Instrumental Analytical Chemistry
University Duisburg-Essen

FORSCHUNGSKOLLEG FUTURE WATER

Bildung und Wirkung von Transformationsprodukten beim Einsatz erweiterter Oxidationsprozesse in der Abwasserbehandlung

O. Knoop

Hintergrund

Durch die herkömmliche Abwasserbehandlung werden Wirkstoffe von Medikamenten, Pflegeprodukten, Haushaltschemikalien und weiterer für die Umwelt möglicherweise schädlichen Stoffe nicht vollständig oder gar nicht aus dem Wasser entfernt. Dadurch können diese Stoffe, die unter dem Begriff **Mikroschadstoffe** zusammengefasst werden, in unsere Flüsse und Seen gelangen. Um deren Eintrag zu verhindern, überlegt man derzeit eine **4. Reinigungsstufe** einzuführen. Hier können z.B. Oxidationsprozesse dazu genutzt werden die Mikroschadstoffe durch chemische Reaktionen so zu verändern, das diese Ihre Wirkung verlieren. Bei diesen Reaktionen entstehen **Abbauprodukte**, oder auch Transformationsprodukte (TP) genannt, die größtenteils unbekannt sind. Da diese Abbauprodukte ebenso eine **Wirkung** auf die Umwelt haben könnten, muss dies erforscht werden.

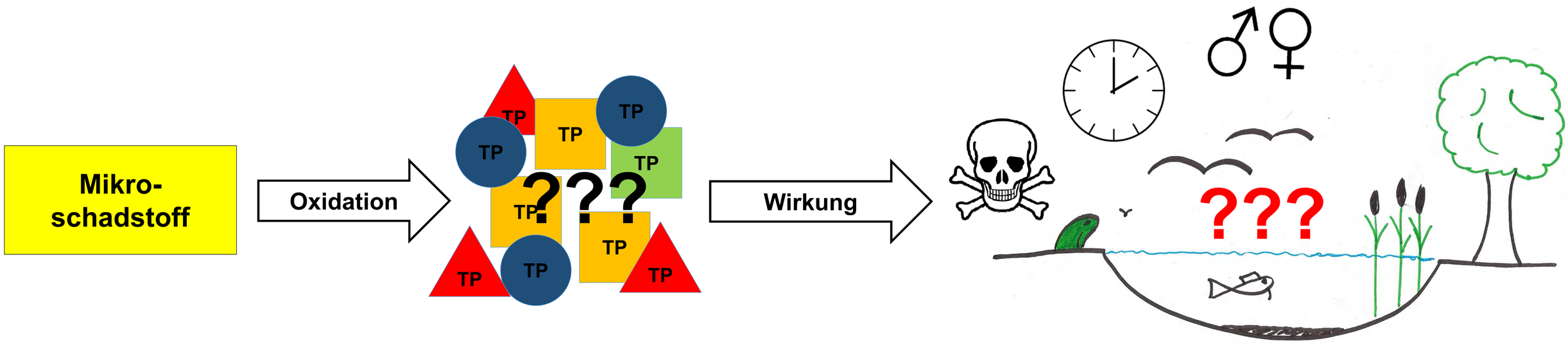

Abbildung 1: Die Transformationsprodukte könnten negative Auswirkungen auf die Umwelt haben. Mögliche Effekte wären akut toxische oder langfristige Effekte. Gerade hormonelle Effekte können dort auch eine große Rolle spielen.

Forschungsansätze

Um die Wirkung einzelner Transformationsprodukte zu bestimmen müssen diese zuerst identifiziert werden. Dazu wird mittels **chemischer Analytik** die Zusammensetzung und Struktur einzelner TP bestimmt. Anschließend können die spezifischen Wirkungen dieser einzelnen Substanzen auf unterschiedliche Organismen getestet werden. Eine weitere Möglichkeit stellt die sogenannte **wirkungsbezogene Analytik** dar. Dabei werden die Wirkungen oxidativ behandelter und unbehandelter Abwässer miteinander verglichen. So kann bestimmt werden, ob durch die 4. Reinigungsstufe die schädliche Wirkungen auf die Umwelt verringert werden können. Allerdings werden so keine direkten Informationen über die Transformationsprodukte erhalten.

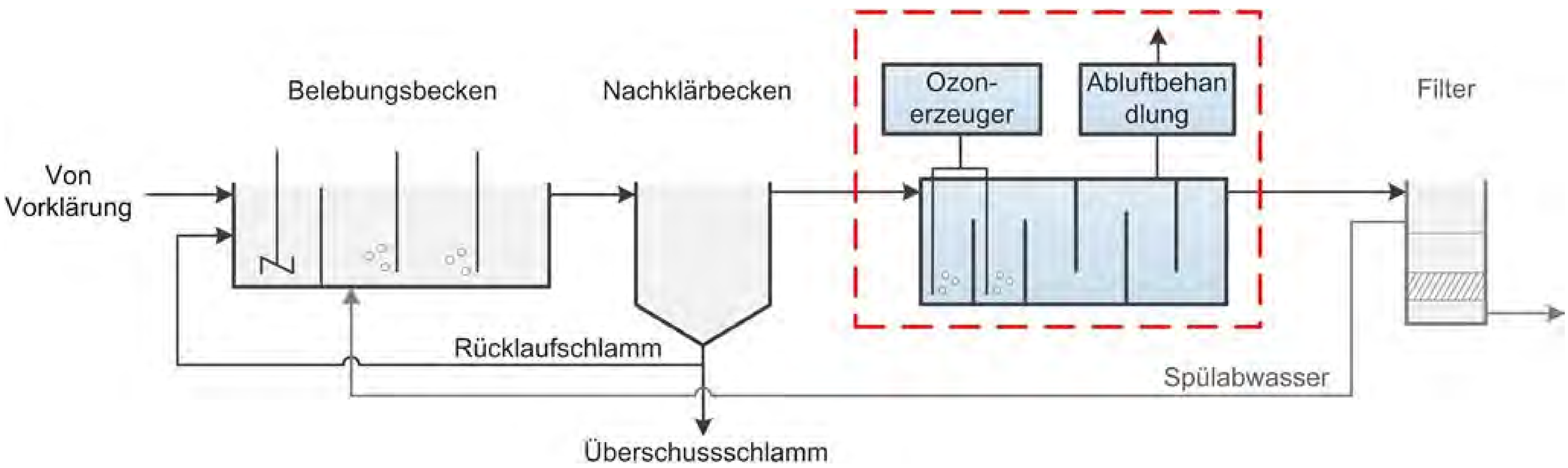

Abbildung 2: Schematischer Aufbau eines Klärwerks mit Ozonierung als vierte Reinigungsstufe und anschließendem biologischem Filter.

Quelle: http://koms-bw.de/technologien/oxidativ/page10

Ministerium für
Kultur und Wissenschaft
des Landes Nordrhein-Westfalen

UNIVERSITÄT DUISBURG ESSEN
Open-Minded

Instrumental Analytical Chemistry
University Duisburg-Essen

FORSCHUNGSKOLLEG FUTURE WATER

Der Abbau von Mikroschadstoffen durch Ozon am Beispiel von Tamoxifen

O. Knoop

Was ist wichtig?

- **Wie schnell reagiert die Substanz mit Ozon?**
- **Was für Substanzen entstehen?**
- **Können die Wirkungen reduziert werden?**

Geschwindigkeit

Tamoxifen (TAM) reagiert schnell mit Ozon und könnte somit gut durch eine Ozonung als Reinigungsstufe entfernt werden.

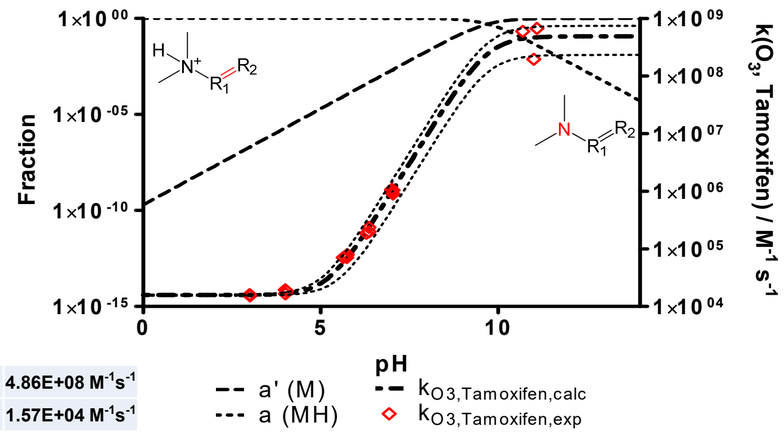

Abbildung 2: Fraktionierung der Tamoxifen-Spezies und berechnete pH-Abhängigkeit von $k_{O3,TAM}$, sowie bestimmte $k_{O3,TAM,determined}$.

Transformationsprodukte

Es gibt drei mögliche Reaktionswege. Diese sind jedoch stark von den Bedingungen im Wasser beeinflusst.

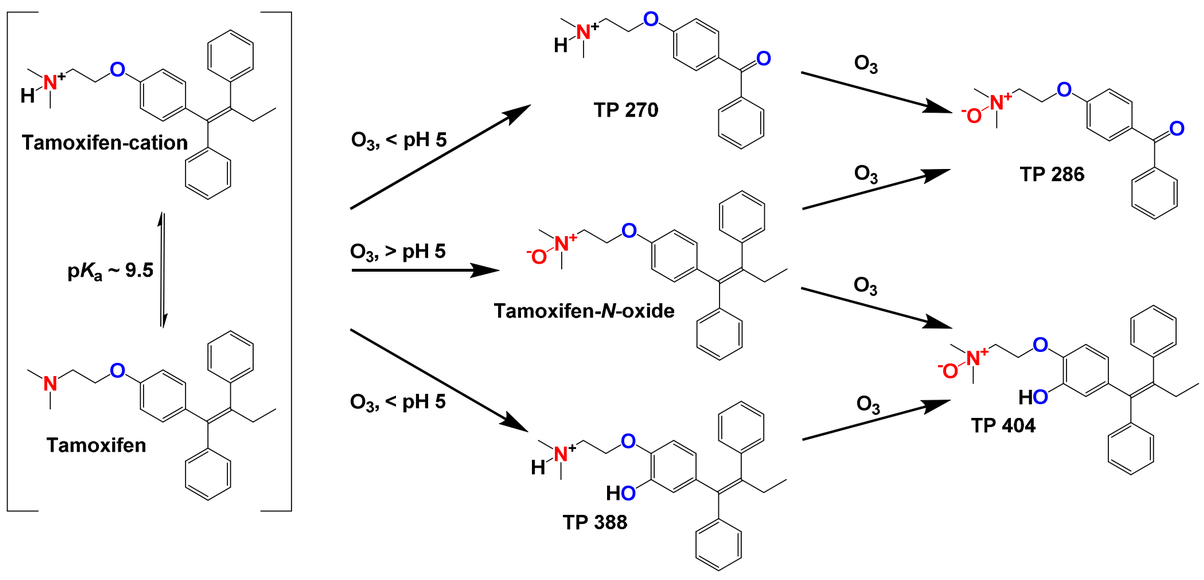

Abbildung 4: Abbauwege und gebildete Transformationsprodukte.

Die Summenformeln der Transformationsprodukte wurden mittels hochauflösender Massenspektrometrie bestimmt und die Strukturen auf Basis der Fragmentierungsmuster ermittelt. Tamoxifen-*N*-oxid ist wurde mittels Referenzsubstanz bestätigt.

Contact:
M. Sc. Oliver Knoop

Instrumental Analytical Chemistry
University Duisburg-Essen
oliver.knoop@uni-due.de

Tamoxifen

Einsatz: Medikament zur Therapie von Brustkrebs
Wirkweise: hormonell (Anti-Östrogen)

$pKa_{Tamoxifen}$: 9.42 ± 0.2

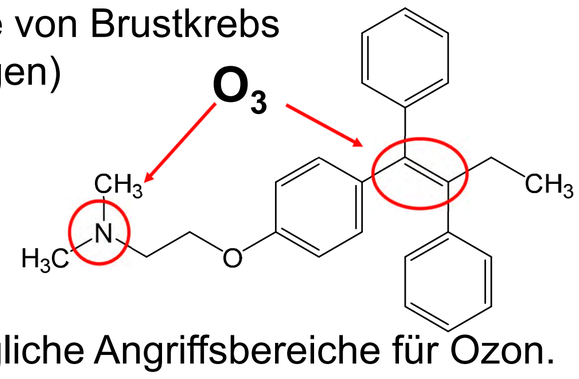

Abbildung 1: Tamoxifen und mögliche Angriffsbereiche für Ozon.

Abbau und anti-östrogener Effekt

Da bei unterschiedlichen pH-Werten verschiedene Transformationsprodukte gebildet werden, wurde bei pH 3 und pH 7 der Abbau und die daraus folgende Produktbildung und der anti-östrogene Effekt untersucht.

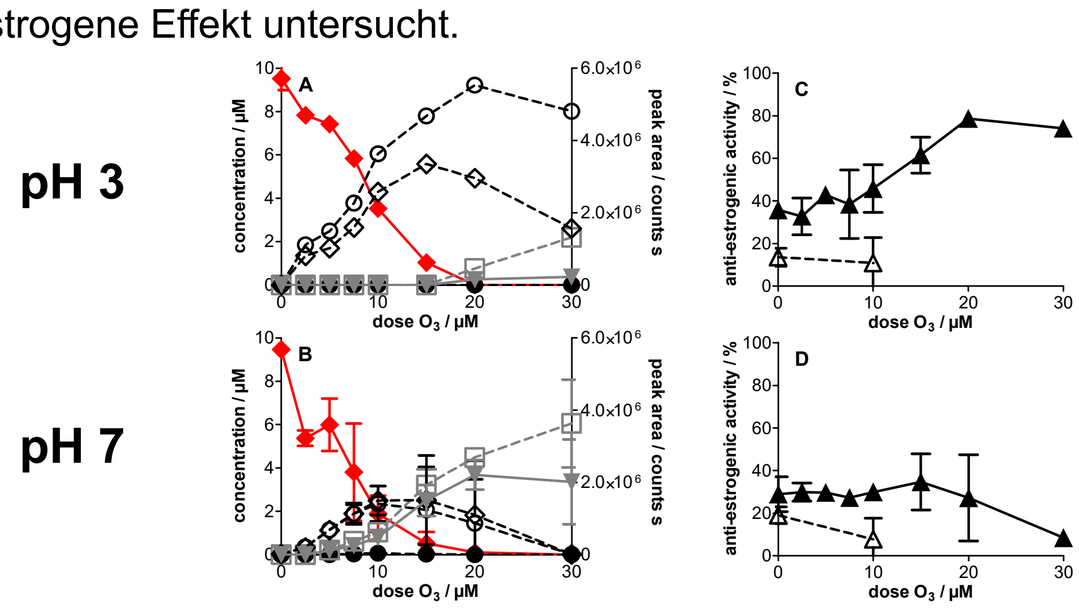

Abbildung 3: Abbau von TAM bei der Ozonierung bei pH 3 und pH 7 and semiquantititive Produktbildung. ○ - TP 270, □ - TP 286, ◊ - TP 388, ▼ - TP 404, ♦ - TAM und ● - TAM-N-oxide. Anti-östrogene Aktivität als Inhibition von 50 ng L^{-1} E2 in % nach der Ozonierung ▲ – TAM und Δ – Lösemittelblank (B).

Zusammenhang Effekt und Struktur

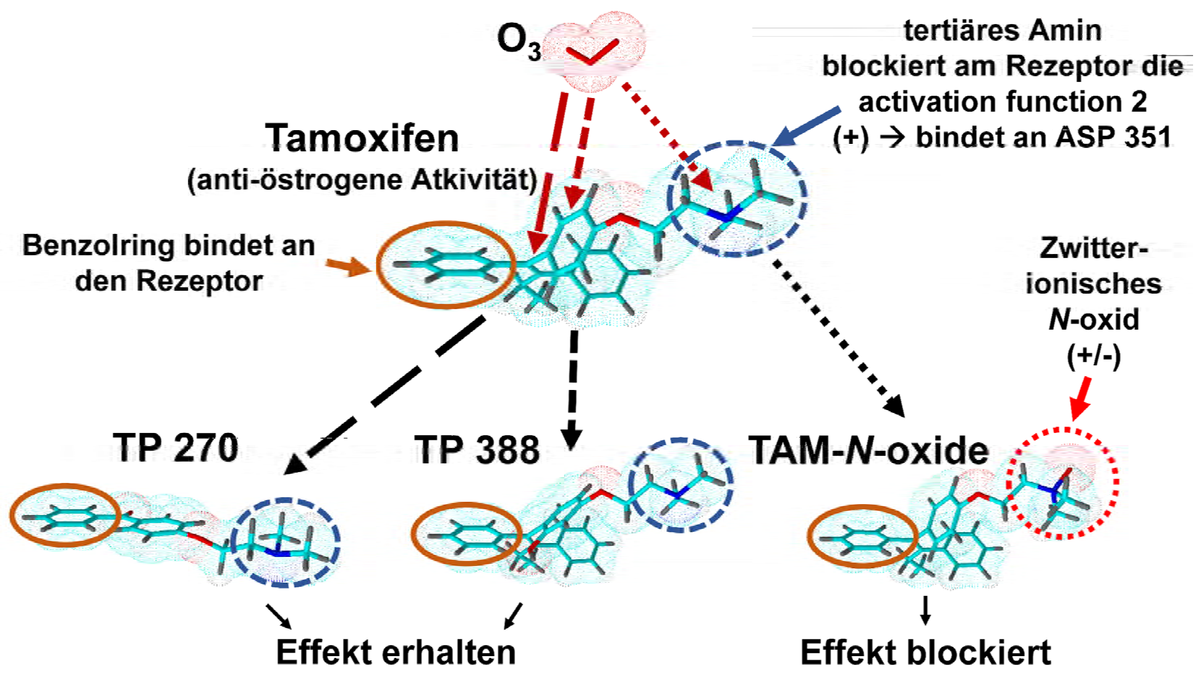

Abbildung 4: Zusammenhang anti-östrogener Effekt und Struktur.

Ministerium für Kultur und Wissenschaft des Landes Nordrhein-Westfalen

UNIVERSITÄT DUISBURG ESSEN
Open-Minded