



Forschungsstrategie der Wasserchemischen Gesellschaft

(Ausgabe 1.0 2023)

Wasserchemische Gesellschaft

Fachgruppe in der Gesellschaft Deutscher Chemiker

Impressum

Wasserchemische Gesellschaft
Fachgruppe in der Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V. (GDCh)
c/o: Bundesanstalt für Gewässerkunde
Am Mainzer Tor 1
56068 Koblenz
T: 0177-745-7288
E: sekretariat@wasserchemische-gesellschaft.de
Web:<http://www.wasserchemische-gesellschaft.de>

ISBN: 978-3-947197-22-4, Druckausgabe
ISBN: 978-3-947197-23-1, eBook

Ausgabe 1.0 2023
Erschienen in Koblenz, den 1.4. 2023

Verantwortlich für den Inhalt:

Holger Lutze, Leiter des Hauptausschusses "Wissenschaftliche Grundlagen und Anwendungen"
Thomas A. Ternes, Vorsitzender der Wasserchemischen Gesellschaft

Autoren: (alphabetisch)

Prof. Dr. Michael Burkhardt (Muttens, CH), Prof. Dr. Martin Elsner (TU München, D), Dr. Thomas Hofstetter (Eawag, Dübendorf, CH), Daniel Hunkeler (University of Neuchâtel, CH), Dr. habil. Thorsten Hüffer (Universität Wien, AUT), Dr. Jochen Kuckelkorn (Bundesumweltamt, Dessau-Roßlau, D), Prof. Dr. Holger Lutze (TU Darmstadt, D), Prof. Dr. Gudrun Massmann (Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, D), Dr. Günther Proll (Eberhard Karls Universität Tübingen, D), Prof. Dr. Thorsten Reemtsma (Helmholz-Zentrum für Umweltforschung, Leipzig, D), Dr. Sabrina Schiwy (Goethe Universität Frankfurt, D), Dr. Wolfgang Schulz (Landeswasserversorgung, Stuttgart-Langenau, D), Dr. Michael Seidel (TU München, D), Dr. Gabriel Sigmund (Universität Wageningen, NL), Dr. Markus Stöckl (DECHEMA-Forschungsinstitut, Frankfurt, D), Prof. Dr. Thomas A. Ternes (Bundesanstalt für Gewässerkunde, Koblenz, D), Prof. Dr. Rita Triebkorn (Universität Tübingen, D), Dr. Arne Wick (Bundesanstalt für Gewässerkunde, Koblenz, D)

©Wasserchemische Gesellschaft

Das Urheberrecht für dieses Dokument liegt bei den mitwirkenden Autoren. Alle Anfragen zur Wiedergabe und Reproduktion in jedem Medium, einschließlich Übersetzungen, sollten direkt an den Leiter des Hauptausschusses Wissenschaftliche Grundlagen und Anwendung" Holger Lutze (h.lutze@iwar.tu-darmstadt.de) gerichtet werden. Der Text darf zwecks Weiterverkaufs nicht kopiert werden.

Bildrechte: Linda Schuster, Gabriel Sigmund und Holger Lutze

Inhaltsverzeichnis

Inhalt

1 Intention der Forschungsstrategie	4
2 Einleitung	6
3 Analytische Verfahren	9
3.1 Non-Target-Analytik.....	9
3.2 (Öko)toxikologische Verfahren.....	12
3.4 Sensoranalytik.....	15
3.5 Umweltisotope - Substanz-spezifische Stabilisotopenanalytik zur Charakterisierung von Herkunft und Transformation von Schadstoffen.....	17
4 Emissionen.....	21
4.1 Ausbreitung und Transport organischer Spurenstoffe in der aquatischen Umwelt	21
4.2 Umweltverhalten von persistenten, mobilen und toxischen Stoffen.....	23
4.3 Mikro- und Nanoplastik.....	26
4.4 Bauchemie und Wasserqualität	28
4.5 Pathogene und antibiotika-resistente Bakterien – Moderne bioanalytische Methoden	30
5 Prozesse	33
5.1 Biologische Verfahren	33
5.2 Oxidative Verfahren.....	35
5.3 Physikalische Prozesse.....	37
6. Klimawandel und Wasser 4.0	39
7. Quellenverzeichnis	42

1. Intention der Forschungsstrategie

Die Wasserchemische Gesellschaft bietet ihre Unterstützung bei der Erstellung nationaler und internationaler Forschungskonzepte an, um die Wasserforschung in Deutschland und Europa auf eine solide wissenschaftliche Grundlage zu stellen und für die zukünftigen Herausforderungen zu ertüchtigen.

Dabei adressiert die Forschungsstrategie der Wasserchemischen Gesellschaft wichtige Zukunftsthemen im Bereich der Wasserforschung. In Folge des Klimawandels müssen grundlegend neue Konzepte erarbeitet werden, die zu schnellen und nachhaltigen Lösungen führen. Wasser- und Gewässerqualität sind in Deutschland ein hohes Gut, das in der Forschung seit jeher einen hohen Stellenwert einnimmt. In der Wasserchemischen Gesellschaft sind fast 1000 Wissenschaftler aus Deutschland, Österreich und der Schweiz organisiert, um gemeinsam Lösungen zu erarbeiten, die zu einer nachhaltigen und zukunftsorientierten Wasserbewirtschaftung führen.

Die Wasserchemische Gesellschaft beherbergt neben dem Hauptausschuss „Analysenverfahren – Entwicklung und Normung“ den Hauptausschuss „Wissenschaftliche Grundlagen und Anwendungen“, in dem über 100 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus Deutschland, Österreich, England, Niederlanden und der Schweiz die aktuellen Entwicklungen der Wasserforschung und Wassertechnologien in Workshops diskutieren, zusammenführen und im Hinblick auf ihre praktische Relevanz prüfen. Um den aktuellen Herausforderungen im Bereich Wasser begegnen zu können, gilt es zukunftsweisende Technologien, Methoden und Modelle zu entwickeln. Eine Besonderheit liegt hierbei auf interdisziplinären Ansätzen, denn das Thema „Wasser“ tangiert viele unterschiedliche Fachdisziplinen. Der Hauptausschuss „Wissenschaftliche Grundlagen und Anwendungen“ unterteilt sich in 13 Fachausschüssen, die in Abbildung 1 aufgeführt sind.

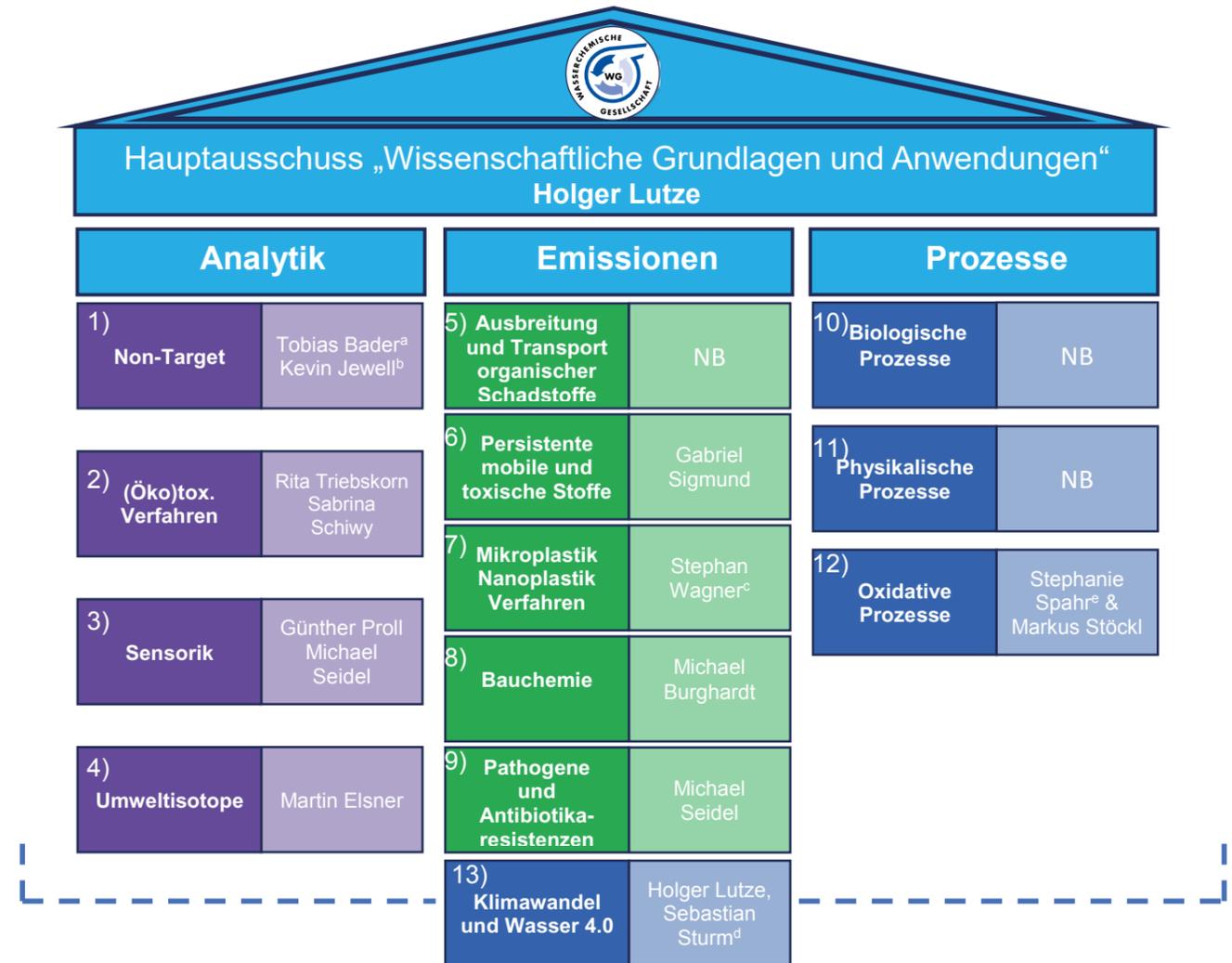
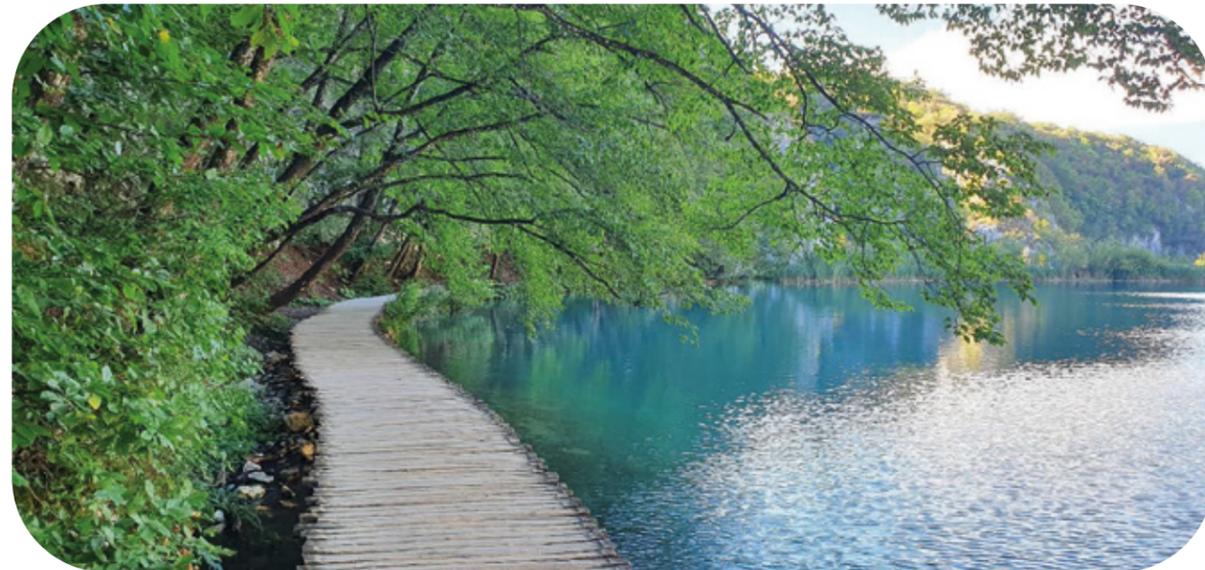


Abbildung 1: Fachausschüsse des Hauptausschusses *Wissenschaftliche Grundlagen und Anwendungen*, NB: nicht besetzt, Stand 27.3.2023,

^{a)} Zweckverband, Landeswasserversorgung, Stuttgart, ^{b)} Bundesanstalt für Gewässerkunde, Koblenz, D ^{c)} Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung, Leipzig, D ^{d)} Technologiezentrum Wasser, Karlsruhe D; ^{e)} Leibniz-Institut für Gewässerökologie und Binnenfischerei (IGB), Berlin, D. Alle weitere Institute, s. Liste der Autoren

Die Fachausschüsse im Bereich **Analytik** beschäftigen sich mit neuen Methoden zur Identifizierung neuer Stoffe und der Erweiterung des analytischen Messfensters (1), (öko)toxikologische Effekte (2), Echtzeitmessungen sowie (3) mit Werkzeugen zur Untersuchung von Umweltprozessen (4). Im Bereich **Emission** werden Quellen und Transport von Spurenstoffen (5), das Verhalten von polaren niedermolekularen Spurenstoffen (z.B. Persistenz und (Öko)Toxikologie) (6), Bildung, Verteilung und Alterung von Mikroplastik (7), Stoffemissionen von modernen Baustoffen (8), und Verbreitung und Verhalten von antibiotika-resistenten Bakterien (9) behandelt. Im Bereich **Prozesse** werden Schwerpunkte bei biologischen Verfahren des Schadstoffabbaus (10), physikalischen Prozesse in der aquatischen Umwelt und in der Aufbereitung (z.B. kolloidaler Stofftransport, Sorptionsprozesse, Filtration) (11) sowie bei oxidativen Wasseraufbereitungsmethoden (12) gesetzt. Ein

Querschnittsthema stellt der Fachausschuss Wasser 4.0 und Klimawandel dar (13), der alle drei Bereiche (Analytik, Emissionen und Prozesse) integriert. Hier werden die Auswirkungen von Extremereignissen und die wasserwirtschaftlichen Anforderungen der Zukunft (Verfügbarkeit und Qualität von Ressourcen) auf die Wasserversorgung mittels digitaler Abbildungen (z.B. virtueller Zwilling) im Bereich der Wassergewinnung, Aufbereitung und Verteilung abgeschätzt. Hiermit sollen Handlungsstrategien zur zukünftigen Sicherung einer ausreichenden Versorgung mit qualitativ hochwertigem Trinkwasser abgeleitet werden.

2. Einleitung

Aktuell kommt es zu vielen Veränderungen, die einen großen Einfluss auf die Wasserbewirtschaftung, die Gewässerentwicklung und damit auf Trinkwassergewinnung und Abwasserreinigung haben. Zu nennen ist beispielsweise die hohe Anzahl der Hoch- und Niedrigwasserereignisse in Fließgewässern (Brasseur and Jacob, 2017), die durch den Klimawandel weiter zunehmen werden (LAWA, 2017). Überdies hat die Covid-19-Pandemie gezeigt, wie schnell sich Anforderungen ändern können (Tang et al., 2021). Hygienische Aspekte gewinnen wegen der Pandemie, aber auch aufgrund prognostizierter Temperaturerhöhungen, der hohen und wachsenden Bevölkerungsdichte und der hohen individuellen Mobilität, immer mehr an Bedeutung. Viren und pathogene Keime können durch Flugreisende über weite Strecken verbreitet werden. Die demographische Entwicklung führt in Deutschland zu einer zunehmend älter werdenden Bevölkerung (Brombach et al., 2017). Daher ist mit neuen und steigenden Mengen an Arzneistoffen zu rechnen (Civity, 2017; LAWA, 2017), die über das Abwasser in den Wasserkreislauf eingetragen werden. Auch die zunehmende Vielfalt an chemischen Stoffen, die durch vielfältige Anwendungen in die Gewässer eingetragen werden (Richardson und Ternes, 2022), beeinträchtigt nicht nur die Biodiversität in den Gewässern, sondern auch die Grundwasserbewirtschaftung und Trinkwasserqualität. Zum anderen führen Abschwemmungen von landwirtschaftlichen Flächen zu diffusen Einträgen von Stoffen wie Pestizide, Zusatzstoffe von Spritzmitteln oder Düngemitteln.

Aus den genannten Gründen sind innovative Lösungswege erforderlich, um die anthropogen geprägten Wasserkreisläufe zu schützen. Hierbei gilt es, u. a. folgende Ziele beizubehalten:

- die Verbesserung aquatischer Lebensräume mit einer hohen biologischen Vielfalt und hohen Wasser- und Sedimentqualitäten,
- die Sicherstellung diverser Nutzungsansprüche an Oberflächengewässer für Schifffahrt, Tourismus, Kühlwasserentnahme von Kraftwerken und industriellen Anlagen,
- die Bereitstellung einer ausreichenden Menge an qualitativ hochwertigem Trinkwasser, das - soweit möglich - mit naturnahen Verfahren gewonnen wird.

Neue Forschungsansätze der Wasserchemischen Gesellschaft können und werden hierfür ganz entscheidende Beiträge liefern.



Viele Stoffe, synthetische Partikel wie Mikroplastik, aber auch pathogene und antibiotikaresistenztragende Keime, gelangen in bedeutenden Anteilen über kommunale und industrielle Kläranlagen in die Gewässer und somit in den Wasserkreislauf (Nickel et al., 2021). Grundwasser und Trinkwasser sind davon ebenso betroffen wie Regenwasser und Böden. Zusätzlich tragen diverse diffuse Eintragsquellen zur Gewässerbelastung bei, beispielsweise über urbane Regenwasserabläufe oder Abschwemmungen landwirtschaftlicher Flächen (Wittmer et al., 2011). Diese können zu signifikanten Stoßbelastungen führen, wie dies bei Pflanzenschutzmitteln, Bioziden und Nährstoffen aus der Gülledüngung beschrieben ist (Thaler, 2019). Durch die verschiedenen Eintragswege werden zunehmend anthropogene Stoffe und pathogene Keime in unsere Gewässer eingetragen, wobei die Identität vieler Stoffe und Krankheitserreger noch unbekannt ist.

Auch wenn kausale Wirkzusammenhänge auf Populationsebene aquatischer Organismen nur schwer zu verifizieren sind, gibt es deutliche Hinweise, dass stoffliche Belastungen adverse Effekte für Organismen und aquatische Lebensgemeinschaften in Oberflächengewässern besitzen (Köhler and Triebkorn, 2013; Liess et al., 2021; Schwarz et al., 2017; Triebkorn et al., 2019a). Im Trinkwasser ist das Vorkommen von anthropogenen Stoffen und Krankheitserregern aus Vorsorgegründen generell unerwünscht (IfSG §37 Absatz 1), sie werden dort jedoch trotzdem nachgewiesen (<https://www.gelsenwasser.de/wasser/trinkwasseranalyse>).

Gesetzliche Regelungen

Viele Oberflächengewässer werden sowohl als Trinkwasserressource (entweder direkt oder über Uferfiltrat), als abwasseraufnehmendes Gewässer oder auch als Badegewässer genutzt. Die eingetragenen Stoffe können daher auch für die Trinkwasserqualität problematisch sein (Übersicht zur Wassergesetzgebung ist in BMUB/UBA (2017a) zu finden). Der Schutz des Wassers als ökologischer Lebensraum und als Trinkwasserressource ist von essenzieller gesellschaftlicher Bedeutung. Dies spiegelt sich in der Vielzahl von Verordnungen, Gesetzen und Rahmenrichtlinien auf nationaler sowie europäischer Ebene wider. Die vom BMUV am 15. März 2023 veröffentlichte nationale Wasserstrategie soll Antworten geben, wie wir die Wasserversorgung für uns Menschen und für unsere Umwelt in ausreichender Menge und notwendiger Qualität sichern können (<https://www.bmu.de/download/nationale-wasserstrategie-2023>). Diese umfasst neben der Verminderung von Stoffeinträgen in die Gewässer ein breites Aktionsprogramm für die zukünftigen Herausforderungen im Gewässer- und Trinkwasserschutz (BMU/UBA, 2020). Ein weiterer Meilenstein bildet auf nationaler Ebene die Spurenstoffstrategie des Bundes (BMU/UBA, 2017a), die federführend durch das Spurenstoffzentrum des Bundes am UBA zukünftig organisiert und unterstützt wird. Auf EU-Ebene setzen die seit Oktober 2020 veröffentlichte Chemikalienstrategie (EC, 2020) und der Null-Schadstoff-Aktionsplan für Wasser, Boden und Luft (Zero Pollution Action Plan) (EC, 2021) neue Maßstäbe. Die neuen Strategien und Aktionspläne ergänzen die Ziele der Wasserrahmenrichtlinie (WRRL), einen guten ökologischen und chemischen Zustand für alle europäischen Oberflächengewässer und Grundwässer zu erreichen.



Die EU-Trinkwasserrichtlinie ist national durch die Trinkwasserverordnung (nach IfSG §38 Absatz 1) umgesetzt (TrinkwV 2019) und beinhaltet zur Sicherstellung der Trinkwasserqualität mikrobiologische und chemische Parameter, Indikatorparameter wie Färbung und Geruch. Neben der „chemischen“ Qualität ist die „hygienische“ Qualität des Wassers und der Gewässer, die zur Trinkwassergewinnung verwendet werden, von hoher Bedeutung. Im Sinne der EU-Badegewässerrichtlinie und der Trinkwasserverordnung (TrinkwV) ist daher der Eintrag von Krankheitserregern zu begrenzen, auch wenn die WRRL hygienische Parameter zur Bewertung der Oberflächengewässer bislang nicht explizit fordert.

Wasserforschung

Einen umfassenden Rahmen der Wasserforschung in Deutschland bildet der vom BMUV initiierte Wasserdialog, die resultierende Wasserstrategie der Bundesregierung (Leese et al., 2021) sowie das vom BMBF initiierte Programm „Wasser: N“, das Teil der Strategie „Forschung für Nachhaltigkeit (FONA)“ ist. Den europäischen Rahmen bildet das EU-Forschungsprogramm Horizont 2020, in dem wichtige europäische Zukunftsthemen mit unterschiedlichen Förderinstrumenten vorangetrieben werden. Das Forschungskonzept der Wasserchemischen Gesellschaft konkretisiert die wasserchemischen Zukunftsthemen, um den zukünftigen Herausforderungen wie die Auswirkungen des Klimawandels und die Umsetzung der europäischen und nationalen Regelungen Rechnung zu tragen. Die Wasserchemische Gesellschaft koordiniert und initiiert in dem Hauptausschuss „Wissenschaftliche Grundlagen und Anwendungen“ Forschungsaktivitäten im Bereich der Wasserchemie. Hierzu zählt neben der umfassenden chemischen, physikalischen, ökotoxikologischen und mikrobiologischen Bewertung der Wasserqualität ein tieferes Prozessverständnis von Verfahren, die im Wasserkreislauf vom Abwasser, über Oberflächenwässer und Grundwässer bis hin zur Trinkwassergewinnung verwendet, bzw. eigens dafür entwickelt werden. Hierbei ist es dem Hauptausschuss der Wasserchemischen Gesellschaft ein großes Anliegen, neueste Forschungsergebnisse direkt in die Praxis zu übertragen, um gemeinsame Lösungen mit Wasserversorgern, Abwasserverbänden und Behörden zu erarbeiten.



3 Analytische Verfahren

3.1 Non-Target-Analytik

Autor: Wolfgang Schulz

Hintergrund

Aufgrund der vielfältigen Anwendungen und Einsatzbereiche organischer Stoffe (u.a. Industrie- und Haushaltschemikalien, Arzneimittel, Pflanzenschutzmittel, Körperpflegemittel) können diese in die unterschiedlichen Umweltkompartimente gelangen. Das Verhalten von Spurenstoffen in der Umwelt sowie in unterschiedlichen Prozessen z.B. der Abwasserreinigung, Uferfiltration oder der Trinkwassergewinnung, ist für ein Systemverständnis und damit eine Risikobewertung von großer Bedeutung. Die bestehenden Methoden der Target-Analytik erfassen nur einen kleinen Teil der auftretenden Stoffvielfalt, was durch das Auftreten von Transformationsprodukten (TP) etwa in der oxidativen Wasseraufbereitung verschärft wird.

Deshalb sind Strategien und Methoden zur Detektion und Beschreibung des Verhaltens bisher nicht beachteter Spurenstoffe und deren TP essenziell. Die Non-Target-Analytik (NTA) hat sich in Ergänzung zur Target-Analytik (TA) zu einem wertvollen Werkzeug der Wasseranalytik in den letzten Jahren entwickelt (Hollender et al., 2017; Kiefer et al., 2021). Es liegen in den Laboratorien und bei behördlichen Untersuchungsstellen große NTA-Datenmengen von Wasserproben vor. Allerdings gibt es hier Limitierungen in der Anreicherung und Trennung von hochpolaren Stoffen. Zur effektiven Nutzung der bundesweit anfallenden NTA-Daten sind neue Ansätze der Kommunikation und Datenauswertung erforderlich. Dabei müssen Probleme wie z. B. das Vorhandensein toxischer Substanzen im Wasserkreislauf schnell erkannt werden, die relevanten Substanzen priorisiert werden und die Substanzidentifikation mit Unterstützung von Metadaten beschleunigt werden. Die stofflichen Informationen der TA/NTA sind aber für eine Bewertung und Priorisierung derzeit noch nicht hinreichend, da die (öko)toxikologische Einschätzung fehlt. Deshalb sind komplementär ausreichend empfindliche Methoden zur Erfassung der Wirkung in Wasserproben erforderlich. Die zunehmende Anzahl von verfügbaren und nebeneinanderstehenden Einzelergebnissen in einer Probe stellen eine Herausforderung für den Vollzug und die Maßnahmenableitung dar. Es müssen „Bündelungsansätze“ erarbeitet werden, die eine sachgerechte Umsetzung der Ergebnisse in Vollzugshandeln ermöglichen.

Forschungslücken

Die Auswertung von Analysendaten basierend auf der NTA erfolgt im Wesentlichen problemorientiert mit lokalem Bezug, wodurch nur ein Bruchteil der Information in den erhobenen Daten genutzt wird. Diese Informationen können aber beispielsweise bei überregionalen Fragestellungen aktuell oder zukünftig von Nutzen sein. Die Entwicklung einer gemeinsamen Austauschplattform für Non-Target-Daten sowie eines Informations- und Auswertesystems mit Einbindung intelligenter Auswertelgorithmen ist für eine effektive Nutzung der Daten erforderlich. Dadurch kann man sowohl lokal, regional als auch bundesweit das Spurenstoffvorkommen zu beschreiben sowie Quellen und Ursachen zu erkennen.

Es werden Analysenmethoden, die einen weiten Polaritätsbereich der organischen Spurenstoffe abdecken, benötigt. Für die Analytik hochpolarer Verbindungen fehlen derzeit noch geeignete Analysenmethoden (inkl. Probenanreicherung). Die Zuordnung von Molekülstrukturen zu

detektierten Signalen stellt im Spurenbereich immer noch eine besondere Herausforderung dar. Eine Steigerung der Empfindlichkeit molekulspektroskopischer Methoden, beispielsweise der NMR-Spektroskopie, könnte hierbei helfen. Neben dem weiteren Ausbau von unterstützenden Datenbanken ist die Weiterentwicklung von in-silico-Methoden zur Spektren-Interpretation sinnvoll. Auch die Weiterentwicklung der Messmethoden beispielsweise der Ionenmobilität sind mögliche Innovationen zur Erleichterung der Identifizierung organischer Spurenstoffe.

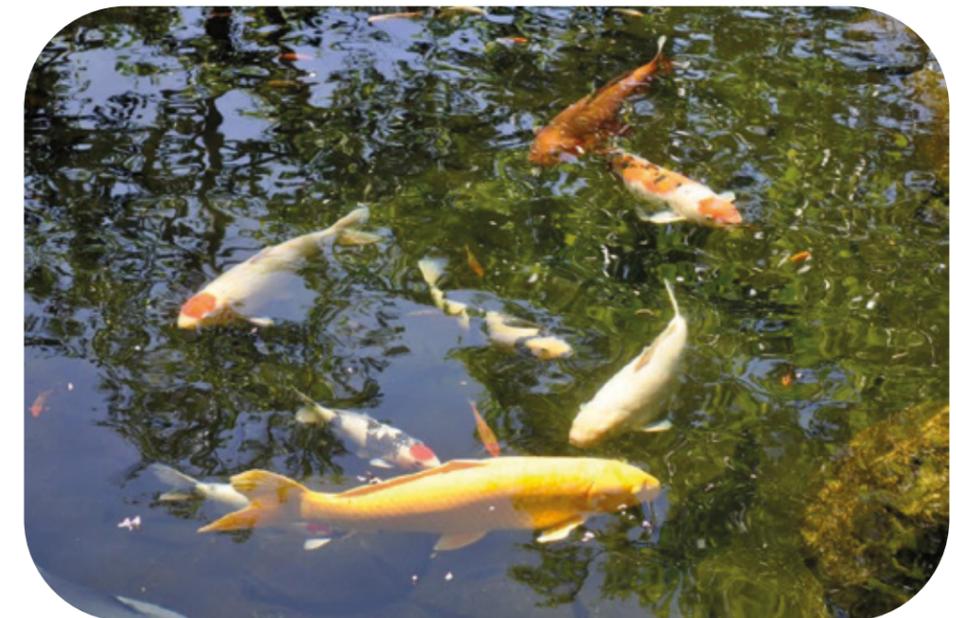
Die bisherige Herangehensweise bei der Beschreibung und Bewertung von Technik- und Umweltprozessen ist überwiegend substanzorientiert. Es wird dabei das Reaktionsverhalten unterschiedlicher ausgewählter Substanzen in einem Prozess mit Methoden der NTA untersucht (Bader et al., 2017). Dies erfolgt mit dem Ziel ein besseres Prozessverständnis zu entwickeln und Einflussmöglichkeiten zu erkennen. Diese substanzorientierte Betrachtungsweise ist durch eine wirkungsorientierte Betrachtungsweise zu ergänzen (Brack, 2003; Brack et al., 2016). Die NTA liefert Informationen über bekannte und unbekannte (nicht identifizierte) Substanzen. Zu deren Bewertung sind Bioassays beispielsweise kombiniert mit einer Probenfraktionierung erforderlich (Stütz et al., 2020). Daher müssen die Möglichkeiten des kombinierten Einsatzes von wirkungsbasierten und substanzbasierten Methoden zur Charakterisierung und Optimierung von Prozessen genutzt und weiterentwickelt werden. Eine Methode für die Ermittlung der Wirkung ist die Wirkungsbezogene Analytik (WBA) unter Einsatz der High Performance Thin Layer Chromatography (HPTLC). Die kombinierte Datenauswertung von Substanz- und Wirkdaten erfordert die Entwicklung erweiterter Algorithmen beispielsweise unter Einbezug von statischen Methoden oder zukünftig auch Ansätze der künstlichen Intelligenz (KI).



Abbildung 2: Schematische Darstellung des Forschungsbedarfs im Bereich Non-Target-Analytik

Zukunftsthemen

- Entwicklung von Methoden zur Aufkonzentrierung hochpolarer Substanzen.
- Erweiterung der NTA um hochpolare Substanzen durch Optimierung der chromatographischen Trennung (z. B. SFC, HILIC, IC, CE).
- Harmonisierung, Standardisierung und Normung der NTA und des Datenaustausches für eine bessere Vernetzung und kollektive Datennutzung (Schwarmintelligenz) (Schulz et al., 2019).
- Neue Techniken zur Identifizierung von Spurenstoffen und Transformationsprodukten
- Automatisierung der Analytik und Datenverarbeitung
- Analytik vor Ort (Online) zur zeitnahen Zustandserfassung (z. B. von Gewässern) v.a. mit LC-HRMS
- Methodenentwicklung zur Erfassung der Veränderung der Wirkung bei Prozessen für Einzelsubstanzen, Substanzgemische und Realproben. Verbesserung der Empfindlichkeit der Bioassays (ng/L-Bereich) und Erweiterung der Endpunkte der WBA.
- Entwicklung einer kombinierten Auswertestrategie für NTA- und Wirkungsdaten auch unter Nutzung von KI mit Einbindung von Metainformationen aus dem untersuchten Prozess.
- Erarbeitung von Ansätzen zur Aggregation von Einzelergebnissen mit dem Ziel, geeignete Kennzahlen für die Ableitung von Maßnahmen zu gewinnen.
- Definition von Zielfunktionen zur Optimierung des analytischen Prozesses unter Nutzung von Wirkung und Substanzinformation. Ermittlung von Prozessgrenzen zur Beurteilung der Resilienz beispielsweise im Hinblick auf Wasserextremereignisse.



3.2 (Öko)toxikologische Verfahren

Autoren: Jochen Kuckelkorn, Sabrina Schiwy und Rita Triebskorn

Hintergrund

Für **Trinkwasser** schreiben das Bundesministerium für Gesundheit und das Umweltbundesamt (UBA) in dem gemeinsamen Bericht an die Verbraucherinnen und Verbraucher über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch (Trinkwasser) in Deutschland (2017-2019), dass die Qualität des Trinkwassers als gut bis sehr gut bewertet werden kann (UBA, 2021). In über 99 % der untersuchten Proben zu den Parametern der Trinkwasserverordnung (TrinkwV) wurden die gesetzlichen Anforderungen, d.h. die Grenzwerte eingehalten. Wasserversorger untersuchen die Roh- und Trinkwässer zusätzlich auf weitere Substanzen, die nicht in der TrinkwV verankert sind z.B. Spurenstoffe wie Arzneimittel, Röntgenkontrastmittel, Duftstoffe in Körperpflege- und Reinigungsmitteln, Biozide, Flammschutzmittel, poly- und perfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS) sowie Stoffe mit hormonähnlichen Wirkungen. Diese Substanzen liegen in Konzentrationen häufig unterhalb toxikologisch bzw. gesundheitlich bedenklicher Wirkschwellen vor. Allerdings gibt es Ausnahmen wie beispielsweise PFAS, die aufgrund ihrer hohen Persistenz in der Umwelt akkumulieren und bereits niedrige chronische Expositionen immuntoxisch wirken können (DeWitt et al., 2019, Dembeck und Lordo, 2022). Eine stetige Weiterentwicklung der toxikologischen Bewertung dieser Substanzen ist aus Vorsorgesicht jedoch von großer Bedeutung. Neben den Trinkwasserleitwerten, die auf soliden chronischen Tierversuchsdaten oder epidemiologischen Studien beruhen, findet das Konzept der Gesundheitlichen Orientierungswerte (GOW) breite Anwendung (UBA, 2003). Das UBA hat 2018 einen Leitfaden veröffentlicht, in dem verschiedene zellbasierte Bioassays vorgeschlagen werden, mit denen die Endpunkte Gentoxizität, endokrine Wirkungen und Neurotoxizität untersucht und gemäß GOW-Konzept bewertet werden können (UBA, 2018). Diese Teststrategie wird fortlaufend erweitert und aktualisiert, so dass neue Entwicklungen, z. B. PMT (persistente, mobile, toxische Substanzen) insbesondere PFAS, sicher und valide bewertet werden können.



Für **Oberflächengewässer** wurde der nach EU-WRRL geforderte gute ökologische und chemische Zustand europäischer Gewässer bislang nicht erreicht. Neben strukturellen Defiziten und Nährstoffbelastungen sind hierfür auch Umweltchemikalien verantwortlich (UBA, 2017).

Gewässerorganismen sind zeitlebens, d. h. kontinuierlich dem gesamten Spektrum an Stoffen im Gewässer ausgesetzt, von denen aber nur ein Bruchteil mittels chemischer Analytik überwacht wird (v. a. prioritäre und flussgebietspezifische Stoffe, Stoffe der Watchlist und weitere landesbehördlich überwachte Stoffe). Viele der nachgewiesenen toxischen Substanzen treten zwar in geringen, aber dennoch oft wirksamen Konzentrationen auf. Im Zuge des Klimawandels ist es zudem abzusehen, dass es durch den Wechsel von Dürreperioden/Trockenwetter und Starkregenereignissen die Qualität der Stoffmischungen sich insgesamt ändert und starke Schwankungen aufweist (Launay et al., 2015; Launay, 2018; Shuliakovich, 2022). Hinzu kommen für Gewässerorganismen zusätzliche Stressoren wie z. B. erhöhte Temperatur oder Sauerstoffmangel.

Die Werkzeuge, die derzeit in der prospektiven und retrospektiven Umweltrisikobewertung von Chemikalien eingesetzt werden, sind nur unzureichend geeignet, diese komplexen Belastungen im Freiland abzubilden bzw. frühzeitig Warnsignale zu erkennen, bevor es zum Artenaussterben kommt. Bei der Beurteilung der biologischen Qualitätskomponenten werden in der Regel Metrics auf

biozönotischer Ebene, wie z.B. der Saprobienindex beurteilt, die in den meisten Fällen keine Indikationskraft für toxische Chemikalien besitzen. Da viele in der Umwelt vorkommenden Stoffe (z.B. Arzneimittel, Pflanzenschutzmittel) sehr spezifische Wirkmechanismen besitzen, führen diese in den meist in der Umwelt vorkommenden Konzentrationen in der Regel nicht zu akut toxischen Effekten, können aber durchaus die Vitalität von Organismen und dadurch langfristig auch das Fortbestehen ganzer Populationen negativ beeinflussen (Köhler et al., 1998; Liess et al., 2021; Schwarz et al., 2017). Dies ist besonders der Fall, wenn z.B. bei Niedrigwasserphasen, zu viele Stressoren gleichzeitig auf bereits geschwächte Organismen einwirken. Große Fischsterben sind im Zuge dessen nicht selten der Fall. Vor diesem Hintergrund ist es wichtig, nicht nur die Präsenz von Organismen als Güteindikator zu verwenden, sondern auch deren Gesundheitszustand zu bewerten.

Ein weiteres Problem besteht darin, dass die Umweltrisikobewertung von Chemikalien in der Regel nur Wirkungen von Einzelsubstanzen betrachtet und Effekte von Transformationsprodukten bzw. Interaktionen mit anderen Stoffen/Stressoren außer Acht gelassen werden. Zudem stehen Standardtests mit oft wenig sensitiven Modellorganismen im Vordergrund (Algen, Daphnien, Fische), wobei vor allem apikale Wirkendpunkte (Tod, Wachstum, Fortpflanzung) von Bedeutung sind. Suborganismische Interaktionen (Biomarker) von Stoffen finden auch hier selten Berücksichtigung.

Sowohl bei der prospektiven als auch der retrospektiven Risikobewertung kommt es somit zu einer Unterschätzung des Risikos für Freilandorganismen. Die Untersuchungen biologischer Wirkungen auf unterschiedlichen biologischen Ebenen mit effektbasierter Analytik, die, je nach Methode, sowohl spezifische Effekte als auch Auswirkungen komplexer Mischungen inkl. Transformationsprodukte aufzeigen kann, sind aus diesem Grund essenziell für eine realistischere Umweltrisikobewertung der Zukunft (Brack et al., 2017; Triebskorn et al., 2019b).

Forschungslücken

- Zellbasierte Bioassays zur Bewertung von PMT-Substanzen (insbesondere PFAS), wirkungsorientierte Konzepte für Mischungstoxizität sowie die Module Neurotoxizität und Endokrine Wirkungen sind für das Trinkwasser noch nicht vollständig optimiert.
- Die Einbindung von *in silico* Modellen (Quantitative Structure Activity Relationship, QSAR) bei der Trinkwasserbewertung befindet sich in der Entwicklung.
- Suborganismische Effekte, die Auskunft über die Vitalität von Gewässerorganismen geben, sind in der Gewässerüberwachung kaum etabliert.
- Daten zu Langzeiteffekten von Spurenstoffen bei sensitiven Arten sind selten vorhanden.
- Auswirkungen von Multistressoren auf Gewässerorganismen in Zeiten des Klimawandels sind wenig untersucht.
- Zusammenhänge zwischen Wirkpotenzialen in der Umwelt, suborganismischen Effekten bei exponierten Organismen und deren Relevanz für Freilandpopulationen sind kaum untersucht.
- Umweltqualitätsnormen existieren nur für sehr wenige Stoffe.
- „-omics-Techniken“ sind noch nicht weit genug entwickelt, um robuste Aussagen zu erlauben
- Experimentelle Zugänge und Modellierungsansätze, durch die Effekte komplexer Stoffmischungen nachgewiesen werden können, sind wenig etabliert.
- Langfristige Auswirkungen einer verbesserter Abwasserreinigung und weitergehender Regenwasserbehandlung auf Ökosysteme sind derzeit nur in Einzelfällen nachgewiesen.

Zukunftsthemen

Trinkwasser

- Weiterentwicklung von Methoden zum Nachweis stoffgruppenspezifischer, Mode of Action (MOA)-basierter Wirkungen
- Erweiterung des Moduls Neurotoxizität zur Abbildung organspezifischer Wirkungen, z.B. bei Effekten auf die Blut-Hirn-Schranke mittels Ko-Kulturen
- Erweiterung des Moduls Endokrine Wirkungen. Bisher werden hauptsächlich Biotests zu östrogenen und androgenen Effekten vorgeschlagen.
- Bewertung von physiko-chemischen Faktoren (PM) im Sinne der Minimierung und Nachhaltigkeit.
- Entwicklung und Etablierung neuer Biotests zur Bewertung von Effekten durch PFAS
- Nutzung von *in silico* Modellen zur Vorhersage von möglichen Effekten großer Stoffgruppen und damit effektiverer Einsatz der vorhandenen Ressourcen

Oberflächenwasser

- Weitergehende Standardisierung effektbasierter Werkzeuge für die Umweltrisikobewertung
- Festlegung von ökotoxikologischen Orientierungswerten (GOW-ÖKO) für häufig nachgewiesene und/oder relevante Stoffe und Stoffgruppen entsprechend des GOW bei der Trinkwasserwasserbewertung
- Effektbasiertes Spurenstoff-Monitoring als Teil der WRRL: Parallele Erhebung von biozönotischen, organismischen und suborganismischen Daten; Kombiniertes Einsatz von *in vitro*- und *in vivo*-Tests für Wirkpotentiale und Biomarkern
- Weiterentwicklung von Methoden zum Nachweis stoffgruppenspezifischer, MOA-basierter Wirkungen
- Integration effektbasierter Tools ins Abwasserabgabengesetz
- Untersuchung der Toxizität von Mischungen
- Etablierung einer effektbasierten Methodenpalette zur Bewertung der Auswirkungen von Maßnahmen aus dem Spurenstoffdialog (4. Reinigungsstufe, Maßnahmen an der Quelle) auf Ökosysteme; Nachweis möglicher schädigender Effekte durch Ozonung
- Weiterentwicklung von -omics-Methoden
- Erstellung von AOPs (adverse outcome pathways) für möglichst viele Substanzen zur Generierung von Plausibilitäts-, bzw. Kausalitätsketten zwischen *in vitro*- und *in vivo*-Ergebnissen sowie zwischen Effekten auf suborganismischer Ebene und apikalen Endpunkten (Ursache-Wirkungsbeziehungen)
- Integration neuer Parameter (Nicht-Modellarten; suborganismische Endpunkte) in die Umweltrisikobewertung
- Neue Ansätze zur Bewertung von Multistressoren
- Berücksichtigung von „confounding factors“ (Drittvariablen, wie pH-Wert und Temperatur) bei der Ableitung von Grenzwerten

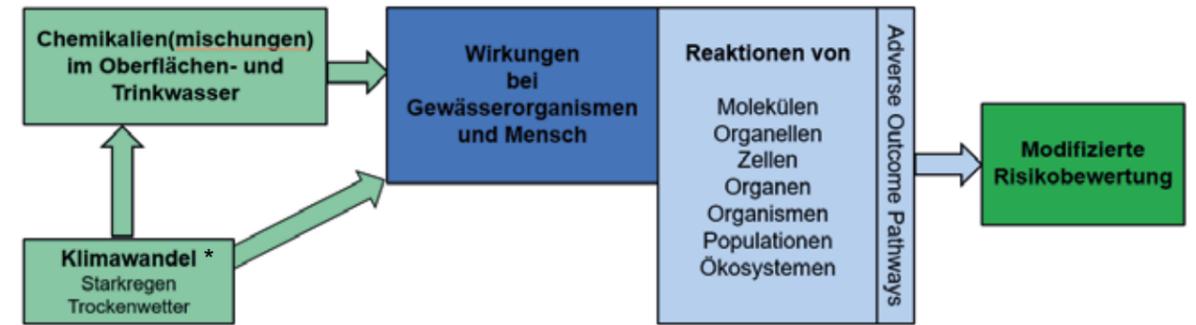


Abbildung 3: Schematische Darstellung des Forschungsbedarfs im Bereich (öko)toxikologische Verfahren; * Starkregen (veränderte Stoffqualität und -Quantität), Trockenwetter (erhöhte Temperatur, geringerer Sauerstoffgehalt, höhere Stoffkonzentration)

3.4 Sensoranalytik

Autoren: Günther Proll und Michael Seidel

Hintergrund

Wasseranalytik mit Sensoren bietet die Möglichkeit, spezifische Parameter einfach, kostengünstig und unabhängig vom Einsatzort analytisch zu erfassen, was im Idealfall ein kontinuierliches Monitoring erlaubt. Es wurden große Fortschritte sowohl bei kommerziellen Sensoren als auch bei anwendungsbezogenen Sensorentwicklungen in der Akademie geleistet, die heute schon eine große Bandbreite an Parametern bei Mikroorganismen und Viren (Karthe et al., 2016; Pilevar et al., 2021), Schwermetallionen (Zulkifli et al., 2018), Pestiziden (Bosch-Orea et al., 2017), organische und anorganische Verbindungen abdecken (Barocio et al., 2021). Bei den bereits kommerziell verfügbaren Sensoren wurden allerdings bisher nur wenige Parameter als Hand-held Versionen verfügbar gemacht. Des Weiteren entstehen durch aktuelle Limitierungen der einzelnen Technologien in vielen Fällen Einschränkungen in der praktischen Einsatzfähigkeit unter realen Bedingungen z.B. durch ungenügende Nachweisgrenzen/Bestimmungsgrenzen und Regenerierbarkeit (z.B. Sensoren für Mikroorganismen, Arzneimittelrückstände oder Pestizide), den Bedarf an umgebender Infrastruktur (betrifft fast alle Sensortypen) oder durch die Notwendigkeit der Betreuung durch Fachpersonal mit großer Hands-on-Time (z.B. wirkungsbezogene Analytik). Dabei bietet gerade der Einsatz von Sensoren und deren intelligenter Vernetzung in Kombination mit den neuen Möglichkeiten der KI (Ullo and Sinha, 2020) eine ideale Perspektive, um sowohl lokale, regionale als auch übergreifende räumliche und zeitliche Veränderungen von Ist-Zuständen zusätzlich zur etablierten Analytik kontinuierlich zu erfassen. Daraus ließen sich eine verbesserte Reaktion/Regelungen z.B. für Betriebsabläufe in der Wasserwirtschaft bzw. der Steuerung bestimmter Infrastruktur ableiten, was wiederum die Nachhaltigkeit unserer Ressourcennutzung verbessern kann.



Forschungslücken

Parameter und analytische Qualität:

- Einfacher und sicherer Nachweis von Mikroorganismen / Pathogenen (Bakterien und Viren) aus verschiedenen Wasserproben unter Berücksichtigung der notwendigen automatisierten Probenahme, Probenvorbereitung und Aufkonzentrierung.
- Unterscheidung von vermehrungsfähigen und toten Mikroorganismen sowie kostengünstigere und wartungsärmere Sensoren mit schnelleren Ansprechzeiten.
- Biosensoren für die Quantifizierung von Mikroschadstoffen, wie z.B. Arzneimittelrückständen, Endokrine Disruptoren, anthropogenen Spurenstoffen oder Toxine.
- Mangel an geeigneten Erkennungsstrukturen; ungenügende Stabilität / Regenerierbarkeit.
- Gruppenspezifische Erkennungsstrukturen (wie z.B. die ADDA Gruppe bei Microcystinen), die die Quantifizierung von Substanzklassen ermöglichen.
- Mikrosensoren zur Bestimmung von anorganischen Parametern im Wasser, wie z.B. Nitrat, Phosphat, Ammonium müssen für die Anwendbarkeit hinsichtlich Handhabbarkeit, Robustheit, Genauigkeit und Feldtauglichkeit weiterentwickelt werden.

Miniaturisierung und Parallelisierung zur Vereinfachung der Betriebsanforderungen:

- Reduzierung des Energiebedarfs, der Baugröße und Verbesserung der Benutzerfreundlichkeit /Robustheit für eine bessere Feldtauglichkeit bei niedrigen Kosten.

Datenübertragung, Datenmanagement und Vernetzung für Wasser 4.0:

- Intelligente Vernetzung von Sensoren als Grundvoraussetzung für die Nutzbarmachung von Sensordaten zusammen mit anderen analytischen Datenquellen.
- Einbindung von Metadaten und Einsatz von KI-Methoden bzw. „Machine Learning“ zur Entwicklung von Wasser 4.0. für Trendanalysen und Frühwarnsysteme.

Zukunftsthemen

Überführung neuer Sensortechnologien in ihre Anwendbarkeit für wasserchemische Analysen:

- Weiterentwicklung der Endproduktkontrolle hin zur Prozesskontrolle.
- KI-basierte Aus- und Bewertungsstrategien für die Modellierung lokaler Zustände und für die Vorhersage von kritischen Betriebszuständen und Szenarien. Online-Sensorik wird zusammen mit datengetriebenen Modellen zur Prozesssteuerung weiterentwickelt. Intelligente Steuerung kritischer Infrastrukturen der Wasserwirtschaft (z.B. 4. Reinigungsstufe von Kläranlagen). Automatisierte Erkennung von Sensorfehlanzeigen oder Güteveränderungen.

Monitoring von Spurenstoffen, Mikroplastik und Mikroorganismen:

- Polare Stoffe (insb. Arzneimittelrückstände), die Kläranlagen passieren können und damit die Trinkwassergewinnung erschweren machen.
- Monitoring von Mikroplastik durch Sensoren
- Sensoren für die Überwachung von Mikroorganismen
- Reduktion der Keimzahl, Identifizierung von Pathogenen (Bakterien und Viren bzw. Bakteriophagen), Charakterisierung bestimmter Eigenschaften wie z. B. Antibiotika-resistenzen.

Sensoren für die wirkungsbezogene Analytik in Kombination mit klassischer Analytik und der Non-Target Analytik:

- Biosensoren mit Erkennungsstrukturen wie z.B. Rezeptoren zur Erfassung von Summenparameter (entsprechend Wirkpotenzial) für die einfache Einordnung der Wirkung (z.T. auch Toxizität) von neu auftretenden Substanzen und deren Abbauprodukte bzw. für die Risikobewertung von kleinen Wirkstoffmolekülen und deren Abbauprodukte/Metabolite.

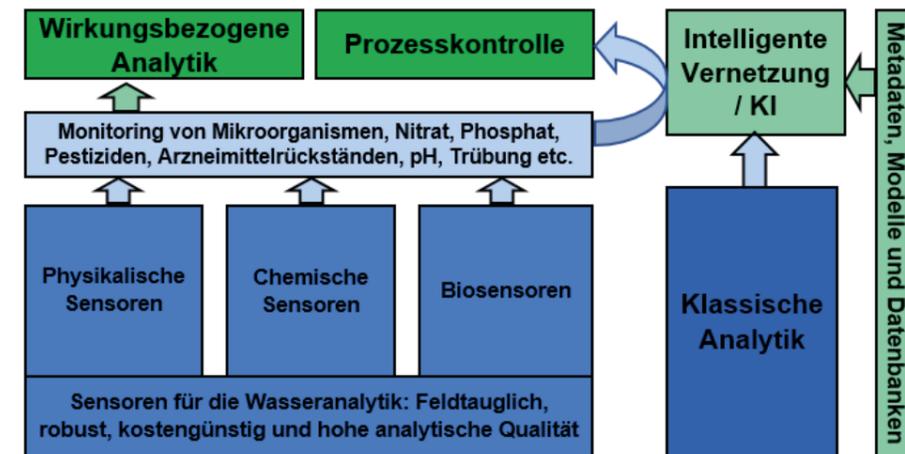


Abbildung 4: Forschungsthemen im Bereich der Sensoranalytik mit Wasser 4.0.

3.5 Umweltisotope - Substanz-spezifische Stabilisotopenanalytik zur Charakterisierung von Herkunft und Transformation von Schadstoffen

Autoren: Martin Elsner, Thomas Hofstetter und Daniel Hunkeler

Hintergrund

Für eine Bewertung von Chemikalien in Grund- und Oberflächenwasser ist nicht nur deren Identifizierung und Quantifizierung wichtig, sondern ebenso Herkunft und Abbauverhalten. Die Substanz-spezifische Isotopenanalytik („Compound-specific Isotope Analysis“, CSIA) misst natürlich vorkommende stabile Isotopenverhältnisse und liefert damit Information, die über die qualitative und quantitative Analytik gängiger massenspektrometrischer Verfahren hinausgeht. Als „isotopischer Fingerabdruck“ geben Isotopenverhältnisse wie $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$, $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$, $^{37}\text{Cl}/^{35}\text{Cl}$ oder $^2\text{H}/^1\text{H}$ Auskunft über unterschiedliche Quellen der gleichen Chemikalie, und deren Änderungen können als „isotopischer Fußabdruck“ als Indiz für unterschiedliche Abbaureaktionen dieser Substanz dienen (Jochmann and Schmidt 2015, Maier et al. 2014, Maier et al. 2016, Schmidt and Jochmann 2012). Mit dieser Zuordnung von Quellen/Vorgängerverbindungen („precursors“) bzw. Um- und Abbaureaktionen stellt die Isotopenanalyse eine wichtige Ergänzung des umweltanalytischen Portfolios dar. Während der Ansatz in der Bewertung von Nitratbelastungen und Altlasten für einzelne Substanzklassen bereits etabliert ist, sind Anwendungen zum Verhalten von Spurenschadstoffe wie Pestizide und Pharmazeutika sowie zur Charakterisierung von Transformationsreaktionen noch in der Erkundung.



Forschungslücken

Aktuelle Forschungslücken der CSIA lassen sich anhand des Bezugs zu Praxis und Forschung in drei Gruppen einteilen (s. auch Tabelle 1).

- a) In wichtigen Bereichen wie der Altlastenbeurteilung und Hydrologie, ist die Isotopenanalytik *ausgereift* und ermöglicht *anwendungsorientierte Untersuchungen* von Herkunft und/oder Transformation von Stoffen. Dazu gehören die ^2H und ^{18}O Quellensignaturen zur Bestimmung der Wasserherkunft, ^{15}N und ^{18}O Analytik von Nitrat, sowie CSIA diverser organischer Schadstoffe. Etablierte analytische Verfahren erlauben ^2H -, ^{15}N -Analysen im ppm Bereich und ^{13}C - und ^{37}Cl -CSIA im ppb Bereich wie sie typischerweise in Altlasten auftreten. Für Benzininhaltsstoffe (BTEX, MTBE), chlorierte Lösemittel (PCE, TCE, *cis*-DCE, Vinylchlorid, Chloroform, Tetrachlorkohlenstoff) und Sprengstoffe (TNT, Nitroaromaten) sind analytische Verfahren nicht nur routinemäßig verfügbar, sondern es gibt auch zahlreiche Anschauungsbeispiele für Quellenzuordnung und zum Aufzeigen von natürlichem Abbau an kontaminierten Standorten. Weitergehender Handlungsbedarf besteht hinsichtlich der Unterstützung von Anwendern wie Ingenieurbüros und Behörden: vielfach werden die Möglichkeiten von CSIA noch zu wenig ausgeschöpft, um im Rahmen einer Altlastensanierung den Beweis für natürlichen Abbau zu erbringen und damit gesetzliche Vorgaben zu erfüllen. Helfen können hier einfach zugängliche Verzeichnisse von Isotopenlaboratorien und deren Expertise, sowie Weiterbildung und anwenderfreundliche IT-basierte Interpretationshilfen.
- b) Die *laufende Forschung* hat zum Ziel, CSIA auch für die Herkunft und Abbau von Spurenstoffen aus der Landwirtschaft und dem urbanen Wasserkreislauf zu entwickeln. Die Machbarkeit der Konzepte wurde an einzelnen Fallstudien gezeigt, und für zahlreiche Pestizide existieren bereits analytische Methoden. Aktuell sind Konzepte zur Verbesserung der Sensitivität und Selektivität analytischer Verfahren und bezüglich der Interpretation beobachteter Isotopenfraktionierung notwendig. Wichtig ist dies besonders für die Isotopenanalytik von Spurenstoffen (Pestizide, Pharmaka, Haushaltschemikalien) welche in Gewässern in sehr viel niedrigeren Konzentrationen vorkommen als Industriechemikalien in Altlasten. Dies erfordert einerseits selektive Anreicherungsverfahren für generische Probenaufbereitungs- und Analyseprotokolle. Andererseits liegt ein Fokus auf Prozessstudien, um Isotopenfraktionierung in lebenden Organismen abhängig von niedrigen Konzentrationen und Enzymaktivität zu verstehen. Eine Erweiterung des Verständnisses über isotopenfraktionierende Prozesse und mögliche Quellensignaturen von Schadstoffen ist von besonderer Bedeutung für die Interpretation von Isotopensignaturen von historischen Boden- und Sedimentkontaminationen, wo sich die Frage stellt, inwieweit aus gebundenen Rückständen Langzeitquellen entstehen.
- c) *Perspektivisch* gilt es, das Substanzspektrum für CSIA kontinuierlich zu erweitern (weitere Verbindungen und weitere Elemente (z.B. Cl, Br, S)). Dies betrifft wichtige Substanzklassen wie poly- und perfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS), Antibiotika und Flammschutzmittel, aber auch Substanzen, die während Aufbereitungsverfahren in technischen Systemen erst entstehen. Isotopenanalysen zur Beurteilung der Trink- und Abwasseraufbereitung zeigen, dass Desinfektionsnebenprodukte wie halogenierte Kohlenwasserstoffe und Nitrosamine Schlüsse auf deren Bildungsprozesse zulassen. Da diese Substanzen aus verschiedenen

Quellen mit unbekannter isotopischer Zusammensetzung gebildet werden, gilt es, sowohl Quellensignaturen (reaktive Gruppen in organischem Material, typische anthropogene Chemikalien) als auch die Isotopenfraktionierung der Bildungsprozesse zu charakterisieren.

Als Vision für die Zukunft liegt die Herausforderung schließlich darin, Isotopenverhältnisse nicht nur im Mittel über molekulare Strukturen zu bestimmen, sondern neue analytische Ansätze zu entwickeln, welche Isotopeninformation an einzelnen molekularen Positionen zugänglich machen. Das Beispiel aus den Lebensmittelwissenschaften, wo die Verfügbarkeit größerer Probenmengen eine solche Analytik bereits ermöglicht hat, zeigt, dass die Reichhaltigkeit der zusätzlichen Information einem Quantensprung für Quellenzuordnung und Reaktionsaufklärung gleichkäme.

Tabelle 1: Forschungslücken im Bereich der Stabilisotopenanalytik

Zielsetzungen	Stoffklassen und Isotopen	Kenntnisstand*		
		Analytik	Isotopen-effekte	Interpretation und Modellierkonzepte
Quellensignaturen zur Bestimmung der Wasserherkunft (a)	Isotope in Wasser ^2H und ^{18}O			
CSIA zur Untersuchung von Herkunft und Abbau von Chemikalien bei Altlasten (a)	Treibstoffe, Industriechemikalien u. Zusatzstoffe, Sprengstoffe, POPs (legacy pollutants) ^{13}C , ^2H , ^{15}N , ^{37}Cl			
CSIA zur Untersuchung von Herkunft und Abbau von Spurenstoffen aus der Landwirtschaft und dem urbanen Wasserkreislauf (b)	Pestizide, Pharmaka, Haushaltschemikalien, POPs, etc. ^{13}C , ^2H , ^{15}N , ^{37}Cl			
CSIA zur Untersuchung von Abbau und Bildung von Stoffen in technischen Systemen (Trinkwasser-Abwasserbehandlung) (c)	Mechanismen der Bildung von Desinfektionsnebenprodukten (z.B. NDMA) von Pestiziden, Pharmaka, Haushalts-/ Industriechemikalien, etc. ^{13}C , ^2H , ^{15}N , ^{37}Cl , ^{81}Br			

*Grün: hoch, gelb: mittel, rot: gering

Zukunftsthemen

- Erweiterung des Substanzspektrums von CSIA für weitere Verbindungen (PFAS, Antibiotika, Flammschutzmittel) und neue Elemente (Cl, Br, S).
- Nutzen von CSIA, um Transformationen in technischen Aufbereitungssystemen wie die Bildung von Desinfektionsnebenprodukten besser zu verstehen.
- Steigerung der analytischen Empfindlichkeit von CSIA durch selektive Anreicherungsverfahren mit generischen Probenaufbereitungs- und Analyseprotokollen.
- Prozessstudien, um Isotopenfraktionierung beim biologischen Abbau in lebenden Organismen abhängig von niedrigen Konzentrationen und Enzymaktivität besser zu verstehen.
- Anwendung der CSIA zur Interpretation von Isotopensignaturen in historischen Boden- und Sedimentkontaminationen (gebundene Rückstände als Langzeit-Kontaminationsquellen?)
- Positions-spezifische Isotopenanalytik zur vollen Erschließung isotopischer Information in organischen Schadstoffmolekülen.
- Unterstützung von Anwendern (z. B. Ingenieurbüros und Behörden), um CSIA als Methode für die Unterscheidung von Abbau- und Verteilungs-/Verdünnungsprozessen zu ermöglichen.

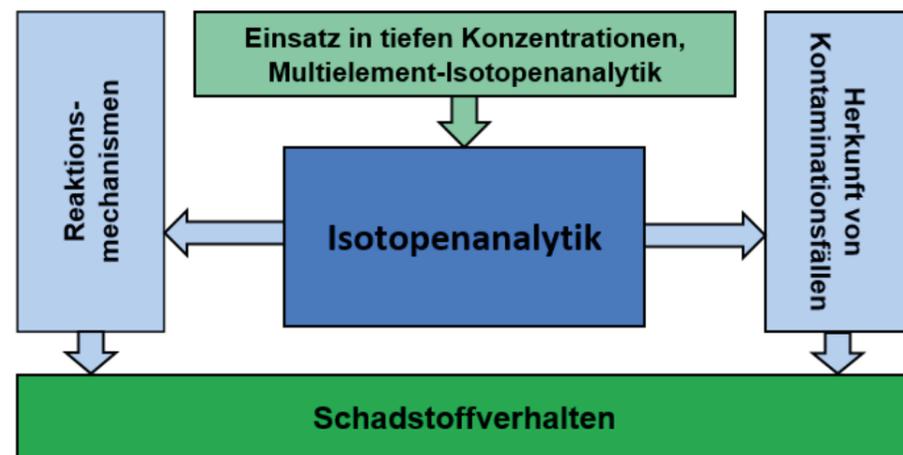


Abbildung 5: Schematische Darstellung der Forschungsthemen im Bereich Stabilisotopenanalytik

4 Emissionen

4.1 Ausbreitung und Transport organischer Spurenstoffe in der aquatischen Umwelt

Autorin: Gudrun Maßmann

Hintergrund

Eine unübersichtliche Anzahl verschiedenster Chemikalien wird auf unterschiedlichsten Pfaden und aus einer Vielzahl an Quellen in den Wasserkreislauf eingetragen (Arman et al. 2021, Karakurt et al. 2019, Schwarzenbach et al. 2010). Eine genaue Quantifizierung dieser Einträge ist oftmals schwierig (Wang et al. 2020). Mit Blick auf die punktuellen Einträge von Spurenstoffen in den Wasserkreislauf sind vor allem die kommunalen und industriellen Kläranlagen zu nennen, die geklärte Abwässer in Fließgewässer abgeben (Michael et al. 2013, Tran et al. 2018). Diese Quellen sind bekannt und am ehesten quantifizierbar. Einträge aus anderen punktuellen Quellen wie der Eintrag von Chemikalien aus Altlasten z.B. an Altstandorten, durch undichte Abwasserleitungen, Öltanks o. Ä. sind per se unbeabsichtigt und deshalb oft (zunächst) nicht bekannt und weniger gut untersucht. Im Gegensatz zu den Punktquellen sind diffuse Einträge, z.B. von Pflanzenschutzmitteln oder Bioziden aus der Landwirtschaft oder Siedlungen nur sehr schwer zu quantifizieren. Bei starkem Oberflächenabfluss, z.B. nach Starkregenereignissen, können diese Substanzen plötzlich in die Fließgewässer eingetragen werden und zu pulsartigem Auftreten in Gewässern führen (Reichenberger et al. 2007).



Chemikalien können auch über den Boden in das Grundwasser und schließlich in die oberirdischen Gewässer eingetragen werden (Lapworth et al. 2012). Neben der Schwierigkeit Quellen eindeutig zu identifizieren und zu quantifizieren wird eine Interpretation von Eintragspfaden und dem sich anschließenden Verhalten (Mobilität und Transformation) in der Umwelt auf diesem Pfad durch die Tatsache erschwert, dass die Verweilzeiten im Untergrund oftmals sehr hoch sind (Lapworth et al. 2012). Die Aufenthaltszeiten in den unterschiedlichen Umweltkompartimenten variieren sehr deutlich: Während die Aufenthaltszeit von Wasser in der Atmosphäre und in Fließgewässern eher in der Größenordnung von Tagen liegen, sind es im Boden und in Seen eher Jahre. Die Verweilzeit im Grundwasser liegt im Bereich von Jahrzehnten bis Jahrhunderten, wobei das Grundwasser selbst sogar auch deutlich älter sein kann (Lapworth et al. 2012). Diese starke Zeitverzögerung auf dem Weg des Grundwassers zum Vorfluter führt dazu, dass die dort eingetragenen Substanzen bereits vor Jahren bis Jahrzehnten in die Umwelt eingetragen wurden. Wenn diese Substanzen sich dann verzögert im Untergrund bewegen (Retardation), verschärft sich diese Problematik der zeitlichen Entkoppelung von Detektion und Einträgen noch mehr. Erschwerend kommt hinzu, dass der Untergrund (Böden, Grundwasserleiter, Gewässersohle) mit Bezug auf die Wasserleitfähigkeiten aber auch die Reaktivität generell sehr heterogen ist.

In Fließgewässern und im davon beeinflussten Grundwasser (Uferfiltrat), sowie in der hyporheischen Zone, kann es zudem eine deutliche zeitliche Dynamik von physikochemischen Faktoren (Abfluss, Fließgeschwindigkeit, Temperaturen, pH-Werte, Redoxbedingungen) und der für den Abbau relevanten Wasserinhaltsstoffe (z.B. Elektronenakzeptoren wie Sauerstoff oder Nitrat) und somit eine starke tägliche bzw. saisonale Variation der Umweltbedingungen geben, die ein Prozessverständnis erschweren (Henzler et al. 2014, Sanz-Prat et al. 2020).

Forschungslücken

Untersuchungen zum Umweltverhalten von Chemikalien im Grundwasser beschränken sich meist auf Altlastenstandorte oder, aufgrund der Relevanz für die Trinkwassergewinnung, auf den Pfad vom Oberflächenwasser zum Grundwasser, während der im Wasserkreislauf eigentlich dominierende umgekehrte Weg vom Grundwasser zum Vorfluter und die daraus resultierenden diffusen Stoffeinträge in Oberflächengewässer weitaus weniger untersucht sind. Dementsprechend ist die Größenordnung diffuser Stoffausträge aus dem Grundwasser in das Oberflächenwasser kaum bekannt und quantifizierbar. Hinzu kommt der oben beschriebene Zeitverzug auf diesem Pfad, so dass sich die eigentlichen Stoffeinträge oft kaum rekonstruieren lassen, was eine Modellierung auf Einzugsgebiets-Skala bislang praktisch unmöglich macht.



Auch bezüglich der Selbstreinigungsleistung von Fließgewässern vor allem durch den hyporheischen Austausch und die Wirkungsweise von Revitalisierungsmaßnahmen von Fließgewässern gibt es noch große Forschungslücken.

Prozessstudien werden meist im Labor durchgeführt, oft unter gänzlich anderen Bedingungen als im Grundwasser (z.B. Batchversuche unter Anwesenheit von Sauerstoff versus laminare Grundwasserströmung in anoxischen Grundwasserleitern), während Felddaten und in-situ Prozessstudien zum Umweltverhalten im Grundwasser jenseits der Uferfiltration selten sind.

Die große Herausforderung besteht also darin, relevante Stoffe und ihre Quellen zu identifizieren bzw. für die Vergangenheit zu rekonstruieren, Strömungs- und Transportwege im Untergrund zu kennen bzw. zu modellieren und letztlich das reaktive Umweltverhalten unter Berücksichtigung der räumlich und zeitlich variablen hydrochemischen Bedingungen zu ermitteln.

Zukunftsthemen

- Prozessstudien zur Mobilität, Verhalten und Transformation von Wasserinhaltsstoffen in der aquatischen Umwelt unter kontrollierten Umweltbedingungen (Einfluss von Redoxbedingungen, pH, Temperatur, Sediment/Bodeneigenschaften),
- Hochaufgelöstes Monitoring von Spurenstoffen und Transformationsprodukten zur Erfassung räumlicher Heterogenität (Grundwasserleiter) und zeitlicher Dynamik (Fließgewässer, Uferfiltration) von Stoffeinträgen.
- Mechanistische in-situ Untersuchungen um ein Verständnis über das Verhalten von Spurenstoffen und Transformationsprodukten insbesondere bezüglich von Reaktionsraten unter realen Feldbedingungen zu generieren.
- Stärkere Anwendung von reaktiven Stofftransportmodellierungen zur integrativen Betrachtung von Strömung, Transport und Reaktionen unter variablen Umweltbedingungen
- Untersuchung der Auswirkungen der durch den Klimawandel hervorgerufenen Veränderungen (u. a. Temperaturerhöhung, Verringerung der Bodenwassergehalte, verändertes Abflussverhalten in Fließgewässern etc.) auf Mobilisation und Transformation von Spurenstoffen
- Bessere Auflösung des Altersspektrums in Catchment-Modellen, die derzeit stark vereinfacht sind.

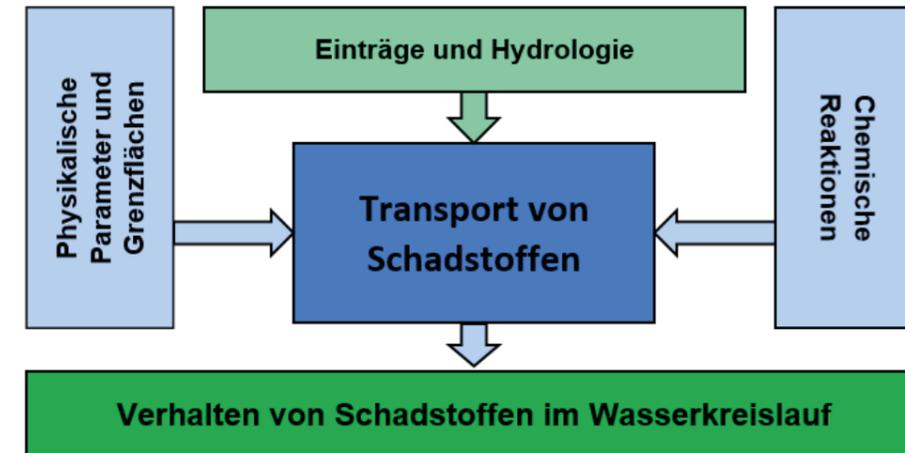


Abbildung 6: Schematische Darstellung der Forschungsthemen im Bereich Ausbreitung und Transport von Spurenstoffen

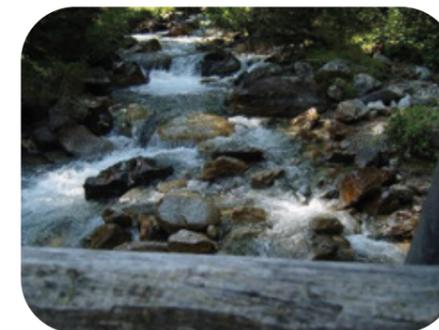
4.2 Umweltverhalten von persistenten, mobilen und toxischen Stoffen

Autoren: Gabriel Sigmund, Thorsten Reemtsma

Hintergrund

Persistente und hoch mobile Stoffe können nur unzureichend in Kläranlagen entfernt werden (Jin et al., 2020; Reemtsma et al., 2016). Aufgrund ihrer hohen Mobilität und Persistenz ist ihr Potential zur Grundwasserkontamination erheblich. Eine Kombination aus Punktquellen (z.B. Pharmazeutika aus Kläranlagen) und diffusen Quellen (z.B. Pestizide aus der Landwirtschaft) resultiert in einer weitflächigen räumlichen Verteilung solcher Stoffe. Dies stellt ein beachtliches Risiko für die nachhaltige Nutzung der Ressource Wasser dar.

Durch jüngere Entwicklungen in der analytischen Chemie wurden hochmobilen Stoffe vermehrt in der Umwelt detektiert sowie in Laborstudien auf ihr Umweltverhalten untersucht (Bieber et al., 2017; Hollender et al., 2017; Neuwald et al., 2021). Diesbezügliche wissenschaftliche und regulatorische Arbeiten resultierten in der Definition zwei neuer Stoffgruppen: persistente mobile und toxische (PMT) Stoffe sowie sehr persistente und sehr mobile (vPvM) Stoffe (Neumann and Schliebner, 2019). Diese beiden Stoffgruppen sollen ab 2022 ins europäische Chemikalienrecht (REACH) aufgenommen werden.



Die vorgeschlagenen Richtwerte für die PMT/vPvM Regulatorik wurden dabei mit bestehenden Grenzwerten in REACH abgestimmt. Für die Parametrisierung von Persistenz und Toxizität wurde ein analoges Schema zur existierenden Regulatorik für persistente bioakkumulierende und toxische

(PBT) Stoffe sowie sehr persistente und sehr bioakkumulierende (vPvB) Stoffe vorgeschlagen (Neumann and Schliebner, 2019). Die Mobilität wird in Anlehnung an existierende Pestizidverordnungen am Kohlenstoff-normalisierten Sorptionskoeffizienten K_{OC}/D_{OC} sowie teilweise auch am Octanol-Wasser Verteilungskoeffizienten K_{OW}/D_{OW} festgemacht (Neumann and Schliebner, 2019).

In den kommenden Jahren wird die derzeit noch dünne Datenlage für viele potentielle PMT/vPvM Stoffe eine große Herausforderung darstellen. Aufgrund mangelnder Daten wurde beispielsweise in einem Screening aller bis 2017 in REACH registrierten Stoffe für 36 % aller Stoffe (> 5500 Stoffe) keine ausreichende PMT/vPvM Einschätzung getroffen (Arp and Hale, 2019). Insbesondere sind hier große Lücken zur Persistenz und der Toxizität hervorzuheben (Hale et al., 2022). Zusätzlich gibt es ein klares Bekenntnis der Europäischen Kommission, zukünftig mehr Mobilitätsdaten für die Regulatorik einzufordern (EC, 2020). Jedoch ist unklar, ob- und in welchem Umfang bestehende Sorptionskonzepte, welche für ungeladene Stoffe entwickelt wurden, auch zur Mobilitätsabschätzung für ionische und ionisierbare Stoffe (85% aller gemessenen PMT/vPvM Stoffe in einem ersten Umweltscreening) geeignet sind (Sigmund et al. 2022).

Forschungslücken

Obwohl es tausende potenziell umweltrelevanter Chemikalien gibt, fehlt das Instrumentarium für eine effektive Einschätzung hinsichtlich ihrer Persistenz und Mobilitäts- (PM)-Eigenschaften. Deshalb hat sich die wissenschaftliche Gemeinschaft in den letzten 20 Jahren auf eine begrenzte Zahl besonders prominenter Stoffe konzentriert (Kristiansson et al., 2021). In der PMT/vPvM Forschung sind hierbei per- und polyfluorierte Alkylverbindungen (PFAS), einige Pestizide und Pharmazeutika und wenige Industriechemikalien (z.B. Trichlorethen) hervorzuheben.

Um das Risikopotential von PMT/vPvM Stoffen zufriedenstellend zu beleuchten, bedarf es weiterer Entwicklungen auf mehreren Feldern:

Verbreiterte Kenntnisse über das Auftreten von PM-Stoffen durch Suspect- und NTA-Screening. Hierzu sind weiterhin analytische Methoden in Hinblick auf hoch polare Spurenstoffe zu verbessern und verbreitet anzuwenden. Dies ist auch ein Weg, um Stoffe von besonderem Interesse zu identifizieren, für die auch die mögliche Toxizität geklärt werden muss (PMT-Stoffe).

Vorhersagemöglichkeit von Persistenz und Mobilität basierend auf der Struktur organischer Moleküle: Die begrenzte Anzahl an bisher untersuchten Stoffen sowie die vergleichsweise aufwendigen Protokolle zur Bestimmung von Persistenz und Toxizität stellen dabei eine erhebliche Hürde dar. Geeignete Parameter für die Mobilitätsabschätzung von ionischen und ionisierbaren Stoffen müssen weiterentwickelt werden, um ihr komplexes Sorptionsverhalten adäquat abzubilden. Außerdem sind hier auch Transformationsprodukte zu berücksichtigen, welche teilweise höhere PMT Risiken darstellen können als die Ausgangsstoffe.

Modelle zur Vorhersage der Ausbreitung von PM-Stoffen im Wasserkreislauf bedürfen weiterer Entwicklungen, um das reaktive Transportverhalten unter Berücksichtigung der räumlich und zeitlich variablen hydrochemischen Bedingungen zu ermitteln. Besonders hervorzuheben ist hierbei eine bessere Zusammenführung von wasserchemischen und hydrologischen Ansätzen zur Mobilitätsvorhersage für ionische und ionisierbare Verbindungen.

Diese Fortentwicklungen würden wertvolle Beiträge der Wissenschaft zur Stoffregulation darstellen und somit helfen, zukünftige Probleme zu vermeiden.

Verfahren zur Entfernung von PM-Stoffen: Zur Behandlung bereits eingetretener Kontaminationen ist das Potential bestehender und neuer Behandlungsverfahren auszuloten und zu verbessern. Zu nennen sind dabei spezifische Sorbenzien, die Membranfiltration sowie die weitergehenden Oxidationsverfahren (Advanced Oxidation Processes).

Zukunftsthemen

- Bessere Vorhersage der Sorption ionischer und ionisierbarer Verbindungen durch erweiterte Parametrisierung und Kategorisierung von Substanzklassen
- Erweiterung des K_{OC} Konzeptes um Mobilität und Sorption von sehr polaren und ionisierbaren Verbindungen zwischen Böden besser vergleichbar zu machen
- Experimentelle Ansätze zur kombinierten Untersuchung von Persistenz unter realistischen wasserchemischen Bedingungen für ein optimiertes kosteneffizientes Screening nach PM Stoffen
- Harmonisierte Datensammlung zur besseren Modellentwicklung
- Weiterentwicklung von Monitoring-Ansätzen und bessere Abstimmung mit labor- und modellbasierten Verfahren zur Risikoabschätzung
- Weiterentwicklung zur Untersuchung von komplexen Stoffmischungen bezüglich Mobilität, Persistenz sowie Toxizität

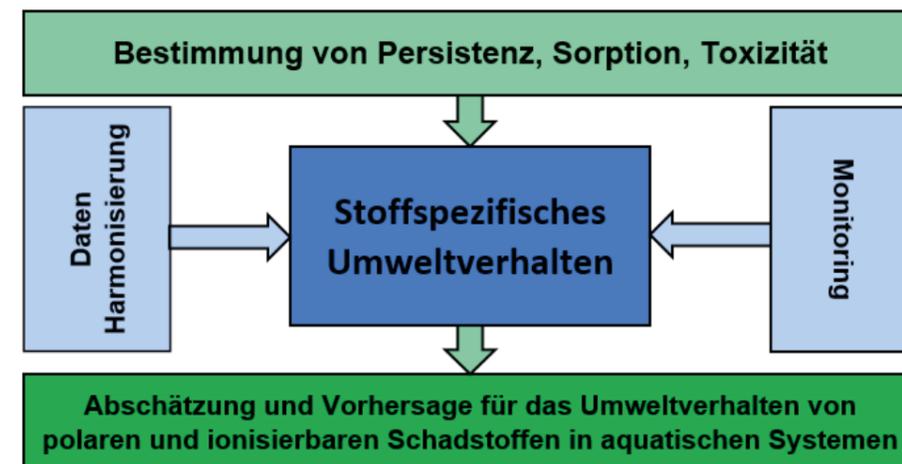


Abbildung 7: Schematische Darstellung der Forschungsthemen im Bereich Umweltverhalten von persistenten, mobilen und toxischen Stoffen

4.3 Mikro- und Nanoplastik

Autor: Thorsten Hüffer

Hintergrund

Die Forschung zu Vorkommen, Verhalten und Wirkungen von Mikro- und neuerlich auch Nanoplastik in der Umwelt hat in den vergangenen Jahren massiv zugenommen. Dabei ist festzuhalten, dass der Begriff Mikroplastik ein breites Spektrum an partikel-spezifischen Parametern umfasst (Rochman et al., 2019). Eine einheitliche Definition existiert bisher nicht und der Diskurs fokussiert sich bisher auf die Skalierung der Partikelgrößen (Gigault et al., 2018; Thompson et al., 2004). Neben physikalischen Größen, wie der der Form, der Partikelanzahl, die durchschnittliche Partikelgröße und deren Verteilung, sind auch chemische Eigenschaften, wie die chemische Zusammensetzung des Polymers und die Beschaffenheit der Partikeloberflächen von Relevanz (Hartmann et al., 2019). Eine besondere Herausforderung ist dabei die Entwicklung analytischer



Verfahren, die nicht nur die Detektion und Auswertung, sondern auch die Probenahme und Probenvorbereitung umfassen (Braun et al., 2020). Die bisherigen Ansätze zu Detektion beinhalten neben der anfänglich oft benutzten, aber stark fehleranfälligen optischen Identifikation, die Bestimmung mittels Raman- oder Infrarotspektroskopie, die Information auf Partikelbasis liefern und spektrometrische Methoden (wie Pyrolyse GC-MS) zur Bestimmung von Gesamtgehalten. Dies führte in Kombination mit unterschiedlichen

Konzepten der Probenahme zu einer breit gestreuten Angabe der Mikroplastikkonzentration in verschiedenen Umweltmatrices (Leusch and Ziajahromi, 2021).

Forschungslücken

Eine zentrale Herausforderung bei der Bewertung der Risiken von Mikro- und Nanoplastik für Mensch und Umwelt besteht in der Variabilität der physikalischen und chemischen Eigenschaften, der Zusammensetzung und der Konzentration der Partikelanzahl. Die dominierende Quelle für Mikro- und Nanoplastik ist häufig die Fragmentierung größerer Kunststoffe oder der Produktverschleiß. Die Fragmentierungsrate unter natürlichen Bedingungen und die Eigenschaften der entstehenden Partikel sind jedoch weitestgehend unbekannt. Diese Herausforderungen verhindern die prospektive Einschätzung von Exposition und Risiko. Weiterhin bestehen Plastikprodukte neben Polymeren auch aus einer Vielzahl verschiedener Zusatzstoffe. Diese haben zum Teil nachgewiesene Effekte auf Organismen und Ökosysteme und können über lange Zeiträume freigesetzt werden (Henkel et al., 2022). Damit stellt Plastik und deren Fragmentierungsprodukte eine Quelle für Schadstoffe in der Umwelt dar wodurch sie für Organismen und Pflanzen zugänglich werden und in das menschliche Nahrungsnetz gelangen können (Castan et al., 2023). Wie Umwelteinflüsse die Freisetzungprozesse beeinflussen ist nur für einige wenige Polymere und Zusatzstoffe wie Weichmacher aus Polyvinylchlorid untersucht.

Zwar wurde mehrfach eine Standardisierung und Harmonisierung der Analysemethoden zur Untersuchung von Mikro- und Nanoplastik in der Umwelt gefordert, doch die Komplexität hat zu einer Entwicklung verschiedener analytischer Methoden und Werkzeuge geführt. Während

unterschiedliche Forschungsfragen unterschiedliche Methoden erfordern, was eine Standardisierung oft unpraktisch macht, bleibt es wichtig, die Ergebnisse dieser verschiedenen Methoden zu harmonisieren. Erste Ansätze zum Erstellen von Qualitätsparametern und deren Standards bestehen bisher auf Basis von Auswertung der wissenschaftlichen Literatur (Hermesen et al., 2018). Neben der Harmonisierung von Methoden und Qualitätssicherungspraktiken zur Sicherstellung der Vergleichbarkeit und Wiederholbarkeit von Forschungsergebnissen, wird dies auch einen konstruktiven und sachlichen Beitrag zum Diskurs über die Verschmutzung durch Plastik beigetragen. Während in den vergangenen Jahren ein erheblicher Fortschritt bei der Entwicklung von Analyseverfahren von Partikeln bis in den unteren Mikrometerbereich erzielt werden konnte, gilt es in Zukunft die Lücken in den Nanometerbereich zu schließen (Schwaferts et al., 2019).

Zukunftsthemen

- Untersuchung der Fragmentierungsprozesse von Makro- über Mikro- zu Nanoplastik und der Raten unter verschiedenen natürlichen Bedingungen, um relevante Quellen und Senken von Mikro- und Nanoplastik zu identifizieren und deren Verbleib in der Umwelt zu bewerten,
- Bewertung der Freisetzung von Zusatzstoffen aus Plastik unter verschiedenen Umweltbedingungen und ihrer Auswirkungen auf Partikeleigenschaften und Ökosysteme,
- Verstärkte Entwicklung von Analysemethoden zum Nachweis und zur Bestimmung von Nanoplastik,
- Entwicklung von Qualitätsstandards und deren Dokumentation, die neben der Analyse auch die Probenahme und Aufbereitung umfassen,
- Herstellung von Referenzmaterialien für den Einsatz als Vergleichsgröße bei Messverfahren und zur Umweltrisikobewertung,
- Nachhaltige Nutzung von Plastikprodukten und Entwicklung von Alternativen um deren Eintrag in die Umwelt zu vermeiden.

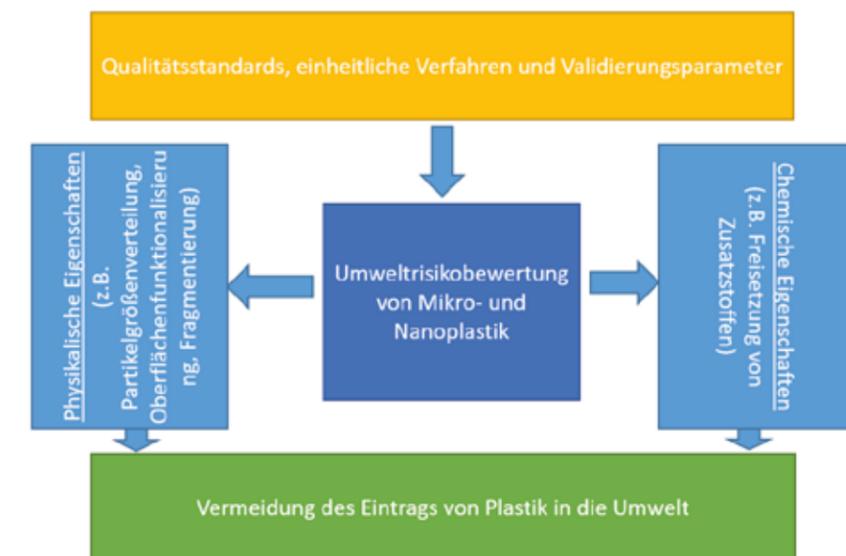


Abbildung 8: Schematische Darstellung des Forschungsbedarfs im Bereich Analytik von Mikro- und Nanoplastik.

4.4 Bauchemie und Wasserqualität

Autor: Michael Burkhardt

Hintergrund

Aufgrund hoher Bauaktivität im urbanen Raum ist ein zunehmender Eintrag von Stoffen aus Bauprodukten in den Wasserkreislauf zu beobachten, vor allem durch den Einsatz von organischen Additiven wie Biozide, UV-Filter, Flammschutzmittel oder Weichmacher. Untersucht wurden Stofffreisetzungen für einzelne Produktgruppen oder Stoffe, beispielsweise für Biozide im Holzschutz oder Fassadenputzen und -farben, sowie Schutzmitteln für Dichtungsbahnen (Clara et al., 2014; Fuchs et al., 2020; Pajens et al., 2021; Wicke et al., 2021). Solche Emissionen wurden aber entweder durch Zufall oder spät erkannt. Typische Beispiele sind überraschend hohe Auswaschungen von Bisphenol A in Korrosionsschutzprodukten (Vermeirssen et al., 2017), das plötzliche Auftreten von 2-Methyl-4-Chlorphenoxyessigsäure (MCPA) als Durchwurzelungsschutzmittel in Bitumenbahnen oder Biozide in Beschichtungen. Diese Stoffe wirken auf aquatische Organismen, sind endokrin, langsam abbaubar oder mobil. Da polymermodifizierte Produkte besonders schnell an Verbreitung im Baubereich gewinnen und typische rein mineralische verdrängen, ist eine zunehmende Emission von Nano-/Mikroplastik (s. o.) zu erwarten.



Der Schwerpunkt von Untersuchungen im Regenwasserabfluss und Gewässern lag bisher auf Schwermetallen (Zink, Kupfer, Chrom etc.) und ausgewählten Additiven (Mecoprop, Diuron, Bisphenol A etc.) (Björklund et al., 2009; Burkhardt et al., 2007). Gelangt das Regenwasser durch Direkteinleitungen in die Gewässer, entstehen Pulsbelastungen. Zu den bei Regenwetter auftretenden Pulsbelastungen in kleinen, urban geprägten Gewässern liegen jedoch nur wenige Kenntnisse vor. Bauprodukte, die im direkten Kontakt mit Grund- oder Oberflächenwasser stehen, beeinflussen ebenfalls die Wasserqualität. Da die Grundwasserüberwachung bevorzugt auf Standorte zur Trinkwassernutzung oder im Bereich von Altlasten fokussiert, sind Belastungen durch versickerndes Regenwasser in urbane Grundwasserleiter eher unbekannt.

Mit der Kenntnis zu den relevanten Quellen lassen sich Maßnahmen evaluieren – an der Quelle oder nachgeschaltet (Hillenbrand et al., 2015). Gegenwärtig ist unsicher, wie gut gängige Anlagenkonzepte der Versickerung (z.B. Bodenfilter oder Schacht, Mulde, Mulde-Rigole) die Spurenstoffe und Schwermetalle zurückhalten.

Da wassermobilisierbare Stoffe in den Bauprodukten meistens wenig bekannt, experimentelle Daten und analytische Methoden lückenhaft sind, bestehen offene Fragen zu den Stoffemissionen in die Umwelt. Eine Deklaration erfolgt sogar nur für kennzeichnungspflichtige Substanzen. Diffuse oder versickerungsbedingte Punkteinträge ins urbane Grundwasser wurden kaum beachtet.

Forschungslücken

Die großen Herausforderungen bestehen darin, die relevanten Stoffe und Stoffquellen - trotz der Produktvielfalt und vielschichtigen Transportwege - in die aquatische Umwelt zu identifizieren und emissionsmindernde Maßnahmen zu entwickeln.

Die Einflussfaktoren für die Alterung und Auslaugung von Bauprodukten lassen sich in Prozessstudien für spezifische Stoffe/Stoffgruppen unter Berücksichtigung von Transformationsprodukten untersuchen und durch Kenntnisse aus realen Anwendungsstudien ergänzen. Dabei kann auf Dächer und Fassaden fokussiert werden, weil diese besonders stark der Witterung ausgesetzt sind. Bemerkenswert ist, dass einige Transformationsprodukte die Wirkstoffkonzentrationen sogar deutlich übersteigen. Gewisse Hinweise zu Nano-/Mikroplastik deuten an, dass die Polymerpartikel als Depot für lösliche Stoffe wie Flammschutzmittel o. ä. dienen können. Durch Erweiterung spezifischer Alterungsversuche für besonders exponierte Anwendungen lassen sich dazu exemplarisch Eckpunkte definieren und damit die effektive Relevanz einordnen. Mit den prozessbasierten Studien können wesentliche Emissionsmuster und Mechanismen der Stofftransformation erarbeitet, damit Transferfaktoren für den Weg von der Stoffquelle ins Gewässer hergeleitet und diese mit Monitoringdaten abgeglichen werden. Vielversprechend ist dafür die Modellierung, um die punktuellen Resultate zu abstrahieren und über die Nutzungsdauer zu extrapolieren (z.B. COMLEAM; www.comleam.com).

Analytische Routinemethoden sind für gewisse Additive erst zu entwickeln und/oder Eluate mittels ökotoxikologischer Methoden zu beurteilen. Als Bewertungsgrundlage für analytische Resultate aus Labor- und Felduntersuchungen können Umweltqualitätsnormen (UQN) oder Geringfügigkeits-schwellenwerte (GFS) beigezogen werden. Da für Additive diese nicht immer vorliegen, können für Biotests Verdünnungsstufen abgeleitet werden, wie sie im Abwasserbereich schon seit längerem etabliert sind (z.B. G_D , G_A). Erste Erfahrungen mit Bauprodukten deuten das hohe Potential für die Zukunft an. Durch Kombination beider Vorgehensweisen – Analytik und Biotests - wird eine ganzheitliche Betrachtung möglich.

Kleine, urban geprägte Fließgewässer mit geringen Verdünnungsverhältnissen stehen im Fokus und benötigen besondere Probenahmestrategien, um die zeitlich hoch dynamischen Eintragsereignisse zu beproben und auch mittels neuer spurenanalytischer Methoden zu analysieren. Die Möglichkeiten hochauflösender Offline-Systeme oder neuartige mobile Geräte sind abzuklären, bzw. geeignete Methoden für Abflussereignisse zu entwickeln (TA, NTA, MS2Field). Durch Einzugsgebietsbilanzen lassen sich Schlüsselfaktoren der Exposition, wie Art und Fläche der Bauprodukte, im Vergleich zur Entwässerungsstruktur bewerten. Vorteilhaft zeigte sich die Identifikation bzw. Festlegung gewisser organischer oder anorganischer Leitsubstanzen (oder Summenparameter) für Schmutzwasser. Solche Parameter für die gebaute Umwelt zu identifizieren, die die Mobilität von Stoffen beschreiben helfen, ist durch Monitoringdaten möglich.

Wenn Sickerraten von Regenwasserbehandlungsanlagen und Sorptionseigenschaften relevanter Stoffe bestimmt werden, lassen sich die Rückhaltewirkung und das mögliche Belastungsrisiko von Grund-/Oberflächenwasser abschätzen. In einer ersten Stufe sind mobile Stoffe durch Recherche zu ermitteln, anschließend umweltkritische Verbindungen experimentell vertieft zu beurteilen. Mit Säulen- und Batchversuchen wurden diesbezüglich gute Erfahrungen gemacht und sollten methodisch auf Stoffe der Gebäudehülle ausgedehnt werden.

Zukunftsthemen

- Prozessstudien zur Auslaugung von umweltkritischen Stoffen inkl. Partikeln, der Stoffumwandlung unter Einfluss von pH und UV, und unter Berücksichtigung von chemischen sowie ökotoxikologischen Methoden. Fokussierung auf endokrin wirksame und besonders mobile, persistente und ökotoxische Stoffe (PMT-Stoffe) in Bauprodukten.
- Bilanzstudien zu den Massenflüssen von Bauinhaltsstoffen via Trennkanalesation in die Umwelt sowie Identifizierung und Bewertung kritischer Eintragsituationen (Pulsbelastungen, Schachtversickerungen etc.)
- Modellierung und Expositionsabschätzungen zu den Einträgen aus Siedlungen in Grund- und Oberflächengewässer, um die Eintragsdynamik zu verstehen und zielführende Maßnahmen zu entwickeln.
- Abschätzung der möglichen Grundwasserbeeinträchtigungen durch Versickerungsanlagen und des Stoffrückhalts von Boden und Substraten
- Erarbeitung von Bewertungskonzepten zur Deklaration / Kennzeichnung der Auswaschung von Bauprodukten und Integration in Labeln für Produkte und Gebäude.

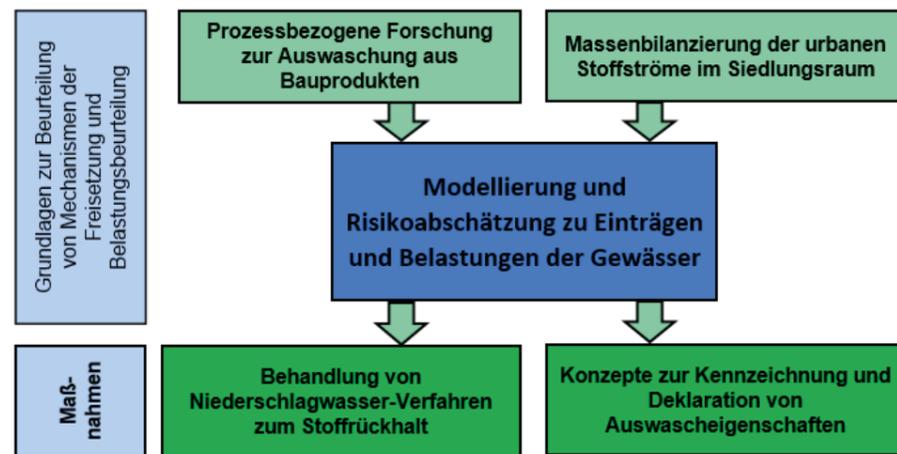


Abbildung 9: Schematische Darstellung der Forschungsthemen im Bereich Bauchemie und Wasserqualität

4.5 Pathogene und Antibiotika-Resistente Bakterien – Moderne Bioanalytische Methoden

Autor: Michael Seidel

Hintergrund

Die Hygiene im Rahmen des One Health-Konzepts (Mensch/Tier/Umwelt) muss für eine große Bandbreite an Wassermatrizes, angefangen von Rohwasser und Trinkwasser bis hin zu Prozesswässern und Abwasser sichergestellt werden und muss in der Ära des Klimawandels neu bewertet werden (Brombach et al., 2017; Gudipati et al., 2020). Diese Aufgabe korreliert sehr stark mit den angewandten Methoden. In den letzten Jahren hat sich das Spektrum an analytischen Verfahren zur Identifizierung und Quantifizierung von Mikroorganismen und Viren (= Bioanalytik) rasant weiterentwickelt. Konventionelle Kultivierungsmethoden zur Quantifizierung von Bakterien wurden und werden erfolgreich eingesetzt. Diese werden mit neuen Methoden, die in kurzer Zeit die Identität, die Quantität, die Vitalität, Infektiosität und die Diversität an Mikroorganismen und Viren

erkennen können zunehmend ergänzt und z. T. ersetzt (Berney et al., 2008; Prest et al., 2016; Seidel et al., 2016)). Damit ist ein hochaufgelöstes Monitoring der mikrobiologischen Dynamik von der Quelle bis zum Wasserhahn zukünftig möglich, um eine vollständige Überwachung der Wasserhygiene sicherzustellen und sogar Frühwarnsysteme aufzubauen (Favere et al., 2021).

Die Beispiele für mikrobiologisch analytische Methoden sind vielfältig. MALDI-TOF-MS ist eine vielversprechende analytische Methode, welche die Identität von Mikroorganismen (Pathogene oder antibiotikaresistente Bakterien) in einzelnen Kolonien viel genauer bestimmen kann als alleinig das Zählen von Kolonien (Pinar-Méndez et al., 2021; Singhal et al., 2015). Spezifische pathogene Bakterien und Viren sowie antibiotikaresistente Bakterien können über Schnelltests (Nukleinsäureamplifikationstests oder Immunoassays) innerhalb weniger Stunden bestimmt werden (Kober et al., 2018; Leifels et al., 2021; Sollweck et al., 2021; Wunderlich et al., 2016). Durchflusszytometrie, sowie kolorimetrische oder Fluoreszenz-Enzymaktivitätstests können Bakterien schnell analysieren und bieten sich für das Monitoring oder die Prozessüberwachung an (Cheswick et al., 2019; Hammes et al., 2008). Omics-Methoden, wie z.B. Next Generation Sequencing oder Mikroarrays ermöglichen eine hoch differenzierte Analyse in der Diversität von Bakterien und Viren (Hjelmso et al., 2017). An mikrofluidischen Systemen wird geforscht, um schneller phenotypisch Antibiotikaresistenzen zu erkennen. All diese Methoden haben sich in der medizinischen Diagnostik durchgesetzt oder ermöglichen zumindest Forschung auf höchstem Niveau. Aus diesem Grund sollten diese Methoden zukünftig für die mikrobiologische Wasseranalytik vertiefend genutzt werden können und in die Praxis übertragen werden.



Forschungsbedarf

Eine generelle Herausforderung besteht bei der stärkeren Gewichtung der Hygiene und ihre Anerkennung eines interdisziplinären Bereiches zwischen Naturwissenschaftlern, Ingenieuren und medizinischen Mikrobiologen/Virologen. Die bisherigen Forschungsaktivitäten lagen darin, die Grundlagen zu schaffen, dass Pathogene und antibiotikaresistente Bakterien im Wasser quantifiziert und bestimmt werden können. Dazu wurden bioanalytische Methoden auf verschiedenste Umweltmatrizes (Grundwasser, Trinkwasser, Oberflächenwasser oder Seewasser) Wasser angewendet. Der nächste Schritt sollte ein Abgleich der Methoden sein. Für den Übertrag von der Wissenschaft in die Praxis ist es wichtig, dass die entwickelten Methoden verlässliche Ergebnisse produzieren. Dies ist nur möglich, wenn instrumentelle Analysegeräte und Reagenzien für den Endnutzer im wasserchemischen Umfeld so angepasst sind, dass eine hohe Qualitätssicherung möglich ist. Aus diesem Grund muss die gesamte analytische Methode (Probenvorbereitung, Analyse, Auswertung, Statistik und Bewertung) aber auch die Probennahme standardisiert werden. Die Mikrobiologie im Wasser unterliegt dynamischen Umwelteinflüssen, weswegen ein zeitaufgelöstes Messen von Pathogenen oder die Entstehung und Verteilung von antibiotikaresistenten Bakterien vollständig neue Erkenntnisse für die Wasserqualität im Bereich Umwelt und wassertechnischen Anlagen liefern wird. Neben der Reproduzierbarkeit ist es essentiell, die Aussagekraft der Ergebnisse der neuen quantitativen Methoden zu gewährleisten. Aufgrund unterschiedlicher Messparameter und Einheiten liefern verschiedene Methoden Werte, die nicht direkt mit den traditionellen Methoden vergleichbar sind. Dies bedingt die Notwendigkeit der

Entwicklung von Ampelsystemen, oder ähnlich gestalteten Klassifikationen, welche eine Bewertung bzw. Einstufung dieser Ergebnisse ermöglichen, basierend auf den Einheiten der neuen Methoden, um einen Handlungsbedarf aus den Analysen ableiten zu können. Schlussendlich sollte die Gesamtheit des Wasserkreislaufes mit dem Bezug auf Menschen, Tieren und der Umwelt (One-Health-Konzept der EU) betrachtet werden. Dies wird insbesondere hinsichtlich des Klimawandels und die Einschränkung der Ressource Wasser immer mehr von Bedeutung sein.

Zukunftsthemen der Forschung

- Evaluierung neuester bioanalytischer Verfahren aus der Forschung für die praktische Anwendung im wasserchemischen Umfeld
- Anpassung von diagnostischen Nachweismethoden für die Matrix Wasser
- Vereinheitlichung der bioanalytischen Nachweismethoden für mikrobiologische Wasserparameter
- Repräsentative Probenmestrategien
- Aufbau von Monitoring-Systemen
- Umfassende Datenerfassung und Datenbewertung mit Einbeziehung von Metadaten
- Verknüpfung von chemischen und mikrobiologischen NTA
- Aufbau von Frühwarnsystemen
- Identifikationen von Kontaminationsquellen in der Umwelt und wassertechnischen Anlagen
- Interventionsstrategien und Eliminierungsansätze für pathogene und antibiotikaresistente Bakterien
- Prüfung der Persistenz und Vermehrung antibiotikaresistenter Bakterien sowie Verbreitung von Resistenzgenen in der Umwelt unter Berücksichtigung der Bedeutung von Biofilmen

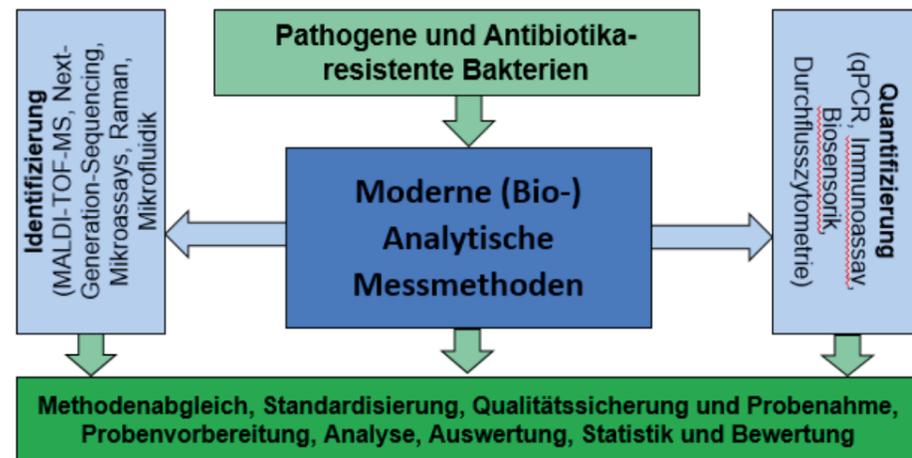


Abbildung 10: Schematische Darstellung des Forschungsbedarfs im Bereich moderne mikrobiologische Verfahren

5 Prozesse

5.1 Biologische Verfahren

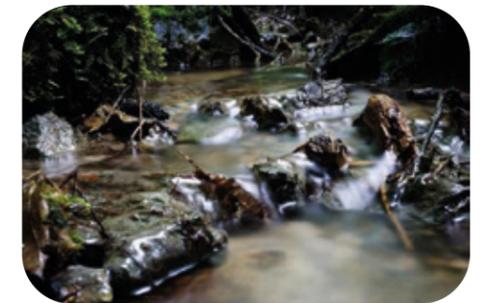
Autor: Arne Wick

Hintergrund

Biologische Abbauprozesse beeinflussen maßgeblich den Verbleib von anthropogenen organischen Spurenstoffen (*trace organic compounds*, TrOCs) im urbanen Wasserkreislauf. In den vergangenen 15 Jahren hat sich insbesondere die Aufklärung der Transformationsprodukte (TPs) von TrOCs als ein wichtiger Forschungsaspekt im Bereich der Wasserchemie etabliert. Es wurde deutlich, dass in vielen Fällen keine vollständige Mineralisierung der Substanzen erfolgt, sondern oftmals ein oder gar mehrere vergleichsweise stabile und oftmals polare Produkte entstehen, die ein erhöhtes Potenzial aufweisen, bis ins Trinkwasser durchzubrechen (z.B. (DWA-Themen, 2014; Yin et al., 2017)). Es stellt sich deshalb insbesondere die Frage wie die Vorhersage von Abbaupwegen und TPs verbessert und ob und inwieweit die Abbaueffizienz in technischen Systemen gezielt verbessert werden kann.

Forschungslücken

Für eine Vielzahl von TrOCs sind die Abbaupwege und TPs weiterhin unbekannt und die Vorhersage von Transformationsreaktionen und Abbaugeschwindigkeiten ist aufgrund der unbekanntenen Abhängigkeit von spezifischen Umweltbedingungen, der Zusammensetzung und Funktion der mikrobiologischen Gemeinschaft und der Molekülstruktur limitiert. Zwar wurden in den letzten Jahren wichtige neue Erkenntnisse zur Abhängigkeit des Primärabbaus von den vorherrschenden Umweltbedingungen gemacht, doch liefern die Studien durchaus widersprüchliche Ergebnisse (z.B. (Fenner and Men, 2021; Fischer and Majewsky, 2014)). Ein Grund hierfür besteht darin, dass sowohl über die am Abbau beteiligten Mikroorganismen als auch über die Enzyme und die Mitwirkung abiotischer Faktoren wie Redoxmediatoren immer noch zu wenig bekannt ist (Fenner et al., 2021). Dies limitiert auch eine mögliche Optimierung des biologischen Abbaus in technischen Systemen.



Zukunftsthemen

Einfluss von Redox-Bedingungen auf den Primärabbau von TROCs:

- Einfluss der Redoxpotentiale der TrOCs sowie der beteiligten Enzyme und Coenzyme
- Bedeutung der Modifikation der Redoxpotentiale bzw. Potentialdifferenzen durch die spezifischen Reaktionsbedingungen sowie die Mitwirkung abiotischer Faktoren wie Redoxmediatoren, Metallionen und katalytisch wirksame Oberflächen

Abhängigkeit des TROC-Abbaus von der Konzentration der TrOCs und der Nährstoffverhältnisse:

- Rolle der Adaption in Abhängigkeit der Nährstoffverhältnisse (u. a. Qualität und Quantität von DOC, Stickstoff-Verfügbarkeit)
- Rolle der Bioverfügbarkeit der TrOCs (Limitierung des Massentransfers in die Zelle)

Einfluss der Zusammensetzung der mikrobiellen Gemeinschaft und ihres funktionellen Potenzials auf den TROC-Abbau:

- Nutzung und Weiterentwicklung moderner *meta-omics* Verfahren, um die vorhandenen Gene, Gentranskripte und Enzyme auch in nativen und komplexen Proben umfassend zu charakterisieren
- Analyse statistischer Zusammenhänge zwischen der Abbauleistung und der mikrobiellen Diversität sowie der Abundanz bestimmter Taxa, Gene, Gentranskripte und Enzyme
- Identifizierung abbauender Taxa und Enzyme zur Ermittlung kausaler Zusammenhänge

Modellierung biologischer Abbauprozesse über Struktur-Abbau-Beziehungen:

- Modellierung der Bioverfügbarkeit (Aufnahme in die Zelle)
- Modellierung von Abbauwahrscheinlichkeiten
- Modellierung von Abbauwegen

Optimierung der Abbauleistung technischer Systeme:

- Systematische der Zusammenhänge zwischen Betriebsbedingungen und Abbauleistung
- Möglichkeiten zur Schaffung vorteilhafter Bedingungen für den Abbau einer Vielzahl von Substanzen (Kopplungen, Kaskadierung)
- Möglichkeiten zur Prozesskontrolle über Indikatorsubstanzen, Indikatortaxa und Indikatorenzyme
- Potenzial und Limitierung von Bioaugmentation und Einsatz von isolierten Enzymen

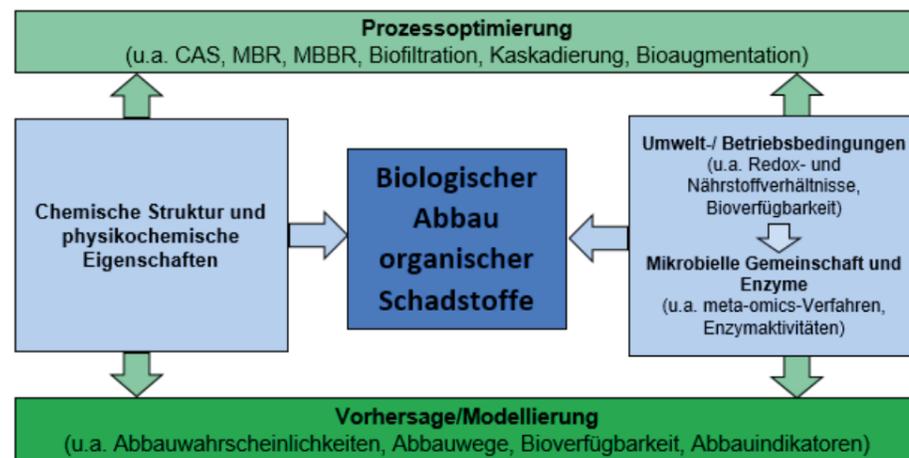


Abbildung 11: Schematische Darstellung der Forschungsthemen im Bereich der biologischen Verfahren.

5.2 Oxidative Verfahren

Autoren: Holger Lutze, Markus Stöckl

Hintergrund

Der Schutz der Ressource Wasser vor organischen und mikrobiellen Verunreinigungen gewinnt derzeit massiv an Bedeutung. Die Ursachen hierfür sind vielfältig: Weltweites Bevölkerungswachstum gefolgt von regionaler Verknappung an sauberem Trinkwasser, Klimaveränderung verbunden mit Trockenzeiten und Starkregen, gesetzliche Vorgaben für industrielles Abwasser (Zero Liquid Discharge), Legionellen-Problematik in Warmwassersystemen und eine stetige Verbesserung der Analytik verbunden mit einer Senkung der Nachweisgrenzen von Spurenstoffen. Dies erfordert ein nachhaltiges Ressourcenmanagement (z. B. Abwasserwiederverwendung und Ausbau von Wasserressourcen). Oxidative Verfahren zur Elimination von Schadstoffen in der Abwasseraufbereitung sind seit Jahren Gegenstand der Forschung und werden zunehmend großtechnisch eingesetzt (von Gunten, 2018). Dennoch gibt es auch im Bereich der oxidativen Prozesse noch erhebliche Forschungslücken, die sowohl im Grundlagenbereich als auch in der praxisorientierten Anwendungsforschung erheblichen Forschungsbedarf aufweisen.



Forschungslücken

1. Oxidativer Abbau von (persistenten) Substanzen

Oxidative Verfahren bieten die Möglichkeit Schadstoffe zu unschädlicheren Substanzen zu transformieren (Kucharzyk et al., 2017). Modelle zur Prognose über die Abbaubarkeit und Produktbildung von Schadstoffen sind derzeit noch in der Entwicklung (Tentscher et al., (2019). Bestimmte persistenten Substanzen wie z. B. perfluorierte Verbindungen sind mit konventionellen Verfahren i.d.R. nicht abbaubar (Lutze et al., 2018) und können teilweise sehr schlecht durch adsorptive Verfahren zurückgehalten werden (z. B. Trifluoressigsäure). Das Potenzial innovativer Oxidationsverfahren zur Elimination sehr persistenter Schadstoffe ist Gegenstand aktueller Forschung.

2. Reaktionsmechanismen

Durch die Verwendung oxidativer Wasseraufbereitungsprozesse entstehen in der Regel auch unerwünschten Produkte. Dies resultiert in einem Optimierungsbedarf von Oxidationsverfahren um die gewünschten Effekte zu maximieren und die unerwünschten Nebeneffekte zu minimieren (von Gunten, 2018). Um diesem Ziel näher zu kommen sind weiterhin mechanistische Untersuchungen der Reaktionen von Oxidationsmittel von größter Bedeutung. So sind beispielsweise die Reaktionen von *N*-haltigen organischen Verbindungen und die Reaktion mit organischem Material in Oxidationsverfahren bis heute kaum vorhersagbar (von Gunten, 2018). Weitere Fortschritte im Bereich der mechanistischen Forschung ergeben sich aus der Verknüpfung nasschemischer Versuche mit moderner Methoden der analytischen Chemie (HRMS und IRMS) (Willach et al., 2017) und der in-silico Chemie (z.B. quantenchemische Rechnungen) (Lee et al., 2015).

3. Oxidative Prozesse zur Desinfektion

Sowohl in der Trink und Abwasseraufbereitung spielen Oxidationsverfahren zur Inaktivierung von Pathogenen und zur Elimination von Antibiotikaresistenzen eine große Rolle. Hier bestehen wesentlichen Forschungslücken bezüglich der Inaktivierungsmechanismen und deren tatsächliche Auswirkung auf die Pathogenität/Aktivität von Mikroorganismen, die durch Kultivierungsmethoden und molekularbiologische Methoden z. T. nicht verlässlich angezeigt werden kann. Eine gute Kenntnis zu extra und intrazellulären Reaktionen von Oxidationsmitteln kann zu einer Einschätzung der Schadwirkung auf Mikroorganismen genutzt werden. Im Zuge des Klimawandels wird die chemische Desinfektion zunehmend an Bedeutung gewinnen. Dabei müssen Qualitätsansprüche bezüglich der Bildung von Desinfektionsnebenprodukten mit den zunehmend größer werdenden Problemen im Bereich der Hygiene abgewogen werden. Dabei stellen die technische Umsetzung, die Prozessintegration und die bedarfsbezogene Wahl der Oxidationsmittel weitere Forschungslücken dar.

Zukunftsthemen

1. Neue Schadstoffe

Neue wasserrelevante Stoffe, die aus Industrie, urbanen Systemen und dem Agrarbereich, dem demographischen Wandel und durch extreme Umweltphänomene (z.B. Waldbrände) hervorgehen, waren und werden Gegenstand der Forschung sein. Die Zahl der produzierten Chemikalien steigt stetig an. Dies wird zum einen zum vermehrten Einsatz oxidativer Prozesse zur Wasserbehandlung führen, wodurch sich auch ein erheblicher Forschungsbedarf bei der Entwicklung neuer Prozesse und Messmethoden sowie der Vorhersage von Transformationsprozessen ergibt.

2. Hygiene: Schwellenländer und neue Pathogene

Derzeit hat der Großteil der Weltbevölkerung noch keinen Zugang zu sicherem Trinkwasser. Hierbei spielen vor allem hohe Lasten an humanpathogenen Keimen eine große Rolle, die mittels Oxidationsverfahren inaktiviert werden können. Diese zum Teil technisch sehr aufwendigen Verfahren müssen zukünftig mehr an die technischen und kulturellen Rahmenbedingungen von Entwicklungs- und Schwellenländern angepasst werden.

3. Standardisierung von Untersuchungsmethoden

Das experimentelle Vorgehen im Bereich der Oxidationsverfahren zur Untersuchung von z. B. Transformationsprozessen aber auch zur Charakterisierung von wassertechnisch genutzten Oxidationsverfahren ist sehr inhomogen. Bisher liegen noch wenige Informationen zur Vergleichbarkeit der Ergebnisse aus diesen verschiedenen Ansätzen vor. Eine hier ansetzende systematische Untersuchung zum Vergleich der verschiedenen Untersuchungsmethoden und deren Modifikationen trägt zur Qualitätssicherung in der wissenschaftlichen Praxis bei.

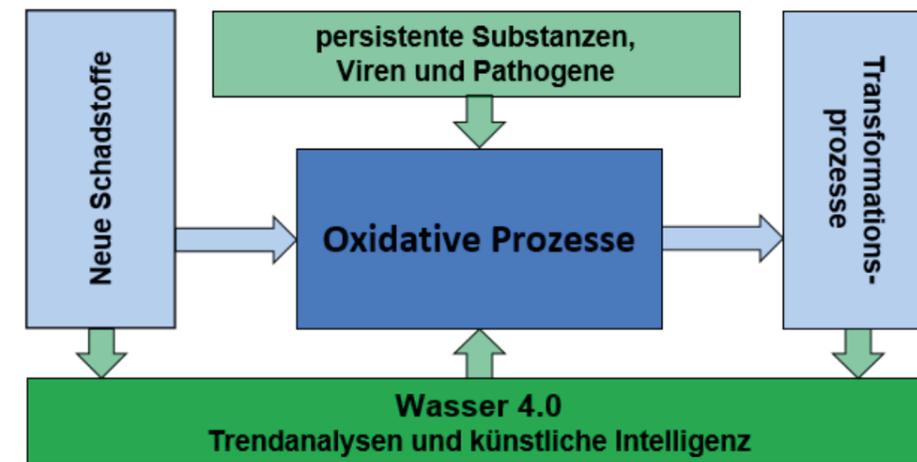


Abbildung 12: Schematische Darstellung der Forschungsthemen im Bereich Oxidative Verfahren.

5.3 Physikalische Prozesse

Autoren: Holger Lutze und Thomas Ternes

Hintergrund

Physikalische Methoden wie Filtration, Sedimentation und Adsorption gehören zu den ältesten Prozessen der Wasseraufbereitung. Während die ursprünglichen Verfahren (z.B. Tiefenfiltration, Aktivkohle Filtration) bis heute erfolgreich eingesetzt werden, haben sich auch hochtechnologische Varianten entwickelt, die zu einer deutlichen Effizienzsteigerung und Erweiterung des Nutzungspotenziales führen. Ein Beispiel ist die Entwicklung der Membranfiltration mit innovativen Membranmaterialien und Hybridverfahren (PAK/MF ©Cristall, flockungsgestützte UF, ozongestützte MF) (Hoffmann et al. 2021), die im Vergleich zur Tiefenfiltration um ein Vielfaches leistungsfähiger sind (kompakte Bauweise, Entfernung von gelösten Verbindungen).

Zudem weisen die „klassischen“ physikalischen Prozesse noch grundlegende Fragestellungen auf.



So ist bis heute der hochkomplexe Prozess der Sorption an Aktivkohle noch nicht aufgeklärt. Hierbei spielen die physikalisch-chemischen Parameter der Wassermatrix (T, pH, Gehalt an Ionen, organisches Material, etc.) und der Aktivkohle (Porenverteilung, funktionelle Oberflächenstrukturen etc.) wichtige Rollen (Schwarzenbach et al. 2003).

Physikalische Prozesse bestimmen die Mobilität von Schadstoffen. Dabei können beispielsweise Kolloide als Vehikel für z.B. schwer wasserlösliche Stoffe dienen, die kaum in der wässrigen Phase nachweisbar sind. Hier stellen polyaromatische Kohlenwasserstoffe ein Beispiel dar, die wegen ihrer geringen Wasserlöslichkeit und hydrophoben Wechselwirkungen sehr gut an Böden ad- und absorbieren, jedoch über die Beweglichkeit von Kolloiden eine signifikante Mobilität besitzen (Schwarzenbach et al. 2003).

Forschungslücken

Der wesentliche Fokus im Bereich physikalischer Wasseraufbereitungsmethoden besteht darin, dass wasserchemische und physikalische Prozessverständnis zu verbessern und neue Materialien und Prozesse zu entwickeln, die über die klassischen Zielstellungen hinaus weitere Aufbereitungszwecke erfüllen. Zur Erreichung dieses Zieles werden neue Materialien entwickelt, die einen robusten und effizienten Prozess ermöglichen und die „klassische Verfahren“ in mit kompaktem Design koppeln (z.B. Oxidation plus Membranfiltration zur Erhöhung der Filtratausbeute). Forschungsbedarf besteht weiterhin darin, neue Materialien zur Entfernung von solchen Schadstoffen zu finden, die sich bisher nur mit großem technischen Aufwand entfernen lassen (z.B. Trifluoressigsäure, Perfluorpropion- und Perfluorbutansäure, M12-Chlortalonil).

In natürlichen Systemen wurde der kolloidale Transport von Schadstoffen bislang kaum untersucht. Hier stellen Fragen zur Fracht kolloidal gebundener Schadstoffe, deren toxikologisches Potential sowie die Größenverteilung natürlicher Partikel.

Zukunftsthemen

Membranfiltration

- Antifoulingstrategien: Reaktive Membranen (z.B. elektrochemische Bildung von Oxidationsmitteln), Rückspül- und Reinigungsstrategien, Hybridverfahren (Flockung, Aktivkohle), Untersuchung und Monitoring von Foulingprozessen
- Spurenstoffeliminierung: Reaktive Membranbeschichtung, funktionelle Gruppen (z.B. Ladungsträger zum selektiven Rückhalt geladener Stoffe),
- Hybridverfahren: Verfahrenskombinationen mit (modifizierter) Pulveraktivkohle, Oxidationsverfahren und Flockungsmitteln
- Einsatz der Membranfiltration in der Abwasserreinigung und Abwasserwiederverwendung

Tiefenfiltration

- Entwicklung neuer Sorbenzien zur selektiven Spurenstoffelimination oder Optimierung von biologischen Prozessen
- Entwicklung von Hochdurchsatzfiltern mit einem weiten dynamischen Bereich (Mischwasseraufbereitung)
- Untersuchung von Transportprozesse in porösen Systemen

Physikalische Prozesse in natürlichen Systemen

- Kolloidaler Transport von Schadstoffen (wie mobil sind Kolloide in natürlichen Systemen? In welchem Umfang werden Schadstoffe durch Kolloide von der Biota aufgenommen und in der Nahrungskette angereichert? Wie hoch ist der Anteil der kolloidal gebundenen Stoffe an der Gesamtbelastung durch Schadstoffe in einem aquatischen System?)
- Einfluss des Größenspektrums von schadstoffbelasteten Kolloiden auf deren Mobilität und Toxizität.

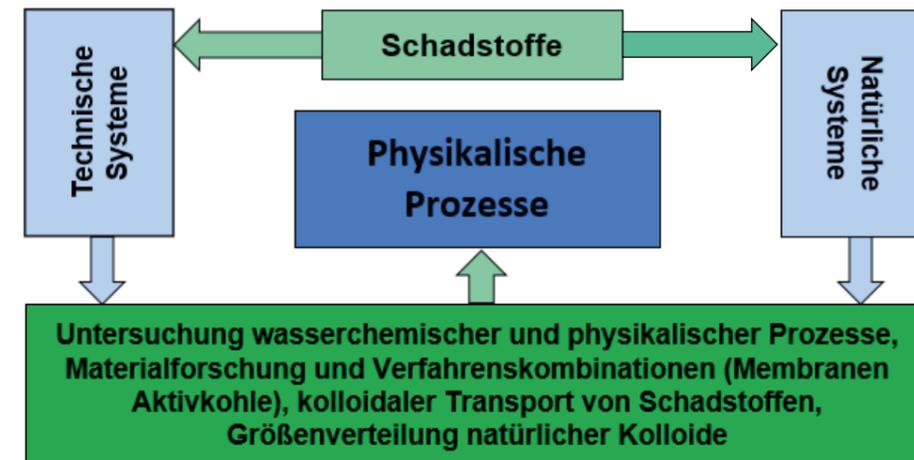


Abbildung 13: Schematische Darstellung des Forschungsbedarfs im Bereich physikalische Prozesse

6. Klimawandel und Wasser 4.0

Autoren: Holger Lutze und Thomas Ternes

Hintergrund

In den letzten Jahrzehnten sind weltweit schnell voranschreitende klimatische Veränderungen zu beobachten (Masson-Delmotte et al., 2021; Sippel et al., 2020). Neben der Erhöhung der weltweiten



Durchschnittstemperaturen äußert sich dies in Mitteleuropa durch die zunehmende Frequenz an Hochwasser- und Niedrigwasserereignissen und den damit einhergehenden Qualitäts- und Quantitätsproblemen der zur Verfügung stehenden Trinkwasserressourcen. Weiterhin wird auch die ökologische Qualität der Gewässer beeinträchtigt. In der Öffentlichkeit wurde dabei v. a. das Fischsterben in der Oder wahrgenommen. Auch signifikante Einbußen landwirtschaftlicher Erträge oder das Schrumpfen von Hochwäldern sind bedeutende Anzeichen des

Klimawandels. Das Klima ist daher ein wichtiger Taktgeber für einen notwendigen Wandel in der Wasserwirtschaft und der Gewässerbewirtschaftung, die vor großen Herausforderungen stehen. Zu den Herausforderungen in der nahen Zukunft zählen u. a. Wasserknappheit, erhöhte Abwasseranteile in Gewässern, extreme Hoch- und Niedrigwasserereignisse (Haer et al., 2020; Swain et al., 2020) und Temperaturanstiege natürlicher Gewässer sowie massive Algenblüten (Gobler, 2020). Ein kontinuierlich sich verbesserndes Prozessverständnis der klimatisch bedingten Veränderungen in Bezug auf Wasserqualität und Wasserquantität sowie die Zukunftsprognosen aus denen Handlungsstrategien abgeleitet werden, sind die Basis zur Erarbeitung von wasserwirtschaftlichen Lösungsvorschlägen.

Hier wird nachfolgend v.a. auf den Bereich Forschungslücken und –bedarf im Bereich der Wassergewinnung eingegangen.

Forschungslücken

Wesentliche Forschungslücken bestehen im Bereich der Vorsage von klimatisch bedingten Veränderungen und den daraus abzuleitenden Anpassungen der Wassergewinnung und den eingesetzten technologischen Verfahren der Wasseraufbereitung. Aktuelle Planungen von Wasseraufbereitungssystemen und Wasserverteilsystemen sind für die sich zukünftig mit zunehmender Dynamik ändernden Rahmenbedingungen zu statisch. Eine Erhöhung der Flexibilität kann durch die Schärfung von Zukunftsprognosen sowie die Entwicklung von virtuellen Werkzeugen und selbstlernenden Systemen erreicht werden, um eine resiliente zukunftsorientierte Wasserwirtschaft zu generieren.

Zukunftsthemen

- 1. Einflüsse der Klimaveränderung auf Qualität und Quantität von Wasserressourcen**
 - Erhöhung der Temperatur und damit verbundene Änderungen der Red/Ox Bedingungen und Algenwachstumsbedingungen
 - Engpass bei Wasserressourcen, Verringerung der Grundwasserneubildung
 - Erhöhung des Eutrophierungspotenzials durch eine verringerte Verdünnung von Nährstoffen aus Abwasser und Oberflächenabfluss (Geruchsstoffe, Toxine, pH-Wertänderung, Verlandung etc.)
 - Erhöhung der Frequenz von Hoch- und Niedrigwasserereignissen
 - Erhöhung der Spurenstoffkonzentrationen durch verringerte Verdünnung
- 2. Erhöhung der Widerstandfähigkeit (Resilienz) der Wasserwirtschaft auf kurzfristige Extremereignisse sowie mittel bis langfristige Trendveränderungen**
 - Erhöhung der Abwasserbehandlung in extremen Trockenwetterphasen sowie nach Starkregenereignissen (Reduzierung/Vermeidung von Mischwasserentlastungen)
 - Anpassung der Trinkwasseraufbereitung an die Aufbereitung von Rohwasser mit stark schwankender Qualität und Quantität
 - Erweiterung/Ausdehnung des Netzschutzes zur ganzjährigen Sicherung der mikrobiellen Sicherheit von Trinkwasser (z.B. Hitzewellen, erhöhte Rohwassertemperaturen).
 - Entwicklung neuer Strategien des Netzschutzes und Evaluierung/Abwägung von Desinfektionsschutz und Nebenprodukt-Bildung beim Einsatz sekundärer Oxidationsmittel.
 - Zusammenschluss von Verteilnetzen zur bundesweiten Sicherung der Wasserversorgung (Mischbarkeit, Korrosion, Materialverträglichkeit, behördliche Schranken etc.)
- 3. Prognoseorientierte Planung neuer Wasserinfrastruktur**
 - KI gestützte Entwicklung von Prognosen zur Wasserqualität und Wassergewinnung
 - Digitale Zwillinge (z.B. virtuelle Abbildung der Wasserwerksprozesse) zur prognoseorientierten Entwicklung neuer Trinkwasseraufbereitungsprozesse, Abwasserbehandlungsverfahren und Verteilnetzdesigns sowie deren Steuerung und Management
 - Verbesserung der Steuerung von Wasseraufbereitungsanlagen, Trinkwasserverteilnetzen und Abwasserkanalsystemen durch Echtzeitübertragung von Ereignissen und automatisierte Steuerung (Digitalisierung der Wasserwirtschaft)
 - Einbindung zukünftiger Datenverarbeitungssysteme (z. B. Quantencomputer)

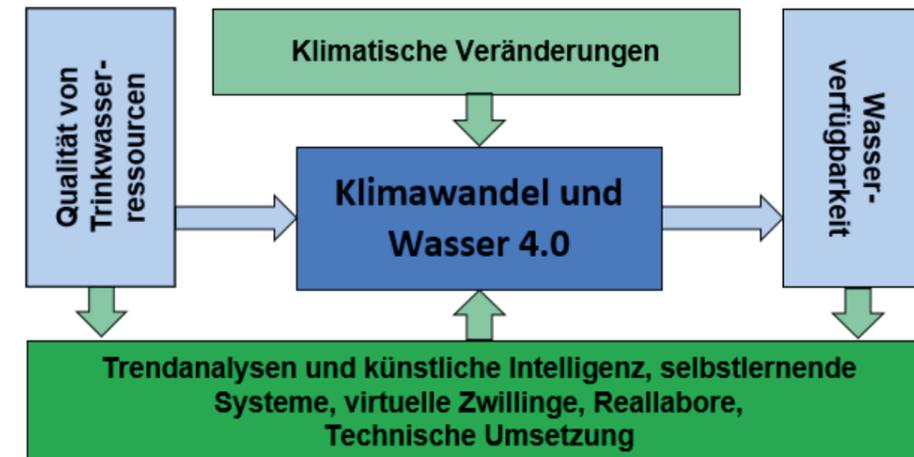


Abbildung 14: Schematische Darstellung des Forschungsbedarfs im Bereich Klimawandel und Wasser 4.0

7. Quellenverzeichnis

- Arp, H.P.H., Hale, S.E., 2019. REACH: Improvement of guidance and methods for the identification and assessment of PMT/vPvM substances. Umweltbundesamt Texte 126/2019.
- Arman, N.Z., Salmiati, S., Aris, A., Salim, M.R., Nazifa, T.H., Muhamad, M.S., Marpongahtun, M., 2021. A Review on Emerging Pollutants in the Water Environment: Existences, Health Effects and Treatment Processes. *Water* 13(22), 3258.
- Bader, T., Schulz, W., Kümmerer, K., Winzenbacher, R., 2017. LC-HRMS Data Processing Strategy for Reliable Sample Comparison Exemplified by the Assessment of Water Treatment Processes. *Anal. Chem.* 89, 13219–13226. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.7b03037>
- Barocio, M.E., Hidalgo-Vázquez, E., Kim, Y., Rodas-Zuluaga, L.I., Chen, W.-N., Barceló, D., Iqbal, H.N.M., Parra-Saldívar, R., Castillo-Zacarías, C., 2021. Portable microfluidic devices for in-field detection of pharmaceutical residues in water: Recent outcomes and current technological situation – A short review. *Case Stud. Chem. Environ. Eng.* 3, 100069. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.cscee.2020.100069>
- Berney, M., Vital, M., Hülshoff, I., Weilenmann, H.-U., Egli, T., Hammes, F., 2008. Rapid, cultivation-independent assessment of microbial viability in drinking water. *Water Res.* 42, 4010–4018. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.watres.2008.07.017>
- Bieber, S., Greco, G., Grosse, S., Letzel, T., 2017. RPLC-HILIC and SFC with Mass Spectrometry: Polarity-Extended Organic Molecule Screening in Environmental (Water) Samples. *Anal. Chem.* 89, 7907–7914. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.7b00859>
- Björklund, K., Cousins, A.P., Strömvall, A.-M., Malmqvist, P.-A., 2009. Phthalates and nonylphenols in urban runoff: Occurrence, distribution and area emission factors. *Sci. Total Environ.* 407, 4665–4672. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2009.04.040>
- BMU/UBA, 2020. Abschlussdokument Nationaler Wasserdialog. Kernbotschaften, Ergebnisse und Dokumentation des Nationalen Wasserdialogs.
- BMUB/UBA 2017 a. Wasserwirtschaft in Deutschland. Grundlagen, Belastungen, Maßnahmen. Umweltbundesamt, Dessau-Roßlau.
- BMU/UBA, 2017 b. Policy-Paper Empfehlungen des Stakeholder-Dialogs »Spurenstoffstrategie des Bundes« an die Politik zur Reduktion von Spurenstoff- einträgen in die Gewässer. Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit/Dessau: Umweltbundesamt, Bonn.
- Bosch-Orea, C., Farré, M., Barceló, D., 2017. Chapter Ten - Biosensors and Bioassays for Environmental Monitoring, in: Palchetti, I., Hansen, P.-D., Barceló, D.B.T.-C.A.C. (Eds.), Past, Present and Future Challenges of Biosensors and Bioanalytical Tools in Analytical Chemistry: A Tribute to Professor Marco Mascini. Elsevier, pp. 337–383. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/bs.coac.2017.06.004>
- Brack, W., 2003. Effect-directed analysis: a promising tool for the identification of organic toxicants in complex mixtures? *Anal. Bioanal. Chem.* 377, 397–407. <https://doi.org/10.1007/s00216-003-2139-z>
- Brack, W., Ait-Aissa, S., Burgess, R.M., Busch, W., Creusot, N., Di Paolo, C., Escher, B.I., Mark Hewitt, L., Hilscherova, K., Hollender, J., Hollert, H., Jonker, W., Kool, J., Lamoree, M., Muschket, M., Neumann, S., Rostkowski, P., Ruttkies, C., Schollee, J., Schymanski, E.L., Schulze, T., Seiler, T.-B., Tindall, A.J., De Aragão Umbuzeiro, G., Vrana, B., Krauss, M., 2016. Effect-directed analysis supporting monitoring of aquatic environments — An in-depth overview.

	Sci.	Total	Environ.	544,	1073–1118.

<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.11.102>

- Brack, W., Dulio, V., Ågerstrand, M., Allan, I., Altenburger, R., Brinkmann, M., Bunke, D., Burgess, R.M., Cousins, I., Escher, B.I., Hernández, F.J., Hewitt, L.M., Hilscherová, K., Hollender, J., Hollert, H., Kase, R., Klauer, B., Lindim, C., Herráez, D.L., Miège, C., Munthe, J., O'Toole, S., Posthuma, L., Rüdell, H., Schäfer, R.B., Sengl, M., Smedes, F., van de Meent, D., van den Brink, P.J., van Gils, J., van Wezel, A.P., Vethaak, A.D., Vermeirssen, E., von der Ohe, P.C., Vrana, B., 2017. Towards the review of the European Union Water Framework Directive: Recommendations for more efficient assessment and management of chemical contamination in European surface water resources. *Sci. Total Environ.* 576, 720–737. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.10.104>
- Brasseur, G., Jacob, D., 2017. Climatic change in Germany Development, consequences, risks and perspectives, Klimawandel in Deutschland Entwicklung, Folgen, Risiken und Perspektiven. Springer Spektrum, Germany.
- Braun, U., Stein, U., Schmitt, H., Altmann, C., Bannick, C.G., Becker, R., Bitter, H., Bochow, M., Dierkes, G., Enders, K., 2020. Statuspapier im Rahmen des Forschungsschwerpunktes Plastik in der Umwelt. Mikroplastik-Analytik Probenahme, Probenaufbereitung und Detektionsverfahren.
- Brombach, K., Jessen, J., Siedentop, S., Zakrzewski, P., 2017. Demographic Patterns of Reurbanisation and Housing in Metropolitan Regions in the US and Germany. *Comp. Popul. Stud.* 42. <https://doi.org/10.12765/CPoS-2017-16>
- Burkhardt, M., Kupper, T., Hean, S., Haag, R., Schmid, P., Kohler, M., Boller, M., 2007. Biocides used in building materials and their leaching behavior to sewer systems. *Water Sci. Technol.* 56, 63–67. <https://doi.org/10.2166/wst.2007.807>
- Castan, S., Sherman, A., Peng, R., Zumstein, M., Wanek, W., Hüffer, T., Hofmann, T., 2023. Uptake, metabolism and accumulation of tire wear particle-derived compounds in lettuce. *Environ. Sci. Technol.*, in press.
- Cheswick, R., Cartmell, E., Lee, S., Upton, A., Weir, P., Moore, G., Nocker, A., Jefferson, B., Jarvis, P., 2019. Comparing flow cytometry with culture-based methods for microbial monitoring and as a diagnostic tool for assessing drinking water treatment processes. *Environ. Int.* 130, 104893. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.envint.2019.06.003>
- civity, 2017. Arzneimittelverbrauch im Spannungsfeld des demografischen Wandels.
- Clara, M., Gruber, G., Humer, F., Hofer, T., Kretschma, F., Ertl, T., 2014. Trace contaminant emissions from residential and traffic areas (German).
- D. Richardson, S., Y. Kimura, S., 2020. Water Analysis: Emerging Contaminants and Current Issues. *Anal. Chem.* 92, 473–505. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.9b05269>
- Dembek, Z. F. and R. A. Lordo 2022. "Influence of Perfluoroalkyl Substances on Occurrence of Coronavirus Disease 2019." *Int J Environ Res Public Health* 19(9) (<https://doi.org/10.3390/ijerph19095375>).
- DeWitt, J. C., et al. (2019). "Exposure to per-fluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances leads to immunotoxicity: epidemiological and toxicological evidence." *Journal of Exposure Science & Environmental Epidemiology* 29(2): 148-156. <https://doi.org/10.1038/s41370-018-0097-y>
- DWA-Themen, 2014. Bedeutung von Transformationsprodukten für den Wasserkreislauf. DWA-Themen.
- EC, 2021. Pathway to a Healthy Planet for All EU Action Plan: "Towards Zero Pollution for Air, Water and Soil."
- EC, 2020. Chemicals Strategy for Sustainability - Towards a Toxic-Free Environment,. Brussels.

Favere, J., Barbosa, R.G., Sleutels, T., Verstraete, W., De Gussemme, B., Boon, N., 2021. Safeguarding the microbial water quality from source to tap. *npj Clean Water* 4, 28. <https://doi.org/10.1038/s41545-021-00118-1>

Fenner, K., Elsner, M., Lueders, T., McLachlan, M.S., Wackett, L.P., Zimmermann, M., Drewes, J.E., 2021. Methodological Advances to Study Contaminant Biotransformation: New Prospects for Understanding and Reducing Environmental Persistence? *ACS ES&T Water* 1, 1541–1554. <https://doi.org/10.1021/acsestwater.1c00025>

Fenner, K., Men, Y., 2021. Comment on “Role of Ammonia Oxidation in Organic Micropollutant Transformation during Wastewater Treatment”: Overlooked Evidence to the Contrary. *Environ. Sci. Technol.* 55, 12128–12129. <https://doi.org/10.1021/acs.est.1c04178>

Fischer, K., Majewsky, M., 2014. Cometabolic degradation of organic wastewater micropollutants by activated sludge and sludge-inherent microorganisms. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 98, 6583–6597. <https://doi.org/10.1007/s00253-014-5826-0>

Fuchs, S., Toshovski, S., Kaiser, M., Sacher, F., Thoma, A., 2020. Realistic mapping of environmental pollution with biocides - Emissions from urban systems. *Umweltbundesamt Texte* 169/2020.

Gesetz zur Verhütung und Bekämpfung von Infektionskrankheiten beim Menschen (Infektionsschutzgesetz - IfSG)

§ 37 Beschaffenheit von Wasser für den menschlichen Gebrauch sowie von Wasser zum Schwimmen oder Baden in Becken oder Teichen, Überwachung

Gigault, J., ter Halle, A., Baudrimont, M., Pascal, P.-Y., Gauffre, F., Phi, T.-L., Hadri, H. El, Grassl, B., Reynaud, S., 2018. Current opinion: What is a nanoplastic? *Environ. Pollut.* 235, 1030–1034. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.envpol.2018.01.024>

Gobler, C.J., 2020. Climate Change and Harmful Algal Blooms: Insights and perspective. *Harmful Algae* 91, 101731. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.hal.2019.101731>

Gudipati, S., Zervos, M., Herc, E., 2020. Can the One Health Approach Save Us from the Emergence and Reemergence of Infectious Pathogens in the Era of Climate Change: Implications for Antimicrobial Resistance? *Antibiot.* . <https://doi.org/10.3390/antibiotics9090599>

Haer, T., Husby, T.G., Botzen, W.J.W., Aerts, J.C.J.H., 2020. The safe development paradox: An agent-based model for flood risk under climate change in the European Union. *Glob. Environ. Chang.* 60, 102009. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.gloenvcha.2019.102009>

Hale, S.E., Neumann, M., Schliebner, I., Schulze, J., Averbek, F., Castell-Exner, C., Collard, M., Drmac, D., Hartmann, J., Hofman-Caris, R., Hollender, J., de Jonge, M., Kullick, T., Lennquist, A., Letzel, T., Nödler, K., Pawlowski, S., Reinecke, N., Rorije, E., Scheurer, M., Sigmund, G., Timmer, H., Trier, X., Verbruggen, E., Arp, H.P.H., 2022. Getting in control of persistent, mobile and toxic (PMT) and very persistent and very mobile (vPvM) substances under REACH to protect water resources: - Strategies from diverse perspectives in prepara.

Hammes, F., Berney, M., Wang, Y., Vital, M., Köster, O., Egli, T., 2008. Flow-cytometric total bacterial cell counts as a descriptive microbiological parameter for drinking water treatment processes. *Water Res.* 42, 269–277. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.watres.2007.07.009>

Hartmann, N.B., Hüffer, T., Thompson, R.C., Hassellöv, M., Verschoor, A., Dugaard, A.E., Rist, S., Karlsson, T., Brennholt, N., Cole, M., Herrling, M.P., Heß, M., Ivleva, N.P., Lusher, A.L., Wagner, M., Hess, M.C., Ivleva, N.P., Lusher, A.L., Wagner, M., 2019. Are We Speaking the Same Language? Recommendations for a Definition and Categorization Framework for Plastic Debris. *Environ. Sci. Technol.* 53, 1039–1047. <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b05297>

Henkel, C., Hüffer, T., Hofmann, T., 2022. Polyvinyl chloride microplastics leach phthalates into the aquatic environment over decades. *Environ. Sci. Technol.* 2022, 56, 20, 14507–14516

Hermesen, E., Mintenig, S.M., Besseling, E., Koelmans, A.A., 2018. Quality Criteria for the Analysis of Microplastic in Biota Samples: A Critical Review. *Environ. Sci. Technol.* 52, 10230–10240. <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b01611>

Henzler, A.F., Greskowiak, J., Massmann, G., 2014. Modeling the fate of organic micropollutants during river bank filtration (Berlin, Germany). *J Contam Hydrol* 156, 78–92.

Hillenbrand, T., Tettenborn, F., Menger-Krug, E., Marscheider-Weidemann, F., Fuchs, S., Toshovski, S., Kittlaus, S., Metzger, S., Tjong, I., Wermter, P., Kersting, M., Abegglen, C., 2015. Measures to reduce micropollutant emissions to water - Summary. *Umweltbundesamt Texte* | 87/2014 25.

Hjelmsø, M.H., Hellmér, M., Fernandez-Cassi, X., Timoneda, N., Lukjancenko, O., Seidel, M., Elsässer, D., Aarestrup, F.M., Löfström, C., Bofill-Mas, S., Abril, J.F., Girones, R., Schultz, A.C., 2017. Evaluation of Methods for the Concentration and Extraction of Viruses from Sewage in the Context of Metagenomic Sequencing. *PLoS One* 12, e0170199.

Hoffmann, G., Rathinam, K., Martschin, M., Ivančev-Tumbas, I., Panglisch, S. 2021. Influence of carbon agglomerate formation on micropollutants removal in combined PAC-membrane filtration processes for advanced wastewater treatment. *Water* 13(24), 3578.

Hollender, J., L. Schymanski, E., P. Singer, H., Lee Ferguson, P., 2017. Nontarget Screening with High Resolution Mass Spectrometry in the Environment: Ready to Go? *Environ. Sci. & Technol.* 51, 11505–11512. <https://doi.org/10.1021/acs.est.7b02184>

Jin, B., Huang, C., Yu, Y., Zhang, G., Peter H. Arp, H., 2020. The Need to Adopt an International PMT Strategy to Protect Drinking Water Resources. *Environ. Sci. & Technol.* 54, 11651–11653. <https://doi.org/10.1021/acs.est.0c04281>

Jochmann, M.A., Schmidt, T.C. 2015. Compound-specific stable isotope analysis, Royal Society of Chemistry.

Karakurt, S., Schmid, L., Hübner, U., Drewes, J.E. 2019. Dynamics of wastewater effluent contributions in streams and impacts on drinking water supply via riverbank filtration in Germany—A national reconnaissance. *Environ. Sci. Technology* 53(11), 6154–6161.

Karthe, D., Behrmann, O., Blättel, V., Elsässer, D., Heese, C., Hügler, M., Hufert, F., Kunze, A., Niessner, R., Ho, J., Scharaw, B., Spoo, M., Tiehm, A., Urban, G., Vosseler, S., Westerhoff, T., Dame, G., Seidel, M., 2016. Modular development of an inline monitoring system for waterborne pathogens in raw and drinking water. *Environ. Earth Sci.* 75, 1481. <https://doi.org/10.1007/s12665-016-6287-9>

Kiefer, K., Du, L., Singer, H., Hollender, J., 2021. Identification of LC-HRMS nontarget signals in groundwater after source related prioritization. *Water Res.* 196, 116994. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.watres.2021.116994>

Kober, C., Niessner, R., Seidel, M., 2018. Quantification of viable and non-viable *Legionella* spp. by heterogeneous asymmetric recombinase polymerase amplification (haRPA) on a flow-based chemiluminescence microarray. *Biosens. Bioelectron.* 100, 49–55. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.bios.2017.08.053>

Köhler, H.-R., Belitz, B., Eckwert, H., Adam, R., Rahman, B., Trontelj, P., 1998. Validation of hsp70 stress gene expression as a marker of metal effects in *Deroceas reticulatum* (pulmonata): Correlation with demographic parameters. *Environ. Toxicol. Chem.* 17, 2246–2253. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/etc.5620171115>

Köhler, H.-R., Triebkorn, R., 2013. Wildlife Ecotoxicology of Pesticides: Can We Track Effects to the Population Level and Beyond? *Science* (80-). 341, 759–765. <https://doi.org/10.1126/science.1237591>

Kristiansson, E., Coria, J., Gunnarsson, L., Gustavsson, M., 2021. Does the scientific knowledge reflect the chemical diversity of environmental pollution? – A twenty-year perspective. *Environ. Sci. Policy* 126, 90–98. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.envsci.2021.09.007>

Kucharzyk, K.H., Darlington, R., Benotti, M., Deeb, R., Hawley, E., 2017. Novel treatment technologies for PFAS compounds: A critical review. *J. Environ. Manage.* 204, 757–764. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2017.08.016>

Lapworth, D.J., Baran, N., Stuart, M.E., Ward, R.S. 2012. Emerging organic contaminants in groundwater: A review of sources, fate and occurrence. *Environ. Pollut.* 163, 287-303.

Launay, M., Droste, F., Dittmer, U., Steinmetz, H., 2015. Emittierte Spurenstoffströme von Kläranlage und Mischwasserentlastungen im Vergleich.

Launay, M.A., 2018. Organic micropollutants in urban wastewater systems during dry and wet weather - occurrence, spatio-temporal distribution and emissions to surface waters. DIV Deutscher Industrieverlag GmbH.

LAWA, 2017. Auswirkungen des Klimawandels auf die Wasserwirtschaft – Bestandsaufnahme, Handlungsoptionen und strategische Handlungsfelder.

Lee, M., Zimmermann-Steffens, S.G., Arey, J.S., Fenner, K., von Gunten, U., 2015. Development of Prediction Models for the Reactivity of Organic Compounds with Ozone in Aqueous Solution by Quantum Chemical Calculations: The Role of Delocalized and Localized Molecular Orbitals. *Environ. Sci. Technol.* 49, 9925–9935. <https://doi.org/10.1021/acs.est.5b00902>

Leese, F., Bernhofer, C., Bronstert, A., Flörke, M., Geist, J., Gessner, M.O., Himmelsbach, T., Krebs, P., Olsson, O., Peiffer, S., Schanze, J., Schließmann, U., Seegert, J., Tetzlaff, D., Teutsch, G., Weiler, M., Zwiener, C., 2021. Wassersysteme im Wandel - Herausforderungen und Forschungsbedarfe für die deutsche Wasserforschung. <https://doi.org/10.5281/zenodo.4923068>

Leifels, M., Cheng, D., Sozzi, E., Shoults, D.C., Wuertz, S., Mongkolsuk, S., Sirikanchana, K., 2021. Capsid integrity quantitative PCR to determine virus infectivity in environmental and food applications – A systematic review. *Water Res.* X 11, 100080. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.wroa.2020.100080>

Leusch, F.D.L., Ziajahromi, S., 2021. Converting mg/L to Particles/L: Reconciling the Occurrence and Toxicity Literature on Microplastics. *Environ. Sci. Technol.* 55, 11470–11472. <https://doi.org/10.1021/acs.est.1c04093>

Liess, M., Liebmann, L., Vormeier, P., Weisner, O., Altenburger, R., Borchardt, D., Brack, W., Chatzinotas, A., Escher, B., Foit, K., Gunold, R., Henz, S., Hitzfeld, K.L., Schmitt-Jansen, M., Kamjunke, N., Kaske, O., Knillmann, S., Krauss, M., Küster, E., Link, M., Lück, M., Möder, M., Müller, A., Paschke, A., Schäfer, R.B., Schneeweiss, A., Schreiner, V.C., Schulze, T., Schürmann, G., von Tümpling, W., Weitere, M., Wogram, J., Reemtsma, T., 2021. Pesticides are the dominant stressors for vulnerable insects in lowland streams. *Water Res.* 201, 117262. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.watres.2021.117262>

Lutze, H. V, Brekenfeld, J., Naumov, S., von Sonntag, C., Schmidt, T.C., 2018. Degradation of perfluorinated compounds by sulfate radicals – New mechanistic aspects and economical considerations. *Water Res.* 129, 509–519. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2017.10.067>

Maier, M.P., De Corte, S., Nitsche, S., Spaett, T., Boon, N., Elsner, M., 2014. C & N isotope analysis of diclofenac to distinguish oxidative and reductive transformation and to track commercial products. *Environ. Sci. Technology* 48(4), 2312-2320.

Maier, M.P., Prasse, C., Pati, S.G., Nitsche, S., Li, Z., Radke, M., Meyer, A., Hofstetter, T.B., Ternes, T.A., Elsner, M. 2016. Exploring trends of C and N isotope fractionation to trace transformation reactions of diclofenac in natural and engineered systems. *Environ. Sci. Technology* 50(20), 10933-10942.

Michael, I., Rizzo, L., McArdell, C.S., Manaia, C.M., Merlin, C., Schwartz, T., Dagot, C., Fatta-Kassinos, D. 2013. Urban wastewater treatment plants as hotspots for the release of antibiotics in the environment: A review. *Water Res.* 47(3), 957-995.

Masson-Delmotte, V., Zhai, P., Pirani, A., Connors, S.L., Péan, P., Berger, S., Caud, N., Chen, Y., Goldfarb, L., Gomis, M.I., Huang, M., Leitzell, K., Lonnoy, E., Matthews, J.B.R., Maycock, T.K., Waterfield, T., Yelekci, O., Yu, R., Zhou, B., 2021. IPCC, 2021: Climate Change 2021: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change.

Neumann, M., Schliebner, I., 2019. Protecting the sources of our drinking water: The criteria for identifying persistent, mobile and toxic (PMT) substances and very persistent and very mobile (vPvM) substances under EU Regulation REACH (EC) No 1907/2006. *Umweltbundesamt Texte* 127/2019.

Neuwald, I., Muschket, M., Zahn, D., Berger, U., Seiwert, B., Meier, T., Kuckelkorn, J., Strobel, C., Knepper, T.P., Reemtsma, T., 2021. Filling the knowledge gap: A suspect screening study for 1310 potentially persistent and mobile chemicals with SFC- and HILIC-HRMS in two German river systems. *Water Res.* 204, 117645. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.watres.2021.117645>

Nickel, J.P., Sacher, F., Fuchs, S., 2021. Up-to-date monitoring data of wastewater and stormwater quality in Germany. *Water Res.* 202, 117452. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.watres.2021.117452>

Paijens, C., Bressy, A., Frère, B., Tedoldi, D., Mailler, R., Rocher, V., Neveu, P., Moilleron, R., 2021. Urban pathways of biocides towards surface waters during dry and wet weathers: Assessment at the Paris conurbation scale. *J. Hazard. Mater.* 402, 123765. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.123765>

Pilevar, M., Kim, K.T., Lee, W.H., 2021. Recent advances in biosensors for detecting viruses in water and wastewater. *J. Hazard. Mater.* 410, 124656. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.124656>

Pinar-Méndez, A., Fernández, S., Baquero, D., Vilaró, C., Galofré, B., González, S., Rodrigo-Torres, L., Arahal, D.R., Macián, M.C., Ruvira, M.A., Aznar, R., Caudet-Segarra, L., Sala-Comorera, L., Lucena, F., Blanch, A.R., Garcia-Aljaro, C., 2021. Rapid and improved identification of drinking water bacteria using the Drinking Water Library, a dedicated MALDI-TOF MS database. *Water Res.* 203, 117543. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.watres.2021.117543>

Prest, E.I., Hammes, F., van Loosdrecht, M.C.M., Vrouwenvelder, J.S., 2016. Biological Stability of Drinking Water: Controlling Factors, Methods, and Challenges . *Front. Microbiol.*

Reemtsma, T., Berger, U., Peter H. Arp, H., Gallard, H., P. Knepper, T., Neumann, M., Benito Quintana, J., de Voogt, P., 2016. Mind the Gap: Persistent and Mobile Organic Compounds—Water Contaminants That Slip Through. *Environ. Sci. & Technol.* 50, 10308–10315. <https://doi.org/10.1021/acs.est.6b03338>

Reichenberger, S., Bach, M., Skitschak, A., Frede, H.-G. (2007) Mitigation strategies to reduce pesticide inputs into ground- and surface water and their effectiveness; A review. *Sci. Total Environ.* 384(1), 1-35.

Richardson, S., Ternes, T.A., *Water Analysis: Emerging Contaminants and Current Issues.* Anal. Chem. 2022, 94, 1, 382–416.

Rochman, C.M., Brookson, C., Bikker, J., Djuric, N., Earn, A., Bucci, K., Athey, S., Huntington, A., McIlwraith, H., Munno, K., De Frond, H., Kolomijeca, A., Erdle, L., Grbic, J., Bayoumi, M., Borrelle, S.B., Wu, T., Santoro, S., Werbowski, L.M., Zhu, X., Giles, R.K., Hamilton, B.M., Thaysen, C., Kaura, A., Klasios, N., Ead, L., Kim, J., Sherlock, C., Ho, A., Hung, C., 2019. Rethinking microplastics as a diverse contaminant suite. *Environ. Toxicol. Chem.* 38, 703–711. <https://doi.org/10.1002/etc.4371>

Sanz-Prat, A., Greskowiak, J., Burke, V., Rivera Villarreyes, C.A., Krause, J., Monnikhoff, B., Sperlich, A., Schimmelpfennig, S., Duennbier, U., Massmann, G. 2020. A model-based analysis of the reactive transport behaviour of 37 trace organic compounds during field-scale bank filtration. *Water Res.* 173, 115523.

Schmidt, T.C. and Jochmann, M.A. (2012) Origin and fate of organic compounds in water: Characterization by compound-specific stable isotope analysis, *Annu. Rev. Anal. Chem.* pp. 133-155.

Schulz, W., Lucke, T., Al., E., 2019. Non-Target Screening in der Wasseranalytik - Leitfaden zur Anwendung der LC-ESI-HRMS für Screening-Untersuchungen.

Schwarzenbach, R.P., Egli, T., Hofstetter, T.B., von Gunten, U., Wehri, B. 2010. Global water pollution and human health, *Annu. Environ. Res. Chem.* pp. 109-136.

Schwarzenbach, R.P., Gschwend, P.M. and Imboden, D.M. (eds) (2003) *Environmental organic chemistry*, John Wiley & Sons, Inc. ISBN 0-47 1-35750-2.

Schwaferts, C., Niessner, R., Elsner, M., Ivleva, N.P., 2019. Methods for the analysis of submicrometer- and nanoplastic particles in the environment. *TrAC Trends Anal. Chem.* <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.trac.2018.12.014>

Schwarz, S., Schmiege, H., Scheurer, M., Köhler, H.-R., Triebkorn, R., 2017. Impact of the NSAID diclofenac on survival, development, behaviour and health of embryonic and juvenile stages of brown trout, *Salmo trutta f. fario*. *Sci. Total Environ.* 607–608, 1026–1036. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.07.042>

Seidel, M., Jurzik, L., Brettar, I., Höfle, M.G., Griebler, C., 2016. Microbial and viral pathogens in freshwater: current research aspects studied in Germany. *Environ. Earth Sci.* 75, 1384. <https://doi.org/10.1007/s12665-016-6189-x>

Shuliakovich, A., 2022. Extensive rain events have a more substantial impact on the endocrine-disruptive potential in an effluent-dominated small river rather than advanced effluent treatment. *Submitt. to STOTEN.*

Sigmund, G., Arp, H.P.H., Aumeier, B.M., Bucheli, T.D., Chefetz, B., Chen, W., Droge, S.T.J., Endo, S., Escher, B.I., Hale, S.E., Hofmann, T., Pignatello, J., Reemtsma, T., Schmidt, T.C., Schönsee, C.D., Scheringer, M. 2022. Sorption and mobility of charged organic compounds: How to confront and overcome limitations in their assessment. *Environ. Sci. Technology.*

Singhal, N., Kumar, M., Kanaujia, P.K., Viridi, J.S., 2015. MALDI-TOF mass spectrometry: an emerging technology for microbial identification and diagnosis. *Front. Microbiol.*

Sippel, S., Meinshausen, N., Fischer, E.M., Székely, E., Knutti, R., 2020. Climate change now detectable from any single day of weather at global scale. *Nat. Clim. Chang.* 10, 35–41. <https://doi.org/10.1038/s41558-019-0666-7>

Sollweck, K., Streich, P., Elsner, M., Seidel, M., 2021. A Chip-Based Colony Fusion Recombinase Polymerase Amplification Assay for Monitoring of Antimicrobial Resistance Genes and Their Carrying Species in Surface Water. *ACS ES&T Water* 1, 584–594. <https://doi.org/10.1021/acsestwater.0c00110>

Stütz, L., Schulz, W., Winzenbacher, R., Happel, O., Schmutz, B., Scheurer, M., 2020. Wirkungsbezogene Analytik in der Trinkwassergewinnung. *DVGW Energ. | wasser-praxis* 2, 46–51.

Swain, D.L., Wing, O.E.J., Bates, P.D., Done, J.M., Johnson, K.A., Cameron, D.R., 2020. Increased Flood Exposure Due to Climate Change and Population Growth in the United States. *Earth's Futur.* 8, e2020EF001778. <https://doi.org/10.1029/2020EF001778>

Tang, J.W., Bialasiewicz, S., Dwyer, D.E., Dilcher, M., Tellier, R., Taylor, J., Hua, H., Jennings, L., Kok, J., Levy, A., Smith, D., Barr, I.G., Sullivan, S.G., 2021. Where have all the viruses gone? Disappearance of seasonal respiratory viruses during the COVID-19 pandemic. *J. Med. Virol.* 93, 4099–4101. <https://doi.org/10.1002/jmv.26964>

Tentscher, P.R., Lee, M. and von Gunten, U. (2019) Micropollutant Oxidation Studied by Quantum Chemical Computations: Methodology and Applications to Thermodynamics, Kinetics, and Reaction Mechanisms. *Accounts of Chemical Research* 52(3), 605-614. <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.8b00610>

Thaler, S., 2019. Spurenstoffe und Krankheitserreger im Wasserkreislauf. *KW Korrespondenz Wasserwirtschaft* 12, 75–79.

Thompson, R.C., Olsen, Y., Mitchell, R.P., Davis, A., Rowland, S.J., John, A.W.G., McGonigle, D., Russell, A.E., 2004. Lost at Sea: Where Is All the Plastic? *Science* (80-.). 304, 838. <https://doi.org/10.1126/science.1094559>

Tran, N.H., Reinhard, M., Gin, K.Y.-H. 2018. Occurrence and fate of emerging contaminants in municipal wastewater treatment plants from different geographical regions-a review. *Water Res.* 133, 182-207.

Triebkorn, R., Blaha, L., Gallert, C., Giebner, S., Hetzenauer, H., Köhler, H.-R., Kuch, B., Lüddecke, F., Oehlmann, J., Peschke, K., Sacher, F., Scheurer, M., Schwarz, S., Thellmann, P., Wurm, K., Wilhelm, S., 2019a. Freshwater ecosystems profit from activated carbon-based wastewater treatment across various levels of biological organisation in a short timeframe. *Environ. Sci. Eur.* 31, 85. <https://doi.org/10.1186/s12302-019-0267-0>

Triebkorn, R., Scherer, U., Braunbeck, T., 2019b. Effektstudien in der Risikobewertung: Das Projekt Effect-Net und Ergebnisse des Workshops. *Korrespondenz Wasserwirtschaft* 8.

UBA, 2021. Bericht des Bundesministeriums für Gesundheit und des Umweltbundesamtes an die Verbraucherinnen und Verbraucher über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch (Trinkwasser) in Deutschland (2017-2019).

UBA, 2018. Leitfaden Gefährdungsbasiertes Risikomanagement für anthropogene Spurenstoffe zur Sicherung der Trinkwasserversorgung (Tox Box).

UBA, 2017. Gewässer in Deutschland - Zustand und Bewertung.

UBA, 2003. Bewertung der Anwesenheit teil- oder nicht bewertbarer Stoffe im Trinkwasser aus gesundheitlicher Sicht. *Bundesgesundheitsblatt - Gesundheitsforsch. - Gesundheitsschutz* 46, 249–251. <https://doi.org/10.1007/s00103-003-0576-7>

- Ullo, S.L., Sinha, G.R., 2020. Advances in Smart Environment Monitoring Systems Using IoT and Sensors. *Sensors*. <https://doi.org/10.3390/s20113113>
- Vermeirssen, E.L.M., Dietschweiler, C., Werner, I., Burkhardt, M., 2017. Corrosion protection products as a source of bisphenol A and toxicity to the aquatic environment. *Water Res.* 123, 586–593. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.watres.2017.07.006>
- von Gunten, U., 2018. Oxidation Processes in Water Treatment: Are We on Track? *Environ. Sci. & Technol.* 52, 5062–5075. <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b00586>
- Wang, Z., Walker, G.W., Muir, D.C.G., Nagatani-Yoshida, K. 2020. Toward a global understanding of chemical pollution: A first comprehensive analysis of national and regional chemical inventories. *Environ. Sci. Technology* 54(5), 2575-2584.
- Wicke, D., Tatis-Muvdi, R., Rouault, P., Zerball-van Baer, R., Dünnbier, U., Rohr, M., Burkhardt, M., 2021. Bauen und Sanieren als Schadstoffquelle in der urbanen Umwelt.
- Willach, S., Lutze, H. V, Eckey, K., Löppenber, K., Lüling, M., Terhalle, J., Wolbert, J.-B., Jochmann, M.A., Karst, U., Schmidt, T.C., 2017. Degradation of sulfamethoxazole using ozone and chlorine dioxide - Compound-specific stable isotope analysis, transformation product analysis and mechanistic aspects. *Water Res.* 122, 280–289. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.watres.2017.06.001>
- Wittmer, I.K., Scheidegger, R., Bader, H.-P., Singer, H., Stamm, C., 2011. Loss rates of urban biocides can exceed those of agricultural pesticides. *Sci. Total Environ.* 409, 920–932. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2010.11.031>
- Wunderlich, A., Torggler, C., Elsässer, D., Lück, C., Niessner, R., Seidel, M., 2016. Rapid quantification method for *Legionella pneumophila* in surface water. *Anal. Bioanal. Chem.* 408, 2203–2213. <https://doi.org/10.1007/s00216-016-9362-x>
- Yin, L., Wang, B., Yuan, H., Deng, S., Huang, J., Wang, Y., Yu, G., 2017. Pay special attention to the transformation products of PPCPs in environment. *Emerg. Contam.* 3, 69–75. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.emcon.2017.04.001>
- Zulkifli, S.N., Rahim, H.A., Lau, W.-J., 2018. Detection of contaminants in water supply: A review on state-of-the-art monitoring technologies and their applications. *Sensors Actuators B Chem.* 255, 2657–2689. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.snb.2017.09.078>

