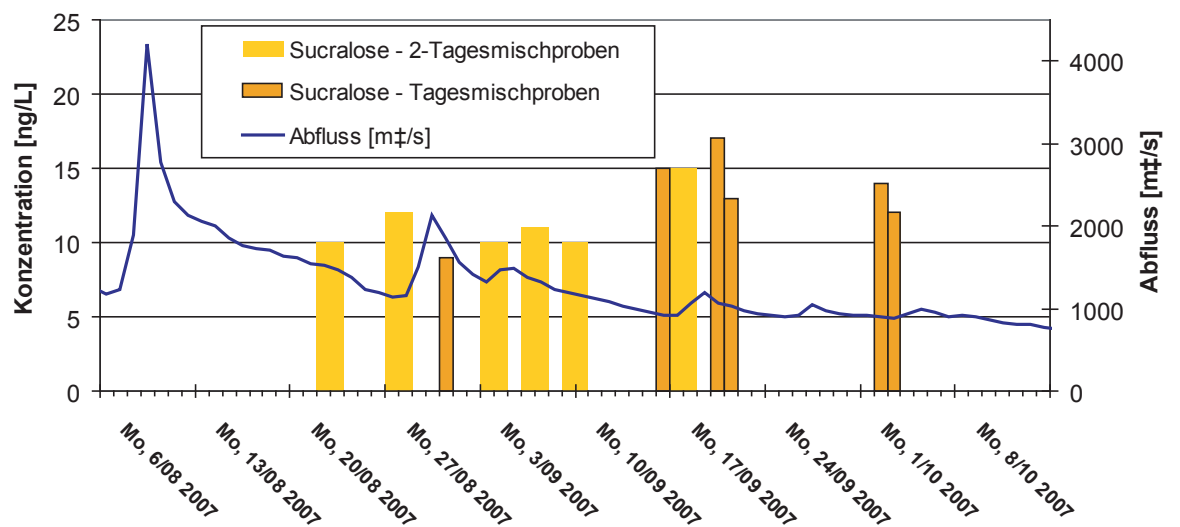


Abbildung 16 Konzentrationsverlauf von Sucralose im Rhein bei Weil

4.4.2 Industriechemikalien

In den Tabelle 14 und Tabelle 15 sind die ermittelten Konzentrationen der Industriechemikalien für die Rhein- und Kläranlagen-Proben mit der abgeschätzten Bestimmungsgrenze zusammengefasst.

Rhein

Im Rhein konnten 3 Industriechemikalien über der Bestimmungsgrenze nachgewiesen werden. Davon stammt eine Substanz aus der Tabelle 6, welche abwassergängige Chemikalien aus der Farbstoffsynthese beinhaltet, und zwei Substanzen aus der Tabelle 7, welche die positiven GC-MS-Screeningbefunde für Industriechemikalien des AUE-Labors umfasst. Es konnte nur 2-Naphthalinsulfonsäure exakt quantifiziert und bestätigt werden. Auffallend ist, dass die Konzentration mit Werten zwischen 10 und 220 ng/L beträchtlich schwankt. Die beiden Substanzen Diglyme und Surfynol 104A konnten zwar detektiert, aber nicht exakt quantifiziert werden, da die Befunde für beide Substanzen ausserhalb des Kalibrierbereiches lagen. Für Surfynol 104A lag ausserdem kein Fragment im MSMS-Spektrum vor. Eine eindeutige Bestätigung der Surfynol-Befunde ist damit nicht möglich.

Tabelle 14 Abgeschätzte Bestimmungsgrenzen und ermittelte Konzentrationen in den Rhein-Proben für die Industriechemikalien

Substanz	BG [ng/L]		Konzentration [ng/L]											
	HR-MS	HR-MSMS	Rhein 22.-23.8.2007	Rhein 27.-28.8.2007	Rhein 31.08.2007	Rhein 3.-4.9.2007	Rhein 6.-7.9.2007	Rhein 9.-10.9.2007	Rhein 16.09.2007	Rhein 17.-18.9.2007	Rhein 20.09.2007	Rhein 21.09.2007	Rhein 2.10.2007	Rhein 3.10.2007
BDD-PEO	42	n.g.												
2,7-Naphthalindisulfonsäure	50	n.g.												
2-Aminonaphthalin-1,5-disulfonsäure	200	n.g.												
2-Naphthalinsulfonsäure	3.1	10	10	86	16	5.2	16	36	130	170	220	130	120	80
4,4'-Diaminostilbene-2,2'-disulfonsäure	140	n.g.												
4,4'-Dinitrostilbene-2,2'-disulfonsäure	n.b.	n.g.												
Diglyme (Diethylen glycol dimethyl ether)	2.2	1.5	>200	>200	>200	>200	>200	>200	>200	>200	>200	>200	>200	>200
N-(4-Aminophenyl)-N-methyl-acetamid	0.5	n.g.												
N-Methyl-N-phenyl-acetamid	0.3	n.g.												
Sulfanilsäure	>600	n.g.												
Surfynol_104A	n.b.	k.F.			>600									

BG = Bestimmungsgrenze; n.b. = nicht bestimmbar; n.g. = nicht gemessen; k.F. = kein Fragment bei gegebener HCD-Energie; **00** = Befunde mit 5.5 IP; **00** = Befunde mit 2 IP

Kläranlagen

Von den 11 Industriechemikalien, welche mit der optimierten Analysenmethode erfasst werden können, wurden in den sieben Kläranlagenabwässern 7 Substanzen über der

Bestimmungsgrenze detektiert (siehe Tabelle 15). Davon stammen fünf Substanzen aus Tabelle 6 (Farbstoffsynthese) und zwei Substanzen aus Tabelle 7 (GC-MS-Screening).

Nur die beiden Naphthalinsulfonsäuren konnten durch die MSMS-Spektren bestätigt werden. 2-Naphthalinsulfonsäure kommt in allen 7 Kläranlagen in Konzentrationen höher als 3400 ng/L vor; 2,7-Naphthalindisulfonsäure erreicht in 6 Kläranlagen Werte von über 5000 ng/L.

Tabelle 15 Abgeschätzte Bestimmungsgrenzen und ermittelte Konzentrationen in den ARA-Proben für die Industriechemikalien

Substanz	BG [ng/L]		Konzentration [ng/L]						
	HR-MS	HR-MSMS	ARA Birs 2.-3.10.07	ARA Steih 2.-3.10.07	ARA DSM 2.10.07	ARA Rhein AG 2.10.07	ARA Chemie 3.10.07	ARA Basel 3.10.07	ARA Ciba G.-W. 2.-3.10.07
BDD-PEO	140	k.F.					>5000		>>5000
2,7-Naphthalindisulfonsäure	390	890	>5000	>5000		>5000	>5000	>5000	>5000
2-Aminonaphthalin-1,5-disulfonsäure	>5000	n.g.							
2-Naphthalinsulfonsäure	200	58	>5000	>5000	4000	>5000	>5000	>5000	3400
4,4'-Diaminostilben-2,2'-disulfonsäure	2700	n.g.							
4,4'-Dinitrostilbene-2,2'-disulfonsäure	n.b.	k.F.							>>5000
Diglyme (Diethylen glycol dimethyl ether)	n.b.	9	370	>5000	2800	>5000	>5000	>5000	1200
N-(4-Aminophenyl)-N-methyl-acetamid	68	29							110
N-Methyl-N-phenyl-acetamid	14	k.F.	300	180	190	310	620	410	110
Sulfanilsäure	n.b.	41							
Surfynol 104A	n.b.	k.F.							

BG = Bestimmungsgrenze; n.b. = nicht bestimmbar; n.g. = nicht gemessen; k.F. = kein Fragment bei gegebener HCD-Energie; **00** = Befunde mit 5.5 IP; 00 = Befunde mit 2 IP

Fallbeispiel

Naphthalinsulfonsäuren stellen wichtige Zwischenprodukte bei der Herstellung von vielen Verbrauchsprodukten dar, wie zum Beispiel bei der Produktion von Farbstoffen, optischen Aufhellern, Netz- und Dispergiermitteln. Sowohl bei der Herstellung als auch bei dem Gebrauch und der Entsorgung dieser Produkte können Naphthalinsulfonsäuren mit dem Abwasser ins Oberflächengewässer gelangen [45-49]. Die sehr hohen Befunde von 2-Naphthalinsulfonsäure im gereinigten Abwasser der beprobten Kommunal- und Industrie-Kläranlagen unterstreichen diesen Sachverhalt (vergleiche Abbildung 17). Nahezu alle Befunde lagen über dem Kalibrationsbereich von 5000 ng/L. Trotz der grossen Verdünnung im Rhein wurden immer noch Konzentrationswerte für 2-Naphthalinsulfonsäure von bis zu 220 ng/L in der RüS gemessen. Die Abbildung 18 zeigt die stark variierenden Konzentrationen von 2-Naphthalinsulfonsäure im Rhein bei Weil im zeitlichen Verlauf.

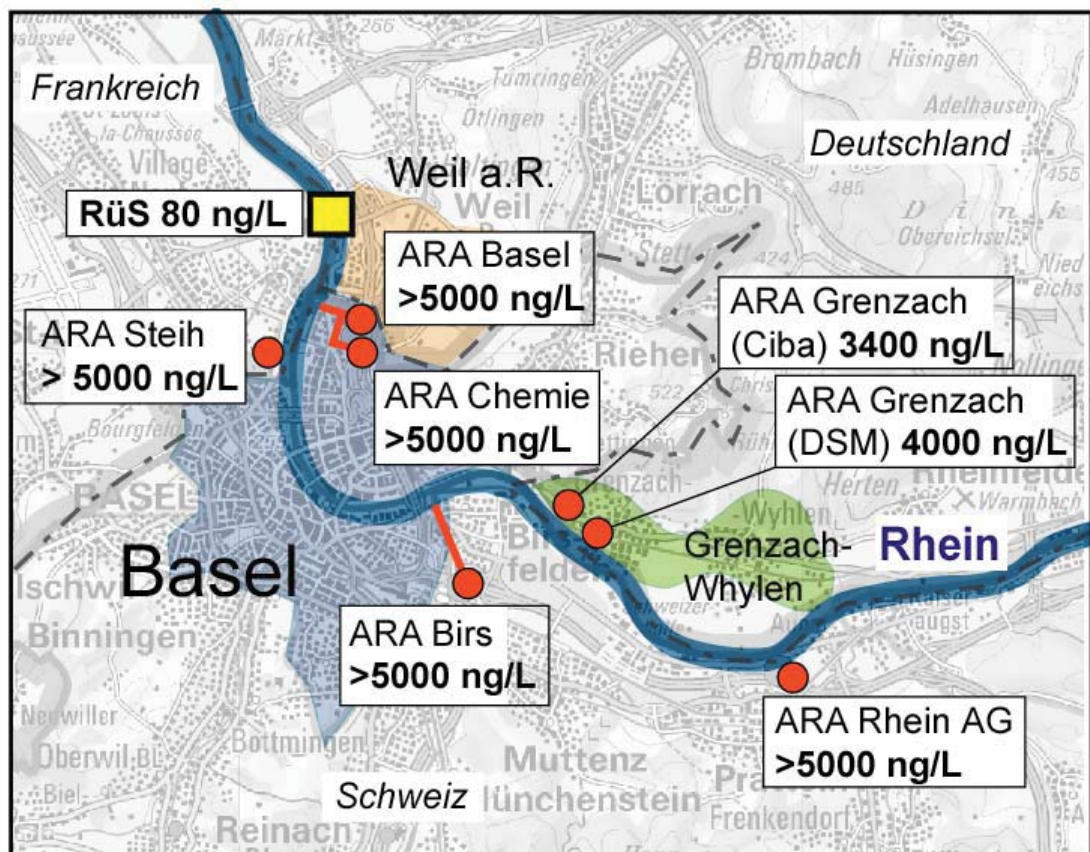


Abbildung 17 Konzentration von 2-Naphthalinsulfonsäure im Rhein bei Weil und in 7 Kommunal- und Industrie-Kläranlagen am 2./3. Oktober 2008

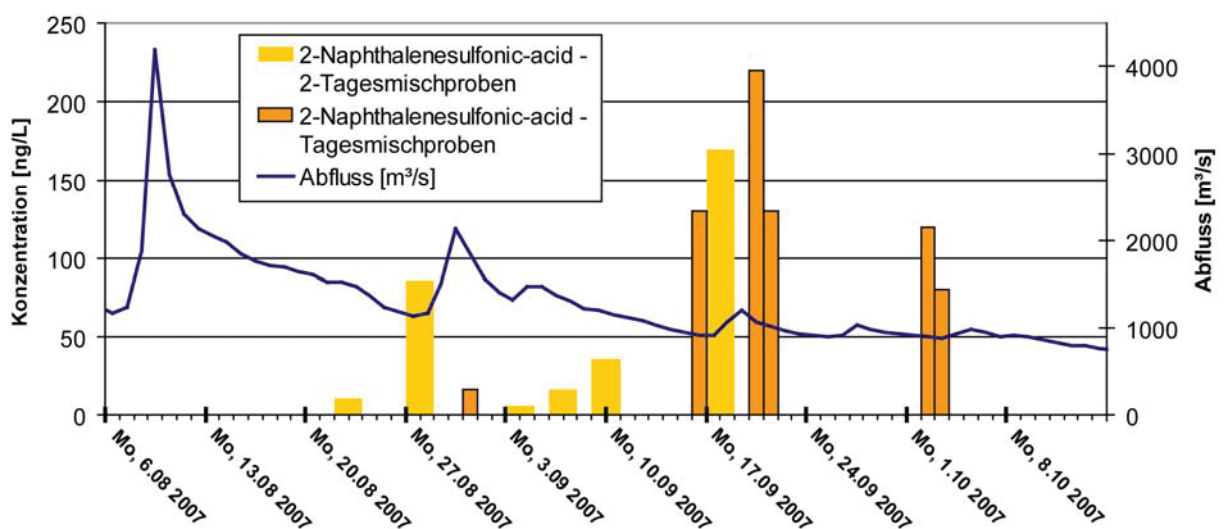


Abbildung 18 Konzentrationsverlauf der 2-Naphthalinsulfonsäure im Rhein bei Weil

4.4.3 Nachweis von Mikroverunreinigungen und Industriechemikalien ohne Probenanreicherung

Wie die Messergebnisse zeigen ist vor allem in den Rheinproben ein Nachweis der Mikroverunreinigungen mit Konzentrationen im niedrigen ng/L Bereich mit der heute verfügbaren Analystechnik ohne einen Anreicherungsschritt nicht möglich. Für die Erfassung von Fehleinleitungen und Havarien, bei welchen stark erhöhte Substanzkonzentrationen im Rhein erwartet werden, wäre ein Messung der Proben ohne Aufkonzentrierungsschritt wünschenswert, um ein möglichst zeitnahes und vollständiges Monitoring des Rheinwassers gewährleisten zu können. So wird zurzeit ein internationaler Rheinalarm je nach Substanzgiftigkeit ab 300 kg Fracht in einer Tagesmischprobe ausgelöst, was bei den Abflüssen des Jahres 2007 einer Substanzkonzentration zwischen 0.8 und 6.8 µg/L entspricht. Überschreitet eine organische Substanz im Rhein eine Konzentration von 1 µg/L wird eine regionale Suchmeldung ausgelöst. Ob eine Alarmierung im Rhein mit der entwickelten Methode auch ohne Anreicherungsschritt möglich ist, wurde für einige Industriechemikalien anhand einer aufgespikten Rheinprobe abgeschätzt (siehe Tabelle 16).

Tabelle 16 Abgeschätzte Bestimmungsgrenzen für einige Industriechemikalien im Rhein für eine Detektion ohne Anreicherungsschritt

Substanz	BG ohne Anreicherung [µg/L]
BDD-PEO	13.0
2,7-Naphthalindisulfonsäure	69.7
2-Aminonaphtalin-1,5-disulfonsäure	162.2
2-Naphthalinsulfonsäure	1.7
4,4'-Diaminostilben-2,2'-disulfonsäure	80.8
4,4'-Dinitrostilben-2,2'-disulfonsäure	n.b.
Diglyme	1.7
N-(4-Aminophenyl)-N-methyl-acetamid	0.2
N-Methyl-N-phenyl-acetamid	0.1
Sulfanilsäure	129.3
Surfynol_104A	n.b.

n.b. = nicht bestimmbar

Nur die beiden Acetamide N-(4-Aminophenyl)-N-methyl-acetamid und N-Methyl-N-phenyl-acetamid können unterhalb von 1 µg/L erfasst werden. Damit wäre die Methode geeignet, um

den Grenzwert für regionale Suchmeldungen von 1 µg/L für diese beiden Substanzen zu überwachen. Die Bestimmungsgrenze für 2-Naphthalindisulfonsäure und Diglyme liegt für eine Detektion ohne Anreicherungsschritt bei 1.7 µg/L und damit knapp über dem regionalen Suchmeldealarm von 1 µg/L. Der Überwachungswert für einen internationalen Rheinalarm kann für Acetamide N-(4-Aminophenyl)-N-methyl-acetamid, N-Methyl-N-phenyl-acetamid-2-Naphthalindisulfonsäure und Diglyme erreicht werden. Bei allen anderen in der Tabelle 16 aufgeführten Substanzen mit Bestimmungsgrenzen von 13 bis 162 µg/L ist ein Anreicherungsschritt für eine zuverlässige Alarmierung unverzichtbar. Damit die RüS eine lückenlose und schnelle Alarmierung gewährleisten kann, sind mit der entwickelten Methodik zwei separate Messungen jeweils mit und ohne Aufkonzentrierungsschritt für jede Rheinprobe empfehlenswert.

5 Schlussfolgerungen und Handlungsempfehlungen

Aus den Hauptaufgaben der Rheinüberwachungsstation mit einer langfristigen Qualitätsüberwachung auf der einen Seite und der Erkennung von Fehleinleitungen und Havarien auf der anderen Seite ergeben sich Anforderungen an die verwendete Analysentechnik, welche von der heute verfügbaren Technik das technisch mögliche abverlangen. Die Analysenmethode muss sowohl eindeutige Messergebnisse im tiefen ng/L-Bereich für eine breite Substanzpalette mit unterschiedlichsten chemisch-physikalischen Eigenschaften liefern als auch die Identifizierung von unbekannten und hoch konzentrierten Schadstoffen ermöglichen. Grundsätzlich besitzt die Kopplung aus Flüssigchromatographie und hoch auflösender Hybrid-Massenspektrometrie mittels LTQ-Orbitrap das Potential den Anforderungen zum grössten Teil gerecht zu werden ohne hierbei eine Vielfalt von zeit- und kostenaufwendigen Analysentechniken zu beanspruchen.

Nachweis von Zielanalyten

Um die Möglichkeiten und Grenzen der Technik auszuloten, wurden in diesem Projekt 211 Mikroverunreinigungen mit sehr unterschiedlichen chemisch-physikalischen Eigenschaften ausgewählt. Durch Optimierung der verschiedenen Analysenschritte konnte eine SPE-LC-HRMS-Methode zur Identifizierung und Quantifizierung ausgearbeitet werden, mit welcher 88% der selektierten Substanzen (185 Substanzen) bis in den tiefen ng/L-Bereich erfasst werden können. 87% aller detektierbaren Substanzen besitzen mit der optimierten Methode eine Bestimmungsgrenze zwischen 0.1 und 10 ng/l.

Von den 211 ausgewählten Mikroverunreinigungen können damit lediglich 26 Wirkstoffe mittels SPE-LC-HRMS nicht hinreichend sensitiv bestimmt werden. Hierbei gingen 2 Substanzen (1%) beim Aufkonzentrierungsschritt mittels SPE verloren. 2 Substanzen waren

mit dem gewählten LC-Gradienten nicht kompatibel. Für 15 Substanzen ist generell eine Ionisierung im ESI-Interface des Massenspektrometers nicht möglich, womit sich diese Wirkstoffe der massenselektiven Detektion am LTQ-Orbitrap entziehen. Hier handelt es sich überwiegend um unpolare Chemikalien.

Bei der Gruppe der Industriechemikalien war für 6 der 19 gewählten Leitsubstanzen ebenfalls die unzureichende Ionisierung im ESI-Interface des Massenspektrometers der limitierende Faktor für eine erfolgreiche Detektion.

Die neu entwickelte Methode führt damit zu einer starken Ausweitung des Analysenfensters bei polaren, nicht GC-gängigen Substanzen. Die bestehenden Limitierungen hinsichtlich des Analysenfensters stehen nicht in Zusammenhang mit der Wahl des LTQ-Orbitrap als Massenspektrometer. Vielmehr sind diese Einschränkungen für alle SPE-LC-MS-Methoden gegeben. Die bestehenden Lücken im Bereich der unpolaren Substanzen können zum Teil nur mit komplementären und etablierten Analysentechniken wie GC-MS ausgefüllt werden. Herausragend ist die Eigenschaft der Methode mit einer einzigen Anreicherungs- und zwei Messungen am LTQ-Orbitrap eine Vielzahl von Analyten detektieren und quantifizieren zu können. Dies ist bisher nur unter erhöhtem Zeitaufwand mit mehreren substanzgruppenspezifischen LC-TripleQuad-MS-Methoden möglich. Lediglich die im Vergleich zu einem TripleQuad-MS etwa um den Faktor 5 schlechtere Nachweisempfindlichkeit und die bisher auf das Orbitrap schlecht abgestimmte Auswertungs-Software setzen der Methodik gewisse Grenzen. Wie die Messergebnisse im Rhein und im gereinigten Abwasser der kommunalen und industriellen Kläranlagen zeigen (siehe Tabelle 12 - Tabelle 15), können mit der entwickelten Methode in der Praxis eine Vielzahl von Mikroverunreinigungen und Industriechemikalien sowohl im tiefen ng/L-Bereich im Rhein als auch im µg/L-Bereich in den Abwasserproben nachgewiesen und quantifiziert werden.

In den 12 Rheinproben wurden insgesamt 672 positive Screening-Befunde (2 IP) getätigt, welche sich auf 84 Substanzen verteilten, darunter 23 Pestizide, 17 Pestizidmetabolite, 8 Biozide, 1 Biozidmetabolit, 26 Arzneimittel, 1 Arzneimittelmetabolit, 1 Korrosionsschutzmittel, 1 Naturstoff-Alkaloid (Coffein), 1 Personal Care Produkt, 1 Personal Care Produkt-Metabolit, 1 Additiv, 1 Lebensmittelzusatzstoff und 3 Industriechemikalien. 357 der 672 Screening-Befunde konnten für 43 Substanzen zweifelsfrei (5.5 IP) bestätigt werden.

Für 80 Substanzen, darunter 19 Pestizide, 5 Pestizidmetabolite, 8 Biozide, 31 Arzneimittel, 4 Arzneimittelmetabolite, 1 Korrosionsschutzmittel, 1 Naturstoff-Alkaloid (Coffein), 1 Personal Care Produkt, 1 Personal Care Produktmetabolit, 1 Additiv, 1 Lebensmittelzusatzstoff und 7 Industriechemikalien wurden in den 7 Kläranlagenproben 218 Screening-Ergebnisse (2 IP) erhalten. Für 60 Substanzen konnten 146 Nachweise eindeutig (5.5 IP) bestätigen werden.

Nachweis von Nicht-Zielanalyten

Die Identifizierung von unbekannten, polaren, nicht GC-gängigen Substanzen aus Fehleinleitungen und Unfällen in Rhein und Abwasserproben ist prinzipiell mit hoch auflösenden Hybrid-Massenspektrometern gekoppelt an Flüssigchromatographen möglich. Das LTQ-Orbitrap besitzt mit einer Massenauflösung von bis zu 100'000 und einer Massengenauigkeit von kleiner als 5 ppm hierfür beste Voraussetzungen. Da bei hohen, aus Unfällen resultierenden Substanzkonzentrationen unter Umständen auch auf einen Aufkonzentrierungsschritt (Aufkonzentrierungsfaktor 500) mittels SPE verzichtet werden kann, sind je nach Substanz Identifizierungen in Konzentrationsbereichen bestenfalls ab 0.1 bis 1 µg/L direkt aus der Probe möglich. Um sowohl einen sensitiven Nachweis von polaren Mikroverunreinigungen als auch eine lückenlose und schnelle Alarmierung von Havarien und Fehleinleitungen gewährleisten zu können, können die Rheinproben in zwei separaten Messungen jeweils mit und ohne Aufkonzentrierungsschritt mit dem LC-HRMS gemessen werden.

Da in der ESI-Ionenquelle des Massenspektrometers in der Regel protonierte oder deprotonierte Molekülonen gebildet werden, kann eine Substanzidentifizierung in folgenden Schritten ablaufen: Aus den hoch aufgelösten Orbitrap-Massenspektren werden Substanzpeaks aus den extrahierten Chromatogrammen detektiert. Den Substanzpeaks können dann anschliessend mit der exakten Masse und verschiedenen Filterregeln Summenformeln zugeordnet werden. Aus den Summenformeln lassen sich mit Hilfe von Datenbanken und anhand der gleichzeitig akquirierten, hoch aufgelösten MSMS-Spektren Vorschläge für Strukturformeln erzeugen. Hierbei handelt es sich immer um einen Vorschlag für die wahrscheinlichste Struktur der unbekannten Verbindung; eine eindeutige Identifizierung kann erst mit der Messung einer Referenzsubstanz stattfinden.

Dieses Verfahren hat überdies den Vorteil, dass bereits vorhandene Messungen retrospektiv auf weitere unbekannte oder bekannte Verbindungen hin ausgewertet werden können, sofern aussagekräftige MSMS-Spektren angefallen sind. Dieses Vorgehen wurde bereits mehrfach mit hoch auflösenden Massenspektrometern in der Literatur an einzelnen, unbekannten Verbindungen gezeigt [7, 41, 50-52]. Die entscheidende Limitierung in der Praxis ist jedoch, dass bisher keine Software existiert, welche basierend auf dem genannten Vorgehen automatisiert Strukturvorschläge für unbekannte Substanzpeaks tätigt. Zurzeit ist das Vorgehen damit sehr zeitaufwändig und bedarf speziell geschultes Personal mit einem gutem analytischen Wissen.

Optimale Analysentechnik

Um das Analysenfenster auf polare, nicht GC-gängige Verbindungen im Rhein ausdehnen zu können, ist der Einsatz von routinemässig durchgeführten SPE-LC-MS-Screeningmethoden für die Rheinstation sinnvoll. Ob eher ein TripleQuad-MS oder ein hoch auflösendes MS wie das LTQ-Orbitrap eingesetzt werden sollte, hängt von der Aufgabenpriorisierung ab. Ein TripleQuad-MS besitzt die beste Nachweisempfindlichkeit und kann damit am besten die Aufgabe einer langfristigen Trendüberwachung von sehr niedrig konzentrierten Mikroverunreinigungen im Rhein übernehmen. Mit nur wenig schlechterer Nachweisempfindlichkeit, aber höherer Flexibilität bei der Substanzauswahl eröffnet das LTQ-Orbitrap aber die Möglichkeit unbekannte Substanzen zu identifizieren. Die Einschränkungen bei der Nutzung der prinzipiell vorhandenen Orbitrap-Funktionalitäten aufgrund fehlender Softwaretools werden vermutlich für die nächsten Jahre bestehen bleiben.

Da sich das Screening mittels GC-MS und LC-MS in ihren Anwendungsbereichen ergänzen, ist die Beibehaltung beider Techniken für eine möglichst weitgehende Überwachung von organischen Schadstoffen im Rhein empfehlenswert.

Literatur

1. *Jahresbericht - Rheinüberwachungs-Station Weil am Rhein*. Im Auftrag von: Umweltministerium Baden-Württemberg, Deutschland; Bundesamt für Umwelt, Schweiz; Amt für Umwelt und Energie Basel-Stadt, Schweiz, 2006: p. 72.
2. *Commission Decision 2002/657/EC of 12 August 2002 implementing Council Directive 96/23/EC concerning the performance of analytical methods and the interpretation of results*.
3. Alder, L., et al., *Residue analysis of 500 high priority pesticides: Better by GC-MS or LC-MS/MS?* Mass Spectrometry Reviews, 2006. **25**(6): p. 838-865.
4. Ferrer, I. and E.M. Thurman, *Liquid chromatography/time-of-flight/mass spectrometry (LC/TOF/MS) for the analysis of emerging contaminants*. Trac-Trends in Analytical Chemistry, 2003. **22**(10): p. 750-756.
5. Hernandez, F., et al., *Comparison of different mass spectrometric techniques combined with liquid chromatography for confirmation of pesticides in environmental water based on the use of identification points*. Analytical Chemistry, 2004. **76**(15): p. 4349-4357.
6. Ibanez, M., et al., *Use of liquid chromatography quadrupole time-of-flight mass spectrometry in the elucidation of transformation products and metabolites of pesticides. Diazinon as a case study*. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2006. **384**(2): p. 448-457.
7. Ibanez, M., et al., *Use of quadrupole time-of-flight mass spectrometry in the elucidation of unknown compounds present in environmental water*. Rapid Communications in Mass Spectrometry, 2005. **19**(2): p. 169-178.
8. Sancho, J.V., et al., *Potential of liquid chromatography/time-of-flight mass spectrometry for the determination of pesticides and transformation products in water*. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2006. **386**(4): p. 987-997.
9. Hardman, M., E. Denisov, and A. Makarov. *Ion fragmentation and storage in an asymmetric trapping quadrupole coupled to the orbitrap mass analyser*. in *Proceedings 50th ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics*. 2002.
10. Hardman, M. and A.A. Makarov, *Interfacing the orbitrap mass analyzer to an electrospray ion source*. Analytical Chemistry, 2003. **75**(7): p. 1699-1705.
11. Hu, Q., et al., *The Orbitrap: A new mass spectrometer*. Journal of Mass Spectrometry, 2005. **40**(4): p. 430-443.
12. Makarov, A., et al., *Performance evaluation of a hybrid linear ion trap/orbitrap mass spectrometer*. Analytical Chemistry, 2006. **78**(7): p. 2113-2120.
13. Makarov, A., et al., *Dynamic range of mass accuracy in LTQ orbitrap hybrid mass spectrometer (vol 17, pg 977, 2006)*. Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 2006. **17**(12): p. 1758-1758.
14. Olsen, J.V., et al., *Parts per million mass accuracy on an orbitrap mass spectrometer via lock mass injection into a C-trap*. Molecular and Cellular Proteomics, 2005. **4**(12): p. 2010-2021.
15. Fontanals, N., R.M. Marce, and F. Borrull, *New hydrophilic materials for solid-phase extraction*. Trac-Trends in Analytical Chemistry, 2005. **24**(5): p. 394-406.

16. Fontanals, N., R.M. Marce, and F. Borrull, *New materials in sorptive extraction techniques for polar compounds*. Journal of Chromatography A, 2007. **1152**(1-2): p. 14-31.
17. Hernandez, F., et al., *Strategies for quantification and confirmation of multi-class polar pesticides and transformation products in water by LC-MS2 using triple quadrupole and hybrid quadrupole time-of-flight analyzers*. TrAC - Trends in Analytical Chemistry, 2005. **24**(7): p. 596-612.
18. Ferrer, I., E.M. Thurman, and D. Barcelo, *Identification of ionic chloroacetanilide-herbicide metabolites in surface water and groundwater by HPLC/MS using negative ion spray*. Analytical Chemistry, 1997. **69**(22): p. 4547-4553.
19. Kuster, M., M.L. de Alda, and D. Barcelo, *Analysis of pesticides in water by liquid chromatography-tandem mass spectrometric techniques*. Mass Spectrometry Reviews, 2006. **25**(6): p. 900-916.
20. Steen, R.J.C.A., I. Bobeldijk, and U.A.T. Brinkman, *Screening for transformation products of pesticides using tandem mass spectrometric scan modes*. Journal of Chromatography A, 2001. **915**(1-2): p. 129-137.
21. Yu, K., et al., *A fully automated LC/MS method development and quantification protocol targeting 52 carbamates, thiocarbamates, and phenylureas*. Analytical Chemistry, 2003. **75**(16): p. 4103-4112.
22. Batt, A.L. and D.S. Aga, *Simultaneous analysis of multiple classes of antibiotics by ion trap LC/MS/MS for assessing surface water and groundwater contamination*. Analytical Chemistry, 2005. **77**(9): p. 2940-2947.
23. Castiglioni, S., et al., *A multiresidue analytical method using solid-phase extraction and high-pressure liquid chromatography tandem mass spectrometry to measure pharmaceuticals of different therapeutic classes in urban wastewaters*. Journal of Chromatography A, 2005. **1092**(2): p. 206-215.
24. Gros, M., M. Petrovic, and D. Barcelo, *Development of a multi-residue analytical methodology based on liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) for screening and trace level determination of pharmaceuticals in surface and wastewaters*. Talanta, 2006. **70**(4): p. 678-690.
25. Gros, M., M. Petrovic, and D. Barcelo, *Multi-residue analytical methods using LC-tandem MS for the determination of pharmaceuticals in environmental and wastewater samples: a review*. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2006. **386**(4): p. 941-952.
26. Kasprzyk-Hordem, B., R.M. Dinsdale, and A.J. Guwy, *Multi-residue method for the determination of basic/neutral pharmaceuticals and illicit drugs in surface water by solid-phase extraction and ultra performance liquid chromatography-positive electrospray ionisation tandem mass spectrometry*. Journal of Chromatography A, 2007. **1161**(1-2): p. 132-145.
27. Quintana, J.B. and T. Reemtsma, *Sensitive determination of acidic drugs and triclosan in surface and wastewater by ion-pair reverse-phase liquid chromatography/tandem mass spectrometry*. Rapid Communications in Mass Spectrometry, 2004. **18**(7): p. 765-774.
28. Reddersen, K. and T. Heberer, *Multi-compound methods for the detection of pharmaceutical residues in various waters applying solid phase extraction*

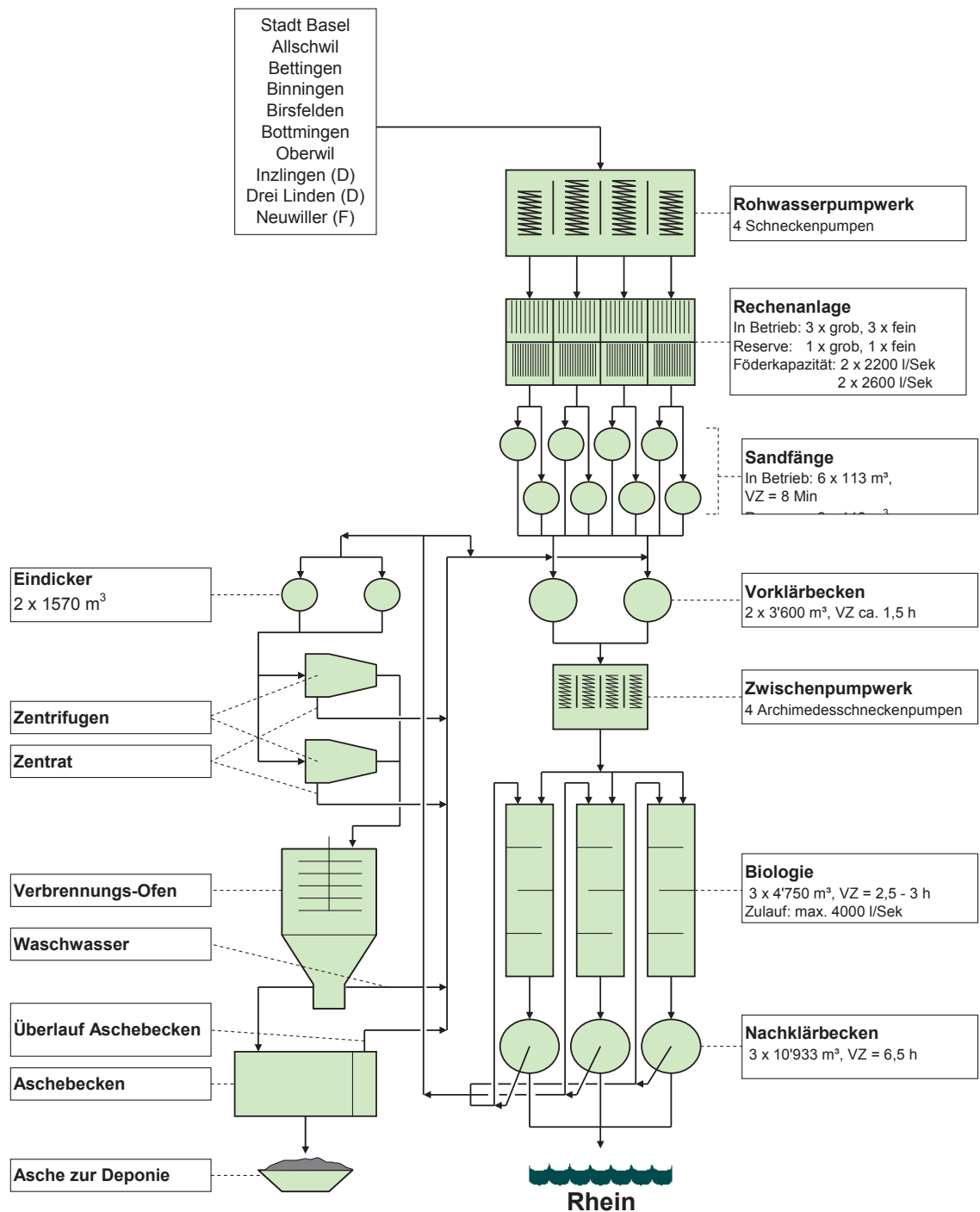
- (SPE) and gas chromatography with mass spectrometric (GC-MS) detection. *Journal of Separation Science*, 2003. **26**(15-16): p. 1443-1450.
29. Vieno, N.M., T. Tuhkanen, and L. Kronberg, *Analysis of neutral and basic pharmaceuticals in sewage treatment plants and in recipient rivers using solid phase extraction and liquid chromatography-tandem mass spectrometry detection*. *Journal of Chromatography A*, 2006. **1134**(1-2): p. 101-111.
 30. Zhang, Z.L. and J.L. Zhou, *Simultaneous determination of various pharmaceutical compounds in water by solid-phase extraction-liquid chromatography-tandem mass spectrometry*. *Journal of Chromatography A*, 2007. **1154**(1-2): p. 205-213.
 31. Rafoth, A., et al., *Analysis of isothiazolinones in environmental waters by gas chromatography-mass spectrometry*. *Journal of Chromatography A*, 2007. **1164**(1-2): p. 74-81.
 32. Lamoree, M.H., et al., *Determination of diuron and the antifouling paint biocide Irgarol 1051 in Dutch marinas and coastal waters*. *Journal of Chromatography A*, 2002. **970**(1-2): p. 183-190.
 33. Piedra, L., et al., *Screening of antifouling pesticides in sea water samples at low ppt levels by GC-MS and LC-MS*. *Chromatographia*, 2000. **52**(9-10): p. 631-638.
 34. Benijts, T., W. Lambert, and A. De Leenheer, *Analysis of multiple endocrine disruptors in environmental waters via wide-spectrum solid-phase extraction and dual-polarity ionization LC-ion trap-MS/MS*. *Analytical Chemistry*, 2004. **76**(3): p. 704-711.
 35. Loos, R., G. Hanke, and S.J. Eisenreich, *Multi-component analysis of polar water pollutants using sequential solid-phase extraction followed by LC-ESI-MS*. *Journal of Environmental Monitoring*, 2003. **5**(3): p. 384-394.
 36. MartinezBueno, M.J., et al., *Application of Liquid Chromatography/Quadrupole-Linear Ion Trap Mass Spectrometry and Time-of-Flight Mass Spectrometry to the Determination of Pharmaceuticals and Related Contaminants in Wastewater*. *Anal. Chem.*, 2007.
 37. Seitz, W., W. Schulz, and W.H. Weber, *Novel applications of highly sensitive liquid chromatography/mass spectrometry/mass spectrometry for the direct detection of ultra-trace levels of contaminants in water*. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 2006. **20**(15): p. 2281-2285.
 38. Stoob, K., et al., *Fully automated online solid phase extraction coupled directly to liquid chromatography-tandem mass spectrometry - Quantification of sulfonamide antibiotics, neutral and acidic pesticides at low concentrations in surface waters*. *Journal of Chromatography A*, 2005. **1097**(1-2): p. 138-147.
 39. Vanderford, B.J., et al., *Analysis of endocrine disruptors, pharmaceuticals, and personal care products in water using liquid chromatography/tandem mass spectrometry*. *Analytical Chemistry*, 2003. **75**(22): p. 6265-6274.
 40. Rodriguez-Mozaz, S., M.J.L. de Alda, and D. Barcelo, *Monitoring of estrogens, pesticides and bisphenol A in natural waters and drinking water treatment plants by solid-phase extraction-liquid chromatography-mass spectrometry*. *Journal of Chromatography A*, 2004. **1045**(1-2): p. 85-92.
 41. Lim, H.K., et al., *Metabolite identification by data-dependent accurate mass spectrometric analysis at resolving power of 60,000 in external calibration*

- mode using an LTQ/Orbitrap. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 2007. **21**(12): p. 1821-1832.
42. Peterman, S.M., et al., *Application of a linear ion trap/orbitrap mass spectrometer in metabolite characterization studies: Examination of the human liver microsomal metabolism of the non-tricyclic anti-depressant nefazodone using data-dependent accurate mass measurements*. *Journal of the American Society for Mass Spectrometry*, 2006. **17**(3): p. 363-375.
 43. Steiner, C., et al., *Atrazinbelastung in Schweizer Fliessgewässern - ein Vergleich auf unterschiedlicher Grössenskala*. Eawag, Dübendorf; Amt für Umwelt und Energie, Basel; im Auftrag von: Bundesamt für Umwelt BAFU, Schweiz, 2006: p. 47.
 44. Brorström-Lundén, E., et al., *Measurements of Sucralose in the Swedish Screening Program 2007 - PART I: Sucralose in surface waters and STP samples*. IVL Swedish Environmental Research Institute Ltd.; Report B1769, 2008.
 45. Alonso, M.C. and D. Barcelo, *Tracing polar benzene- and naphthalenesulfonates in untreated industrial effluents and water treatment works by ion-pair chromatography-fluorescence and electrospray-mass spectrometry*. *Analytica Chimica Acta*, 1999. **400**(1-3): p. 211-231.
 46. Alonso, M.C., et al., *Monitoring and toxicity of sulfonated derivatives of benzene and naphthalene in municipal sewage treatment plants*. *Environmental Pollution*, 2005. **137**(2): p. 253-262.
 47. Altenbach, B. and W. Giger, *Determination of benzene- and naphthalenesulfonates in wastewater by solid-phase extraction with graphitized carbon black and ion-pair liquid chromatography with UV detection*. *Analytical Chemistry*, 1995. **67**(14): p. 2325-2333.
 48. Riediker, S., M.J.F. Suter, and W. Giger, *Benzene- and naphthalenesulfonates in leachates and plumes of landfills*. *Water Research*, 2000. **34**(7): p. 2069-2079.
 49. Suter, M.J.F., S. Riediker, and W. Giger, *Selective determination of aromatic sulfonates in landfill leachates and groundwater using microbore liquid chromatography coupled with mass spectrometry*. *Analytical Chemistry*, 1999. **71**(4): p. 897-904.
 50. Bobeldijk, I., et al., *Screening and identification of unknown contaminants in water with liquid chromatography and quadrupole-orthogonal acceleration-time-of-flight tandem mass spectrometry*. *Journal of Chromatography A*, 2001. **929**(1-2): p. 63-74.
 51. Ferrer, I., et al., *Exact-mass library for pesticides using a molecular-feature database*. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 2006. **20**(24): p. 3659-3668.
 52. Thurman, E.M., I. Ferrer, and A.R. Fernandez-Alba, *Matching unknown empirical formulas to chemical structure using LC/MS TOF accurate mass and database searching: Example of unknown pesticides on tomato skins*. *Journal of Chromatography A*, 2005. **1067**(1-2): p. 127-134.

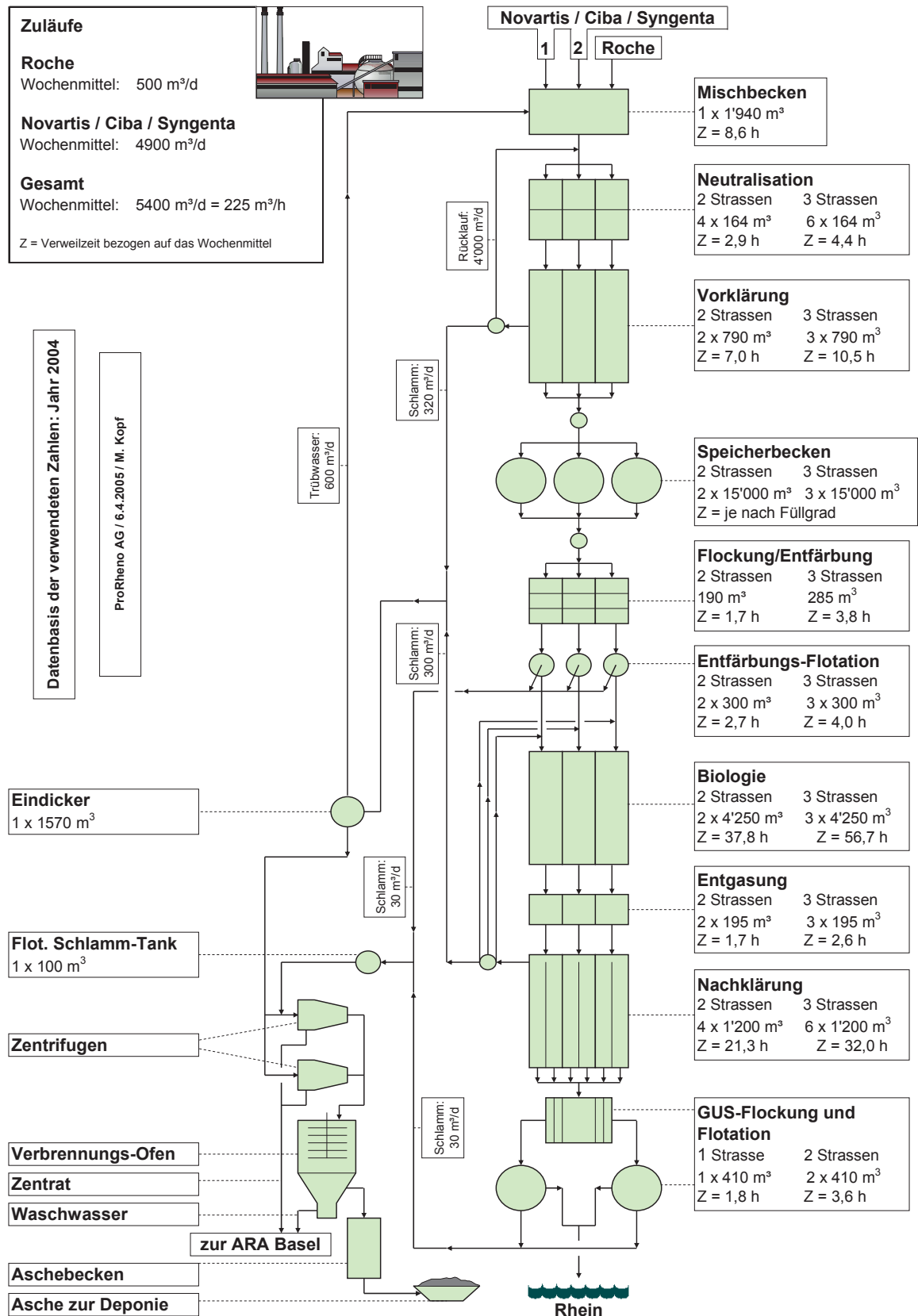
Anhang

A) Schemata der Kläranlagen

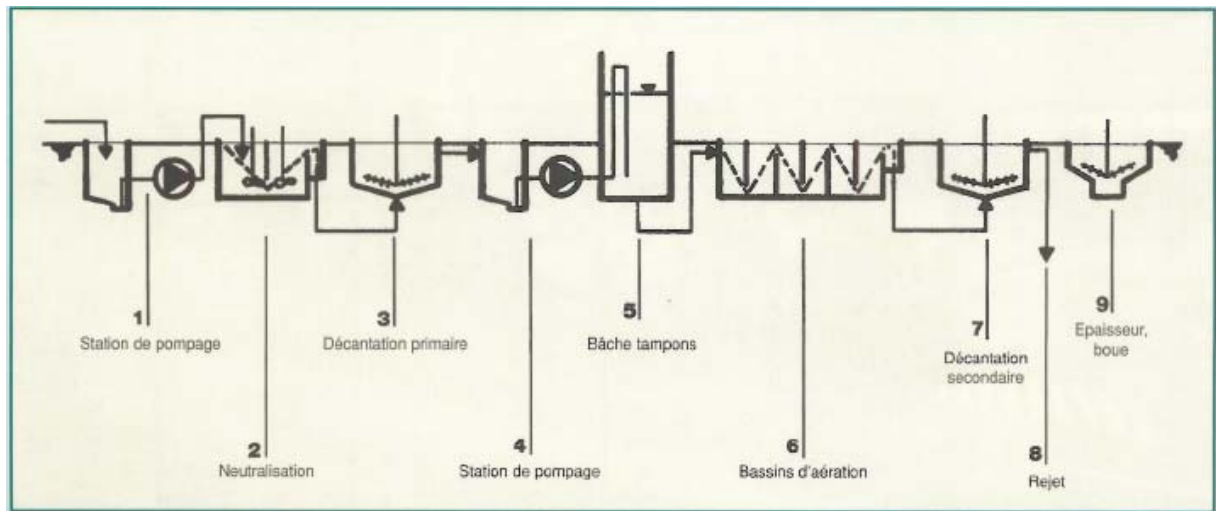
Fliess-Schema der ARA Basel kommunal



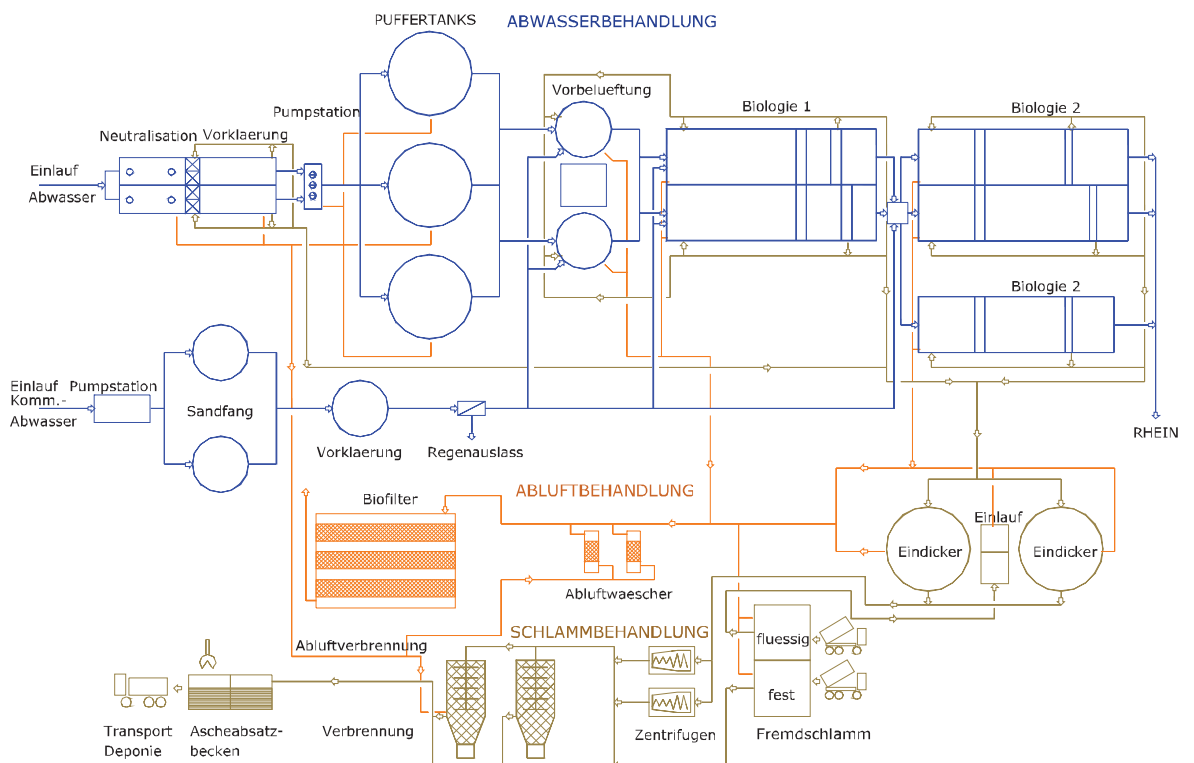
Fluss-Schema der ARA Chemie Basel

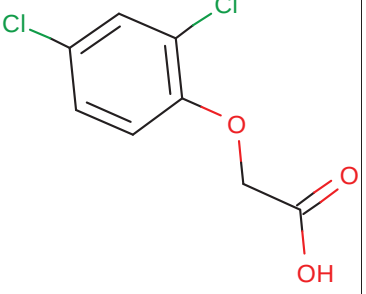


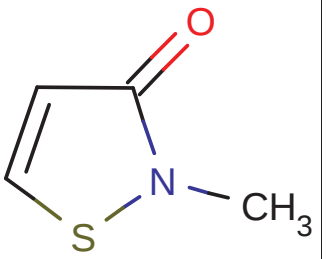
Fließ-Schema der ARA STEIH

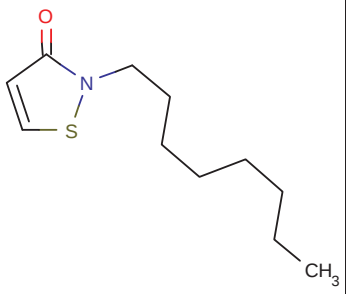


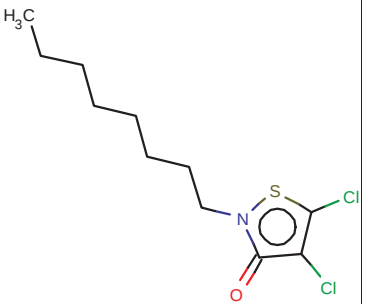
Fließ-Schema der ARA Rhein AG



Wirkstoff		2,4-D			
Metabolit von					
CAS-No	94-75-7	Klassifizierung	Muttersubstanz		
Summenformel	C ₈ H ₆ Cl ₂ O ₃	Wirkstoffgruppe	Pestizid		
Exakte Masse	219.9689	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL		
M+H	☐	220.97668	0 pg	Speziierung pH3	neutral
M+Na	☐	242.9586	0 pg		pH7
M-H	☒	218.96213	17 pg	Kow-Wert	2.81
M-FA	☐		9000 pg		

Wirkstoff		2-Methylisothiazolin-3-on (MI)			
Metabolit von					
CAS-No	2682-20-4	Klassifizierung	Muttersubstanz		
Summenformel	C ₄ H ₅ N ₁ O ₁ S ₁	Wirkstoffgruppe	Biozid		
Exakte Masse	115.0086	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL		
M+H	☒	116.0165	0 pg	Speziierung pH3	neutral
M+Na	☐	137.9984	0 pg		pH7
M-H	☐	114.0019	0 pg	Kow-Wert	-0.83
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff		2-n-Octyl-4-isothiazolin-3-on (OI)			
Metabolit von					
CAS-No	26530-20-1	Klassifizierung	Muttersubstanz		
Summenformel	C ₁₁ H ₁₉ NOS	Wirkstoffgruppe	Biozid		
Exakte Masse	213.1182	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL		
M+H	☒	214.126	11 pg	Speziierung pH3	neutral
M+Na	☐	236.108	10 pg		pH7
M-H	☐	212.1115	pg	Kow-Wert	2.45
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff		4,5-Dichloro-2-n-octyl-isothiazol-3(2H)-one (DCOIT)			
Metabolit von					
CAS-No	64359-81-5	Klassifizierung	Muttersubstanz		
Summenformel	C ₁₁ H ₁₇ Cl ₂ NOS	Wirkstoffgruppe	Biozid		
Exakte Masse	281.0402	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL		
M+H	☒	282.0481	0.7 pg	Speziierung pH3	neutral
M+Na	☐	304.03	pg		pH7
M-H	☐	280.0335	pg	Kow-Wert	3.59
M-FA	☐		pg		

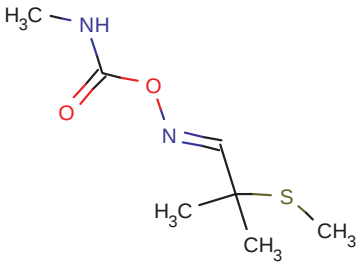
Wirkstoff	5-Chloro-2-methylisothiazolin-3-on (CMI)			
Metabolit von				
CAS-No	26172-55-4	Klassifizierung	Muttersubstanz	
Summenformel	C ₄ H ₄ ClNOS	Wirkstoffgruppe	Biozid	
Exakte Masse	148.9697	Int. Standard	☐	
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit
M+H	☒	149.9775	31 pg	3.72 min
M+Na	☐	171.9594	85 pg	Speziierung pH3
M-H	☐	147.9629	pg	pH7
M-FA	☐		pg	Kow-Wert
				-0.34

Wirkstoff	5-Methyl-Benzotriazol			
Metabolit von				
CAS-No	136-85-6	Klassifizierung	Muttersubstanz	
Summenformel	C ₇ H ₇ N ₃	Wirkstoffgruppe	Korrosionsschutzmittel	
Exakte Masse	133.0635	Int. Standard	☐	
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit
M+H	☒	134.0713	pg	5.74 min
M+Na	☐	156.0532	pg	Speziierung pH3
M-H	☐	132.0567	35532 pg	pH7
M-FA	☐		pg	Kow-Wert
				1.71

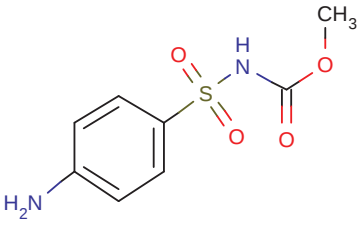
Wirkstoff	Acetochlor			
Metabolit von				
CAS-No	34256-82-1	Klassifizierung	Muttersubstanz	
Summenformel	C ₁₄ H ₂₀ ClNO ₂	Wirkstoffgruppe	Pestizid	
Exakte Masse	269.1177	Int. Standard	☐	
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit
M+H	☒	270.1255	315 pg	11.61 min
M+Na	☐	292.1075	14 pg	Speziierung pH3
M-H	☐	268.111	pg	pH7
M-FA	☐		pg	Kow-Wert
				3.03

Wirkstoff	Alachlor			
Metabolit von				
CAS-No	15972-60-8	Klassifizierung	Muttersubstanz	
Summenformel	C ₁₄ H ₂₀ ClNO ₂	Wirkstoffgruppe	Pestizid	
Exakte Masse	269.1177	Int. Standard	☐	
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit
M+H	☒	270.1255	290 pg	11.61 min
M+Na	☐	292.1075	12 pg	Speziierung pH3
M-H	☐	268.111	pg	pH7
M-FA	☐		pg	Kow-Wert
				3.52

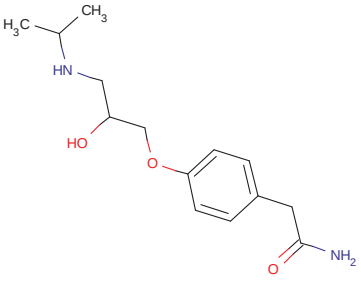
Wirkstoff		Aldicarb	
Metabolit von			
CAS-No	116-06-3	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₇ H ₁₄ O ₂ N ₂ S ₁	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	190.077	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	191.0849	0 pg
M+Na	☒	213.0668	4 pg
M-H	☐	189.0703	0 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.06 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.13	



Wirkstoff		Asulam	
Metabolit von			
CAS-No	3337-71-1	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₈ H ₁₀ N ₂ O ₄ S ₁	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	230.0356	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	231.04341	316 pg
M+Na	☐	253.0253	50 pg
M-H	☐	229.02886	655 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		2.58 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		-0.27	

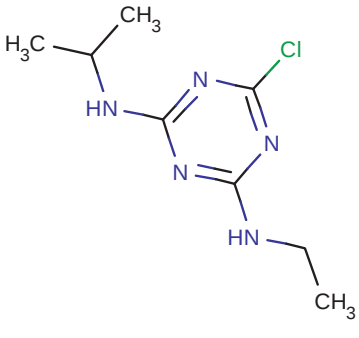


Wirkstoff		Atenolol	
Metabolit von			
CAS-No	29122-68-7	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O ₃	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	266.1625	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	267.17033	8 pg
M+Na	☐	289.1523	pg
M-H	☐	265.15577	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		2.12 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		kationisch	
Kow-Wert		0.23	

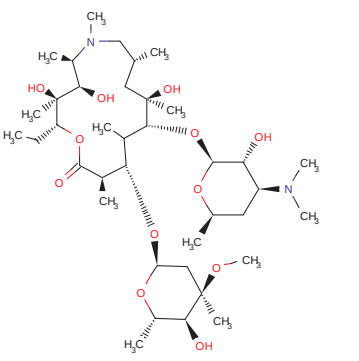


Wirkstoff		Atraton (Isobare zu Prometon-Hydroxy)	
Metabolit von			
CAS-No	1610-17-9	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	211.1428	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	212.1506	pg
M+Na	☐	234.1325	pg
M-H	☐	210.136	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		5.09 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.69	

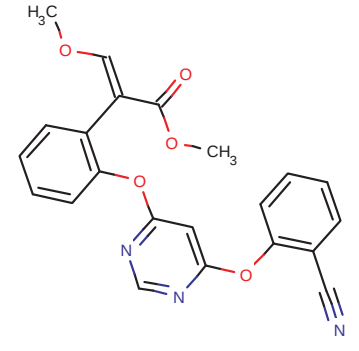
Wirkstoff		Atrazine	
Metabolit von			
CAS-No	1912-24-9	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₈ H ₁₄ ClN ₅	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	215.0932	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	216.10105	4 pg
M+Na	☐	238.083	8000 pg
M-H	☐	214.08650	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.36 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.6	



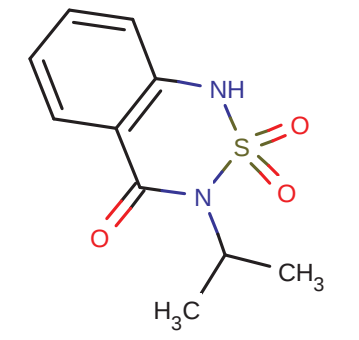
Wirkstoff		Azithromycin	
Metabolit von			
CAS-No	83905-01-5	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₃₈ H ₇₂ N ₂ O ₁₂	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	748.508	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	749.5158	27 pg
M+Na	☐	771.4977	pg
M-H	☐	747.5012	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		5.74 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		kationisch	
Kow-Wert		4.02	



Wirkstoff		Azoxystrobin	
Metabolit von			
CAS-No	131860-33-8	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₂₂ H ₁₇ N ₃ O ₅	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	403.1163	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	404.12411	16 pg
M+Na	☐	426.106	11 pg
M-H	☐	402.10955	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		9.99 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.5	



Wirkstoff		Bentazon	
Metabolit von			
CAS-No	25057-89-0	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₀ H ₁₂ N ₂ O ₃ S	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	240.0563	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	241.0641	8500 pg
M+Na	☐	263.0461	20000 pg
M-H	☒	239.0496	8 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		7.59 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.34	



Wirkstoff

Benzisothiazolin-3-on (BIT)

Metabolit von

CAS-No

2634-33-5

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₇H₅NOS

Wirkstoffgruppe

Biozid

Exakte Masse

151.0086

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

4.93 min

M+H

☒

152.0165

25 pg

M+Na

☐

173.9984

90 pg

M-H

☐

150.0019

1100 pg

M-FA

☐

pg

Kow-Wert

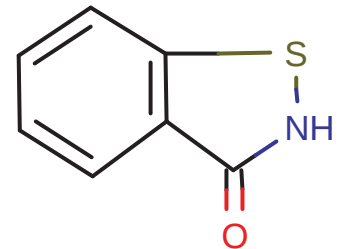
0.64

Speziierung pH3

neutral

pH7

neutral



Wirkstoff

Benzophenon 3 (=2-Hydroxy-4-methoxybenzophenon)

Metabolit von

CAS-No

131-57-7

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₄H₁₂O₃

Wirkstoffgruppe

Personal Care Product

Exakte Masse

228.0781

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

12.21 min

M+H

☒

229.0859

36 pg

M+Na

☐

251.0679

3840 pg

M-H

☐

227.0714

pg

M-FA

☐

pg

Kow-Wert

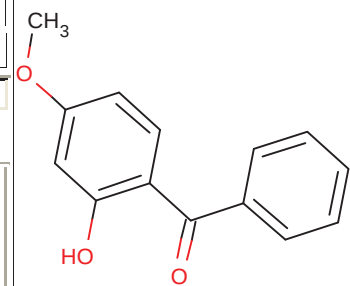
3.79

Speziierung pH3

neutral

pH7

neutral



Wirkstoff

Benzothiazol

Metabolit von

CAS-No

95-16-9

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₇H₅NS

Wirkstoffgruppe

Additiv

Exakte Masse

135.0137

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

6.47 min

M+H

☒

136.0215

1.2 pg

M+Na

☐

158.0035

pg

M-H

☐

134.007

pg

M-FA

☐

pg

Kow-Wert

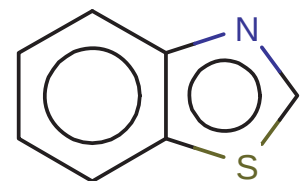
2.01

Speziierung pH3

neutral

pH7

neutral



Wirkstoff

Benzotriazol

Metabolit von

CAS-No

95-14-7

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₆H₅N₃

Wirkstoffgruppe

Korrosionsschutzmittel

Exakte Masse

119.0478

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

4.39 min

M+H

☒

120.0556

1547 pg

M+Na

☐

142.0376

pg

M-H

☐

118.0411

pg

M-FA

☐

pg

Kow-Wert

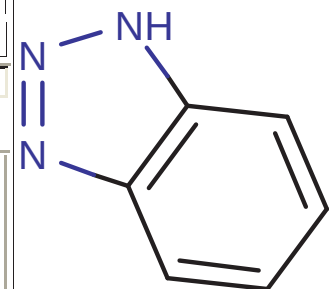
1.44

Speziierung pH3

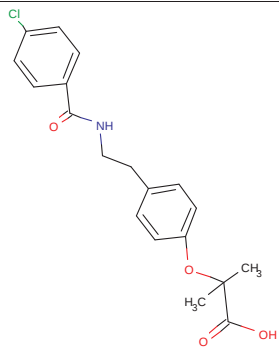
neutral

pH7

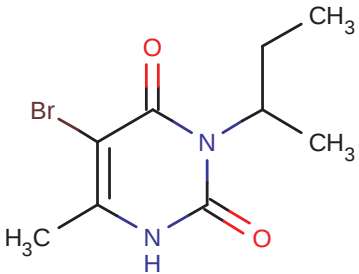
neutral



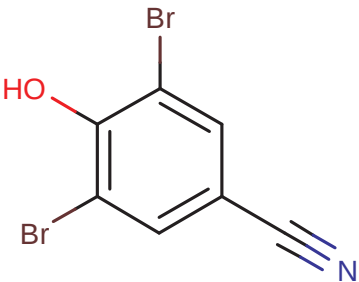
Wirkstoff		Bezafibrat	
Metabolit von			
CAS-No	41859-67-0	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₉ H ₂₀ ClNO ₄	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	361.1075	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	362.1154	51 pg
M+Na	☐	384.0973	53 pg
M-H	☒	360.1008	18 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		10.62 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		4.25	



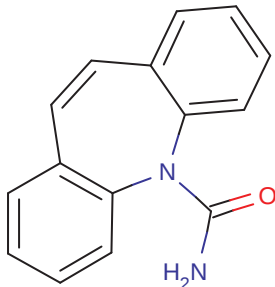
Wirkstoff		Bromazil	
Metabolit von			
CAS-No	314-40-9	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₉ H ₁₃ BrN ₂ O ₂	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	260.0155	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	261.0233	110 pg
M+Na	☐	283.0053	42 pg
M-H	☒	259.0088	24 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		7.03 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.11	



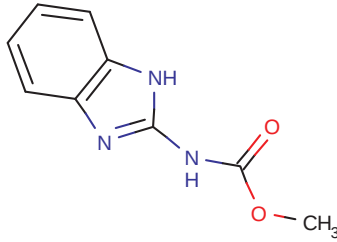
Wirkstoff		Bromoxynil	
Metabolit von			
CAS-No	1689-84-5	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₇ H ₃ Br ₂ N ₁ O ₁	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	276.8561	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	275.86542	pg
M+Na	☐	299.8453	pg
M-H	☒	273.85086	6 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.33 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		3.39	



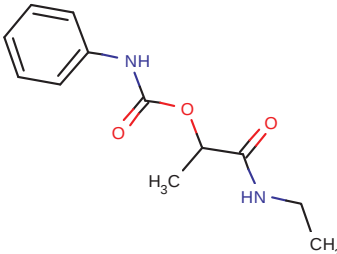
Wirkstoff		Carbamazepin	
Metabolit von			
CAS-No	298-46-4	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	236.0944	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	237.1022	17 pg
M+Na	☐	259.0842	4 pg
M-H	☐	235.0877	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		7.71 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.45	



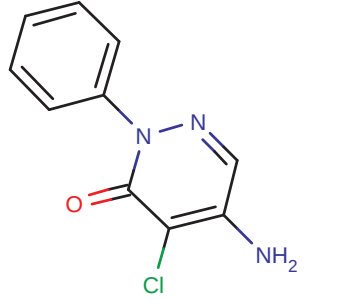
Wirkstoff		Carbendazim	
Metabolit von			
CAS-No	10605-21-7	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₉ H ₉ N ₃ O ₂	Wirkstoffgruppe	Biozid
Exakte Masse	191.0689	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	192.07676	6 pg
M+Na	☐	214.0587	350 pg
M-H	☐	190.06220	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		3.31 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		kationisch	
Kow-Wert		1.52	



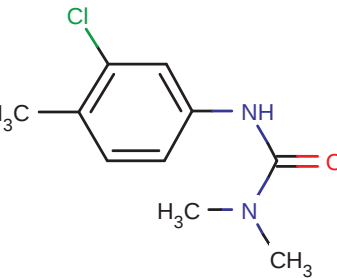
Wirkstoff		Carbetamide	
Metabolit von			
CAS-No	16118-49-3	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₂ H ₁₆ N ₂ O ₃	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	236.1155	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	237.1234	42 pg
M+Na	☐	259.1053	8 pg
M-H	☒	235.1088	17 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.55 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.63	



Wirkstoff		Chloridazon	
Metabolit von			
CAS-No	1698-60-8	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₀ H ₈ ClN ₃ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	221.035	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	222.04287	26 pg
M+Na	☐	244.0248	18 pg
M-H	☐	220.02832	412 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		5.17 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.14	



Wirkstoff		Chlortoluron	
Metabolit von			
CAS-No	15545-48-9	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₀ H ₁₃ ClN ₂ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	212.0711	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	213.0789	18 pg
M+Na	☐	235.0609	11 pg
M-H	☐	211.0644	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.21 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.41	



Wirkstoff

Clarithromycin

Metabolit von

CAS-No

81103-11-9

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C38H69NO13

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

747.4763

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

9.5 min

M+H



748.4842

6.3 pg

M+Na



770.4661

167 pg

M-H



764.4696

pg

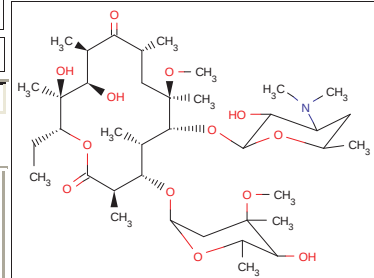
M-FA



pg

Kow-Wert

3.16



Wirkstoff

Clindamycin

Metabolit von

CAS-No

18323-44-9

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C18H33ClN2O5S1

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

424.17987

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

6.58 min

M+H



425.1871

pg

M+Na



447.1691

pg

M-H



423.1726

pg

M-FA



pg

Kow-Wert

2.16

Wirkstoff

Clofibrinsäure

Metabolit von

CAS-No

882-09-7

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C10H11ClO3

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

214.0391

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

10.01 min

M+H



215.0469

pg

M+Na



237.0289

pg

M-H



213.0324

10 pg

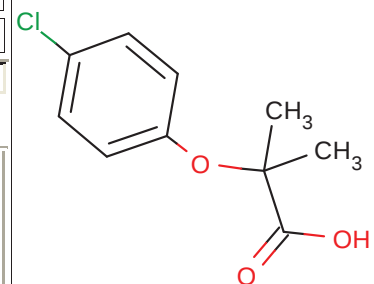
M-FA



pg

Kow-Wert

2.57



Wirkstoff

Clomazone

Metabolit von

CAS-No

81777-89-1

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C12H14ClNO2

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

239.0708

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

9.5 min

M+H



240.0786

8 pg

M+Na



262.0605

48 pg

M-H



238.064

pg

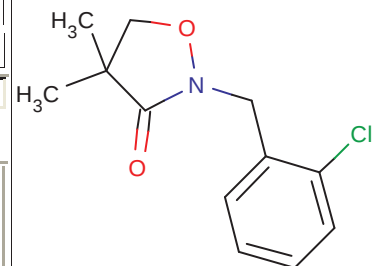
M-FA



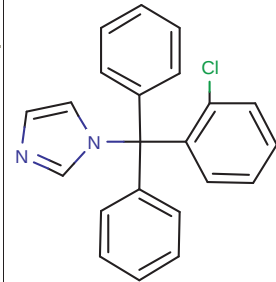
pg

Kow-Wert

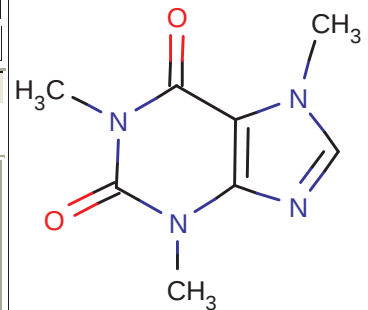
2.5



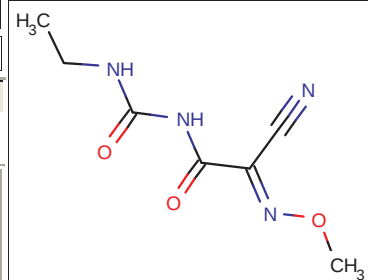
Wirkstoff		Clotrimazole	
Metabolit von			
CAS-No	23593-75-1	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₂₂ H ₁₇ ClN ₂	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	344.1075	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	345.1153	1.2 pg
M+Na	☐	367.0972	pg
M-H	☐	343.1007	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.58 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		neutral	
Kow-Wert		6.26	



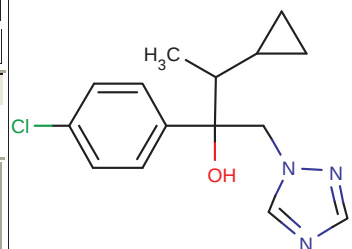
Wirkstoff		Coffein	
Metabolit von			
CAS-No	58-08-2	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	Wirkstoffgruppe	Tracer
Exakte Masse	194.0798	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	195.0877	29 pg
M+Na	☐	217.0696	1000 pg
M-H	☐	193.0731	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		3.9 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		neutral	
Kow-Wert		-0.07	



Wirkstoff		Cymoxanil	
Metabolit von			
CAS-No	57966-95-7	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₇ H ₉ N ₄ O ₃	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	198.0747	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	198.07475	pg
M+Na	☒	221.0645	42 pg
M-H	☐	196.06019	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		5.45 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		4.24	



Wirkstoff		Cyproconazol	
Metabolit von			
CAS-No	94361-06-5	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₅ H ₁₈ ClN ₃ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	291.1133	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	292.1211	5 pg
M+Na	☐	314.1031	5621 pg
M-H	☐	290.1066	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		11.21 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.9	



Wirkstoff

Cyprodinil

Metabolit von

CAS-No

121552-61-2

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₄H₁₅N₃

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

225.126

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

226.13388

6 pg

M+Na

☐

248.1158

pg

M-H

☐

224.11933

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

9.38 min

Speziierung pH3

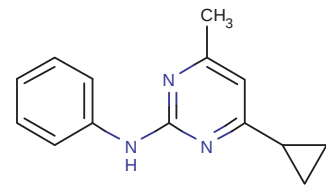
kationisch

pH7

neutral

Kow-Wert

4



Wirkstoff

Desmedipham

Metabolit von

CAS-No

13684-56-5

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₆H₁₆N₂O₄

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

300.1105

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

301.1183

64 pg

M+Na

☐

323.1002

10 pg

M-H

☐

299.1037

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

9.4 min

Speziierung pH3

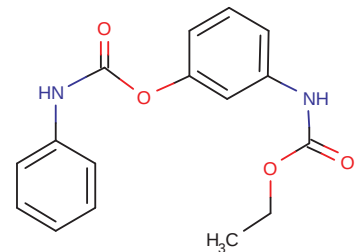
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

3.39



Wirkstoff

Diatrizoat (=Amidotrizoesäure)

Metabolit von

CAS-No

117-96-4

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₁H₉I₃N₂O₄

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

613.7691

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

614.7769

4547 pg

M+Na

☒

636.7589

2775 pg

M-H

☐

612.7624

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

1.8 min

Speziierung pH3

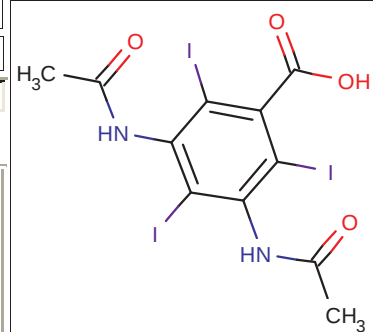
anionisch

pH7

anionisch

Kow-Wert

1.37



Wirkstoff

Diazinon

Metabolit von

CAS-No

333-41-5

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₂H₂₁N₂O₃P₁S₁

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

304.1005

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

305.10833

2 pg

M+Na

☐

327.0903

100 pg

M-H

☐

303.09378

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

13.01 min

Speziierung pH3

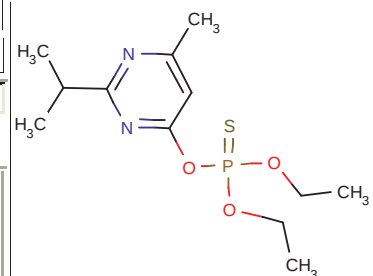
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

3.81



Wirkstoff

Dicamba

Metabolit von

CAS-No

1918-00-9

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₈H₆Cl₂O₃

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

219.9699

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

220.97668

0 pg

M+Na

☐

242.9586

0 pg

M-H

☒

218.96213

70 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

7.12 min

Speziierung pH3

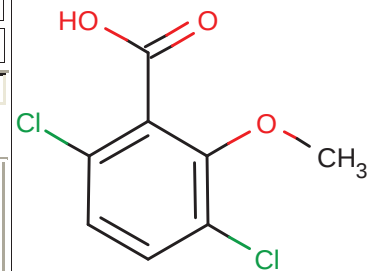
anionisch

pH7

anionisch

Kow-Wert

2.21



Wirkstoff

Dichlorprop

Metabolit von

CAS-No

120-36-5

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₉H₈O₃Cl₂

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

233.9845

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

234.9923

0 pg

M+Na

☐

256.9743

800 pg

M-H

☒

232.9778

15 pg

M-FA

☐

5000 pg

Retentionszeit

10.83 min

Speziierung pH3

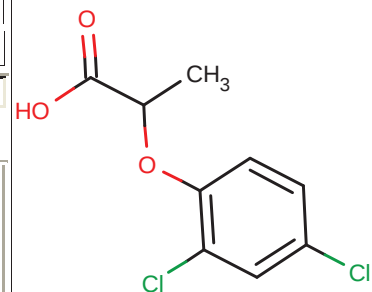
neutral

pH7

anionisch

Kow-Wert

3.43



Wirkstoff

Diclofenac

Metabolit von

CAS-No

15307-86-5

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₄H₁₁Cl₂N₁O₂

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

295.0161

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

296.02397

73 pg

M+Na

☐

318.0059

79 pg

M-H

☒

294.00941

22 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

12.88 min

Speziierung pH3

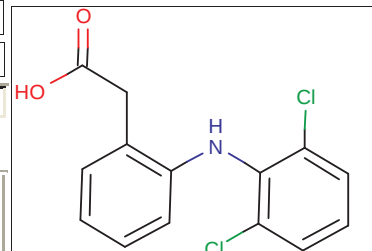
neutral

pH7

anionisch

Kow-Wert

4.51



Wirkstoff

Diflufenican

Metabolit von

CAS-No

83164-33-4

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₉H₁₁F₅N₂O₂

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

394.0735

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

395.0813

65 pg

M+Na

☐

417.0633

393 pg

M-H

☐

393.0668

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

14.55 min

Speziierung pH3

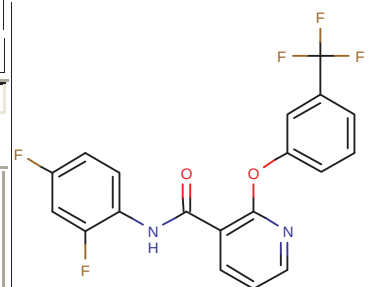
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

4.9



Wirkstoff

Dimethenamid

Metabolit von

CAS-No

87674-68-8

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₂H₁₈ClNO₂S

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

275.0741

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

276.082

14 pg

M+Na

☐

298.0639

6 pg

M-H

☐

274.0674

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

10.15 min

Speziierung pH3

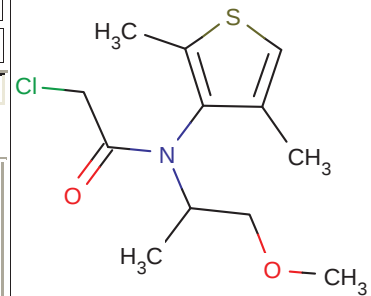
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

2.15



Wirkstoff

Dinoseb

Metabolit von

CAS-No

88-85-7

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₀H₁₂N₂O₅

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

240.0741

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

241.0819

0 pg

M+Na

☐

263.0638

0 pg

M-H

☒

239.0673

5 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

13.18 min

Speziierung pH3

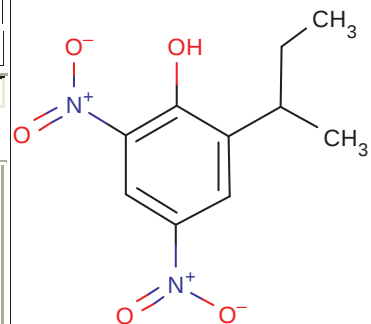
neutral

pH7

anionisch

Kow-Wert

3.56



Wirkstoff

Diuron

Metabolit von

CAS-No

330-54-1

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₉H₁₀Cl₂N₂O

Wirkstoffgruppe

Biozid

Exakte Masse

232.0165

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

233.0243

30 pg

M+Na

☐

255.0062

17 pg

M-H

☐

231.00975

1000 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

9.02 min

Speziierung pH3

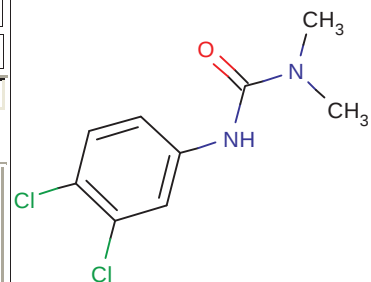
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

2.68



Wirkstoff

Epoxyconazol

Metabolit von

CAS-No

133855-98-8

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₇H₁₃ClFN₃O

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

329.0726

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

330.0804

9 pg

M+Na

☐

352.0623

388 pg

M-H

☐

328.0658

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

11.84 min

Speziierung pH3

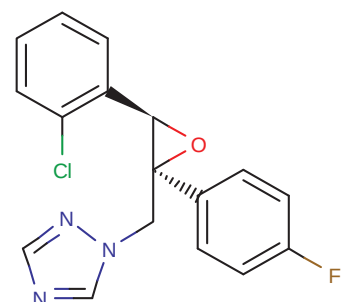
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

3.47



Wirkstoff

Erythromycin

Metabolit von

CAS-No

114-07-8

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C37H67NO13

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

733.4607

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

8 min

M+H



734.4685

13 pg

M+Na



756.4505

242 pg

M-H



732.454

pg

M-FA



pg

Kow-Wert

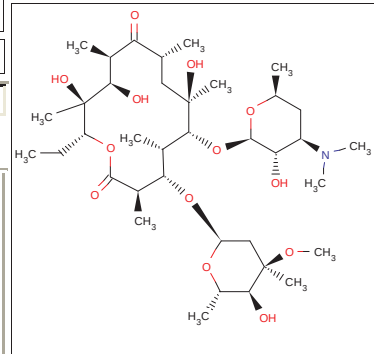
3.06

Speziierung pH3

kationisch

pH7

kationisch



Wirkstoff

Ethofumesate

Metabolit von

CAS-No

26225-79-6

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C13H18O5S1

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

286.0869

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

10.11 min

M+H



287.09478

88 pg

M+Na



309.0767

16 pg

M-H



285.08022

pg

M-FA



pg

Kow-Wert

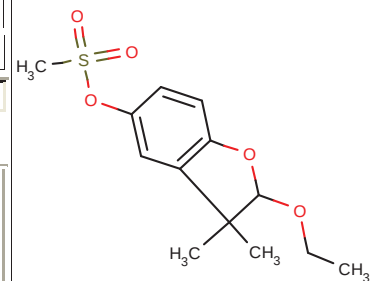
2.7

Speziierung pH3

neutral

pH7

neutral



Wirkstoff

Exemestane

Metabolit von

CAS-No

107868-30-4

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C20H24O2

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

296.1771

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

10.04 min

M+H



297.1849

pg

M+Na



319.1668

pg

M-H



295.1704

pg

M-FA



pg

Kow-Wert

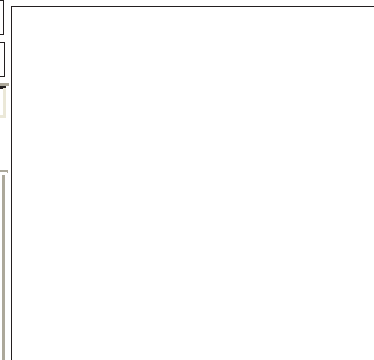
2.95

Speziierung pH3

neutral

pH7

neutral



Wirkstoff

Fenofibrate

Metabolit von

CAS-No

49562-28-9

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C20H21ClO4

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

360.1123

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

15.59 min

M+H



361.12012

0.8 pg

M+Na



383.1021

pg

M-H



359.10557

pg

M-FA



pg

Kow-Wert

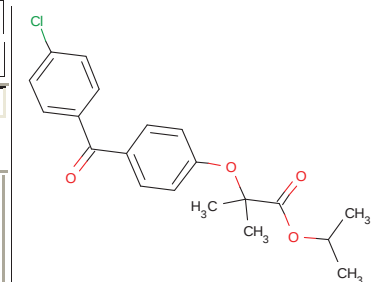
5.19

Speziierung pH3

neutral

pH7

neutral



Wirkstoff

Fenpropimorph

Metabolit von

CAS-No

67306-03-0

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C20H33NO

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

303.2557

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

304.2635

3 pg

M+Na

☐

326.2454

2559 pg

M-H

☐

302.2489

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

9.1 min

Speziierung pH3

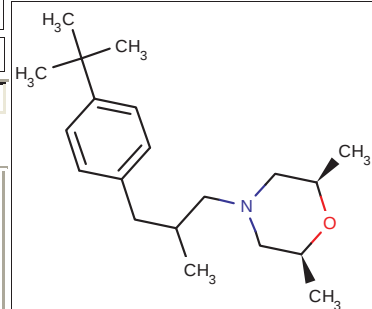
kationisch

pH7

kationisch

Kow-Wert

4.93



Wirkstoff

Fluazifop (freie Säure)

Metabolit von

CAS-No

69335-91-7

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C15H12F3NO4

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

327.0724

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

328.0791

17 pg

M+Na

☐

350.0611

31 pg

M-H

☒

326.0646

12 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

10.96 min

Speziierung pH3

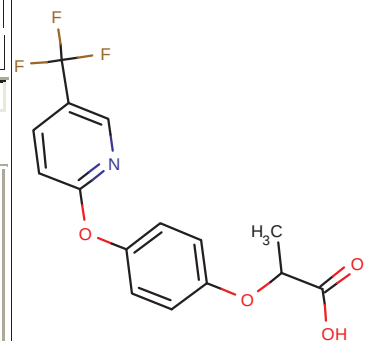
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

3.18



Wirkstoff

Fluconazole

Metabolit von

CAS-No

86386-73-4

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C13H12F2N6O

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

306.1035

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

307.113

0.2 pg

M+Na

☐

329.0933

pg

M-H

☐

305.0968

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

5.21 min

Speziierung pH3

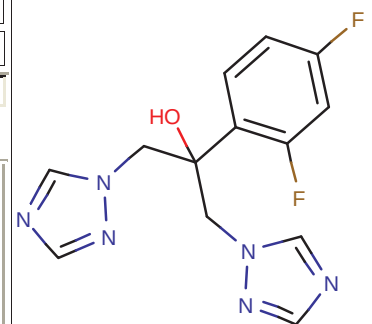
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

0.25



Wirkstoff

Fludioxonil

Metabolit von

CAS-No

131341-86-1

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C12H6F2N2O2

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

248.0392

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

249.047

12864 pg

M+Na

☐

271.029

16 pg

M-H

☒

247.0325

3 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

10.79 min

Speziierung pH3

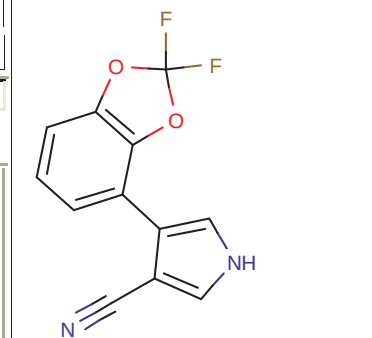
neutral

pH7

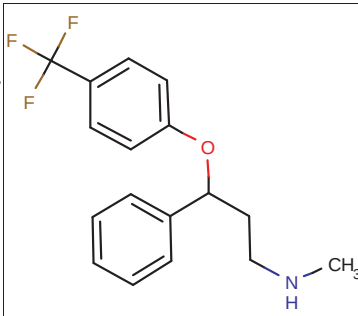
neutral

Kow-Wert

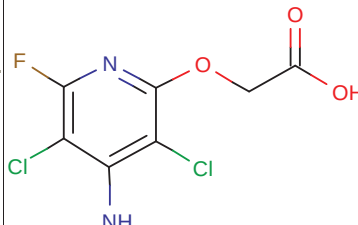
4.12



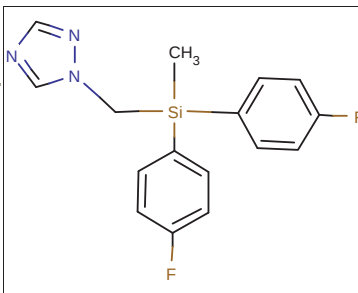
Wirkstoff		Fluoxetine HCl	
Metabolit von			
CAS-No	54910-89-3	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C17H18F3NO	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	309.1335	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	310.1413	0.2 pg
M+Na	☐	332.1233	pg
M-H	☐	308.1268	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		9.02 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		kationisch	
Kow-Wert		4.05	



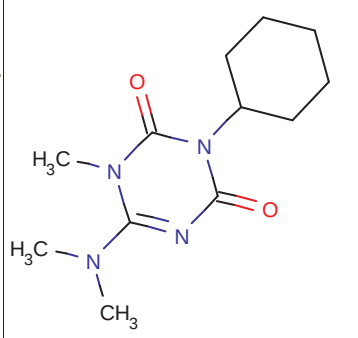
Wirkstoff		Fluroxypyr (freie Säure)	
Metabolit von			
CAS-No	69377-81-7	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C7H5Cl2FN2O3	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	253.9667	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	254.9734	546 pg
M+Na	☐	276.9553	346 pg
M-H	☒	252.9588	41 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.95 min	
Speziierung pH3		anionisch	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		1.17	



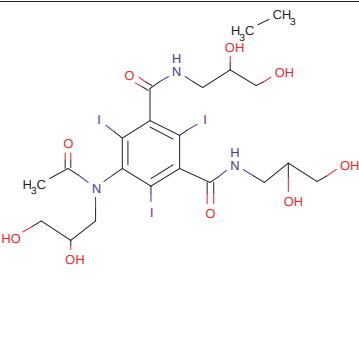
Wirkstoff		Flusilazole	
Metabolit von			
CAS-No	85509-19-9	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C16H15F2N3Si	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	315.0998	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	316.1076	4 pg
M+Na	☐	338.0896	1600 pg
M-H	☐	314.0931	7928 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		12.46 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		3.7	



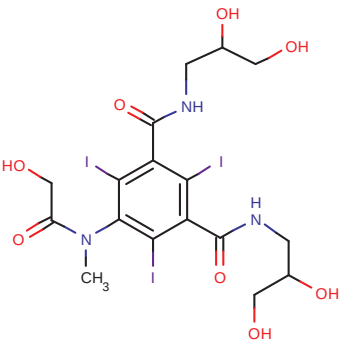
Wirkstoff		Hexazinon	
Metabolit von			
CAS-No	51235-04-2	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C12H20N4O2	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	252.1581	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	253.1659	6 pg
M+Na	☐	275.1478	10 pg
M-H	☐	251.1513	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		7.02 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.85	



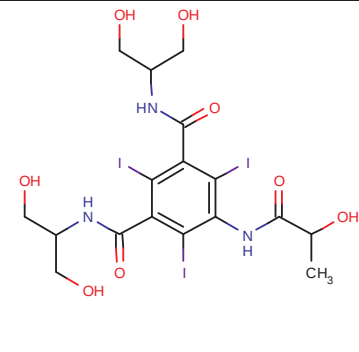
Wirkstoff		lohexol	
Metabolit von			
CAS-No	66108-95-0	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₉ H ₂₆ I ₃ N ₃ O ₉	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	820.8798	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	821.8876	14728 pg
M+Na	☐	843.8695	16372 pg
M-H	☐	819.873	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		1.6 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		-3.05	



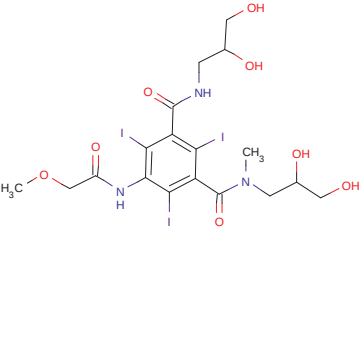
Wirkstoff		lomeprol	
Metabolit von			
CAS-No	78649-41-9	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₇ H ₂₂ I ₃ N ₃ O ₈	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	776.8535	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	777.8614	pg
M+Na	☐	799.8433	pg
M-H	☐	775.8468	923 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		1.2 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		-1.35	



Wirkstoff		lopamidol	
Metabolit von			
CAS-No	62883-00-5	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₇ H ₂₂ I ₃ N ₃ O ₈	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	776.8535	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	777.8614	pg
M+Na	☐	799.8433	pg
M-H	☐	775.8468	9236 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		1.2 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		-2.42	



Wirkstoff		lopromid	
Metabolit von			
CAS-No	73334-07-3	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₈ H ₂₄ I ₃ N ₃ O ₈	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	790.8692	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	791.877	pg
M+Na	☐	813.859	pg
M-H	☐	789.8625	721 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		2.6 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		-2.05	



Wirkstoff

Ioxitalaminsäure

Metabolit von

CAS-No

28179-44-4

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C12H11I3N2O5

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

643.7797

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

644.7875

pg

M+Na

☐

666.7694

pg

M-H

☐

642.7729

120.2

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

1.47 min

Speziierung pH3

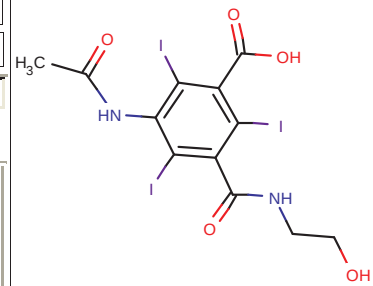
anionisch

pH7

anionisch

Kow-Wert

0.5



Wirkstoff

Ioxynil

Metabolit von

CAS-No

1689-83-4

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C7H3I2NO

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

370.8299

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

371.8377

pg

M+Na

☐

393.8196

pg

M-H

☒

369.8231

2 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

9.55 min

Speziierung pH3

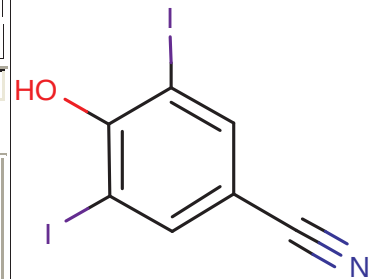
neutral

pH7

anionisch

Kow-Wert

3.43



Wirkstoff

IPBC (=Iodocarb)

Metabolit von

CAS-No

55406-53-6

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C8H12I1N1O2

Wirkstoffgruppe

Biozid

Exakte Masse

280.9907

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

281.9985

65

pg

M+Na

☐

303.9805

17

pg

M-H

☐

279.984

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

8.51 min

Speziierung pH3

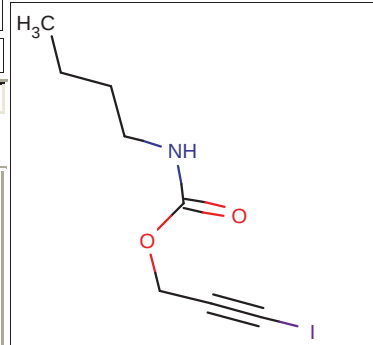
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

2.45



Wirkstoff

Irgarol

Metabolit von

CAS-No

28159-98-0

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C11H19N5S1

Wirkstoffgruppe

Biozid

Exakte Masse

253.1356

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

254.1434

2

pg

M+Na

☐

276.1253

1000

pg

M-H

☐

252.12885

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

8.91 min

Speziierung pH3

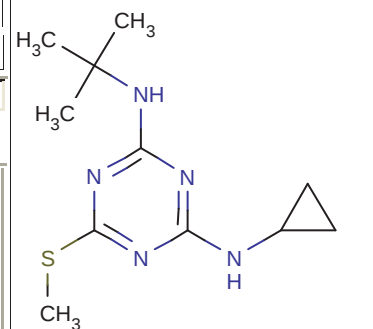
kationisch

pH7

neutral

Kow-Wert

4.07



Wirkstoff

Isoproturon

Metabolit von

CAS-No

34123-59-6

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₂H₁₈N₂O₁

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

206.1414

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

207.1492

8 pg

M+Na

☐

229.1311

8 pg

M-H

☐

205.13464

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

8.73 min

Speziierung pH3

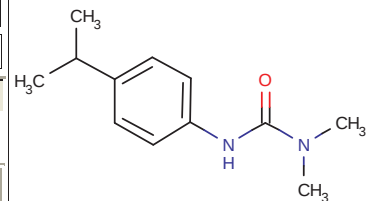
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

2.87



Wirkstoff

Ketoprofen

Metabolit von

CAS-No

22071-15-4

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₆H₁₄O₃

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

254.0937

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

255.1016

44 pg

M+Na

☐

277.0835

25 pg

M-H

☐

253.087

52 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

9.65 min

Speziierung pH3

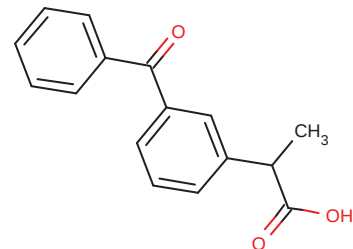
neutral

pH7

anionisch

Kow-Wert

3.12



Wirkstoff

Kresoxim-methyl

Metabolit von

CAS-No

143390-89-0

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₈H₁₉NO₄

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

313.1309

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

314.1387

165 pg

M+Na

☐

336.1206

7 pg

M-H

☐

312.1241

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

12.63 min

Speziierung pH3

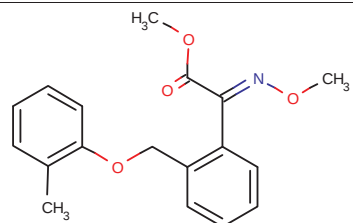
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

3.4



Wirkstoff

Linuron

Metabolit von

CAS-No

330-55-2

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₉H₁₀Cl₂N₂O₂

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

248.0114

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

249.0192

35 pg

M+Na

☐

271.0012

47 pg

M-H

☐

247.0047

4450 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

10.07 min

Speziierung pH3

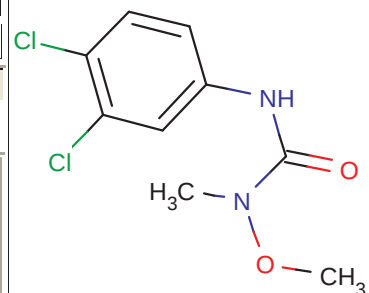
neutral

pH7

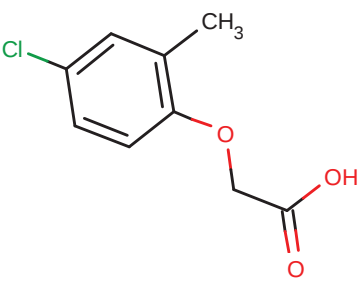
neutral

Kow-Wert

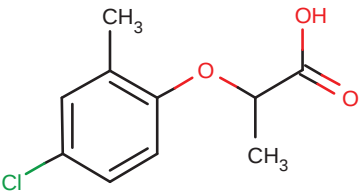
3.2



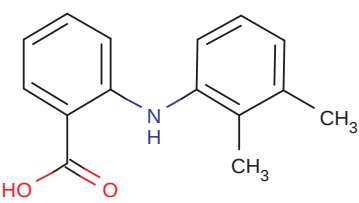
Wirkstoff		MCPA	
Metabolit von			
CAS-No	94-74-6	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₉ H ₉ ClO ₃	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	200.0235	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	201.0313	0 pg
M+Na	☐	223.0132	0 pg
M-H	☒	199.0167	12 pg
M-FA	☐		4500 pg
Retentionszeit		9.63 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		3.25	



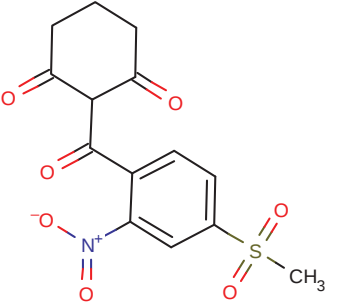
Wirkstoff		Mecoprop	
Metabolit von			
CAS-No	93-65-2	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₀ H ₁₁ ClO ₃	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	214.0391	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	215.0469	0 pg
M+Na	☐	237.0289	0 pg
M-H	☒	213.0324	10 pg
M-FA	☐		3000 pg
Retentionszeit		10.96 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		3.13	



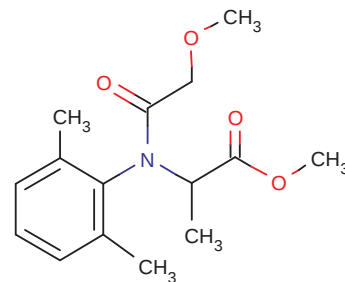
Wirkstoff		Mefenamic acid	
Metabolit von			
CAS-No	61-68-7	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₅ H ₁₅ N ₁ O ₂	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	241.1097	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	242.11756	21 pg
M+Na	☐	264.0995	842 pg
M-H	☒	240.10301	16 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		14.69 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		5.12	



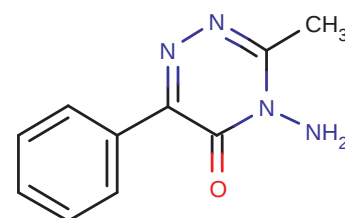
Wirkstoff		Mesotriol	
Metabolit von			
CAS-No	104206-82-8	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₄ H ₁₃ NO ₇ S	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	339.0407	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	340.0485	350 pg
M+Na	☐	362.0305	245 pg
M-H	☐	338.034	200 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.18 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.49	



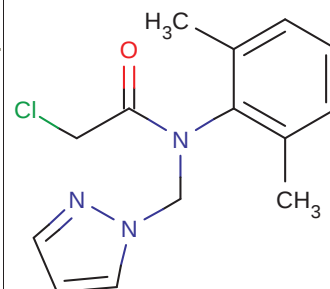
Wirkstoff		Metalexyl	
Metabolit von			
CAS-No	57837-19-1	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₅ H ₂₁ NO ₄	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	279.1465	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	280.1543	8 pg
M+Na	☐	302.1363	4 pg
M-H	☐	278.1398	25991 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.69 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.71	



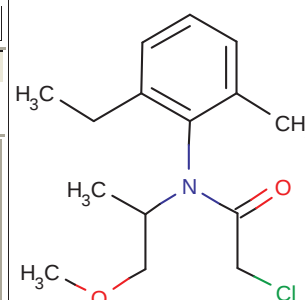
Wirkstoff		Metamitron	
Metabolit von			
CAS-No	41394-05-2	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₀ H ₁₀ N ₄ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	202.086	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	203.09274	6 pg
M+Na	☐	225.0747	91 pg
M-H	☐	201.07819	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		4.89 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		neutral	
Kow-Wert		0.83	



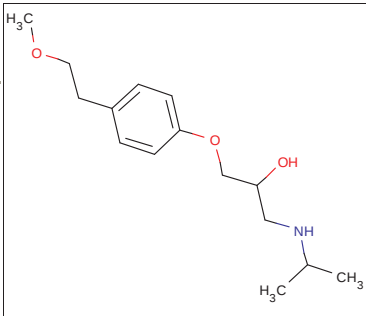
Wirkstoff		Metazachlor	
Metabolit von			
CAS-No	67129-08-2	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₄ H ₁₆ ClN ₃ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	277.0976	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	278.1055	22 pg
M+Na	☐	300.0874	8 pg
M-H	☐	276.0909	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.55 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.13	



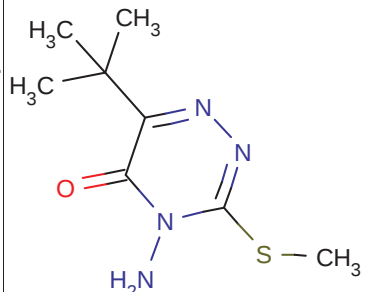
Wirkstoff		Metolachlor	
Metabolit von			
CAS-No	51218-45-2	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₅ H ₂₂ ClNO ₂	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	283.1334	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	284.1412	11 pg
M+Na	☐	306.1231	6 pg
M-H	☐	282.1266	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		11.81 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		3.13	



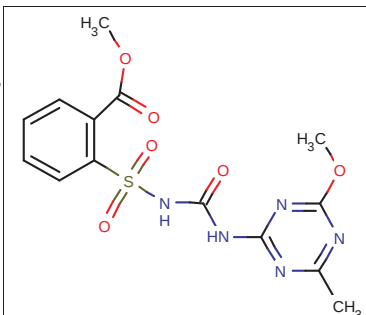
Wirkstoff		Metoprolol	
Metabolit von			
CAS-No	37350-58-6	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₅ H ₂₅ NO ₃	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	267.1829	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	268.1907	2 pg
M+Na	☐	290.1727	821 pg
M-H	☐	266.1762	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		4.89 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		kationisch	
Kow-Wert		1.88	



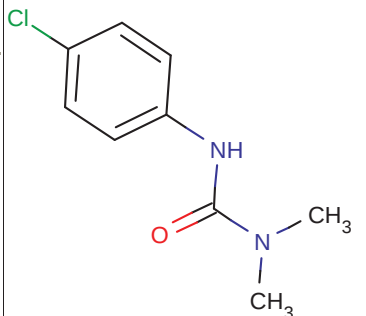
Wirkstoff		Metribuzin	
Metabolit von			
CAS-No	21087-64-9	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₈ H ₁₄ N ₄ O ₁ S ₁	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	214.0883	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	215.09611	5 pg
M+Na	☐	237.0781	3453 pg
M-H	☐	213.08156	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.9 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.7	



Wirkstoff		Metsulfuron-methyl	
Metabolit von			
CAS-No	74223-64-6	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₄ H ₁₅ N ₅ O ₆ S	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	381.0738	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	382.0816	46 pg
M+Na	☐	404.0635	28 pg
M-H	☒	380.067	17 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		7.12 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.2	



Wirkstoff		Monuron	
Metabolit von			
CAS-No	150-68-5	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₉ H ₁₁ ClN ₂ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	198.0554	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	199.0633	15 pg
M+Na	☐	221.0452	15 pg
M-H	☐	197.0487	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.74 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.94	



Wirkstoff		N,N-diethyl-3-methylbenzamide (DEET)	
Metabolit von			
CAS-No	134-62-3	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₂ H ₁₇ NO	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	191.1305	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	192.1383	4 pg
M+Na	☐	214.1202	10 pg
M-H	☐	190.1237	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.58 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.18	

Wirkstoff		Napropamid	
Metabolit von			
CAS-No	15299-99-7	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₇ H ₂₁ NO ₂	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	271.1567	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	272.1645	9 pg
M+Na	☐	294.1465	8 pg
M-H	☐	270.15	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		11.69 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		3.36	

Wirkstoff		Naproxen	
Metabolit von			
CAS-No	22204-53-1	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	230.0937	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	231.10158	1368 pg
M+Na	☐	253.0835	105 pg
M-H	☐	229.08702	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		10.19 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		3.18	

Wirkstoff		Nicosulfuron	
Metabolit von			
CAS-No	111991-09-4	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₅ H ₁₈ N ₆ O ₆ S	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	410.1003	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	411.1081	46 pg
M+Na	☐	433.0901	14 pg
M-H	☒	409.0936	30 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.99 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		0.01	

Wirkstoff

Octocrylene (=2-Ethyl-2-cyano-3,3-diphenylacrylate)

Metabolit von

CAS-No

6197-30-4

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₂₄H₂₇NO₂

Wirkstoffgruppe

Personal Care Product

Exakte Masse

361.2036

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

17.31 min

M+H



362.2115

88 pg

Speziierung pH3

neutral

M+Na



384.1934

5 pg

pH7

neutral

M-H



360.1969

pg

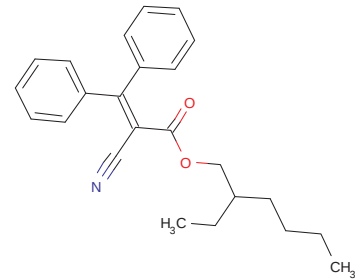
M-FA



pg

Kow-Wert

6.88



Wirkstoff

Orbencarb

Metabolit von

CAS-No

34622-58-7

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₂H₁₆ClNOS

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

257.0647

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

13.5 min

M+H



258.0714

17 pg

Speziierung pH3

neutral

M+Na



280.0533

14 pg

pH7

neutral

M-H



256.0568

pg

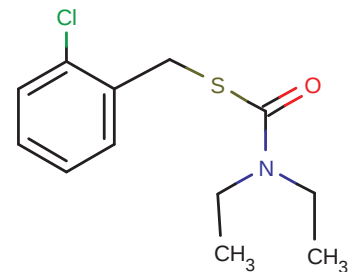
M-FA



pg

Kow-Wert

3.43



Wirkstoff

Oseltamivir

Metabolit von

CAS-No

196618-13-0

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₆H₂₈N₂O₄

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

312.2044

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

6.74 min

M+H



313.2122

pg

Speziierung pH3

kationisch

M+Na



335.1941

pg

pH7

kationisch

M-H



311.1976

pg

M-FA



pg

Kow-Wert

0.95

Wirkstoff

Pantoprazol

Metabolit von

CAS-No

102625-70-7

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₆H₁₅F₂N₃O₄S

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

383.0746

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

6.48 min

M+H



384.0824

pg

Speziierung pH3

kationisch

M+Na



406.0644

pg

pH7

neutral

M-H



382.0679

pg

M-FA



pg

Kow-Wert

1.27

Wirkstoff		Paracetamol	
Metabolit von			
CAS-No	103-90-2	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₈ H ₉ N ₁ O ₂	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	151.0628	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	152.0706	pg
M+Na	☐	174.0525	75 pg
M-H	☐	150.0561	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		2.37 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		0.46	

Wirkstoff		Phenazon	
Metabolit von			
CAS-No	60-80-0	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	188.0944	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	189.1022	0.1 pg
M+Na	☐	211.0842	pg
M-H	☐	187.0877	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		4.58 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		0.38	

Wirkstoff		Phenmedipham	
Metabolit von			
CAS-No	13684-63-4	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₆ H ₁₆ N ₂ O ₄	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	300.1116	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	301.11829	64 pg
M+Na	☐	323.1002	10 pg
M-H	☐	299.10374	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		9.4 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		3.59	

Wirkstoff		Primidon	
Metabolit von			
CAS-No	125-33-7	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₂	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	218.105	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	219.1128	65 pg
M+Na	☐	241.0947	33 pg
M-H	☐	217.0983	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		5.25 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		0.91	

Wirkstoff

Prochloraz

Metabolit von

CAS-No

67747-09-5

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C15H16Cl3N3O2

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

375.0303

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

376.03809

13

pg

M+Na

☐

398.02

pg

M-H

☐

374.02354

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

12

min

Speziierung pH3

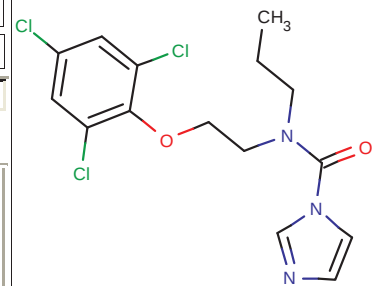
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

4.1



Wirkstoff

Prometon

Metabolit von

CAS-No

1610-18-0

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C10H19N5O

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

225.1584

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

226.1662

1

pg

M+Na

☐

248.1482

436

pg

M-H

☐

224.1517

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

6.51

min

Speziierung pH3

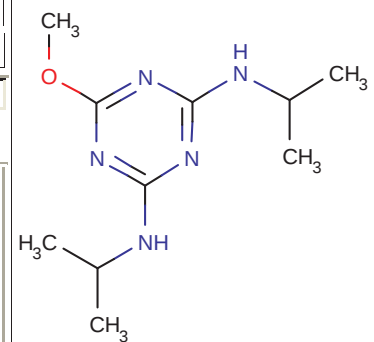
kationisch

pH7

neutral

Kow-Wert

2.99



Wirkstoff

Prometryn

Metabolit von

CAS-No

7287-19-6

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C10H19N5S

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

241.1356

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

242.1434

3

pg

M+Na

☐

264.1253

939

pg

M-H

☐

240.1288

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

8.28

min

Speziierung pH3

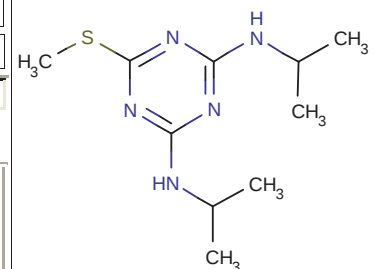
kationisch

pH7

neutral

Kow-Wert

3.51



Wirkstoff

Propanolol

Metabolit von

CAS-No

525-66-6

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C16H21NO2

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

259.1567

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

260.1645

2

pg

M+Na

☐

282.1465

942

pg

M-H

☐

258.15

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

6.39

min

Speziierung pH3

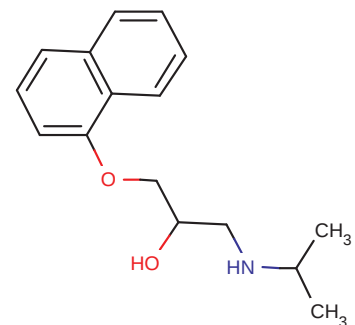
kationisch

pH7

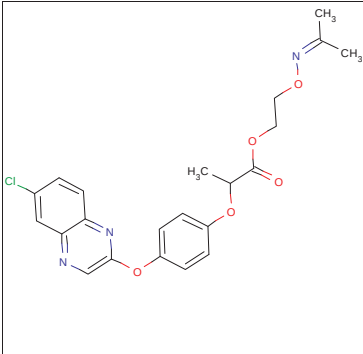
kationisch

Kow-Wert

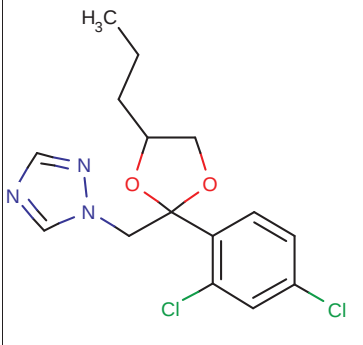
3.48



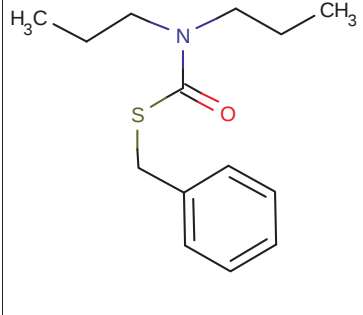
Wirkstoff		Propaquizafop	
Metabolit von			
CAS-No	111479-05-1	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C22H22ClN3O5	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	443.1242	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	444.1321	40 pg
M+Na	☐	466.114	13 pg
M-H	☐	442.1175	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		15.25 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		4.6	



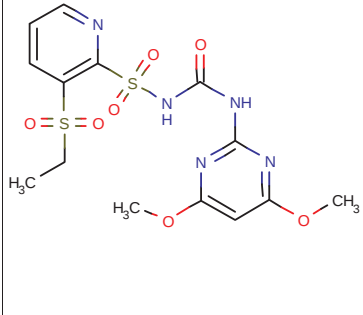
Wirkstoff		Propiconazol	
Metabolit von			
CAS-No	60207-90-1	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C15H17Cl2N3O2	Wirkstoffgruppe	Biozid
Exakte Masse	341.0692	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	342.0771	13 pg
M+Na	☐	364.059	96 pg
M-H	☐	340.0625	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		13.25 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		3.72	



Wirkstoff		Prosulfocarb	
Metabolit von			
CAS-No	52888-80-9	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C14H21NOS	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	251.1349	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	252.1417	11 pg
M+Na	☐	274.1236	9 pg
M-H	☐	250.1271	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		14.64 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		4.65	



Wirkstoff		Rimsulfuron	
Metabolit von			
CAS-No	122931-48-0	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C14H17N5O7S2	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	431.0564	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	432.0642	63 pg
M+Na	☐	454.0462	31 pg
M-H	☒	430.0497	21 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		7.85 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		0.03	



Wirkstoff

Roxithromycin

Metabolit von

CAS-No

80214-83-1

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₄₁H₇₆N₂O₁₅

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

836.524

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

9.78 min

M+H



837.5318

24 pg

M+Na



859.5138

81 pg

M-H



835.5172

pg

M-FA



pg

Kow-Wert

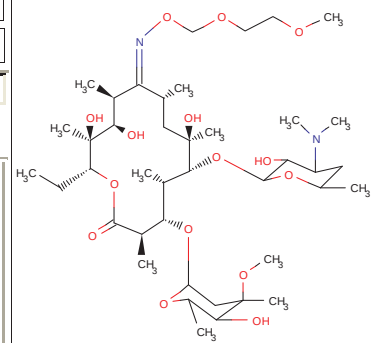
2.75

Speziierung pH3

kationisch

pH7

kationisch



Wirkstoff

Sebuthylazine

Metabolit von

CAS-No

7286-69-3

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₉H₁₆ClN₅

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

229.1089

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

10.19 min

M+H



230.1167

pg

M+Na



252.0986

pg

M-H



228.1021

pg

M-FA



pg

Kow-Wert

3.31

Speziierung pH3

neutral

pH7

neutral

Wirkstoff

Secbumeton

Metabolit von

CAS-No

26259-45-0

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₀H₁₉N₅O₁

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

225.1584

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

6.67 min

M+H



226.1662

pg

M+Na



248.1482

pg

M-H



224.1517

pg

M-FA



pg

Kow-Wert

3.64

Speziierung pH3

kationisch

pH7

neutral

Wirkstoff

Simazin

Metabolit von

CAS-No

122-34-9

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₇H₁₂ClN₅

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

201.0776

Int. Standard



Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

6.9 min

M+H



202.0854

16 pg

M+Na



224.0673

0 pg

M-H



200.0708

0 pg

M-FA



pg

Kow-Wert

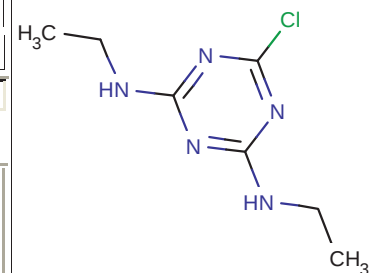
2.18

Speziierung pH3

neutral

pH7

neutral



Wirkstoff

Simeton

Metabolit von

CAS-No

673-04-1

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C8H15N5O1

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

197.1271

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

198.1349

pg

M+Na

☐

220.1169

pg

M-H

☐

196.1204

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

4.91 min

Speziierung pH3

kationisch

pH7

neutral

Kow-Wert

2.73

Wirkstoff

Sotalol

Metabolit von

CAS-No

3930-20-9

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C12H20N2O3S

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

272.1189

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

273.1267

36 pg

M+Na

☐

295.1087

pg

M-H

☐

271.1122

9662 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

1.7 min

Speziierung pH3

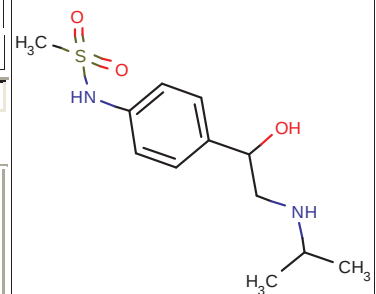
kationisch

pH7

kationisch

Kow-Wert

0.24



Wirkstoff

Sulcotrione

Metabolit von

CAS-No

99105-77-8

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C14H13ClO5S1

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

328.0167

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

329.02450

120 pg

M+Na

☐

351.0064

80 pg

M-H

☒

327.00995

70 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

6.82 min

Speziierung pH3

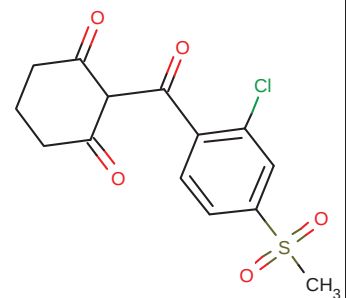
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

2.31



Wirkstoff

Sulfadiazine

Metabolit von

CAS-No

68-35-9

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C10H10N4O2S

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

250.0519

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

251.0597

280 pg

M+Na

☐

273.0417

179 pg

M-H

☐

249.0452

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

2.37 min

Speziierung pH3

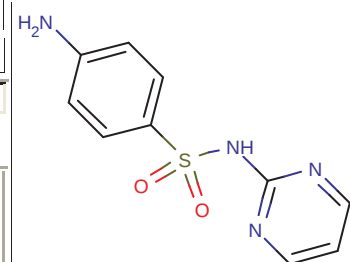
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

-0.09



Wirkstoff		Sulfadimethoxine	
Metabolit von			
CAS-No	122-11-2	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	310.073	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	311.0809	15 pg
M+Na	☐	333.0628	12 pg
M-H	☐	309.0663	65 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		5.63 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.63	

Wirkstoff		Sulfamethazine	
Metabolit von			
CAS-No	57-68-1	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₂ S	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	278.0832	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	279.091	20 pg
M+Na	☐	301.073	29 pg
M-H	☐	277.0765	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		3.79 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		0.89	

Wirkstoff		Sulfamethoxazole	
Metabolit von			
CAS-No	723-46-6	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	253.0516	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	254.05939	32 pg
M+Na	☐	276.0413	16 pg
M-H	☐	252.04484	2200 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		4.5 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		0.89	

Wirkstoff		Sulfapyridin	
Metabolit von			
CAS-No	144-83-2	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₁ H ₁₁ N ₃ O ₂ S	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	249.0566	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	250.0645	57 pg
M+Na	☐	272.0464	56 pg
M-H	☐	248.0499	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		2.97 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		0.35	

Wirkstoff

Sulfathiazole

Metabolit von

CAS-No

72-14-0

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₉H₉N₃O₂S₂

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

255.0131

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

256.0209

72 pg

M+Na

☐

278.0028

73 pg

M-H

☐

254.0063

136 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

2.82 min

Speziierung pH3

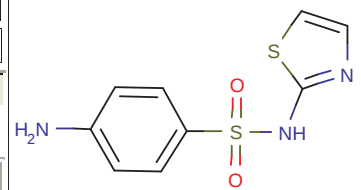
kationisch

pH7

neutral

Kow-Wert

0.05



Wirkstoff

Tebuconazole

Metabolit von

CAS-No

107534-96-3

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₆H₂₃ClN₃O

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

307.1446

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

308.1524

299.4 pg

M+Na

☒

330.1344

pg

M-H

☐

306.1379

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

13.05 min

Speziierung pH3

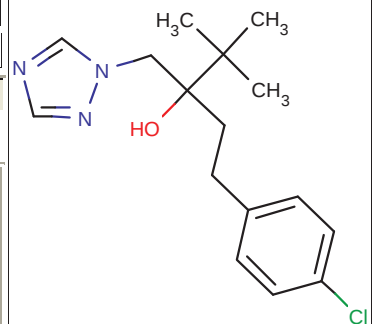
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

3.7



Wirkstoff

Tebutam

Metabolit von

CAS-No

35256-85-0

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₅H₂₃NO

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

233.1774

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

234.1852

5 pg

M+Na

☐

256.1672

6 pg

M-H

☐

232.1707

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

11.78 min

Speziierung pH3

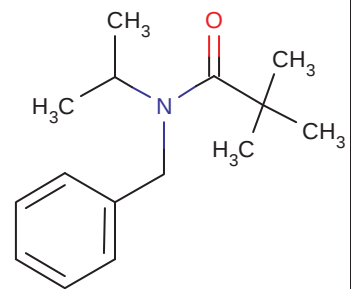
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

3



Wirkstoff

Terbumeton

Metabolit von

CAS-No

33693-04-8

Klassifizierung

Muttersubstanz

Summenformel

C₁₀H₁₉N₅O

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

225.1584

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

226.1662

pg

M+Na

☐

248.1428

pg

M-H

☐

224.1517

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

6.55 min

Speziierung pH3

kationisch

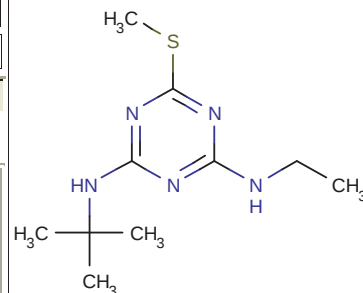
pH7

neutral

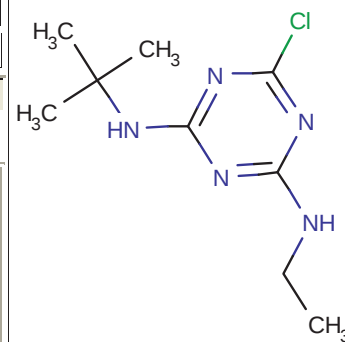
Kow-Wert

3.1

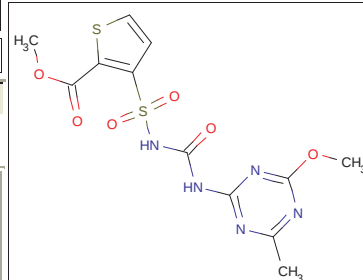
Wirkstoff		Terbutryn	
Metabolit von			
CAS-No	886-50-0	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C10H19N5S1	Wirkstoffgruppe	Biozid
Exakte Masse	241.1356	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	242.1434	3 pg
M+Na	☐	264.1253	1000 pg
M-H	☐	240.12885	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.28 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		neutral	
Kow-Wert		3.74	



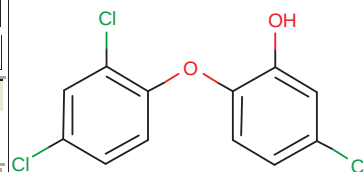
Wirkstoff		Terbutylazin	
Metabolit von			
CAS-No	5915-41-3	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C9H16ClN5	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	229.1089	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	230.1167	8 pg
M+Na	☐	252.0986	3500 pg
M-H	☐	228.1021	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		10.19 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		3.21	



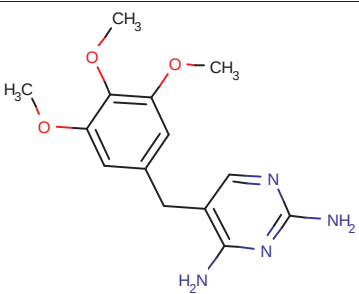
Wirkstoff		Thifensulfuron-methyl	
Metabolit von			
CAS-No	79277-27-3	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C12H13N5O6S2	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	387.0302	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	388.038	125 pg
M+Na	☐	410.0199	78 pg
M-H	☒	386.0234	33 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.86 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.56	



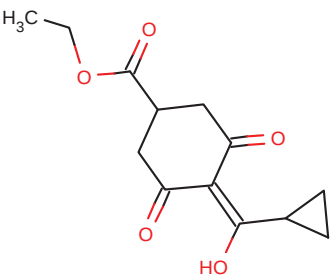
Wirkstoff		Triclosan	
Metabolit von			
CAS-No	3380-34-5	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C12H7Cl3O2	Wirkstoffgruppe	Biozid
Exakte Masse	287.9506	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	288.95844	pg
M+Na	☐	310.9404	pg
M-H	☒	286.94389	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		15.03 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		4.76	



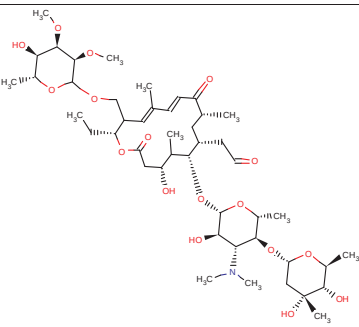
Wirkstoff		Trimethoprim	
Metabolit von			
CAS-No	738-70-5	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₄ H ₁₈ N ₄ O ₃	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	290.1373	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	291.14517	2 pg
M+Na	☐	312.1271	pg
M-H	☐	289.13062	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		3.68 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		neutral	
Kow-Wert		0.91	



Wirkstoff		Trinexapac-ethyl	
Metabolit von			
CAS-No	95266-40-3	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₃ H ₁₆ O ₅	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	252.0992	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	253.1071	48 pg
M+Na	☐	275.089	32 pg
M-H	☐	251.0925	770 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.98 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		1.6	



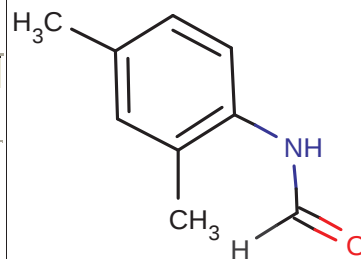
Wirkstoff		Tylosin	
Metabolit von			
CAS-No	1401-69-0	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₄₆ H ₇₇ NO ₁₇	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	915.5186	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	916.5264	165 pg
M+Na	☐	938.5084	pg
M-H	☐	914.5119	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		7.92 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		kationisch	
Kow-Wert		1.63	



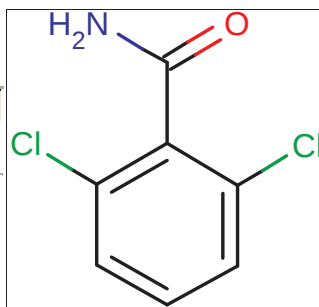
Wirkstoff		Venlafaxine	
Metabolit von			
CAS-No	93413-69-5	Klassifizierung	Muttersubstanz
Summenformel	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	277.2036	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	278.2115	pg
M+Na	☐	300.1934	pg
M-H	☐	276.1969	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.01 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		kationisch	
Kow-Wert		3.28	

Wirkstoff	Verapamil HCl				
Metabolit von					
CAS-No	152-11-4	Klassifizierung	Muttersubstanz		
Summenformel	C ₂₇ H ₃₈ N ₂ O ₄	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika		
Exakte Masse	454.2826	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	7.11 min
M+H	☒	455.2904	pg	Speziierung pH3	kationisch
M+Na	☐	477.2724	pg	pH7	kationisch
M-H	☐	453.2759	pg	Kow-Wert	4.8
M-FA	☐		pg		

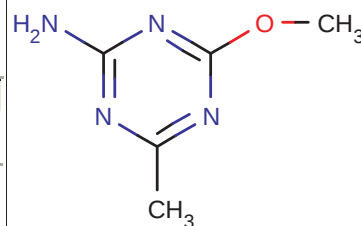
Wirkstoff	2,4-dimethylphenylformamide				
Metabolit von	Amitraz				
CAS-No	60397-77-5	Klassifizierung	Metabolit		
Summenformel	C ₉ H ₁₁ NO	Wirkstoffgruppe	Pestizid		
Exakte Masse	149.0835	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	6.59 min
M+H	☒	150.0913	0.5 pg	Speziierung pH3	neutral
M+Na	☐	172.0733	pg	pH7	neutral
M-H	☐	148.0768	pg	Kow-Wert	2.23
M-FA	☐		pg		



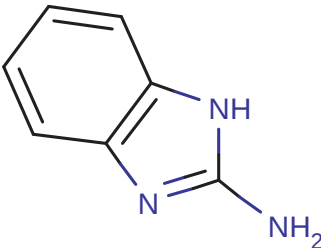
Wirkstoff	2,6-Dichlorbenzamid				
Metabolit von	Dichlobenil				
CAS-No	2008-58-4	Klassifizierung	Metabolit		
Summenformel	C ₇ H ₅ Cl ₂ NO	Wirkstoffgruppe	Pestizid		
Exakte Masse	188.9743	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	3.86 min
M+H	☒	189.9821	63 pg	Speziierung pH3	neutral
M+Na	☐	211.964	46 pg	pH7	neutral
M-H	☐	187.9675	13989 pg	Kow-Wert	0.77
M-FA	☐		pg		



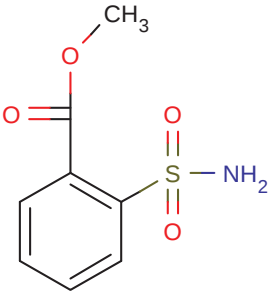
Wirkstoff	2-Amino-4-methoxy-6-methyl-1,3,5 triazin				
Metabolit von	Thifensulfuron-methyl /Metsulfuron-methyl				
CAS-No	1668-54-8	Klassifizierung	Metabolit		
Summenformel	C ₅ H ₈ N ₄ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid		
Exakte Masse	140.0693	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	1.74 min
M+H	☒	141.0771	3129 pg	Speziierung pH3	neutral
M+Na	☐	163.059	7008 pg	pH7	neutral
M-H	☐	139.0625	pg	Kow-Wert	1.26
M-FA	☐		pg		



Wirkstoff		2-Aminobenzimidazole	
Metabolit von Carbendazim			
CAS-No	934-32-7	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C7H7N3	Wirkstoffgruppe	Biozid
Exakte Masse	133.0634	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	134.07128	pg
M+Na	☐	156.0532	pg
M-H	☐	132.05672	1615 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		2.66 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		kationisch	
Kow-Wert		0.91	

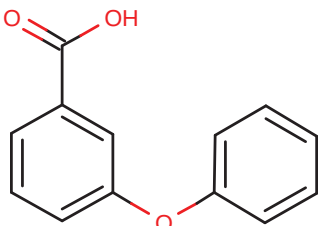


Wirkstoff		2-Aminosulfonyl-benzoic acid-methylester (=Methyl-2-(aminosulfonyl)benzoate)	
Metabolit von Metsulfuron-methyl / Tribenuron			
CAS-No	57683-71-3	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C8H9NO4S	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	215.0247	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	216.0325	946 pg
M+Na	☐	238.0144	11 pg
M-H	☐	214.018	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		4.27 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		0.01	



Wirkstoff		3,5-dibromo-4-hydroxybenzoic acid	
Metabolit von Bromoxynil			
CAS-No	3337-62-0	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C7H4Br2NO3	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse		Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	308.86307	pg
M+Na	☐		pg
M-H	☒	306.84852	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit			
Speziierung pH3			
pH7			
Kow-Wert		3.17	

Wirkstoff		3-Phenoxybenzoic acid	
Metabolit von Permethrin			
CAS-No	3739-38-6	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C13H10O3	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	214.0624	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	215.0703	pg
M+Na	☐	237.0522	pg
M-H	☒	213.0557	13.7 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		11.17 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		3.91	



Wirkstoff

3-Phenoxybenzyl alcohol

Metabolit von

Permethrin

CAS-No

13826-35-2

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C₁₃H₁₂O₂

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

200.0843

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

201.091

174.2 pg

M+Na

☐

223.073

pg

M-H

☐

199.0765

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

7.38 min

Speziierung pH3

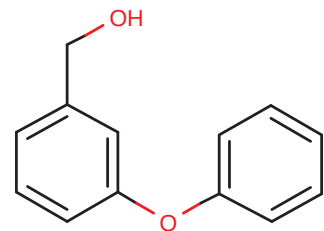
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

3.13



Wirkstoff

4-Acetamidoantipyrin (=N-Acetyl-4-Aminoantipyrin)

Metabolit von

Metamizol

CAS-No

83-15-8

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C₁₃H₁₅N₃O₂

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

245.1159

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

246.1237

9 pg

M+Na

☐

268.1056

4 pg

M-H

☐

244.1092

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

3.72 min

Speziierung pH3

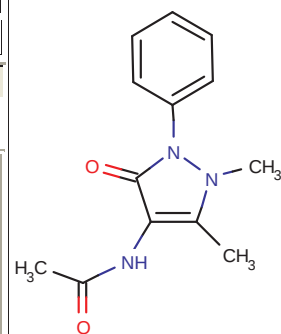
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

-0.13



Wirkstoff

4-chlor-2-methylphenol

Metabolit von

Mecoprop

CAS-No

74-11-3

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C₇H₇ClO

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

142.018

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

143.0258

0 pg

M+Na

☐

165.0078

0 pg

M-H

☒

141.0113

250 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

11 min

Speziierung pH3

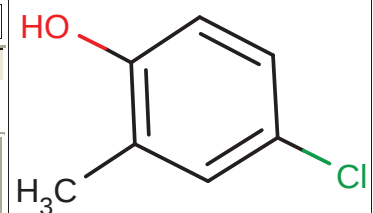
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

2.63



Wirkstoff

4-Isopropylanilin

Metabolit von

Isoproturon

CAS-No

99-88-7

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C₉H₁₃N

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

135.1043

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

136.1121

4946 pg

M+Na

☐

158.094

pg

M-H

☐

134.0975

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

5.05 min

Speziierung pH3

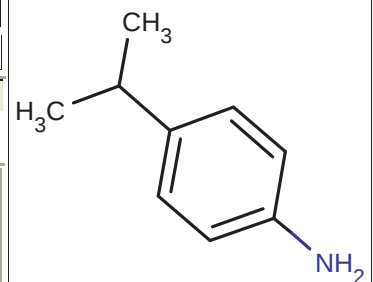
kationisch

pH7

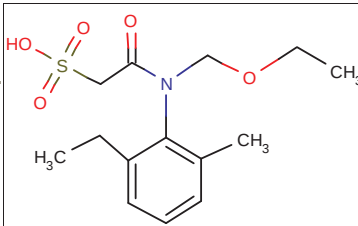
neutral

Kow-Wert

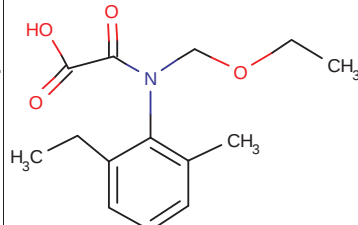
2.49



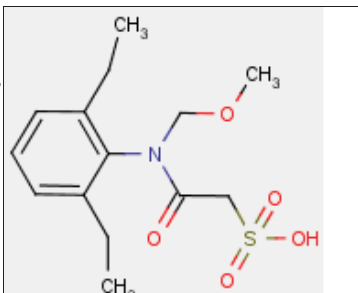
Wirkstoff		Acetochlor-ESA	
Metabolit von		Acetochlor	
CAS-No		Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	315.1135	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	316.1213	1126 pg
M+Na	☐	338.1033	pg
M-H	☒	314.1068	16 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.22 min	
Speziierung pH3		anionisch	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		1.82	



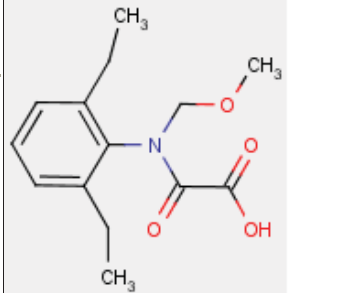
Wirkstoff		Acetochlor-OXA	
Metabolit von		Acetochlor	
CAS-No		Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₄ H ₁₉ NO ₄	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	265.132	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	266.1387	17868 pg
M+Na	☐	288.1206	341 pg
M-H	☒	264.1241	22 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.89 min	
Speziierung pH3		anionisch	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		1.55	



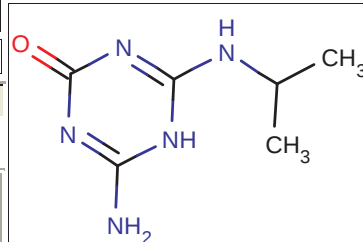
Wirkstoff		Alachlor-ESA	
Metabolit von		Alachlor	
CAS-No	140939-15-7	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₄ H ₂₁ NO ₅ S	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	315.1135	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	316.1213	pg
M+Na	☐	338.1033	pg
M-H	☒	314.1068	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.04 min	
Speziierung pH3		anionisch	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		1.82	



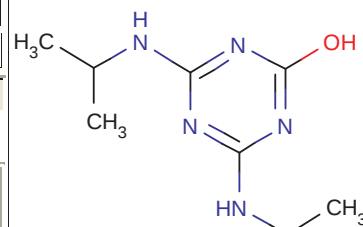
Wirkstoff		Alachlor-OXA	
Metabolit von		Alachlor	
CAS-No	171262-17-2	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₄ H ₁₉ NO ₄	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	265.132	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	266.1387	pg
M+Na	☐	288.1206	pg
M-H	☒	264.1241	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		7.87 min	
Speziierung pH3		anionisch	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		1.55	



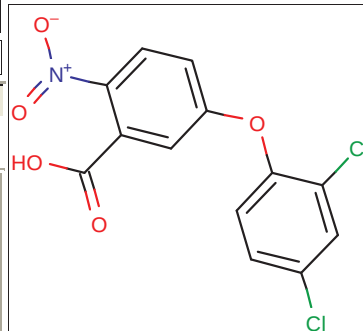
Wirkstoff		Atrazin-desethyl-2-hydroxy (=Prometon-Hydroxy-Desisopropyl)	
Metabolit von Prometon/Atrazin			
CAS-No	19988-24-0	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₆ H ₁₁ N ₅ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	169.0958	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	170.1036	8 pg
M+Na	☐	192.0856	0 pg
M-H	☐	168.0891	800 pg
M-FA	☐		33000 pg
Retentionszeit		1.41 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		neutral	
Kow-Wert		-2.7	



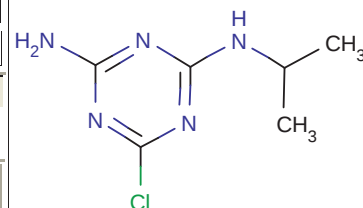
Wirkstoff		Atrazine-2-Hydroxy	
Metabolit von Atrazine			
CAS-No	2163-68-0	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₈ H ₁₅ N ₅ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	197.1271	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	198.1349	4 pg
M+Na	☐	220.1169	250 pg
M-H	☐	196.1204	100 pg
M-FA	☐		1000 pg
Retentionszeit		4.18 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.09	



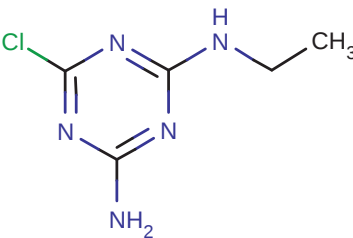
Wirkstoff		Bifenox-Säure	
Metabolit von Bifenox			
CAS-No	53774-07-5	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₃ H ₇ Cl ₂ NO ₅	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	326.9707	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	327.9774	pg
M+Na	☐	349.9593	pg
M-H	☒	325.9629	31 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		12.14 min	
Speziierung pH3		anionisch	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		3.86	



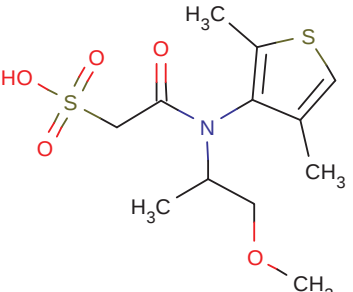
Wirkstoff		Desethylatrazin	
Metabolit von Atrazine			
CAS-No	6190-65-4	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₆ H ₁₀ ClN ₅	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	187.0619	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	188.0697	8 pg
M+Na	☐	210.0517	0 pg
M-H	☐	186.0552	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		5.52 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.51	



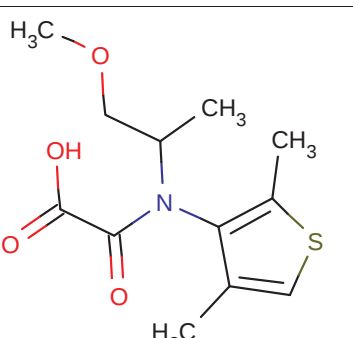
Wirkstoff		Desisopropylatrazin	
Metabolit von Atrazine			
CAS-No	1007-28-9	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₅ H ₈ ClN ₅	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	173.0463	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	174.0541	11 pg
M+Na	☐	196.036	0 pg
M-H	☐	172.0395	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		4.27 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.15	



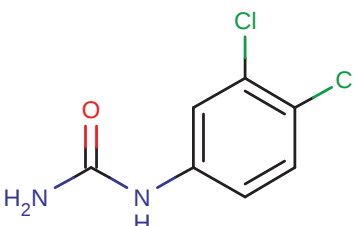
Wirkstoff		Dimethenamid-ESA	
Metabolit von Dimethenamid			
CAS-No		Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₂ H ₁₉ N ₁ O ₅ S ₂	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	321.0699	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	322.0777	0 pg
M+Na	☐	344.0597	0 pg
M-H	☒	320.0632	19 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.82 min	
Speziierung pH3		anionisch	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		1.02	



Wirkstoff		Dimethenamid-OXA	
Metabolit von Dimethenamid			
CAS-No		Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₂ H ₁₇ N ₁ O ₄ S ₁	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	271.0873	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	272.0951	130 pg
M+Na	☐	294.077	75 pg
M-H	☒	270.0806	20 pg
M-FA	☐		13000 pg
Retentionszeit		7.47 min	
Speziierung pH3		anionisch	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		0.75	



Wirkstoff		Diuron-desdimethyl = 1-(3,4-Dichlorophenyl)urea	
Metabolit von Diuron			
CAS-No	2327-02-8	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₇ H ₆ Cl ₂ N ₂ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	203.9852	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	204.993	90 pg
M+Na	☐	226.9749	180 pg
M-H	☒	202.9784	20 pg
M-FA	☐		20 pg
Retentionszeit		8.29 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.65	



Wirkstoff

Diuron-desmonomethyl (DCPMU) = 1-(3,4-Dichlorophenyl)-3-methylurea

Metabolit von

Diuron

CAS-No

3567-62-2

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C₈H₈Cl₂N₂O

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

218.0008

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

219.0086

50 pg

M+Na

☐

240.9906

55 pg

M-H

☒

216.9941

15 pg

M-FA

☐

15 pg

Retentionszeit

8.87 min

Speziierung pH3

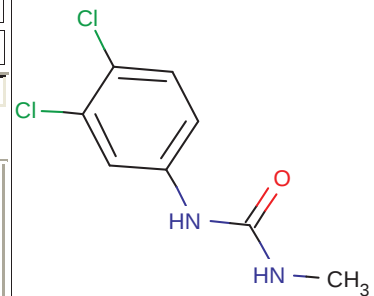
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

2.94



Wirkstoff

DMSA (=N,N-Dimethylaminosulfanilid)

Metabolit von

Dichlofluand

CAS-No

4710-17-2

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C₈H₁₂N₂O₂S

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

200.0614

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

201.0692

42 pg

M+Na

☐

223.0512

22 pg

M-H

☐

199.0547

1700 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

6.26 min

Speziierung pH3

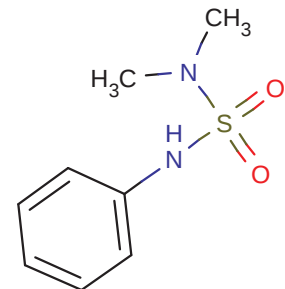
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

1.15



Wirkstoff

Ethofumesate-2-keto

Metabolit von

Ethofumesate

CAS-No

26244-33-7

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C₁₁H₁₂O₅S

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

256.04

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

257.0478

48 pg

M+Na

☐

279.0298

32692 pg

M-H

☐

255.0333

pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

5.86 min

Speziierung pH3

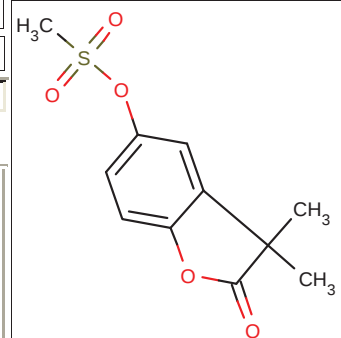
neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

0.7



Wirkstoff

Fenofibric-Acid

Metabolit von

Fenofibrate

CAS-No

42017-89-0

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C₁₇H₁₅ClO₄

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

318.0653

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

319.0732

pg

M+Na

☐

341.0551

pg

M-H

☒

317.0586

1.1 pg

M-FA

☐

pg

Retentionszeit

12.7 min

Speziierung pH3

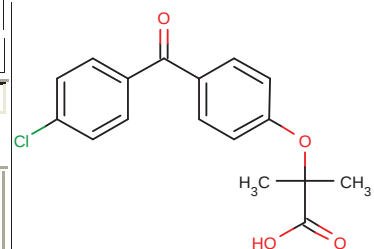
neutral

pH7

anionisch

Kow-Wert

4

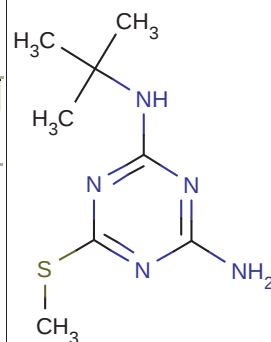


Wirkstoff		Flufenacet-ESA	
Metabolit von		Flufenacet	
CAS-No	201668-31-7	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₁ H ₁₄ F ₁ NO ₄ S ₁	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	275.0622	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	276.07	pg
M+Na	☐		pg
M-H	☒	274.0555	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.1 min	
Speziierung pH3		anionisch	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		1.07	

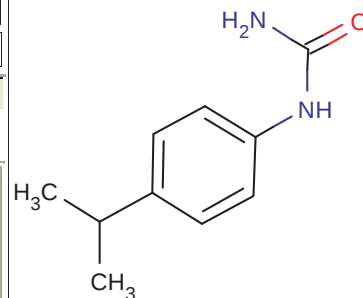
Wirkstoff		Flufenacet-OXA	
Metabolit von		Flufenacet	
CAS-No	201668-32-8	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₁ H ₁₂ F ₁ N ₁ O ₃	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	225.0796	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	226.0874	pg
M+Na	☐		pg
M-H	☒	224.0728	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.1 min	
Speziierung pH3		anionisch	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		0.8	

Wirkstoff		Galaxolidon	
Metabolit von		Galaxolid	
CAS-No		Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₈ H ₂₄ O ₂	Wirkstoffgruppe	Personal Care Product
Exakte Masse	272.1771	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	273.1849	pg
M+Na	☐	295.1669	pg
M-H	☐	271.1704	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		14.68 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		5.26	

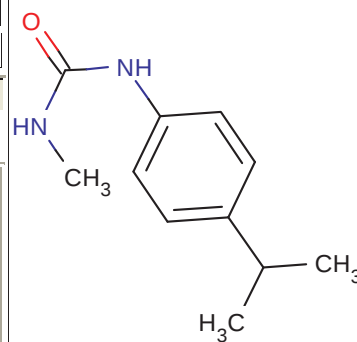
Wirkstoff		Irgarol-descyclopropyl	
Metabolit von		Irgarol	
CAS-No	30125-65-6	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₈ H ₁₅ N ₅ S	Wirkstoffgruppe	Biozid
Exakte Masse	213.1043	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	214.1121	5 pg
M+Na	☐	236.094	0 pg
M-H	☐	212.0975	pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.47 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.73	



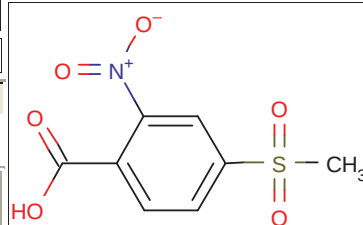
Wirkstoff	Isoproturon-didemethyl = 1-(4-Isopropenyl)urea				
Metabolit von	Isoproturon				
CAS-No	56046-17-4	Klassifizierung	Metabolit		
Summenformel	C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid		
Exakte Masse	178.1101	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	8.04 min
M+H	☒	179.1179	18 pg	Speziierung pH3	neutral
M+Na	☐	201.0998	13 pg	pH7	neutral
M-H	☐	177.1033	pg	Kow-Wert	2.16
M-FA	☐		300 pg		



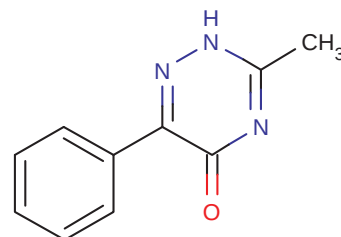
Wirkstoff	Isoproturon-monodemethyl = 1-(4-Isopropenyl)-3-methylurea				
Metabolit von	Isoproturon				
CAS-No	34123-57-4	Klassifizierung	Metabolit		
Summenformel	C ₁₁ H ₁₆ N ₂ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid		
Exakte Masse	192.1257	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	8.58 min
M+H	☒	193.1335	11 pg	Speziierung pH3	neutral
M+Na	☐	215.1155	11 pg	pH7	neutral
M-H	☐	191.119	pg	Kow-Wert	2.63
M-FA	☐		200 pg		



Wirkstoff	Mesotrion-MNBA				
Metabolit von	Mesotrion				
CAS-No	110964-79-9	Klassifizierung	Metabolit		
Summenformel	C ₈ H ₇ NO ₆ S	Wirkstoffgruppe	Pestizid		
Exakte Masse	244.9989	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	1.61 min
M+H	☐	246.0067	0 pg	Speziierung pH3	anionisch
M+Na	☐	267.9886	0 pg	pH7	anionisch
M-H	☒	243.9921	400 pg	Kow-Wert	-0.08
M-FA	☐		pg		

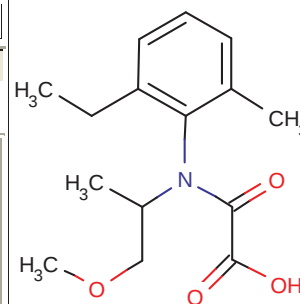


Wirkstoff	Metamitron-Desamino				
Metabolit von	Metamitron				
CAS-No		Klassifizierung	Metabolit		
Summenformel	C ₁₀ H ₉ N ₃ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid		
Exakte Masse	187.0746	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	5.01 min
M+H	☒	188.08184	12 pg	Speziierung pH3	kationisch
M+Na	☐	210.0638	29 pg	pH7	neutral
M-H	☐	186.06729	63 pg	Kow-Wert	1.43
M-FA	☐		pg		

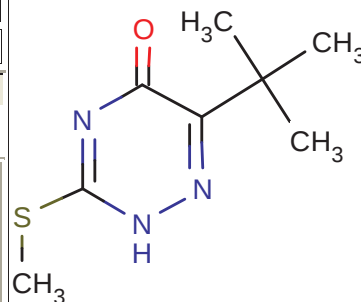


Wirkstoff		Metolachlor-ESA	
Metabolit von		Metolachlor	
CAS-No		Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C15H23N1O5S1	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	329.1291	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	330.13698	350 pg
M+Na	☐	352.1189	200 pg
M-H	☒	328.12242	10 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		8.29 min	
Speziierung pH3		anionisch	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		1.69	

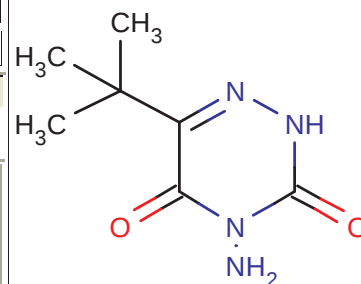
Wirkstoff		Metolachlor-OXA	
Metabolit von		Metolachlor	
CAS-No		Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C15H21N1O4	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	279.1465	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	280.15434	65 pg
M+Na	☐	302.1363	50 pg
M-H	☒	278.13979	17 pg
M-FA	☐		20000 pg
Retentionszeit		9.37 min	
Speziierung pH3		anionisch	
pH7		anionisch	
Kow-Wert		1.42	



Wirkstoff		Metribuzin-Desamino (DA)	
Metabolit von		Metribuzin	
CAS-No	35045-02-4	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C8H13N3OS	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	199.0774	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	200.0852	6 pg
M+Na	☐	222.0672	14 pg
M-H	☐	198.0707	4 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		7.34 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		2.51	



Wirkstoff		Metribuzin-Diketo (DK)	
Metabolit von		Metribuzin	
CAS-No		Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C7H12N4O2	Wirkstoffgruppe	Pestizid
Exakte Masse	184.0966	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☐	185.1033	pg
M+Na	☒	207.0852	179 pg
M-H	☐	183.0887	1831 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		5.7 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		0.23	



Wirkstoff

N-(2,4-dimethylphenyl)-N-methylformamidine

Metabolit von

Amitraz

CAS-No

33089-74-6

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C10H14N2

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

162.1152

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

4.02 min

M+H

☒

163.123

0.3 pg

M+Na

☐

185.1049

pg

M-H

☐

161.1084

pg

M-FA

☐

pg

Kow-Wert

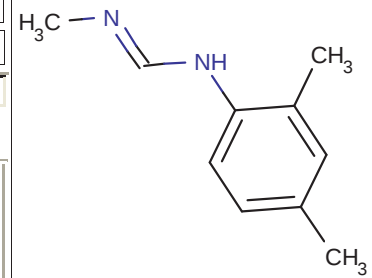
2.92

Speziierung pH3

kationisch

pH7

kationisch



Wirkstoff

N,N-dimethyl-N'-(4-methylphenyl)-sulfamide

Metabolit von

Tolyfluanid

CAS-No

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C9H14N2O2S

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

214.077

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

7.46 min

M+H

☒

215.0849

0.9 pg

M+Na

☐

237.0668

pg

M-H

☐

213.0703

pg

M-FA

☐

pg

Kow-Wert

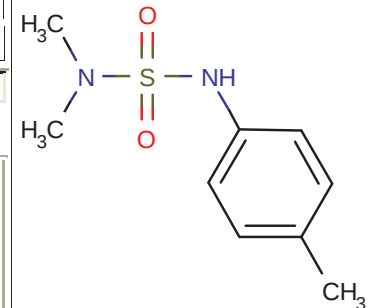
1.7

Speziierung pH3

neutral

pH7

neutral



Wirkstoff

N,N-Dimethylsulfamide

Metabolit von

Tolyfluanid/Dichlofluanid

CAS-No

3984-14-3

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C2H8N2O2S

Wirkstoffgruppe

Biozid

Exakte Masse

124.0301

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

1.24 min

M+H

☒

125.0379

48.1 pg

M+Na

☐

147.0199

pg

M-H

☐

123.0234

pg

M-FA

☐

pg

Kow-Wert

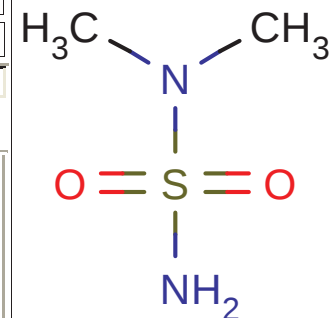
-1.11

Speziierung pH3

neutral

pH7

neutral



Wirkstoff

N4-Acetylsulfadiazin

Metabolit von

Sulfadiazin

CAS-No

127-74-2

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C12H12N4O3S

Wirkstoffgruppe

Pharmazeutika

Exakte Masse

292.0625

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

Retentionszeit

3.6 min

M+H

☒

293.0703

95 pg

M+Na

☐

315.0522

145 pg

M-H

☐

291.0557

69 pg

M-FA

☐

pg

Kow-Wert

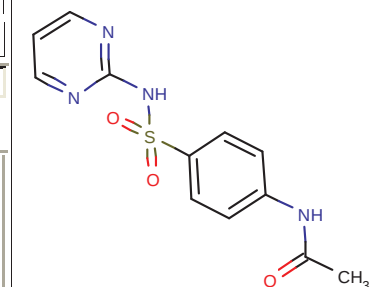
0.39

Speziierung pH3

neutral

pH7

neutral



Wirkstoff		N4-Acetyl-Sulfadimethoxin	
Metabolit von Sulfadimethoxin			
CAS-No	24341-30-8	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₄ H ₁₆ N ₄ O ₅ S	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	352.0836	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	353.0914	22 pg
M+Na	☐	375.0734	41 pg
M-H	☐	351.0769	18 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		6.26 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.46	

Wirkstoff		N4-Acetyl-Sulfamethazin	
Metabolit von Sulfamethazin			
CAS-No	100-90-3	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₄ H ₁₆ N ₄ O ₃ S	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	320.0938	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	321.1016	18 pg
M+Na	☐	343.0835	35 pg
M-H	☐	319.087	34 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		4.46 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.48	

Wirkstoff		N4-Acetyl-Sulfamethoxazole	
Metabolit von Sulfamethoxazole			
CAS-No	21312-10-7	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₄ S	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	295.0621	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	296.07	47 pg
M+Na	☐	318.0519	31 pg
M-H	☐	294.0554	20 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		5.41 min	
Speziierung pH3		neutral	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.21	

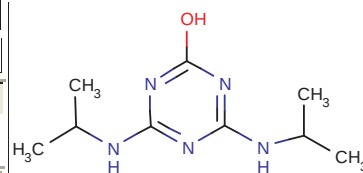
Wirkstoff		N4-Acetyl-Sulfathiazol	
Metabolit von Sulfathiazol			
CAS-No	127764	Klassifizierung	Metabolit
Summenformel	C ₁₁ H ₁₁ N ₃ O ₃ S ₂	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika
Exakte Masse	297.0236	Int. Standard	☐
Ion	Nachweis	m/z	IDL
M+H	☒	298.0315	69 pg
M+Na	☐	320.0134	88 pg
M-H	☐	296.0169	44 pg
M-FA	☐		pg
Retentionszeit		4.02 min	
Speziierung pH3		kationisch	
pH7		neutral	
Kow-Wert		1.44	

Wirkstoff		Oseltamivir-carboxylat			
Metabolit von		Oseltamivir			
CAS-No		Klassifizierung	Metabolit		
Summenformel	C ₁₄ H ₂₄ N ₂ O ₄	Wirkstoffgruppe	Pharmazeutika		
Exakte Masse	284.1731	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	4.97 min
M+H	☒	285.1809	pg	Speziierung pH3	kationisch
M+Na	☐	307.1628	pg	pH7	zwitterionisch
M-H	☐	283.1663	pg	Kow-Wert	0.18
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff		Propachlor-ESA			
Metabolit von		Propachlor			
CAS-No	123732-85-4	Klassifizierung	Metabolit		
Summenformel	C ₁₁ H ₁₅ N ₁ O ₄ S ₁	Wirkstoffgruppe	Pestizid		
Exakte Masse	257.0716	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	5.8 min
M+H	☐	258.0795	pg	Speziierung pH3	anionisch
M+Na	☐		pg	pH7	anionisch
M-H	☒	256.0649	pg	Kow-Wert	0.87
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff		Propachlor-OXA			
Metabolit von		Propachlor			
CAS-No	70628-36-3	Klassifizierung	Metabolit		
Summenformel	C ₁₁ H ₁₃ N ₁ O ₃	Wirkstoffgruppe	Pestizid		
Exakte Masse	207.089	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	5.7 min
M+H	☐	208.0968	pg	Speziierung pH3	anionisch
M+Na	☐		pg	pH7	anionisch
M-H	☒	206.0823	pg	Kow-Wert	0.6
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff		Propazine-2-hydroxy (=Prometon-Hydroxy)			
Metabolit von		Prometon			
CAS-No		Klassifizierung	Metabolit		
Summenformel	C ₉ H ₁₇ N ₅ O	Wirkstoffgruppe	Pestizid		
Exakte Masse	211.1428	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	5.09 min
M+H	☒	212.1506	2 pg	Speziierung pH3	zwitterionisch
M+Na	☐	234.1325	261 pg	pH7	zwitterionisch
M-H	☐	210.136	68 pg	Kow-Wert	2.51
M-FA	☐		pg		



Wirkstoff

Simazin-2-hydroxy

Metabolit von

Simazin

CAS-No

2599113

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C7H13N5O1

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

183.1115

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

184.1193

 pg

M+Na

☐

206.1012

 pg

M-H

☐

182.1047

 pg

M-FA

☐ pg

Retentionszeit

2.98 min

Speziierung pH3

zwitterionisch

pH7

zwitterionisch

Kow-Wert

1.67

Wirkstoff

Sulcotrione-CMBA

Metabolit von

Sulcotrione

CAS-No

53250-83-2

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C8H7Cl1O4S1

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

233.9748

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☐

234.98264

 0 pg

M+Na

☐

256.9646

 0 pg

M-H

☒

232.96808

 80 pg

M-FA

☐ pg

Retentionszeit

3.14 min

Speziierung pH3

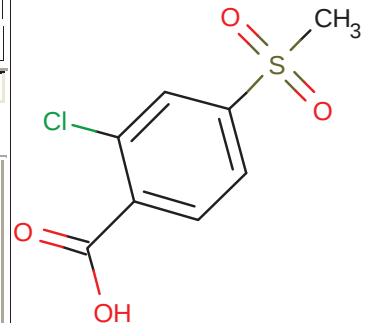
anionisch

pH7

anionisch

Kow-Wert

0.75



Wirkstoff

Terbutylazin-2-hydroxy

Metabolit von

Terbutylazin

CAS-No

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C9H17N5O

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

211.1428

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

212.1506

 pg

M+Na

☐

234.1325

 pg

M-H

☐

210.136

 pg

M-FA

☐ pg

Retentionszeit

5.05 min

Speziierung pH3

kationisch

pH7

zwitterionisch

Kow-Wert

2.55

Wirkstoff

Terbutylazine-desethyl

Metabolit von

Terbutylazine

CAS-No

Klassifizierung

Metabolit

Summenformel

C7H12Cl1N5

Wirkstoffgruppe

Pestizid

Exakte Masse

201.0776

Int. Standard

☐

Ion

Nachweis

m/z

IDL

M+H

☒

202.0854

 pg

M+Na

☐

224.0673

 pg

M-H

☐

200.0708

 pg

M-FA

☐ pg

Retentionszeit

7.49 min

Speziierung pH3

neutral

pH7

neutral

Kow-Wert

2.23

Wirkstoff	Terbutylazine-desethyl-2-hydroxy				
Metabolit von	Terbutylazine				
CAS-No		Klassifizierung	Metabolit		
Summenformel	C7H13N5O1	Wirkstoffgruppe	Pestizid		
Exakte Masse	183.1115	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL		
M+H	☒	184.1193	pg	Retentionszeit	2.72 min
M+Na	☐	206.1012	pg	Speziierung pH3	
M-H	☐	182.1047	pg	pH7	zwitterionisch
M-FA	☐		pg	Kow-Wert	1.51

Wirkstoff	1,2-Bis-(2-Chlorethoxy)-ethan				
Metabolit von					
CAS-No	112-26-5	Klassifizierung	Muttersubstanz		
Summenformel	C6H12Cl2O2	Wirkstoffgruppe	Industriechemikalie		
Exakte Masse	186.0214	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☐	187.0287	pg	Spezierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☐	185.0142	pg	Kow-Wert	1.2
M-FA	☐		pg		

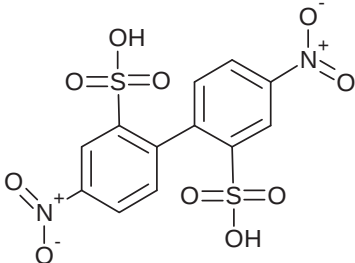
Wirkstoff	2,7-Naphthalindisulfonsäure				
Metabolit von					
CAS-No	92-41-1	Klassifizierung	Muttersubstanz		
Summenformel	C10H8O6S2	Wirkstoffgruppe	Industriechemikalie		
Exakte Masse	287.9762	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☐	288.9835	pg	Spezierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☒	286.969	pg	Kow-Wert	-0.94
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	2-Aminonaphtalin-1,5-disulfonsäure				
Metabolit von					
CAS-No	117-62-4	Klassifizierung	Muttersubstanz		
Summenformel	C10H9NO6S2	Wirkstoffgruppe	Industriechemikalie		
Exakte Masse	302.9871	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☐	303.9944	pg	Spezierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☒	301.9799	pg	Kow-Wert	-1.85
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	2-Naphthalinsulfonsäure				
Metabolit von					
CAS-No	120-18-3	Klassifizierung	Muttersubstanz		
Summenformel	C10H8O3S	Wirkstoffgruppe	Industriechemikalie		
Exakte Masse	208.0189	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☐	209.0267	pg	Spezierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☒	207.0121	pg	Kow-Wert	0.63
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	4,4'-Diaminostilbene-2,2'-disulfonic acid (DAS)			
Metabolit von				
CAS-No	81-11-8	Klassifizierung	Muttersubstanz	
Summenformel	C14H14N2O6S2	Wirkstoffgruppe	Industriechemikalie	
Exakte Masse	370.0288	Int. Standard	☐	
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit
M+H	☐	371.0366	pg	min
M+Na	☐		pg	Speziierung pH3
M-H	☐	369.0221	pg	pH7
M-FA	☐		pg	Kow-Wert
				anionisch
				-1.42

Wirkstoff	4,4'-Dinitrostilbene-2,2'-disulfonic acid (DNS)			
Metabolit von				
CAS-No	128-42-7	Klassifizierung	Muttersubstanz	
Summenformel	C14H10N2O10S2	Wirkstoffgruppe	Industriechemikalie	
Exakte Masse	429.9771	Int. Standard	☐	
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit
M+H	☐	430.985	pg	5.49 min
M+Na	☐		pg	Speziierung pH3
M-H	☒	428.9704	pg	pH7
M-FA	☐		pg	Kow-Wert
				anionisch
				anionisch
				0.05



Wirkstoff	Diglyme			
Metabolit von				
CAS-No	111-96-6	Klassifizierung	Muttersubstanz	
Summenformel	C6H14O3	Wirkstoffgruppe	Industriechemikalie	
Exakte Masse	134.0938	Int. Standard	☐	
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit
M+H	☐	135.1016	pg	3.07 min
M+Na	☐		pg	Speziierung pH3
M-H	☐	133.087	pg	pH7
M-FA	☐		pg	Kow-Wert
				neutral
				neutral
				-0.4

Wirkstoff	N-(4-Aminophenyl)-N-methyl-acetamid			
Metabolit von				
CAS-No	119-63-1	Klassifizierung	Muttersubstanz	
Summenformel	C9H12N2O	Wirkstoffgruppe	Industriechemikalie	
Exakte Masse	164.0944	Int. Standard	☐	
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit
M+H	☒	165.1022	pg	1.79 min
M+Na	☐	187.0842	pg	Speziierung pH3
M-H	☐	163.0877	pg	pH7
M-FA	☐		pg	Kow-Wert
				kationisch
				neutral
				0.4

Wirkstoff	N-Methylacetanilide				
Metabolit von					
CAS-No	579-10-2	Klassifizierung	Muttersubstanz		
Summenformel	C9H11NO	Wirkstoffgruppe	Industriechemikalie		
Exakte Masse	149.0835	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	5.9 min
M+H	☒	150.0913	pg	Speziierung pH3	neutral
M+Na	☐	172.0733	pg	pH7	neutral
M-H	☐	148.0768	pg	Kow-Wert	1.1
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Sulfanilsäure				
Metabolit von					
CAS-No	121-57-3	Klassifizierung	Muttersubstanz		
Summenformel	C6H7NO3S	Wirkstoffgruppe	Industriechemikalie		
Exakte Masse	173.0141	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☐	174.0219	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☒	172.0074	pg	Kow-Wert	-0.51
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Surfynol 104A				
Metabolit von					
CAS-No	126-86-3	Klassifizierung	Muttersubstanz		
Summenformel	C14H26O2	Wirkstoffgruppe	Industriechemikalie		
Exakte Masse	226.1927	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	11.02 min
M+H	☐	227.2006	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☐	225.186	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	2,4-D 6C13				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	12C2-13C6-H6Cl2O3	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	225.9933	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	9.29 min
M+H	☐	226.9968	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	248.9787	pg	pH7	
M-H	☒	224.9823	pg	Kow-Wert	2.81
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Alachlor-D13				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C14H7D13ClNO2	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	282.1999	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	283.2071	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	305.1891	pg	pH7	
M-H	☐	281.1926	pg	Kow-Wert	3.52
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Aldicarb-D3				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C7H11D3N2O2S	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	193.0964	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	6.06 min
M+H	☐	194.1037	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☒	216.0856	pg	pH7	
M-H	☐	192.0892	pg	Kow-Wert	1.13
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Atenolol-D7				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C14H15D7N2O3	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	273.207	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	274.2143	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	296.1962	pg	pH7	
M-H	☐	272.1997	pg	Kow-Wert	0.23
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Atrazine-2-Hydroxy-D5				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C8H10D5N5O	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	202.15959	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	203.16632	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☐	201.15177	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Atrazine-d5				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C8H9D5CIN5	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	220.1246	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	221.1324	pg	Speziierung pH3	8.36
M+Na	☐	243.1144	pg	pH7	
M-H	☐	219.1179	pg	Kow-Wert	2.6
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Azithromycin-D3				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C38H69D3N2O12	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	751.5268	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	752.53463	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	774.5166	pg	pH7	
M-H	☐	750.5201	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Bentazon-D6				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C10H6D6N2O3S	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	246.0951	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☐	247.1018	pg	Speziierung pH3	7.59
M+Na	☐	269.0837	pg	pH7	
M-H	☒	245.0872	pg	Kow-Wert	2.34
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Benzotriazol-D4				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C6H1D4N3	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	123.0729	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	124.0807	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	146.0627	pg	pH7	
M-H	☐	122.0662	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Bezafibrat-D4				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C19H16D4ClNO4	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	365.13264	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☐	366.14047	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☒	364.12592	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Bisphenol A-d16				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C15D16O2	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	244.2149	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	245.2227	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	267.2047	pg	pH7	
M-H	☐	244.216	pg	Kow-Wert	3.32
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Carbamazepin-C13N15				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C14H12N1O[13]C[15]N	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	238.0959	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	239.10263	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☐	237.08808	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Carbendazim-D4						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C9H5D4N3O2	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	195.09513	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	196.10186		pg	Retentionszeit		min
M+Na	☐			pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	194.08731		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff	Chlortoluron-D6						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C10H7D6ClN2O	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	218.1088	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	219.1166		pg	Retentionszeit	8.21	min
M+Na	☐	241.0985		pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	217.102		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert	2.41	

Wirkstoff	Clarithromycin-D3						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C38H66D3NO13	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	750.4952	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	751.503		pg	Retentionszeit		min
M+Na	☐	773.4849		pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	749.4884		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff	Clofibrinsäure-D4						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C10H7D4ClO3	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	218.0648	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☐	219.0721		pg	Retentionszeit	10.01	min
M+Na	☐	241.054		pg	Speziierung pH3		
M-H	☒	217.0575		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert	2.57	

Wirkstoff	Coffein-D9						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C8H1N4O2D9	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	203.13632	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	204.14414		pg	Retentionszeit		min
M+Na	☐			pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	202.12959		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff	Desethylatrazine-15N3						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C6H10CIN2-15N3	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse		Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	191.0609		pg	Retentionszeit	5.52	min
M+Na	☐			pg	Speziierung pH3		
M-H	☐			pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert	1.51	

Wirkstoff	Desethylatrazine-D6						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C6H4D6CIN5	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	193.0996	Int. Standard	☐				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	194.1074		pg	Retentionszeit	5.52	min
M+Na	☐	216.0894		pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	192.0929		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert	1.51	

Wirkstoff	Desisopropylatrazin-D5						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C5H3D5CIN5	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	178.07766	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	179.0855		pg	Retentionszeit	4.2	min
M+Na	☐	201.06743		pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	177.07093		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff		Desmethoxy-Iopromid (DMI)			
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C17H22I3N3O7	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	760.85973	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	
M+H	☒	761.86646	pg		min
M+Na	☐		pg	Speziierung pH3	
M-H	☐	759.8519	pg	pH7	
M-FA	☐		pg	Kow-Wert	

Wirkstoff		Diazinon-D10			
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C12H11D10N2O3PS	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	314.1633	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	
M+H	☒	315.1711	pg		13.01 min
M+Na	☐	337.153	pg	Speziierung pH3	
M-H	☐	313.1565	pg	pH7	
M-FA	☐		pg	Kow-Wert	3.81

Wirkstoff		Dicamba-D3			
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C8H3D3Cl2O3	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	222.9888	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	
M+H	☐	223.9955	pg		7.12 min
M+Na	☐	245.9775	pg	Speziierung pH3	
M-H	☒	221.981	pg	pH7	
M-FA	☐		pg	Kow-Wert	2.21

Wirkstoff		Dichlorprop-D6			
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C9H2D6Cl2O3	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	240.0227	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	
M+H	☐	241.03	pg		10.83 min
M+Na	☐	263.0119	pg	Speziierung pH3	
M-H	☒	239.0154	pg	pH7	
M-FA	☐		pg	Kow-Wert	3.43

Wirkstoff	Diclofenac-D4				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C14H7D4Cl2NO2	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	299.04124	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	12.88 min
M+H	☐	300.04907	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	322.03101	pg	pH7	
M-H	☒	298.03451	pg	Kow-Wert	4.51
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Dihydro-Carbamazepin				
Metabolit von					
CAS-No	3564-73-6	Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C15H14N2O	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	238.110075	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	239.1179	pg	Speziierung pH3	neutral
M+Na	☐	261.0998	pg	pH7	neutral
M-H	☐	237.1033	pg	Kow-Wert	2.46
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Dimethenamid-D3				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C12H15D3ClNO2S	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	278.093	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	10.15 min
M+H	☒	279.1008	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	301.0827	pg	pH7	
M-H	☐	277.0862	pg	Kow-Wert	2.15
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Dimethyl-Benzotriazol				
Metabolit von					
CAS-No	4184-79-6	Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C8H9N3	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	147.079075	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☐	148.0869	pg	Speziierung pH3	neutral
M+Na	☐	170.0689	pg	pH7	neutral
M-H	☐	146.0724	pg	Kow-Wert	2.26
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Diuron-D6				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C9H4D6Cl2N2O	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	238.0541	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	9.02 min
M+H	☒	239.062	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	261.0439	pg	pH7	
M-H	☐	237.0474	pg	Kow-Wert	2.68
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Erythromycin-13C3				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C34H67NO13-13C	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	736.4713	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	8 min
M+H	☒	737.4786	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	759.4605	pg	pH7	
M-H	☐	735.464	pg	Kow-Wert	3.06
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Ibuprofen-D3				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C13H15D3O2	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	209.1495	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	13.25 min
M+H	☐	210.1568	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☒	232.1387	pg	pH7	
M-H	☐	208.1422	pg	Kow-Wert	3.97
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Irgarol-D9				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C11H10D9N5S1	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	262.19316	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	263.19988	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☐	261.18533	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Isoproturon-D6				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C ₁₂ H ₁₂ D ₆ N ₂ O	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	212.179	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	8.73 min
M+H	☒	213.1869	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	235.1688	pg	pH7	
M-H	☐	211.1723	pg	Kow-Wert	2.87
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	MCPA-D6				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C ₉ H ₃ D ₆ ClO ₃	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	206.0622	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	9.63 min
M+H	☐	207.069	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	229.0509	pg	pH7	
M-H	☒	205.0544	pg	Kow-Wert	3.25
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Mecoprop-D3				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C ₁₀ H ₈ D ₃ ClO ₃	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	217.0591	Int. Standard	☐		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	10.96 min
M+H	☐	218.0658	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	240.0477	pg	pH7	
M-H	☒	216.0512	pg	Kow-Wert	3.13
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Mecoprop-D6				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C ₁₀ H ₅ D ₆ ClO ₃	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	220.07788	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☐	221.08461	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☒	219.07006	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Mefenamic acid-D3				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C15H12D3N1O2	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	244.12966	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☐	245.13639	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☒	243.12183	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Mesotriol-D3				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C14H10D3NO7S	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	342.0607	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	343.0674	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	365.0493	pg	pH7	
M-H	☐	341.0528	pg	Kow-Wert	1.49
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Metolachlor-D6				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C15H16D6ClNO2	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	289.1716	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	290.1788	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	312.1608	pg	pH7	
M-H	☐	288.1643	pg	Kow-Wert	3.13
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Metolachlor-ESA-D6				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C15H17D6N1O5S1	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	335.1679	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☐	336.17463	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☒	334.16008	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Metoprolol-D7				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C15H18D7NO3	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	274.22683	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL		
M+H	☒	275.23466	pg	Retentionszeit min	
M+Na	☐		pg	Speziierung pH3	
M-H	☐	273.2201	pg	pH7	
M-FA	☐		pg	Kow-Wert	

Wirkstoff	N4-Acetylsulfamethoxazol-D4				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C12H9D4N3O4S	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	299.0878	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL		
M+H	☒	300.0951	pg	Retentionszeit min	
M+Na	☐	322.077	pg	Speziierung pH3	
M-H	☐	298.0805	pg	pH7	
M-FA	☐		pg	Kow-Wert	

Wirkstoff	N4-Acetyl-Sulfathiazol-D4				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C11H7D4N3O3S2	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	301.04984	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL		
M+H	☒	302.05657	pg	Retentionszeit min	
M+Na	☐		pg	Speziierung pH3	
M-H	☐	300.04201	pg	pH7	
M-FA	☐		pg	Kow-Wert	

Wirkstoff	Naproxen-13C,D3				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C13H11O3D3-13C1	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	234.1165	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL		
M+H	☒	235.1238	pg	Retentionszeit min	
M+Na	☐	257.1057	pg	Speziierung pH3	
M-H	☐	233.1092	pg	pH7	
M-FA	☐		pg	Kow-Wert	

Wirkstoff	Octhilinone-D17 (2-n-Octyl-4-isothiazolin-3-on-D17 (OI-D17))				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C11H2D17NOS	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	230.22599	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	231.23272	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☐	229.21816	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Oleandomycine				
Metabolit von					
CAS-No	3922-90-5	Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C35H61NO12	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	687.418875	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	688.4267	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	710.4086	pg	pH7	
M-H	☐	686.4121	pg	Kow-Wert	1.69
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Phenazon-D3				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C11H9D3N2O	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	191.11434	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	192.12107	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐		pg	pH7	
M-H	☐	190.10652	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Propanolol-D7				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C16H14D7NO2	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	266.2006	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	min
M+H	☒	267.2084	pg	Speziierung pH3	6.39
M+Na	☐	289.1904	pg	pH7	
M-H	☐	265.1939	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Propazin-D6						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C9H10D6ClN5	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	235.14654	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	236.15436		pg	Retentionszeit		min
M+Na	☐	258.1363		pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	234.13981		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff	Propiconazol-D5						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C15H12D5Cl2N3O2	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	346.10062	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	347.10844		pg	Retentionszeit		min
M+Na	☐			pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	345.09389		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff	Simazin-D5						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C7H7D5ClN5	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	206.109	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	207.1168		pg	Retentionszeit	6.9	min
M+Na	☐	229.0987		pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	205.1022		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff	Sotalol-D6						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C12H14D6N2O3S	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	278.1566	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	279.1644		pg	Retentionszeit	1.7	min
M+Na	☐	301.14634		pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	277.14985		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff	Sulcotrione-D3				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C14H10D3ClO5S	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	331.0366	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	6.82 min
M+H	☐	332.0433	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	354.0253	pg	pH7	
M-H	☒	330.0288	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Sulfadiazine-D4				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C10H6D4N4O2S	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	254.077	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	2.37 min
M+H	☒	255.0848	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	277.0668	pg	pH7	
M-H	☐	253.0703	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Sulfadimethoxine-D4				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C12H10D4N4O4S	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	314.0981	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	5.63 min
M+H	☒	315.106	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	337.0879	pg	pH7	
M-H	☐	313.0914	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Sulfamethazine-13C6				
Metabolit von					
CAS-No		Klassifizierung	IntStd		
Summenformel	C6H14N4O2S-13C6	Wirkstoffgruppe			
Exakte Masse	284.1001	Int. Standard	☒		
Ion	Nachweis	m/z	IDL	Retentionszeit	3.79 min
M+H	☒	285.1112	pg	Speziierung pH3	
M+Na	☐	307.0931	pg	pH7	
M-H	☐	283.0966	pg	Kow-Wert	
M-FA	☐		pg		

Wirkstoff	Sulfamethoxazole-D4						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C10H7D4N3O3S	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	257.0767	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	258.0845		pg	Retentionszeit		min
M+Na	☐	280.0664		pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	256.0699		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff	Sulfathiazole-D4						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C9H5D4N3O2S2	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	259.0382	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	260.046		pg	Retentionszeit	2.82	min
M+Na	☐	282.0279		pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	258.0314		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff	Tebutam-D4						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C15H19D4NO	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	237.2025	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	238.2103		pg	Retentionszeit	11.78	min
M+Na	☐	260.1923		pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	236.1958		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff	Terbutryn-D5						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C10H14D5N5S1	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	246.16805	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	247.17478		pg	Retentionszeit		min
M+Na	☐			pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	245.16022		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff	Terbutylazin-D5					
Metabolit von						
CAS-No		Klassifizierung	IntStd			
Summenformel	C9H11D5ClN5	Wirkstoffgruppe				
Exakte Masse	234.1403	Int. Standard	☒			
Ion	Nachweis	m/z	IDL			
M+H	☒	235.1481		pg	Retentionszeit	10.19 min
M+Na	☐	257.13		pg	Speziierung pH3	
M-H	☐	233.1335		pg	pH7	
M-FA	☐			pg	Kow-Wert	

Wirkstoff	Triclosan-13C6						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C6H7Cl3O2[13]C6	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	293.97184	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☐	294.97857		pg	Retentionszeit		min
M+Na	☐			pg	Speziierung pH3		
M-H	☒	292.96401		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		

Wirkstoff	Trimethoprim-D9						
Metabolit von							
CAS-No		Klassifizierung	IntStd				
Summenformel	C14H9D9N4O3	Wirkstoffgruppe					
Exakte Masse	299.19493	Int. Standard	☒				
Ion	Nachweis	m/z	IDL				
M+H	☒	300.20166		pg	Retentionszeit		min
M+Na	☐			pg	Speziierung pH3		
M-H	☐	298.1871		pg	pH7		
M-FA	☐			pg	Kow-Wert		