



**2. Zwischenbericht Screening von Wasserproben:
 Evaluierung von 13 unbekanntem Verbindungen gemäss des Konzeptes
 „Kategorisierung von unbekanntem Verbindungen“**

In diesem Bericht wurden die restlichen 13 der 55 unbekanntem Verbindungen evaluiert, die in diversen Extrakten von Wasserproben nachgewiesen wurden: Dabei wurde wiederum das Informationssystem für die Kategorisierung von unbekanntem Verbindungen angewendet. Es wurde versucht deren vermutliche Struktur bzw. deren Teilstrukturen tentativ zu identifizieren und anschliessend diese in Bezug auf deren Ursprung wie folgt zu klassifizieren: Rein biogen, biogen und anthropogen, rein anthropogen (Syntheseprodukte, Pestizide etc.), Abbauprodukt (z.B. eines Pestizids oder von Biopolymeren).

Zusätzlich wurde das mögliche Umweltbelastungspotential evaluiert. Dies wurde basierend auf entweder Modellverbindungen oder Stoffklasseneigenschaften vorgenommen. Zusätzlich kann man dann mit Hilfe von Modellverbindungen (z.B. als „worst case“ der bekannteste toxische Vertreter einer Stoffklasse oder ein strukturell typischer Vertreter der Stoffklasse bei unvollständiger Charakterisierung) eine weitere Evaluierung vornehmen.

Das es sich bei den restlichen 13 Verbindungen um Substanzen handelt, welche gaschromatographisch spät eluieren und daher grössere Moleküle sind, waren wegen der stark zunehmenden Anzahl möglicher Strukturen bzw. nicht ausreichender Informationen im Massenspektrum die Chancen für eine erfolgreiche Charakterisierung entsprechend geringer.

Die nachfolgende Tabelle fasst die erhaltenen Informationen zu den 13 Verbindungen zusammen. Diese konnten dabei wie folgt eingestuft werden:

- 1 als biogenen Ursprungs, Belastungspotential nicht relevant
- 2 als vermutlich biogenen Ursprungs, Belastungspotential kaum relevant
- 3 als anthropogenen Ursprungs, Belastungspotential relevant
- 1 als vermutlich anthropogenen Ursprungs, Belastungspotential vermutlich relevant
- 3 als unbekanntem Ursprungs, aber möglicherweise biogen, Belastungspotential kaum relevant
- 2 unbekanntem Ursprungs mit Teilstrukturinformation
- 1 als Unbekannt mit zu wenig Information zur Struktur

ADRESSE:
 AAC
 GRUENHOLZ 266
 CH-9044 WALD AR
 SCHWEIZ

TEL: INT: +41-71-870 04 26
 FAX: INT: +41-71-870 04 27
 GSM: INT: +41-79-358 20 10
 E-MAIL: MICHAEL.OEHME@UNIBAS.CH

BANK: BASELSTADTLICHE
 KANTONALBANK, ARLESHEIM
 SWIFT: BLKBCH22
 IBAN: CH75 0076 9016 2247 8050
 2

Tabelle 2: Restliche charakterisierte unbekannte Verbindungen

Verbindungsnr.	Identifizierbare Teilstrukturen	Herkunft	Umweltbelastungspotential
1940-201-244	Vermutlich ein Hydroxydihydrobenzofuran (Teilstruktur von CAS 171507-23-6 passt gut) mit Acetylrest	Unbekannt	Möglicherweise biogen
1944-205-X	Molekülmasse 248 u, ein sterisch gehindertes Phenol analog zu CAS 2934-07-8 + C ₂ H ₅	Anthropogen	Radikalfänger, Additiv in Kunststoffen
1978-183-X	Strukturvorschlag CAS 5948-67-4 für m/z 183 (m/z 240 - Iso-Butyl) geht in richtige Richtung (m/z 183-28-28 selten), aber auch andere Mögl., m/z 97 schwer erklärbar, MW ?	Vermutlich anthropogen	Relevant, Modellverbindung abklären
2038-201-244	Gleiches Massenspektrum wie 1940-201-244, siehe dort. Isomer?	Unbekannt	Möglicherweise biogen
2079-187-X	MW ist 245 u, N in aromatischem Ring, subst. Indol, Pyrrol, Pyrroloquinolin (siehe CAS 40135-93-1 als Modellverb. Für Teilstruktur)	Anthropogen	Relevant, Modellverbindung abklären
2118-240-X	MW 255, m/z „128“ (127,5) doppelt geladen, wie CAS 54827-17-7, aber nur 1 x NH ₂ , OH- statt 2. NH ₂ -Gruppe ³⁾ , + -CH ₂ - oder CH ₃ -	Anthropogen	Relevant, Modellverbindung abklären
2227-126-X	MW 309, besser ladungsstabilisierende Gruppe als Vorschlag CAS 117968-71-5, siehe CAS 22609-95-6 als mögl. Teilstruktur.	Unbekannt	Möglicherweise biogen

3) Sequenz M-15-18 vorhanden.

Tabelle 2: Fortsetzung

Verbindungsnr.	Identifizierbare Teilstrukturen	Herkunft	Umweltbelastungspotential
2317-203-X	MG 246, kein, keine Acetylgruppe, O-haltiger heterozyklischer Aromat	Unbekannt	Unbekannt
2341-311-X	MG unbekannt, zu komplexes MS	Unbekannt	Unbekannt
2369-203-X	Gleiches MS wie 2317-203-X, siehe dort, Isomer?	Unbekannt	Unbekannt
2390-133-X	MW 302, Vorschlag CAS 5461-67-2 geht in richtige Richtung, längere Kette mit CO (M-28), siehe auch Modellverbindung CAS 30316-09-7 für unteren Massenbereich.	Biogen	Ligninabbauprodukt?
2453-316-X	Grosse Ähnlichkeit zum Vorschlag CAS 897-78-9, MW 316, Teilstruktur bis m/z 274 wohl gleich oder isomer,	Biogen?	Kaum relevant
2992-178-178	MS sehr schwach (wenige Massen, nicht interpretierbar	Unbekannt	Unbekannt

