



**Zwischenbericht Screening von Wasserproben:  
Evaluierung von 42 unbekanntem Verbindungen gemäss des Konzeptes  
„Kategorisierung von unbekanntem Verbindungen“**

Es wurde versucht in einem ersten Schritt 42 von 55 unbekanntem Verbindungen, die in diversen Extrakten von Wasserproben nachgewiesen wurden, mit Hilfe des Informationssystem für die Kategorisierung von unbekanntem Verbindungen zu kategorisieren. Dabei 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 teilweise schon 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.

Die nachfolgende Tabelle fasst die bisher erhaltenen Informationen zusammen. Die bisher 42 charakterisierten Verbindungen konnten dabei wie folgt eingestuft werden:

- 8 als biogenen Ursprungs, Belastungspotential nicht relevant
- 7 als vermutlich biogenen Ursprungs, Belastungspotential kaum relevant
- 11 als anthropogenen Ursprungs, Belastungspotential relevant
- 7 als vermutlich anthropogenen Ursprungs, Belastungspotential vermutlich relevant
- 1 als biogen oder anthropogenen Ursprungs, Belastungspotential kaum relevant
- 1 unbekanntem Ursprungs mit Teilstrukturinformation
- 7 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 1: Bisher charakterisierte unbekannte Verbindungen**

<b>Verbindungsnr.</b>	<b>Identifizierbare Teilstrukturen</b>	<b>Herkunft</b>	<b>Umweltbelastungspotential</b>
1290-139-154	Nur 3 Massen >10% vorhanden: Kein Aromat, nicht S-haltig, verm. Ringsystem (subst. Cyclohexan o. ä.). Muss weiter evaluiert werden	Unbekannt	Unbekannt
1296-136-194	Eine terpenoide Substanz. Acetylrest, subst. Cyclohexen o.ä.. Isomer der vorgeschlagenen Verbindung <sup>1)</sup>	Biogen <sup>2)</sup>	Nicht relevant
1327-109-X	Acetylgruppe, ges. bzw. teilweise unges. Ringe. Carnen-ähnl. Teilstruktur? <sup>1)</sup>	Vermutlich biogen	Kaum relevant, Modellverbindung CAS 4017-82-7 (trans-2-Caren-4-ol)
1337-109-192	OH-Gruppe <sup>3)</sup> , ges. bzw. teilweise unges. Ringe. Terpenoid <sup>1)</sup> . Teilstruktur wie CAS 35907-10-9	Biogen <sup>2)</sup>	Nicht relevant.
1411-111-206	Koelution (z.B. m/z 192)? Ges. bzw. teilweise unges. Ringe. Acetylgruppe? Terpenoid <sup>1)</sup> .	Biogen <sup>2)</sup>	Nicht relevant.
1466-93-236	Acetylgruppe, ges. bzw. teilweise unges. Ringe, ev. überbrückt. Terpenoid <sup>1)</sup>	Vermutlich biogen	Kaum relevant
1472-134-X	MW 177. Alkylsubst. Anilin. N,N-subst. (m/z 56)?	Anthropogen	Relevant. Modellverbindung abklären.

1) Reine Kohlenwasserstoff-Terpene bzw. solche mit O-Atomen (meist Terpenoide) zeigen trotz unterschiedlicher Kohlenstoffgerüste sehr ähnliche Massenspektren, da durch Gerüstumlagerungen identische Fragmentstrukturen gebildet werden (z.B. durch Aromatisierung). Es sind daher verschiedene isomere Strukturen möglich. Zudem kann meist nicht oder nur schwer zwischen cyclischen und offenkettigen ungesättigten Strukturen unterschieden werden.

2) Ein Teil der gefundenen Terpene wurden auch synthetisch hergestellt (u.a. als Duftstoffe). Deren Menge ist jedoch sehr gering und es gab keine Synthese in der Region Basel. Terpene befinden sich auch in Sperrholz- und Spanplatten aus Nadelhölzern (Bauschutt). Terpene können Allergene sein.

3) Sequenz M-15-18 vorhanden.

**Tabelle 1: Fortsetzung**

<b>Verbindungsnr.</b>	<b>Identifizierbare Teilstrukturen</b>	<b>Herkunft</b>	<b>Umweltbelastungspotential</b>
1506-123-X	MW 180. Kein Aromat. Cyclopenten mit Carboxylrest. Carbonylgruppe in Mitte Alkylkette (kein Acetyl). Terpenoid? <sup>1)</sup>	Unbekannt	Unbekannt
1509-156-X	N- und O-Atome in Ring. 2 x N. M-32: HN=OH aus Ring? Muss weiter abgeklärt werden.	Verm. anthropogen	Verm. relevant
1520-177-177	O als CH <sub>3</sub> O- ortho zu NH <sub>2</sub> . NH <sub>2</sub> - an Aromat, alkylsub. Aromat. Anzahl C-Atome etc. muss weiter abgeklärt werden.	Anthropogen	Relevant
1522-191-X	MW 191. N-haltig. Aromat. N,N-alkylsubstituiert. Anzahl C-Atome etc. muss weiter abgeklärt werden.	Anthropogen	Relevant
1530-124-X	MW unklar. N-haltige Fragmente. Amid (dann 2 x N)? Muss weiter abgeklärt werden.	Unbekannt	Unbekannt
1530-95-X	MW 222. OH-Gruppe <sup>3)</sup> . Bornanteilstruktur? Rest wenig ladungsstabilisierend. Terpenoid <sup>1)</sup> .	Vermutlich biogen	Kaum relevant
1540-191-X	Entspricht 1522-191-X. m/z 166 fehlt. Verm. Isomer	Anthropogen	Relevant
1541-172-X	MW 203. 1 x N. O als CH <sub>3</sub> O-, kettig bis 86 u. Kein Aromat. Anzahl C-Atome etc. muss weiter abgeklärt werden.	Unbekannt	Unbekannt
1557-177-X	MW 192. Isomer zu Methylionon. Terpenoid <sup>1)</sup> .	Biogen <sup>2)</sup>	Nicht relevant.

1) Reine Kohlenwasserstoff- Terpene bzw. solche mit O-Atomen (Terpenoide) zeigen trotz unterschiedlicher Kohlenstoffgerüste sehr ähnliche Massenspektren, da durch Gerüstumlagerungen identische Fragmentstrukturen gebildet werden (z.B. durch Aromatisierung). Es sind daher verschiedene isomere Strukturen möglich. Zudem kann meist nicht oder nur schwer zwischen cyclischen und offenkettigen ungesättigten Strukturen unterschieden werden.

2) Ein Teil der gefundenen Terpene wurden auch synthetisch hergestellt (u.a. als Duftstoffe). Deren Menge ist jedoch sehr gering und es gab keine Synthese in der Region Basel. Terpene befinden sich auch in Sperrholz- und Spanplatten aus Nadelhölzern (Bauschutt). Terpene können Allergene sein.

3) Sequenz M-15-18 vorhanden.

**Tabelle 1: Fortsetzung**

<b>Verbindungsnr.</b>	<b>Identifizierbare Teilstrukturen</b>	<b>Herkunft</b>	<b>Umweltbelastungspotential</b>
1565-167-X	MW 224. t-Butylrest ( $\Delta m$ 57), Cyclohexanonrest. Kein Aromat.	Biogen <sup>2)</sup>	Nicht relevant.
1578-136-X	MW 207. Teilstruktur ähnlich wie Ethoxyphenyl)ethylamin (MW 165). Zusätzlich Acetylgruppe? Massen m/z 43/120/162 durch Kollision? m/z 70 Störung (kein Isotopensignal)?	Anthropogen	Relevant
1590-151-X	MW 208. CAS 120-25-2 (Ethoxyanisoaldehyd) + Ethylgruppe	Biogen aus Lignin?	Vermutlich nicht relevant, Gruppe wird als Duftstoff eingesetzt
1598-194-X	MW 209: 1 x Cl, 1 x N. Carbonylgruppe. MS von Teilstruktur CAS 83-54-5 (4(1H)-1-Methylquinolinon) + Methyl + Cl passt sehr gut.	Anthropogen	Relevant
1620-139-X	MW 211. Chlorbenzoylrest + N-Alkyl (72 u, -NH-C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> )	Anthropogen	Relevant
1631-161-253	Sehr ähnlich CAS 50790-32-4 (4-Trifluormethyl-N-methylsulfonylphenylamin). Ethyl- statt Methyl- = 253 u	Anthropogen	Relevant
1659-96-X	MW 196. Decahydronaphthalin + -O-CO-CH <sub>3</sub> . Umlagerungsprodukt m/z 138!	Unbekannt	Kaum relevant
1677-191-X	MW 234. Homolog zu Methylionon(oder Isomer) + C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> -Rest <sup>1)</sup>	Biogen <sup>2)</sup>	Nicht relevant.
1678-134-X	MW 194? $\Delta m$ 60: Verlust Essigsäure. m/z 94 = C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O. Kein Aromat. Ges./teilw. unges. Ring. Terpenoid <sup>1)</sup>	Verm. biogen	Nicht relevant.

1) Reine Kohlenwasserstoff- Terpene bzw. solche mit O-Atomen (Terpenoide) zeigen trotz unterschiedlicher Kohlenstoffgerüste sehr ähnliche Massenspektren, da durch Gerüstumlagerungen identische Fragmentstrukturen gebildet werden (z.B. durch Aromatisierung). Es sind daher verschiedene isomere Strukturen möglich. Zudem kann meist nicht oder nur schwer zwischen zyklischen und offenkettigen ungesättigten Strukturen unterschieden werden.

2) Ein Teil der gefundenen Terpene wurden auch synthetisch hergestellt (u.a. als Duftstoffe). Deren Menge ist jedoch sehr gering und es gab keine Synthese in der Region Basel. Terpene befinden sich auch in Sperrholz- und Spanplatten aus Nadelhölzern (Bauschutt). Terpene können Allergene sein.

**Tabelle 1: Fortsetzung**

<b>Verbindungsnr.</b>	<b>Identifizierbare Teilstrukturen</b>	<b>Herkunft</b>	<b>Umweltbelastungspotential</b>
1695-205-205	C <sub>4</sub> -Alkyl-Phenyl-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N. Ev. t-Butyl.	Verm. anthropogen	Verm. relevant
1716-177-220	Multicyklisch, bis auf –CO gesättigt. m/z 94 = C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O, CO in Ring. Terpenoid?	Unbekannt	Kaum relevant
1752-207-252	Teilstruktur 178 u ähnlich Tetrahydronaphthalenon (z.B. CAS 54549-75-9) + 45 u (-COOH an Aromat (M-17, M-45) + Rest	Verm. anthropogen	Verm. relevant
1770-112-X	MW 226. Bis 168 u Teilstruktur von CAS 6267-39-6 (Ethoxy-Dimethylcyclohexenon oder Isomer), Rest verm. CH <sub>3</sub> CO-O-, Terpenoid <sup>1)</sup>	Verm. biogen	Nicht relevant.
1777-130-197	Benzonitril mit MW 197. Homolog zu CAS 72114-67-1 (-2 x -CH <sub>2</sub> -), Alkylrest unsicher	Verm. anthropogen	Verm. relevant
1784-137-X	MW 254, nicht aromatisch, ges. und teilw. unges. Ringe, Teilstruktur ähnlich (Isomer) zu CAS 74685-51-1 (bicykl. terpenoide Struktur), Acetylgruppe	Biogen <sup>2)</sup>	Nicht relevant.

1) Reine Kohlenwasserstoff- Terpene bzw. solche mit O-Atomen (Terpenoide) zeigen trotz unterschiedlicher Kohlenstoffgerüste sehr ähnliche Massenspektren, da durch Gerüstumlagerungen identische Fragmentstrukturen gebildet werden (z.B. durch Aromatisierung). Es sind daher verschiedene isomere Strukturen möglich. Zudem kann meist nicht oder nur schwer zwischen cyklischen und offenkettigen ungesättigten Strukturen unterschieden werden.

2) Ein Teil der gefundenen Terpene wurden auch synthetisch hergestellt (u.a. als Duftstoffe). Deren Menge ist jedoch sehr gering und es gab keine Synthese in der Region Basel. Terpene befinden sich auch in Sperrholz- und Spanplatten aus Nadelhölzern (Bauschutt). Terpene können Allergene sein.

3) Sequenz M-15-18 vorhanden.

**Tabelle 1: Fortsetzung**

<b>Verbindungsnr.</b>	<b>Identifizierbare Teilstrukturen</b>	<b>Herkunft</b>	<b>Umweltbelastungspotential</b>
1799-184-199	N-haltiger polycyklischer Aromat, Indolstruktur, Isomer zu CAS 6515-43-1 aber andere Alkylsubstitution	Verm. anthropogen	Verm. relevant
1801-174-216	Acetyl an vermutlich Tetrahydronaphthalin + Alkylgruppen	Verm. biogen, Abbauprod. Lignin etc.	Nicht relevant.
1806-93-200	Isomer zu CAS 1709-53-1 (4-Amino-N-Ethylbenzulfonamid, aber m/z 92/93 anders)	Anthropogen	Relevant
1820-137-X	MW 208, MS typisch für Aromat mit mehrfachen O-Subst., Acetylgruppe, Struktur ähnlich CAS 22924-18-1	Biogen oder anthropogen <sup>4)</sup>	Kaum relevant
1822-184-X	Gleiches MS wie 1799-184-199, Isomer	Verm. anthropogen	Verm. relevant
1844-235-X	MW 280, MS bis m/z 205 sehr ähnlich zu Verb. 1752-207-252, div. andere Subst. Kein N,	Verm. anthropogen	Verm. relevant
1901-123-X	MW 206 (Isotopensing. fehlen), CAS 77822-40-3 passt recht gut. Struktur hat geliche Elementarzusammensetzung, eine ladungsstab. Teilstruktur C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> O (Alk. Furan oder Isomer) + Acetylgruppe + kettigen Rest. Terpenoid <sup>1)</sup>	Verm. biogen	kaum relevant

1) Reine Kohlenwasserstoff- Terpene bzw. solche mit O-Atomen (Terpenoide) zeigen trotz unterschiedlicher Kohlenstoffgerüste sehr ähnliche Massenspektren, da durch Gerüstumlagerungen identische Fragmentstrukturen gebildet werden (z.B. durch Aromatisierung). Es sind daher verschiedene isomere Strukturen möglich. Zudem kann meist nicht oder nur schwer zwischen cyklischen und offenkettigen ungesättigten Strukturen unterschieden werden.

2) Ein Teil der gefundenen Terpene wurden auch synthetisch hergestellt (u.a. als Duftstoffe). Deren Menge ist jedoch sehr gering und es gab keine Synthese in der Region Basel. Terpene befinden sich auch in Sperrholz- und Spanplatten aus Nadelhölzern (Bauschutt). Terpene können Allergene sein.

3) Sequenz M-15-18 vorhanden.

4) Aromaten mit mehrfacher O-Substitution sind u.a. Ligninabbauprodukte (biogen oder bei Verbrennung anthropogen).

**Tabelle 1: Fortsetzung**

Verbindungsnr.	Identifizierbare Teilstrukturen	Herkunft	Umweltbelastungspotential
1917-191-191	Wenig Information im MS. Aromat, OH-Gruppe, N-haltig. CAS 60814-32-6 (1,6-Dimethyl-8-[Hydroxymethyl]-tetrahydroquinolin enthält diese Teilstrukturen.	Anthropogen	Relevant
1919-205-X	m/z 205 kein Molekülion, ev, m/z 235. Teilstruktur bis 190 u ist Chloraminobenzsulfonyl (siehe auch CAS 64415-13-0 als Beispiel). Rest hat ev. 45 u.	Anthropogen	Relevant
1927-202-202	Sehr wenig Information im MS. besteht aus Phenyl + Teilstr. 110 u + Rest 15 u. Aromatisch. Geradz. Anz. N. Anzahl C-Atome abklären.	Unbekannt	Unbekannt
1940-201-244	2 x O-Atome (C=O), Benzylrest. Wenig Inf. unter 146 u. CAS 22381-56-2 (MW 202, Phenylmethylcyclohexandion) hat ähnl. Fragmentierung.	Unbekannt	Falls Teilstr. i. O., wenig relevant

- 1) Reine Kohlenwasserstoff- Terpene bzw. solche mit O-Atomen (Terpenoide) zeigen trotz unterschiedlicher Kohlenstoffgerüste sehr ähnliche Massenspektren, da durch Gerüstumlagerungen identische Fragmentstrukturen gebildet werden (z.B. durch Aromatisierung). Es sind daher verschiedene isomere Strukturen möglich. Zudem kann meist nicht oder nur schwer zwischen cyklischen und offenkettigen ungesättigten Strukturen unterschieden werden.
- 2) Ein Teil der gefundenen Terpene wurden auch synthetisch hergestellt (u.a. als Duftstoffe). Deren Menge ist jedoch sehr gering und es gab keine Synthese in der Region Basel. Terpene befinden sich auch in Sperrholz- und Spanplatten aus Nadelhölzern (Bauschutt). Terpene können Allergene sein.
- 3) Sequenz M-15-18 vorhanden.
- 4) Aromaten mit mehrfacher O-Substitution sind u.a. Ligninabbauprodukte (biogen oder bei Verbrennung anthropogen).