

NTSPortal – ein neues Managementinstrument für das überregionale chemische Gewässermonitoring

Thomas Ternes, Tobias Bader

Teil 1 – NTS zur Gewässerüberwachung

Teil 2 – NTS beim Wasserversorger

DVGW, 22.04.2026, Koblenz



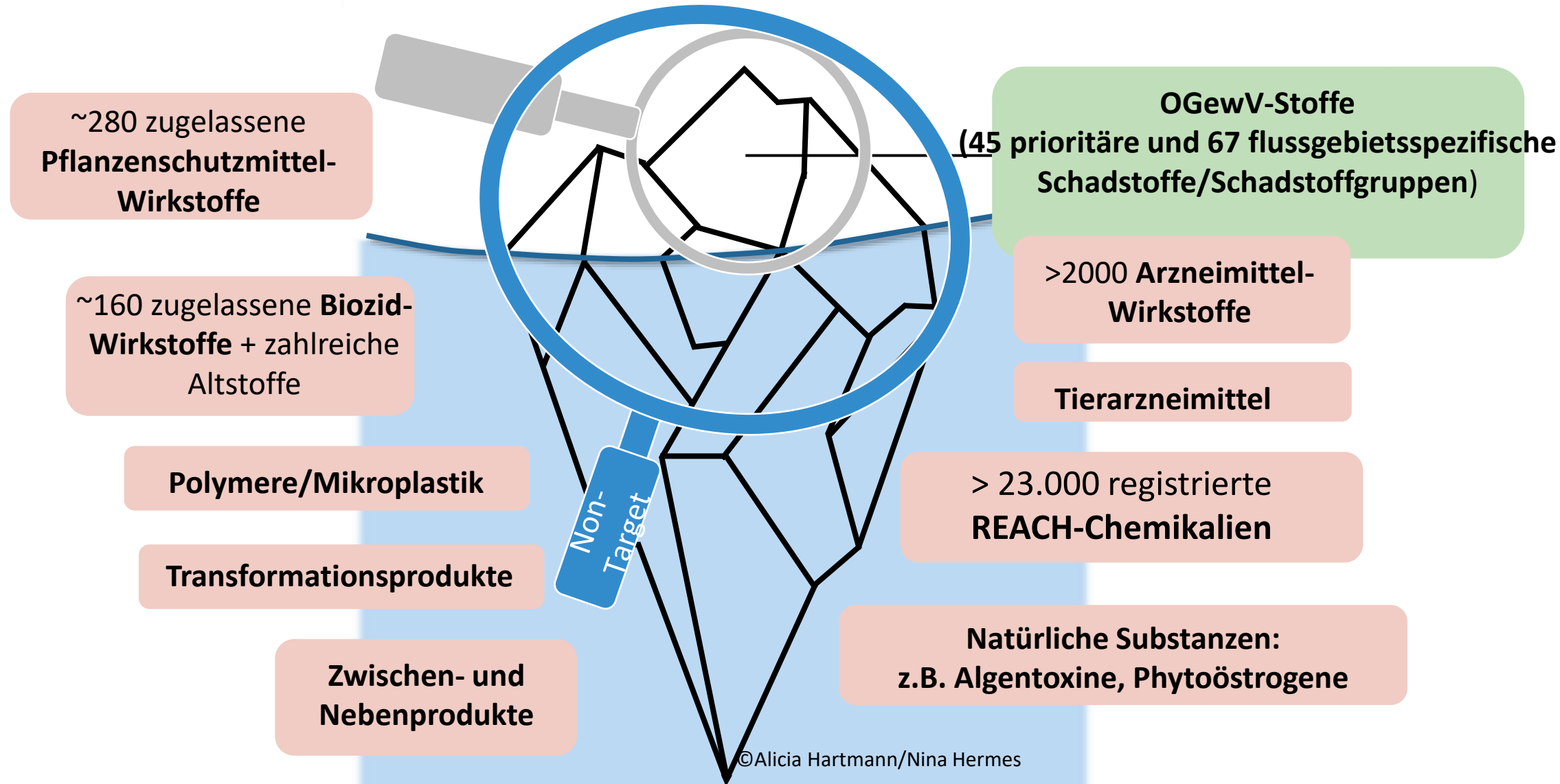
BfG Bundesanstalt für
Gewässerkunde

Eintrag und Verbleib von Schadstoffen in unsere Gewässer



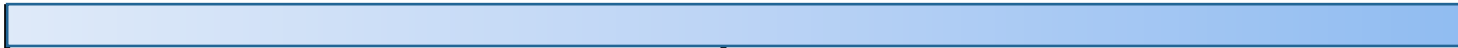
Herausforderung

Null-Schadstoff-Ziel und Spurenstoffstrategie: Eine Mammutaufgabe



Target, suspect und non-target Analyse von organischen Stoffen

Zunehmende Sicherheit bei Identifizierung/Quantifizierung



Non-target

Substanzen
unbekannt

Ziele:
Identifizierung/Trendanalyse

Suspect

Substanzen bekannt
keine Kalibrierung

Ziele:
Identifizierung/Trendanalyse

Target

Substanzen bekannt
Kalibrierung

Ziele:
Quantifizierung/Tendanalyse

Exakte Massen (hohe Auflösung)
Isotopenmuster, MS²-Spectren
Retentionszeit
Relative Intensitäten

Mehrere Tausend von (unbekannten) Substanzen
werden in einem Lauf erfasst

Kalibrierung
Retentionszeit
MS²-Übergänge (min. 2)
Exakte Konzentrationen

Bis zu ca. 150 Substanzen werden
in einem Lauf quantifiziert

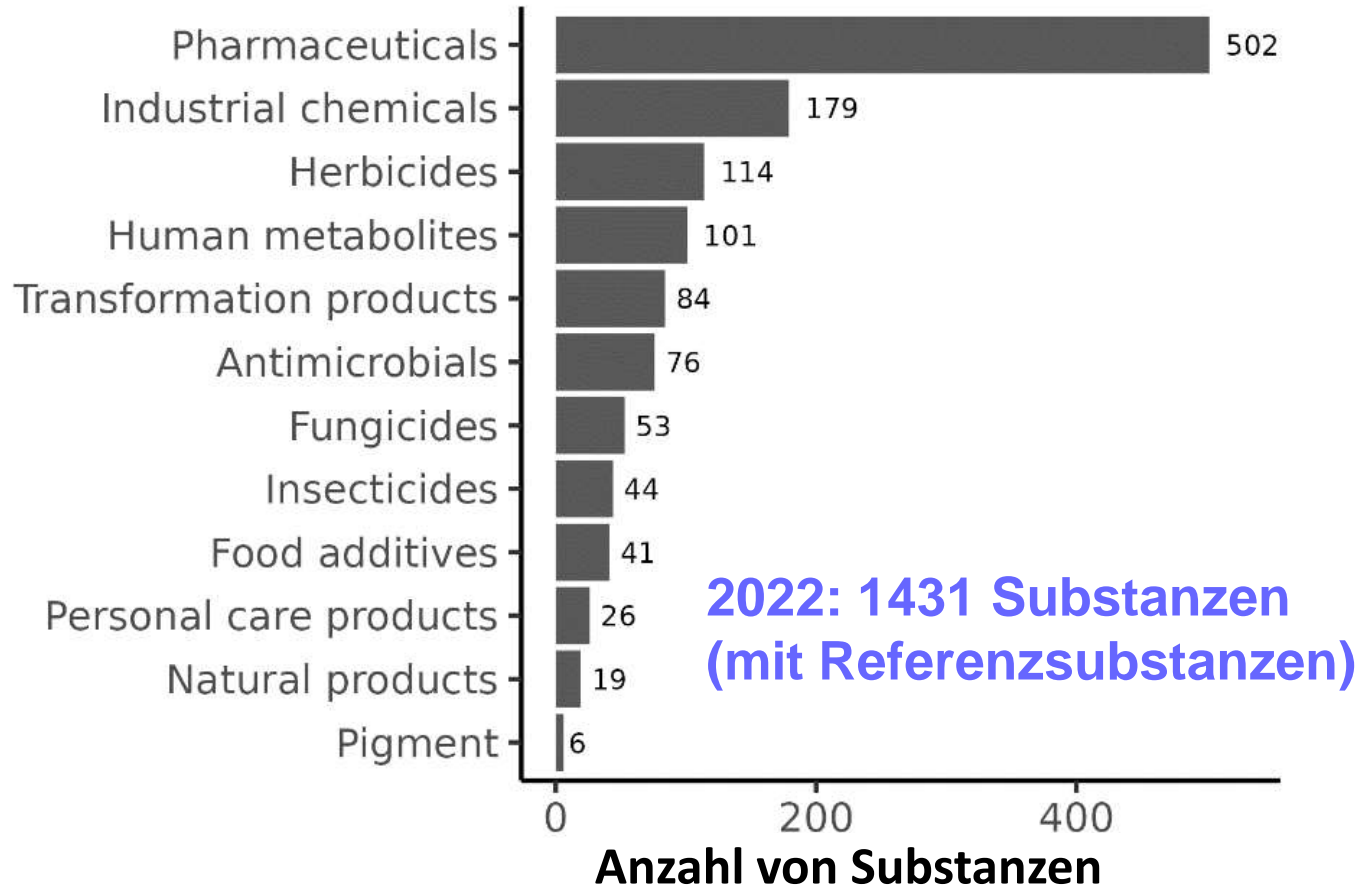
„Validierte“ NTS-Methode der BfG

Prep	Filter 0.45 μm (regenerated cellulose)
LC	Agilent Zorbax Eclipse Plus C18 Narrow Bore (2.1 \times 150 mm; 3.5 μm) Flow: 300 $\mu\text{L}/\text{min}$, injection: 100 μL A: Water + 0.1 % HCOOH, B: CH ₃ CN + 0.1 % HCOOH Run time: 27 min
Instr.	QToF-MS 5600/6600 TripleTOF (Sciex), ESI +/-
MS	Accumulation time = 0.2 s, Cycle time = 0.6 s, Scan range = 100 Da –1200 Da
MS ²	Data dependent (isolation width = 1 Da) Accumulation time = 0.05 s, CE = 40 eV, CES = 15 eV trigger threshold = 100 cps, max. ions = 8



Gemeinsame Spektrenbibliothek von BfG und Umweltbehörden

- BfG Spektren sind verfügbar bei Massbank.eu
Contributor: „BAFG“



MS¹, Retentionszeit, MS²

- $\Delta m/z < 5$ mDa, $\Delta t_R < 2$ min
- MS² similarity score > 300 (purity)

Vergleich:

HR-MS¹, ESI (+), ESI (-), HR-MS² aufgenommen
bei 10-15 Fragmentierungsenergien
 t_R für 3 chromatographische Methoden

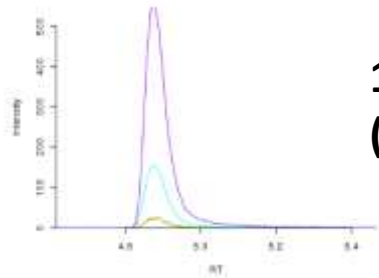
Viele Formate können verarbeitet werden:

Compound Discoverer (MSP),
SQLite, ElasticSearch, EnviMass, ...

NTS: Priorisierung und Identifizierung unbekannter Substanzen

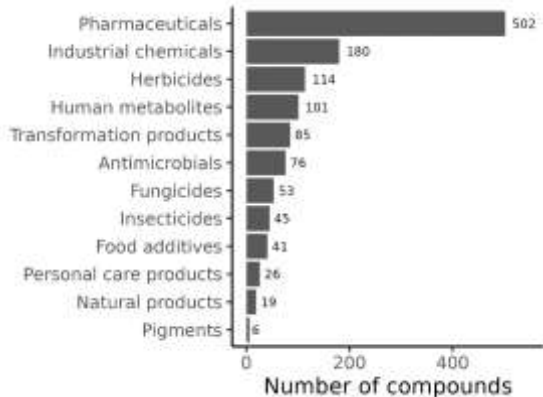
Workflow

	m/z	RT	Intensity	Component
	185.6276	4.9	25	
	222.1727	4.9	548	
	222.6744	4.9	155	
	223.1753	4.9	26	13C of 222.1727



1. Priorisierung
(HR-MS¹, -MS²)

1a. Interne Spektrenbibliothek



2. Summenformel

ChemCalc

GenForm

Generation of molecular formulas by high-resolution MS and MS/MS data

MassBank
High Quality Mass Spectral Database

3. Online
Spektrenbibliothek

MoNA

m/z
CLOUD

7. Verifizierung durch
Referenz Standards

6. Plausibility check

ECHA
EUROPEAN CHEMICALS AGENCY

4. Chemische Datenbank

PubChem

norman

5. MS²-Vergleich

Metrag

UNITED STATES
ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY

FOR
IDENT



Studie zu Charakterisierung und Quantifizierung unbekannter Substanzen in Grundwasser des Hessian Rieds

Hermes N., Wick, A., Ternes, T.A.,
Bundesanstalt für Gewässerkunde

Mayer, J.; Martin, H.; Leßmann, B.
Hessisches Landesamt für Naturschutz, Umwelt und Geologie



NTS zur Identifizierung von Schadstoffquellen im Grundwasser

Hintergrund

- Hoch belastetes Gebiet
- Wasserwerke verwenden Grundwasserbrunnen
- Mehrere kommunale und industrielle KA befinden sich in dem Gebiet

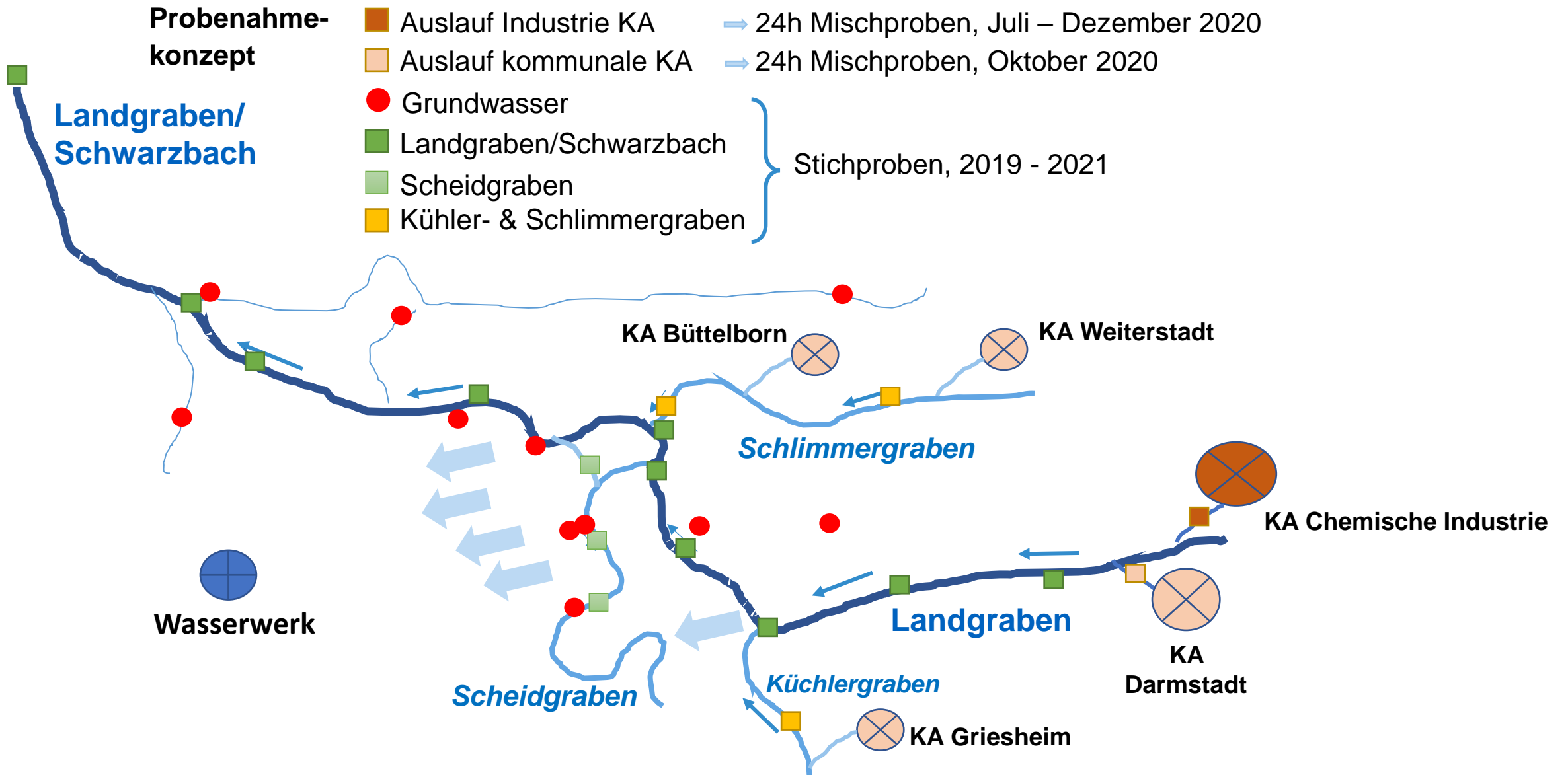
Ziele

- Identifizierung von Quellen, die zur Grundwasserbelastung führen
- Hauptfokus: Substanzen von Industriekläranlagen
- Charakterisierung und Identifizierung von unbekanntem Substanzen, die im Grundwasser nachweisbar sind.



Karte: Geoportal Hessen

Monitoringkampagne im Hessischen Ried



Studie zu Charakterisierung und Quantifizierung unbekannter Substanzen in Grundwasser des Hessian Rieds

Ergebnisse finden sich in:

Hermes et al. (2025), Studie zur chemischen Charakterisierung und Quantifizierung bisher nicht bekannter Stoffe in Wässern des Landgrabensystems (Hessisches Ried). Bundesanstalt für Gewässerkunde. BfG-2209. Doi: 10.5675/BfG-2209

Zusammenfassung Teil 1: Einsatz von NTSPortal als Managementinstrument

1) Schneller Zugang zu den großen Datenmengen aus NTS

- Überwachung eines breiten Stoffspektrums mit Hilfe von Priorisierungstools

2) Retrospektive Datenanalyse bisher unbekannter Substanzen durch das NTSPortal

- Hinweise auf Vorkommen, Eintragsquellen und Langzeittrends
- Relevanzabschätzung

Verwertung

- Stoffe auswählen für (inter)nationale Beobachtungslisten (z.B. EU Watchlist), Monitoringprogramme der Flussgebietsgemeinschaften (z.B. Rheinmessprogramm Chemie)
- Messstellen auswählen, z.B. für Überblicksmonitoring der Länder
- Relevanzbetrachtung (bundesweit), z.B. beim Spurenstoffzentrum des Bundes

Publikationsliste

Methodik

Nürenberg et al. (2015), Development and validation of a generic nontarget method based on liquid chromatography – high resolution mass spectrometry analysis for the evaluation of different wastewater treatment options. J Chroma A, 1426, 77 – 90

Dietrich et al. (2020), Open-source feature detection for non-target LC–MS analytics, Rapid Commun. Mass Spectrom. 36(2):e9206, DOI: 10.1002/rcm.9206

Jewell et al. (2021), Methodik zur Anwendung von Non-Target Screening (NTS) mittels LC-MS/MS in der Gewässerüberwachung, Umweltbundesamt. <https://doi.org/10.60810/openumwelt-6137>

Portal

Jewell et al. (2021), Ein Datenbankmodell für aggregierte Non-Target-Screening-Ergebnisse, Vom Wasser, DOI: 10.1002/vomw.202100020

Jewell et al. (2025), Online-Portal „Non-Target Screening für die Umweltüberwachung der Zukunft“, Umweltbundesamt, Texte 21/2025

Jewell et al. (2026), Development of a retrospective processing and data aggregation platform for non-target screening of surface waters, Environ Sci Europe, submitted (24.03.2025)

Publikationsliste

Ausgewählte Anwendungen

Schlüsener et al. (2015), Quaternary Triphenylphosphonium Compounds: A New Class of Environmental Pollutants, *Enviro Sci Technol*, 49, 24, 14282 – 14297.

Köppe et al. (2020), Application of a non-target workflow for the identification of specific contaminants using the example of the Nidda river basin, *Water Res* 178:115703, DOI: 10.1016/j.watres.2020.115703

Köppe et al. (2022), Identification and trend analysis of organic cationic contaminants via non-target screening in suspended particulate matter of the German rivers Rhine and Saar, *Water Res* 229:119304, DOI: 10.1016/j.watres.2022.119304

Köppe et al. (2025), A category approach to characterize river sites based on non-target screening and target analysis, *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 417(27), DOI: 10.1007/s00216-025-06124-3

Jewell et al. (2025), Identification of acrylonitrile sulfonates in the river Rhine using non-target screening and a spatially distributed sampling strategy, *Environmental Sciences Europe* 37(1), DOI: 10.1186/s12302-025-01277-5

Hermes et al. (2025), Studie zur chemischen Charakterisierung und Quantifizierung bisher nicht bekannter Stoffe in Wässern des Landgrabensystems (Hessisches Ried). Bundesanstalt für Gewässerkunde. BfG-2209.Doi: 10.5675/BfG-2209

Teil 2 – NTS beim Wasserversorger

Wasser Lunch & Learn

22. April 2026

Tobias Bader

Landeswasserversorgung Stuttgart

📍 Wasserwerk Langenau

7 km
~1400 m³/s

📍 Pumpwerk

📍 Donau, Leipheim



Trinkwasseraufbereitung



 Donau

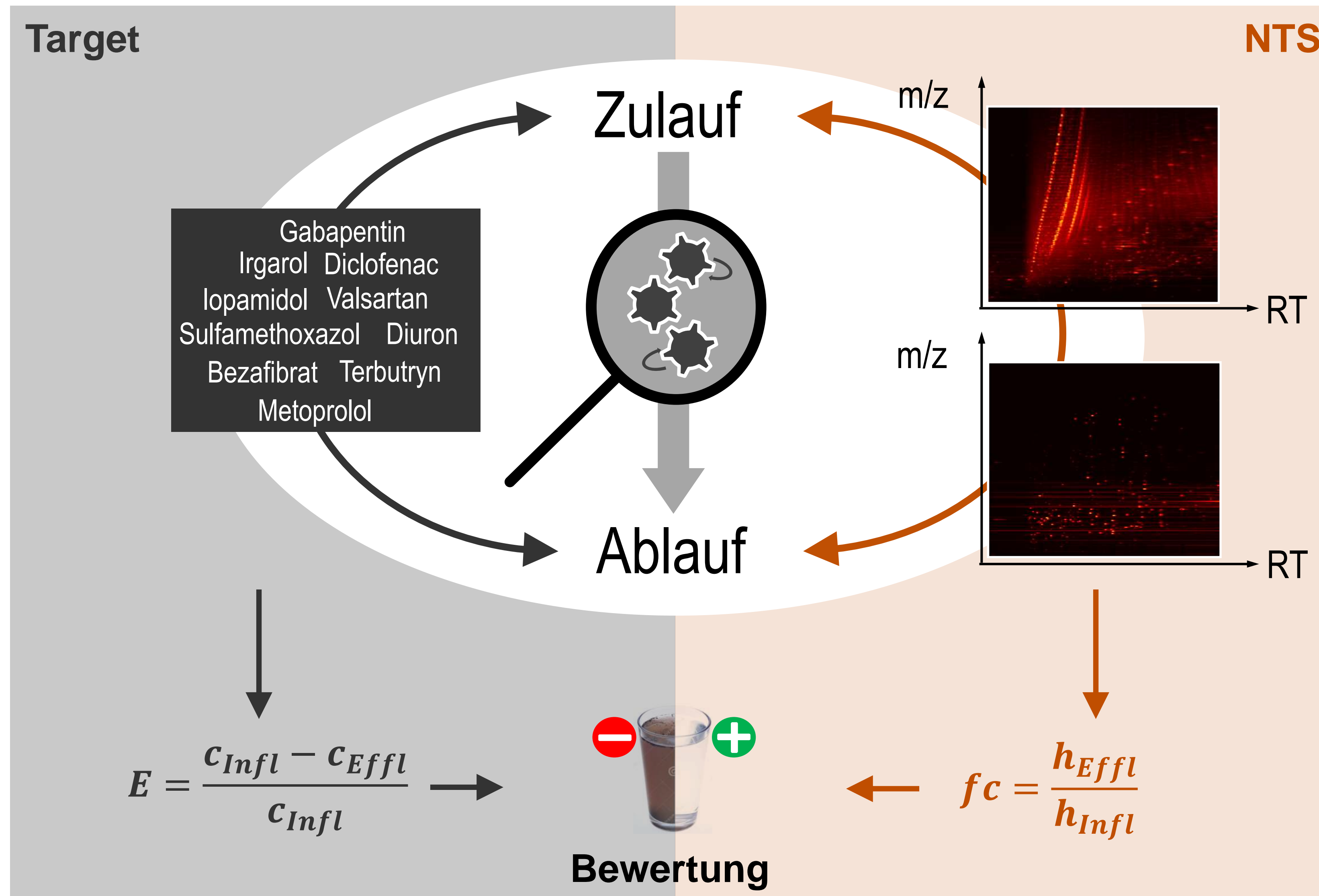


> 3 Mio.
Menschen

Prozessbewertung mit NTS?

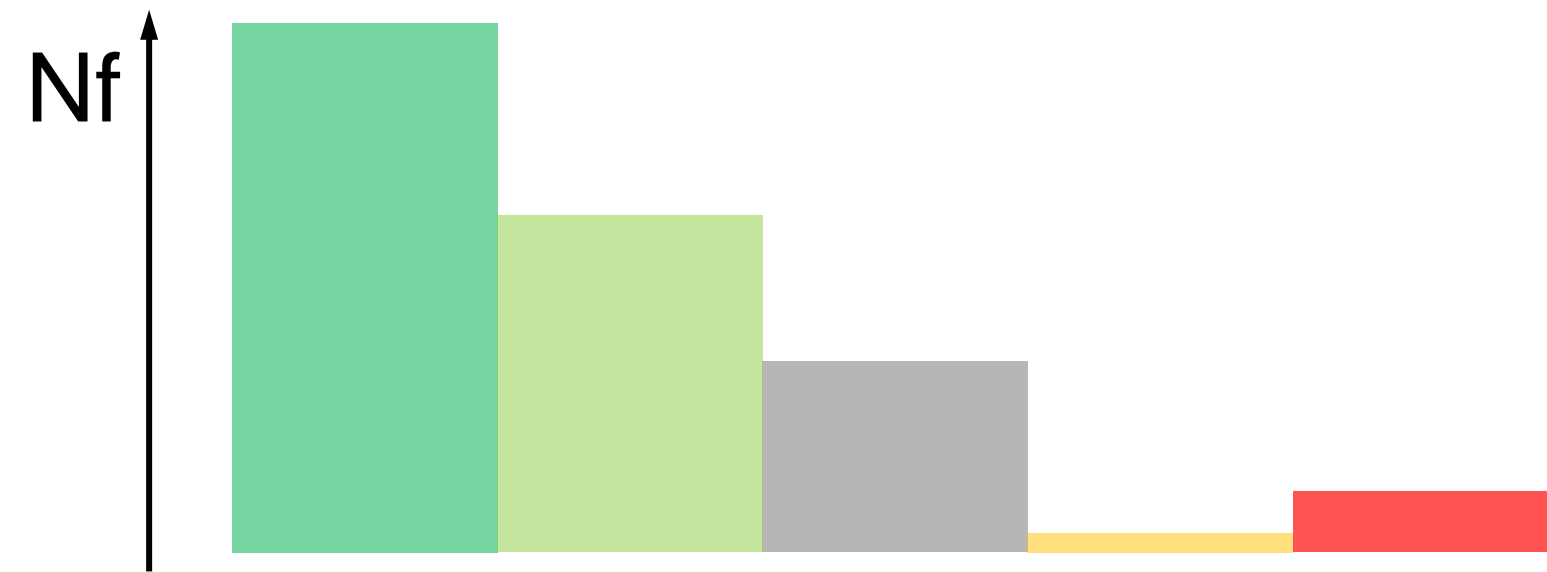


Prozessbewertung mit NTS

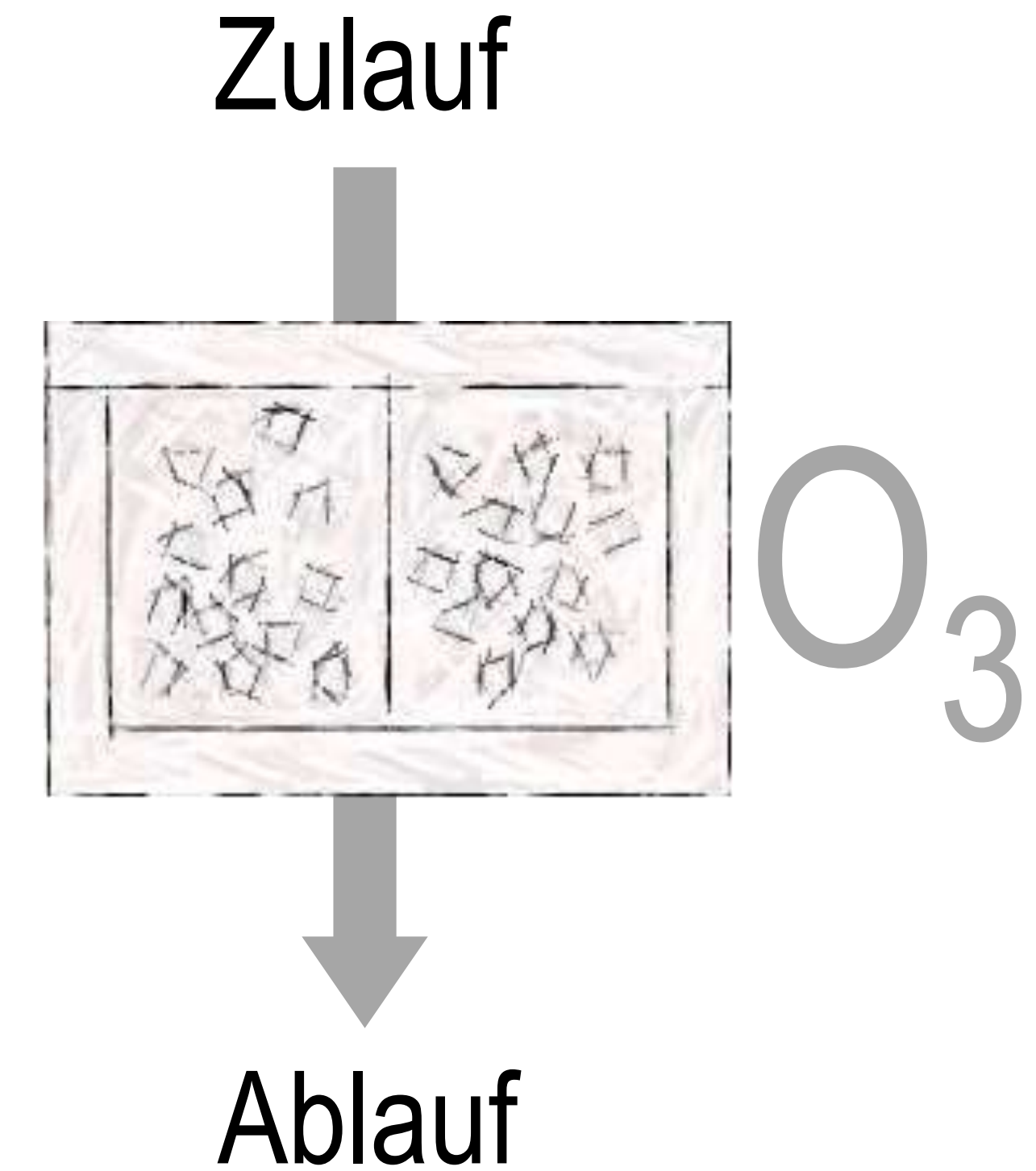
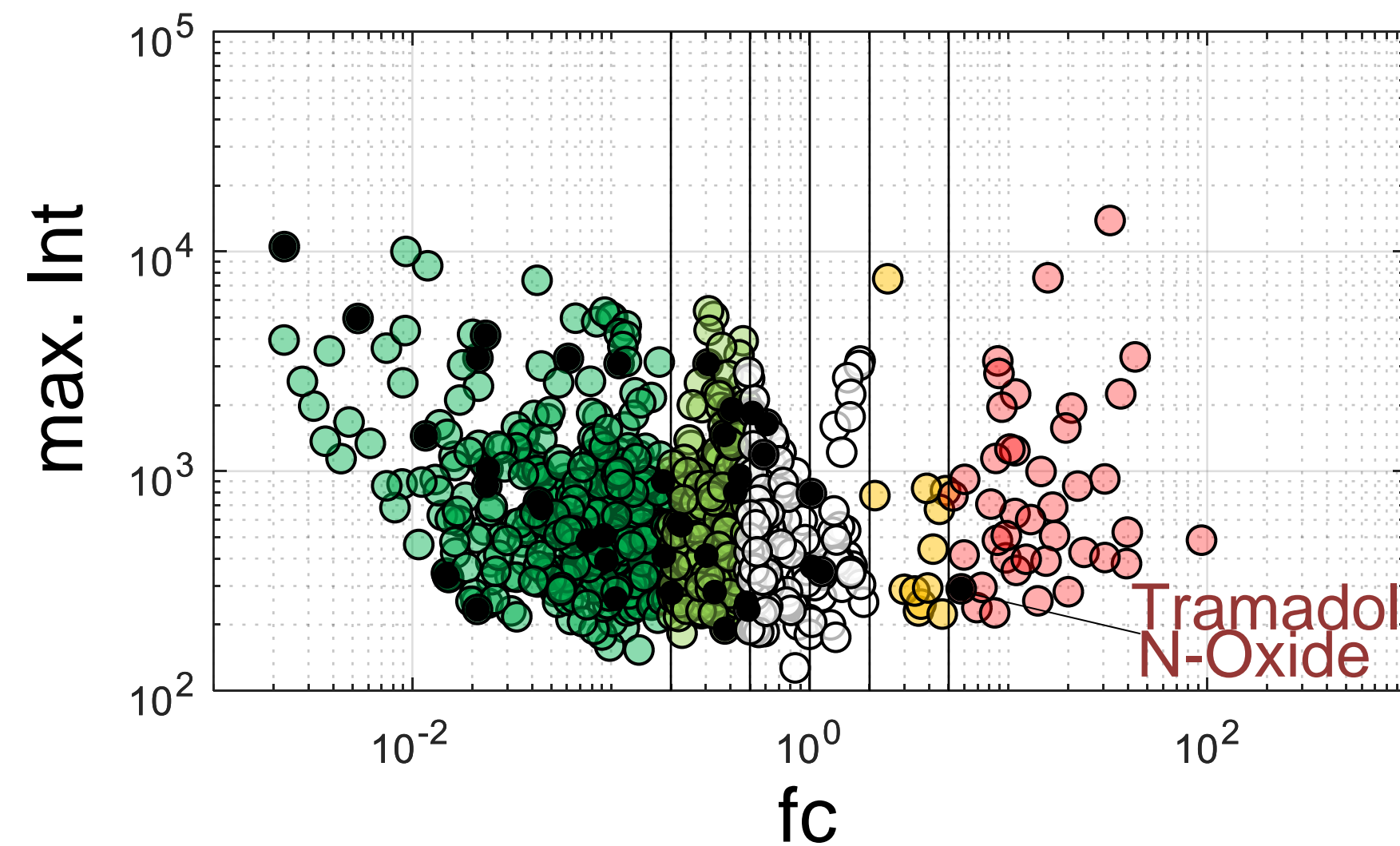


Bader, T et al. (2017),
Analytical Chemistry,
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.analchem.7b03037>

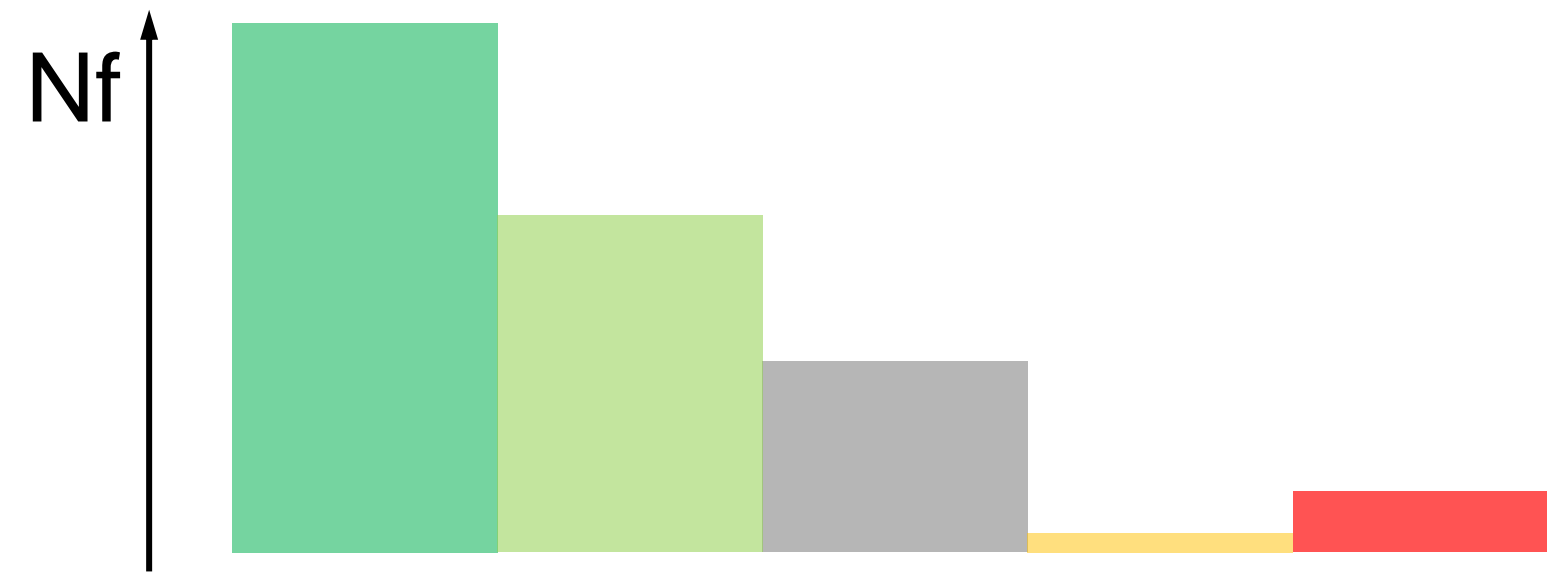
Prozessbewertung mit NTS



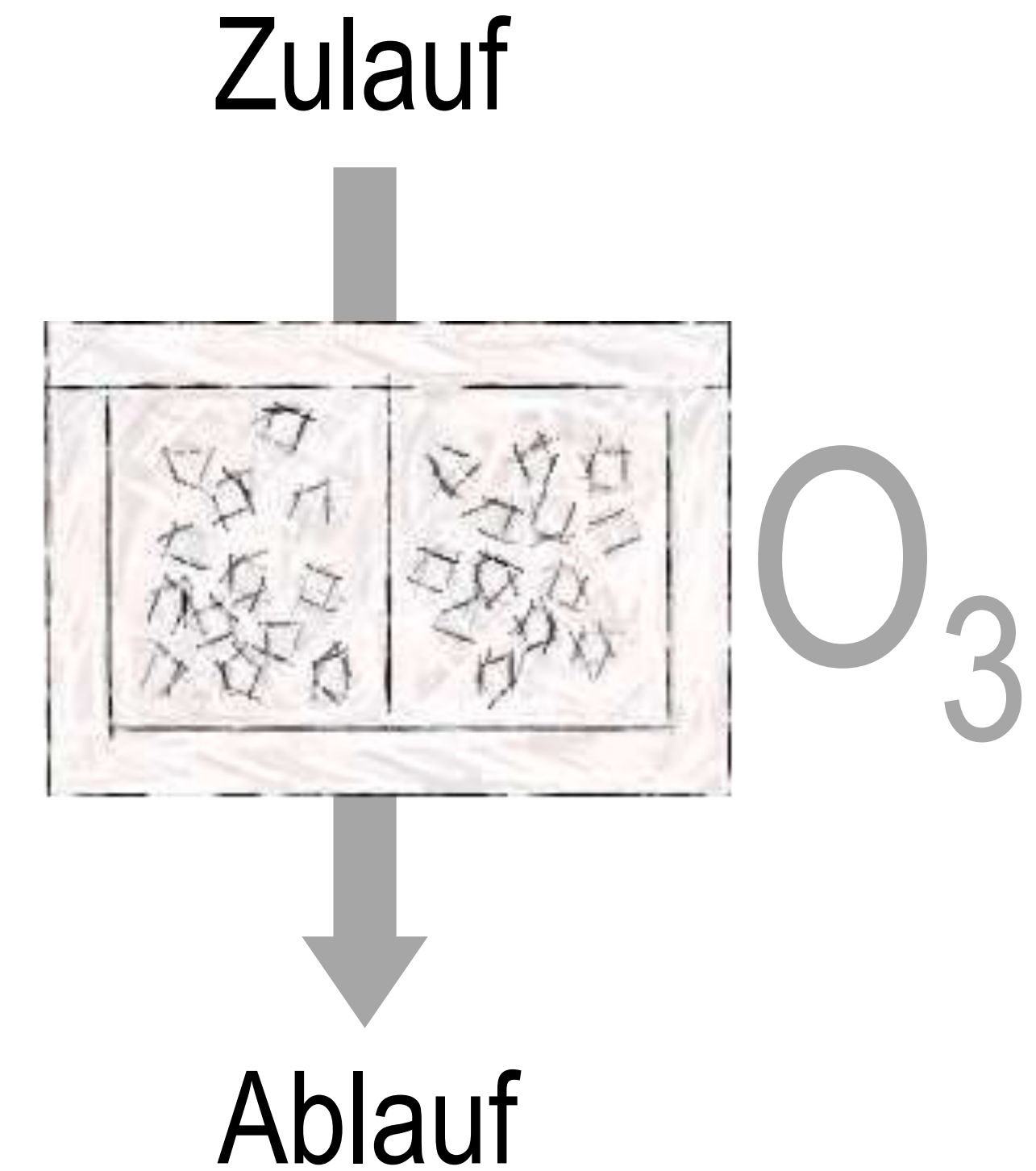
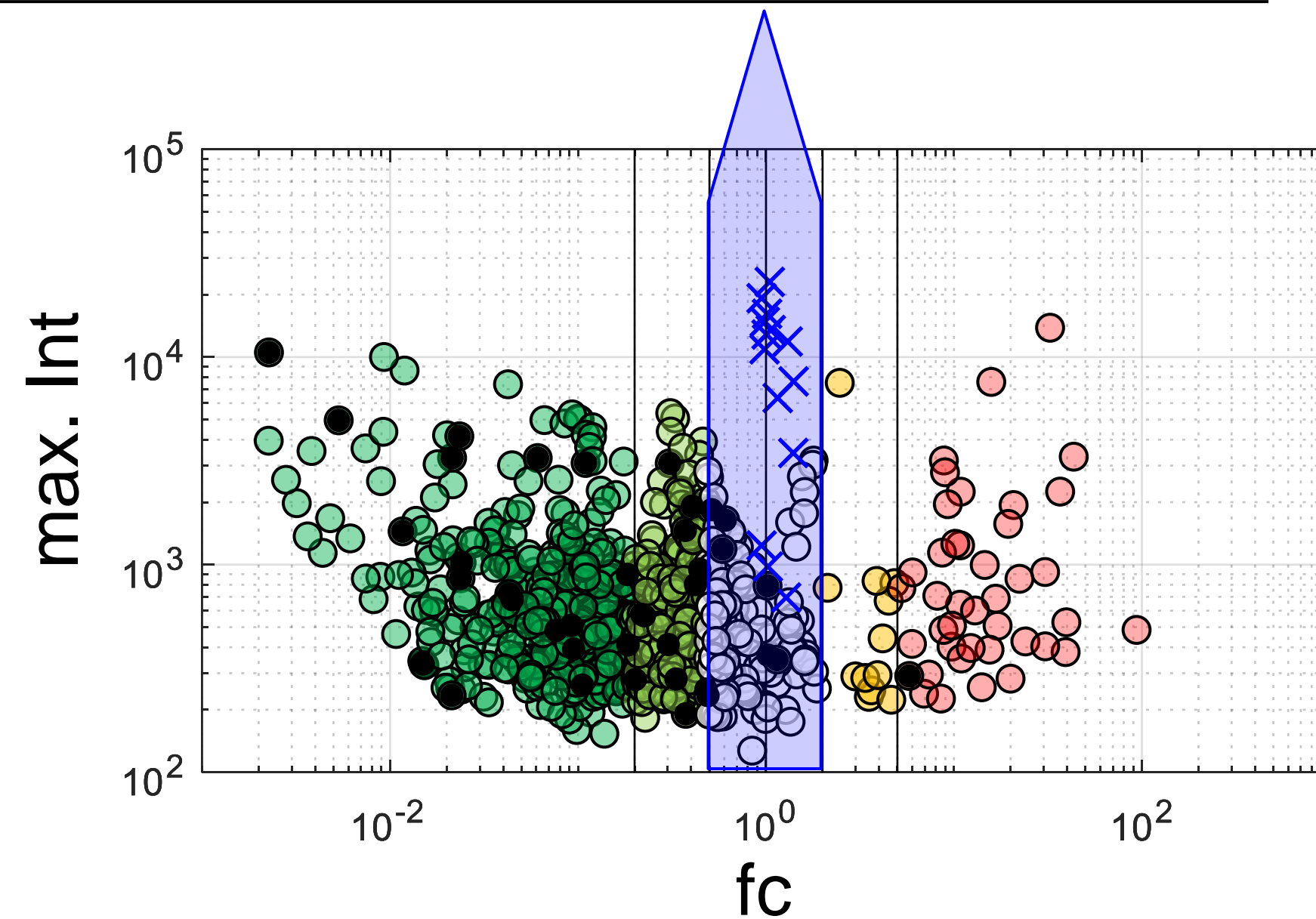
Features	372	237	133	12	41
Targets(●)	19	12	7	0	1
IS (x)	0	0	14	0	0



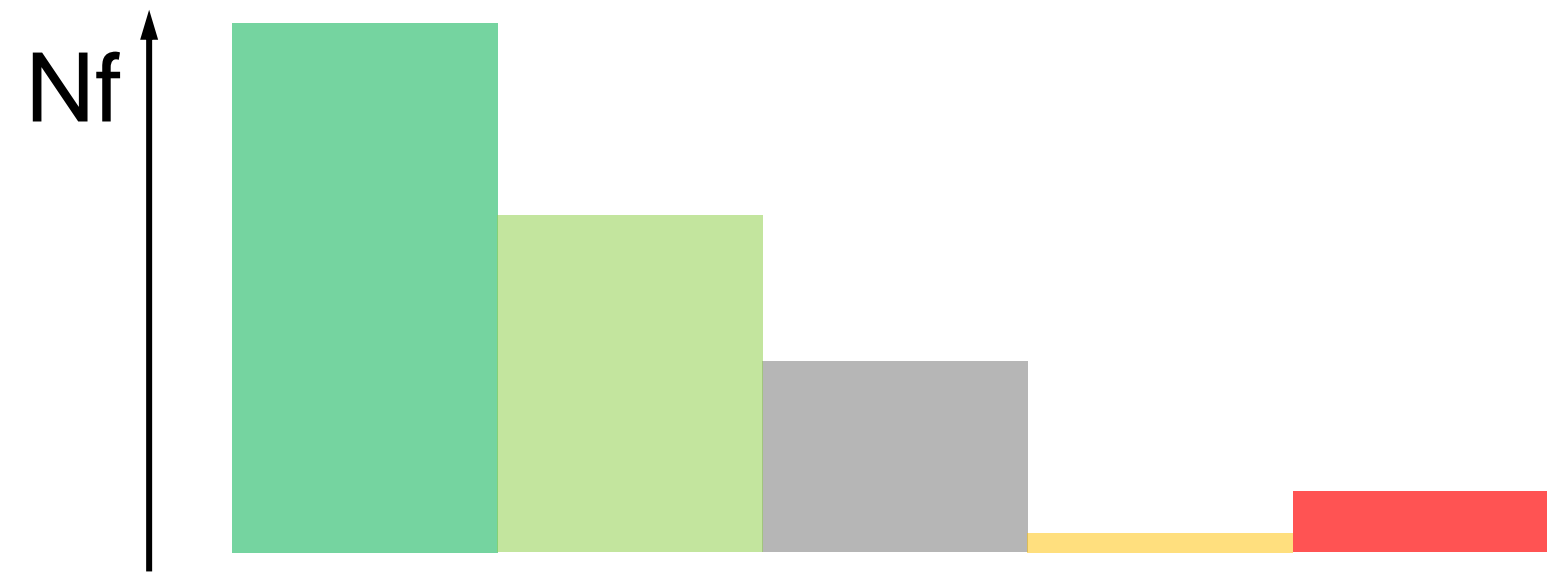
Prozessbewertung mit NTS



Features	372	237	133	12	41
Targets(●)	19	12	7	0	1
IS (x)	0	0	14	0	0

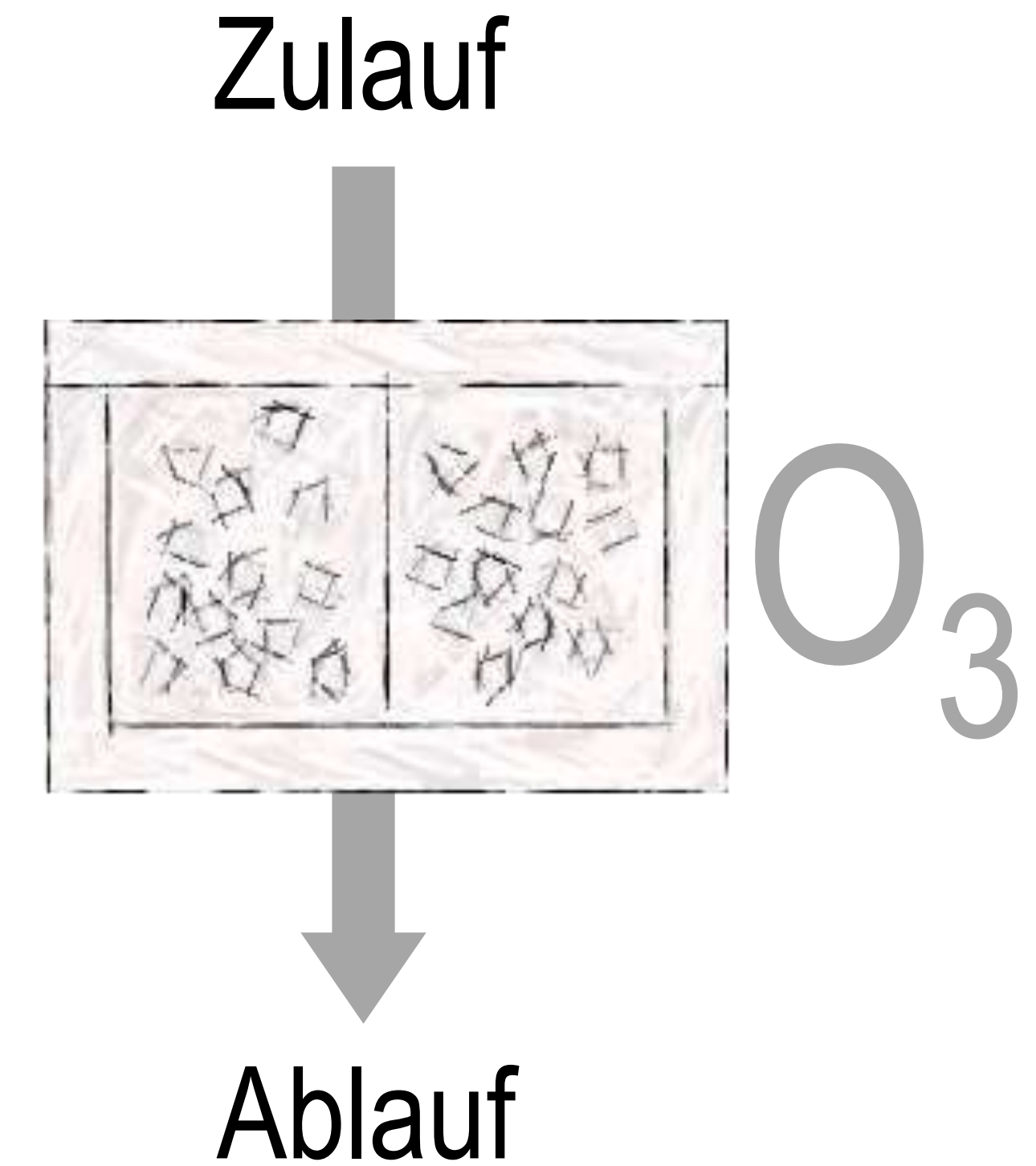
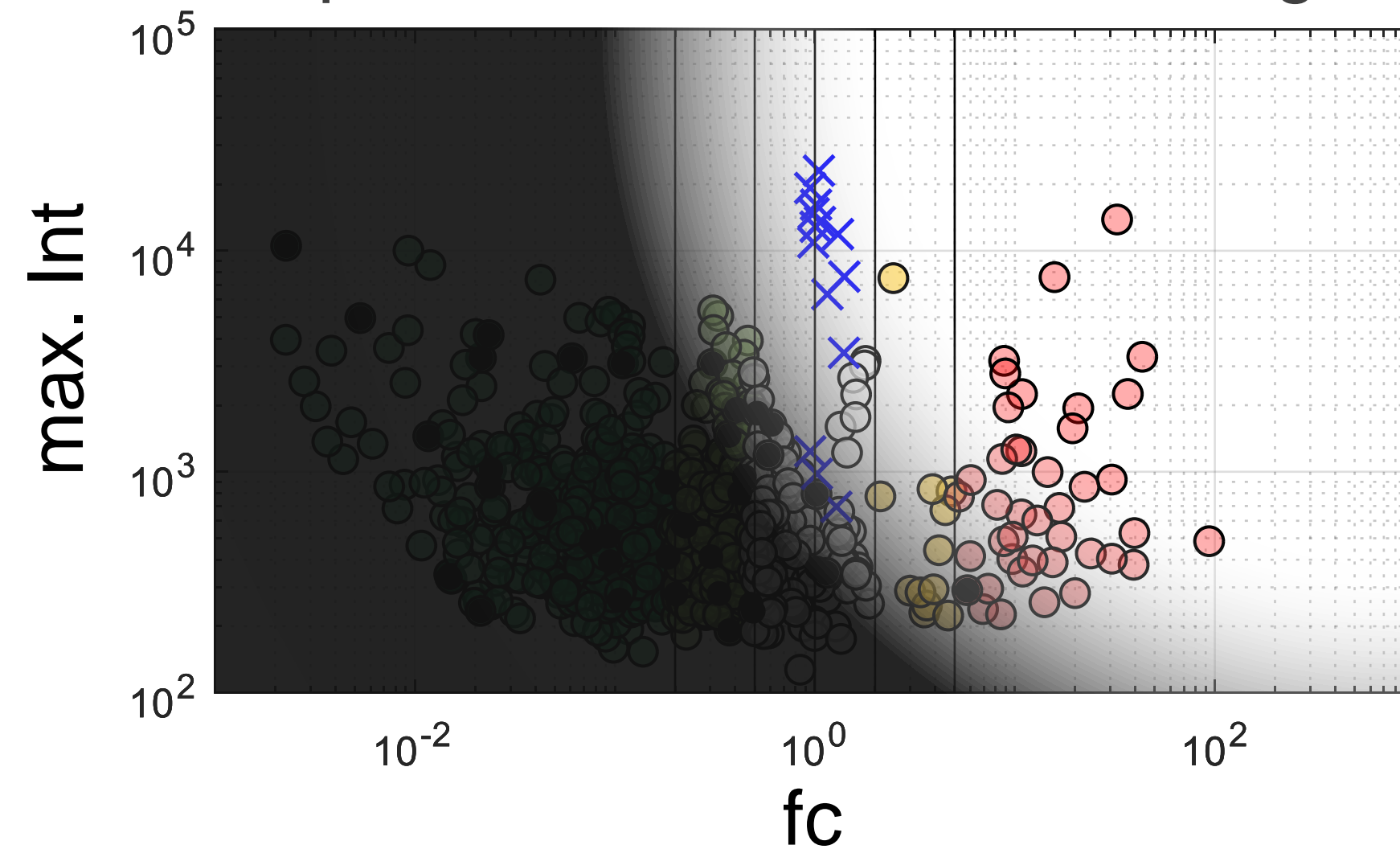


Prozessbewertung mit NTS

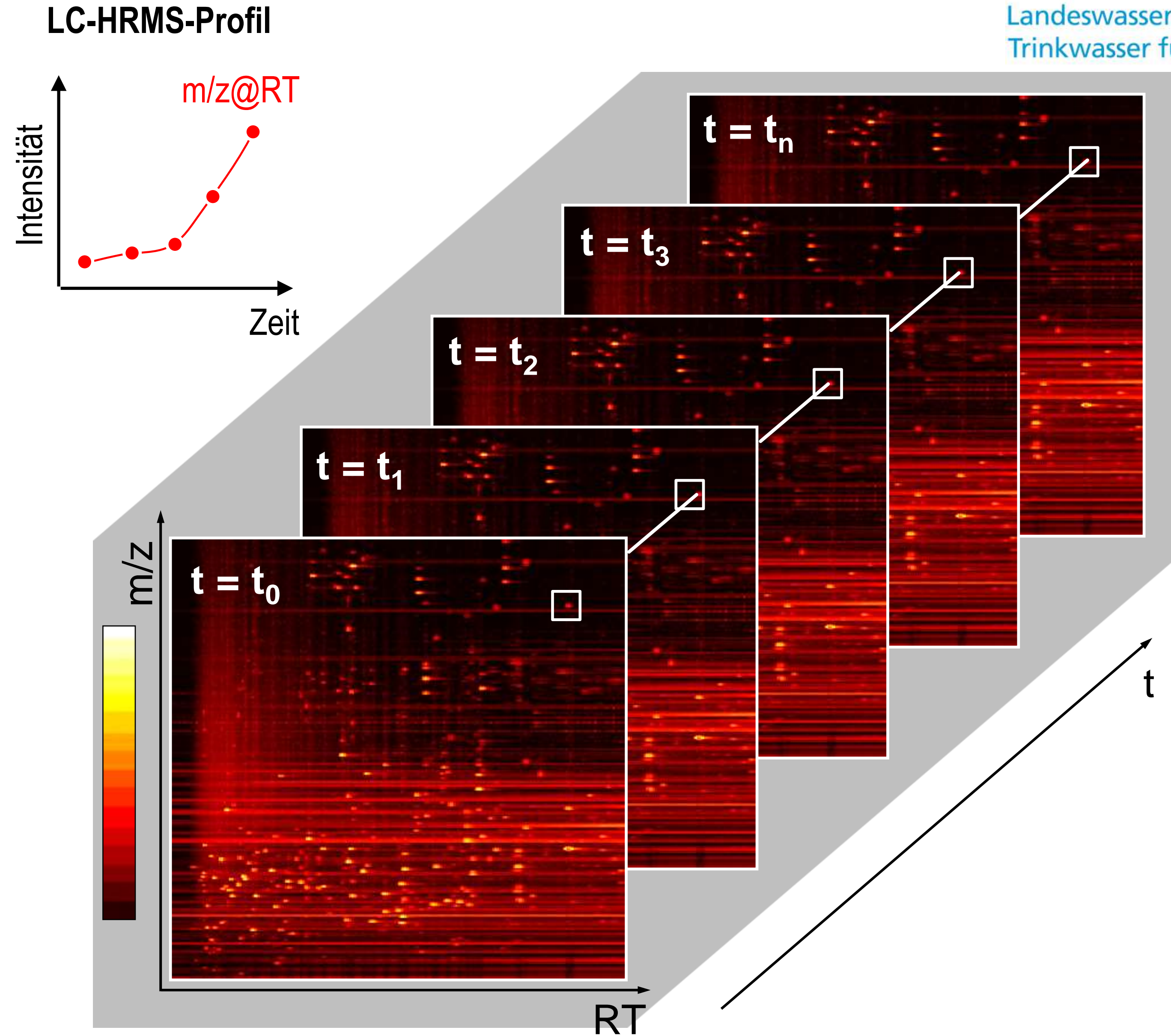


Features	372	237	133	12	41
Targets(●)	19	12	7	0	1
IS (x)	0	0	14	0	0

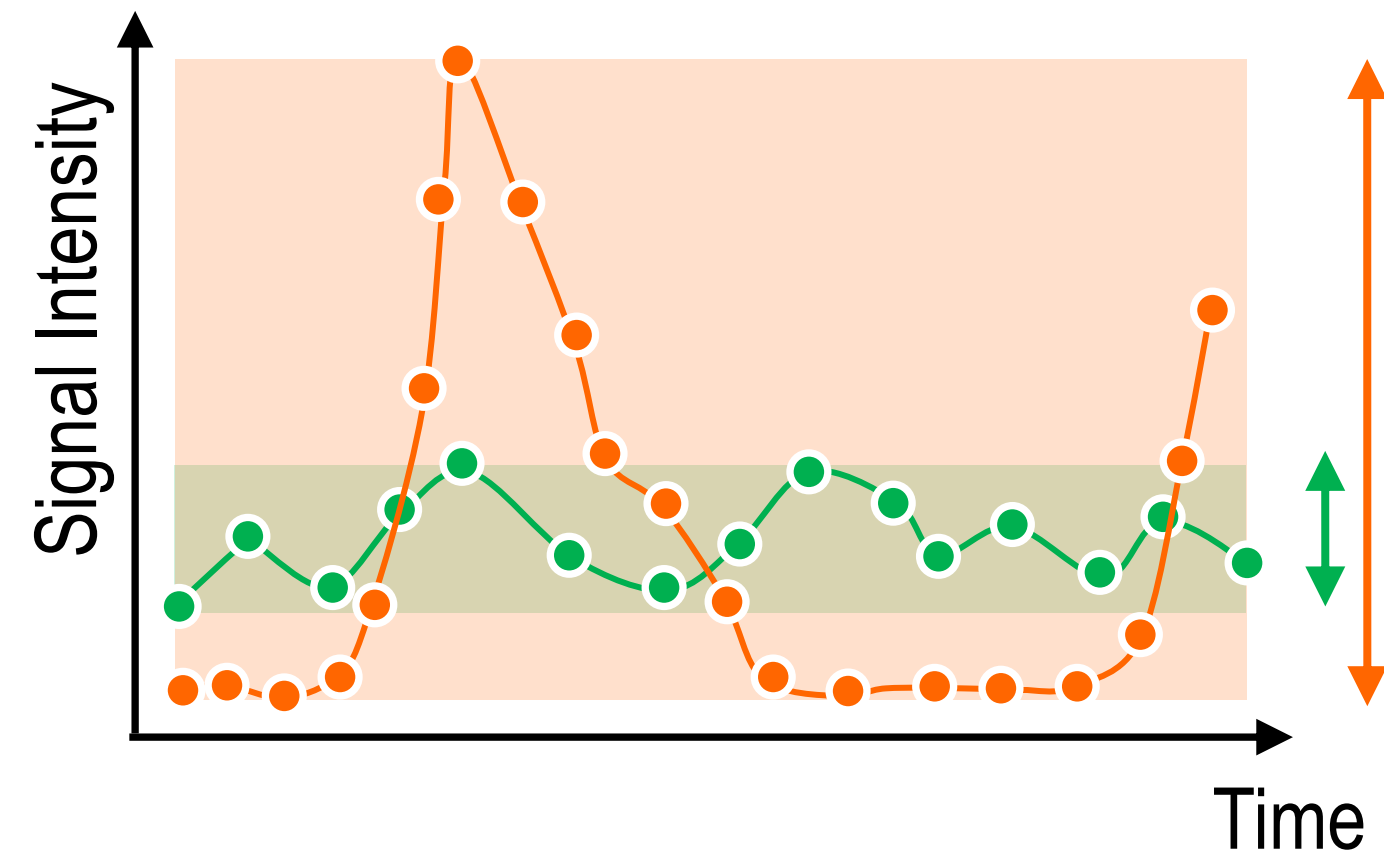
prozessbasierte Priorisierung



Priorisierung

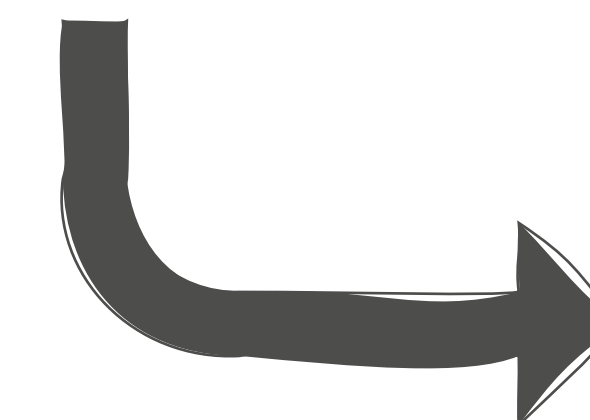
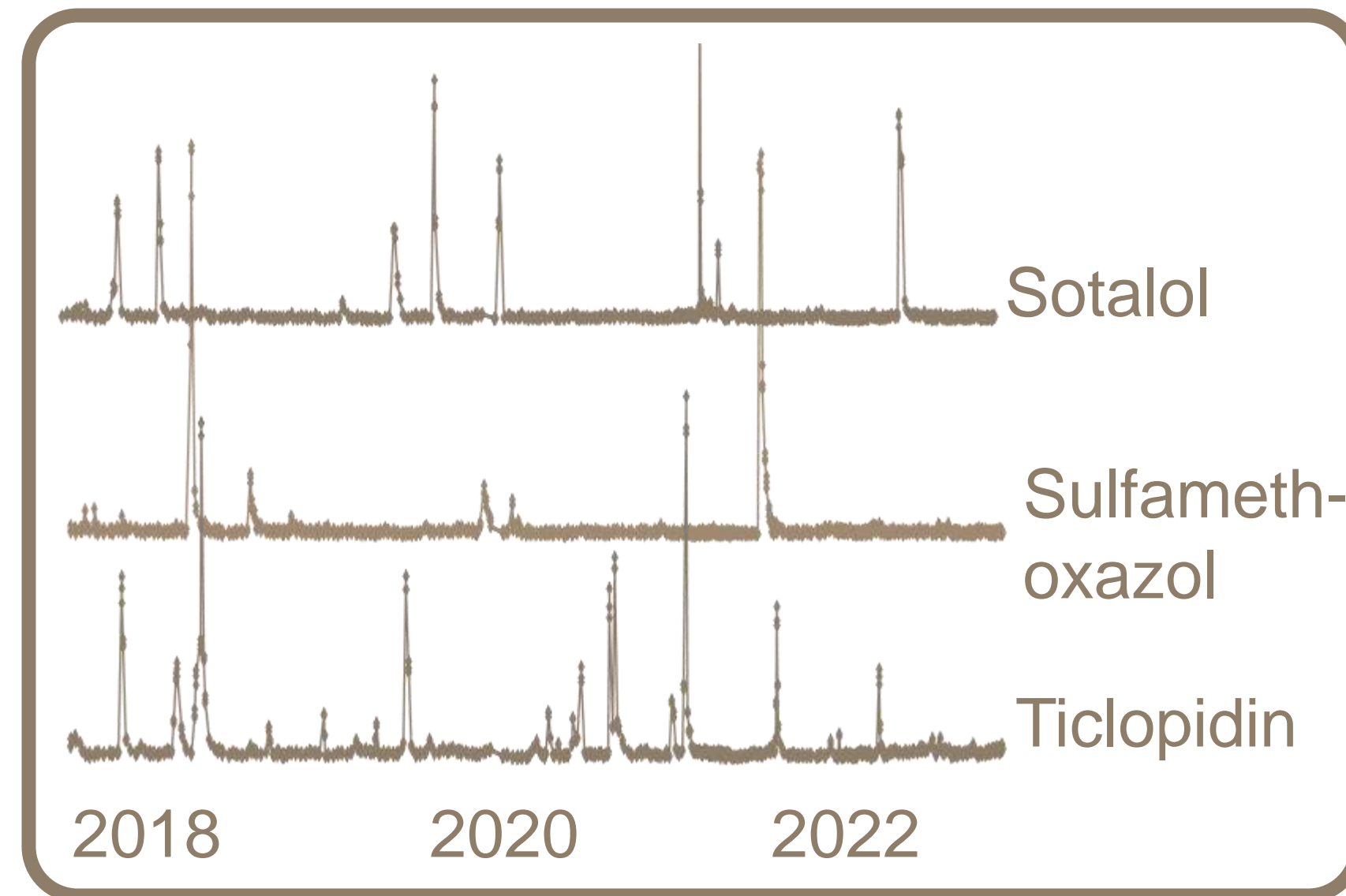


Priorisierung von Industrieemissionen



Anliker et al., *Environ. Sci. Technol.*
2020, 54, 7, 4110–412
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.est.9b07085>

AZM in Donauwasser

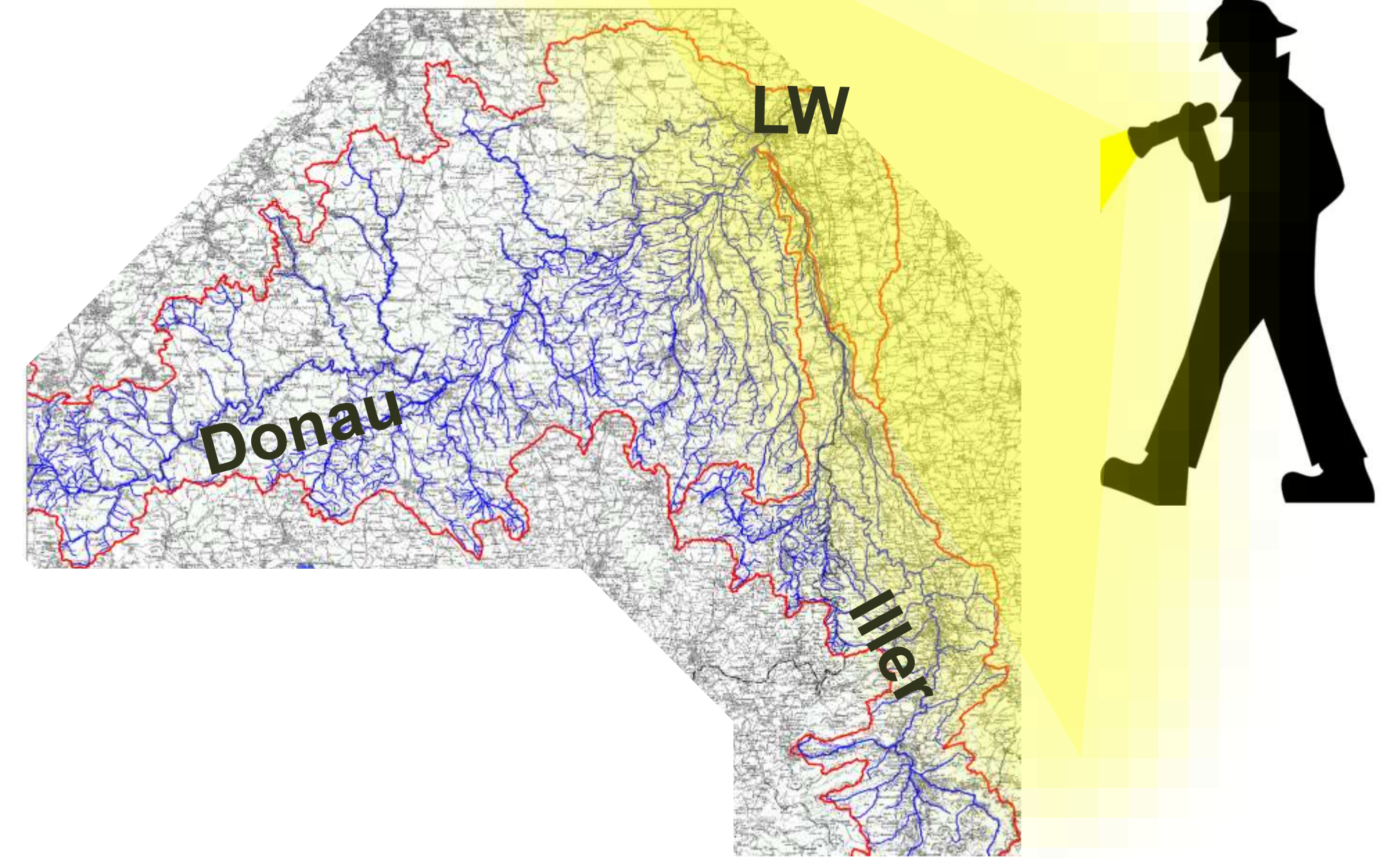


Quellen-
suche

Priorisierung von Industrieemissionen

- Pharmafirma im Einzugsgebiet
- Umwelterklärung:

»[...] bevor das Abwasser der kommunalen Kläranlage Gerhausen zugeleitet wird.«



TOP 5	c in $\mu\text{g/L}$
Sulfamethoxazol	190
Ibuprofen	160
Metoprolol	80
Quetiapin-COOH	60
Ibuprofen-2-OH	35



Pharmaceutical pollution of the world's rivers

Wilkinson, John; Boxall, Alistair; Kolpin, Dana; Leung, Kenneth; Lai, Racliffe; Galbán-Malagón, Cristóbal; Adell, Aiko; +120 Authors

» The most polluted sampling site was located in the Rio Seke (La Paz, Bolivia) and had a cumulative [61 compounds] API concentration of 297 $\mu\text{g/L}$ «

Maßnahmen an der Quelle

Sofortmaßnahme „1st rinse“

→ > 75% Reduktion der AZM-Fracht!

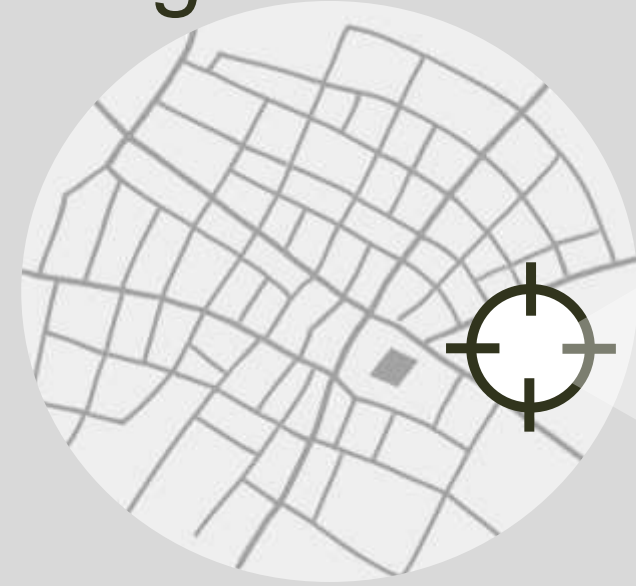
Reinigungsanlage

- Labortests durchgeführt
- Pilotanlagen vor Ort
- Aktuell: Bau der Anlage
- Inbetriebnahme Q3/2026 → Neue Beprobungskampagne

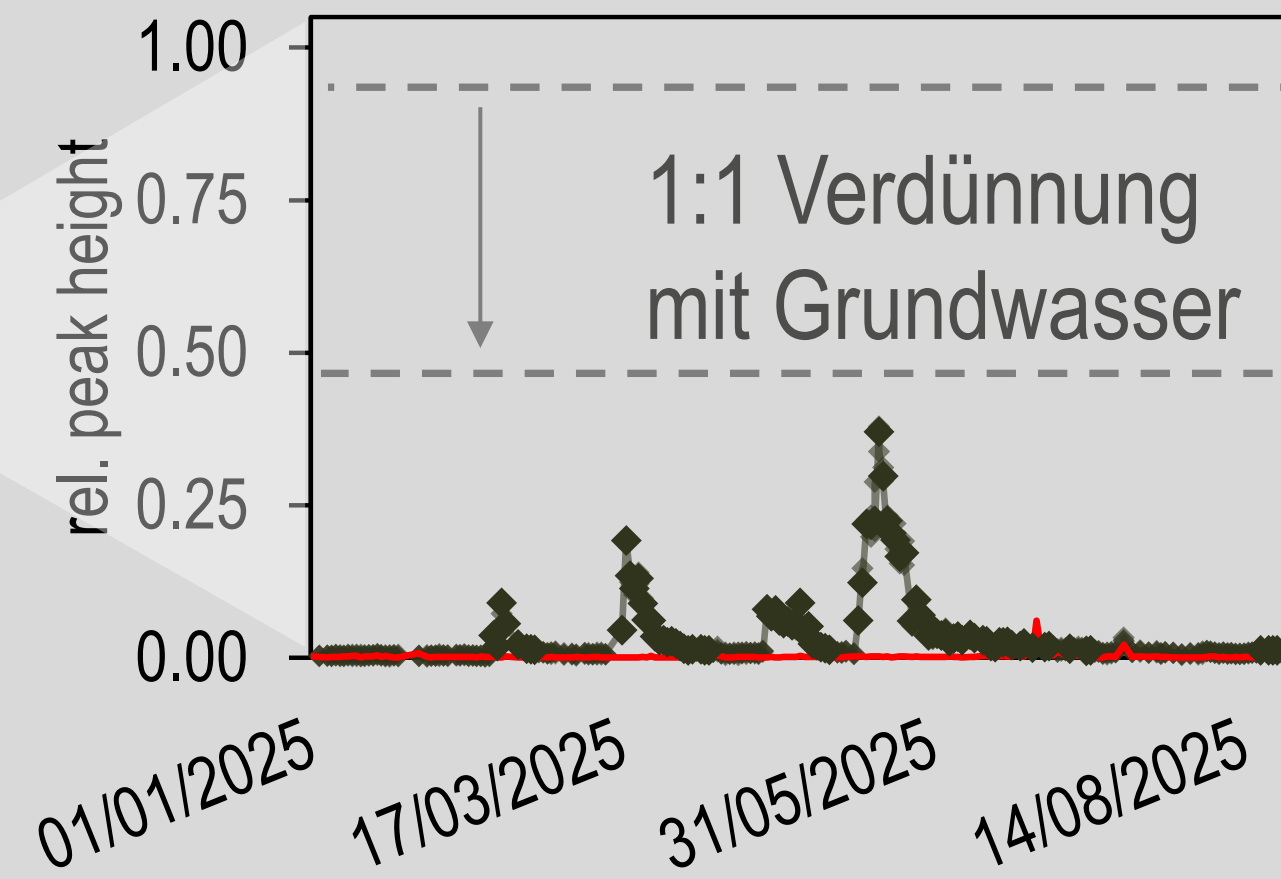


 Donau, Leipheim

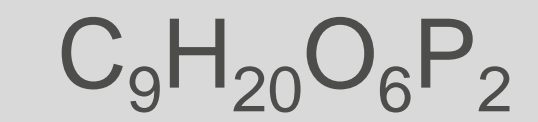
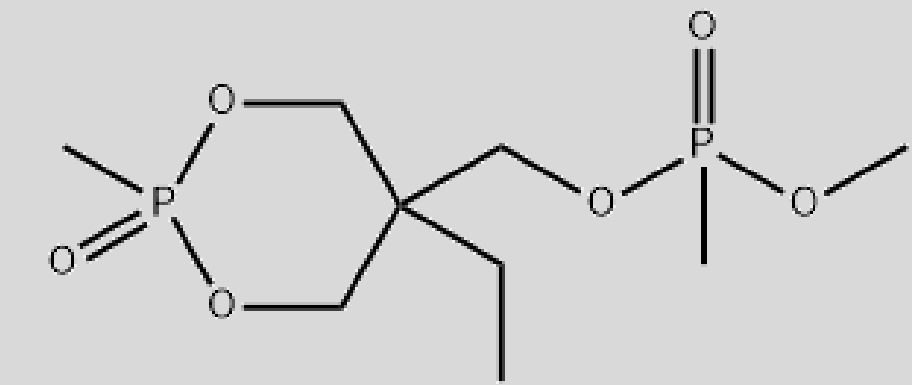
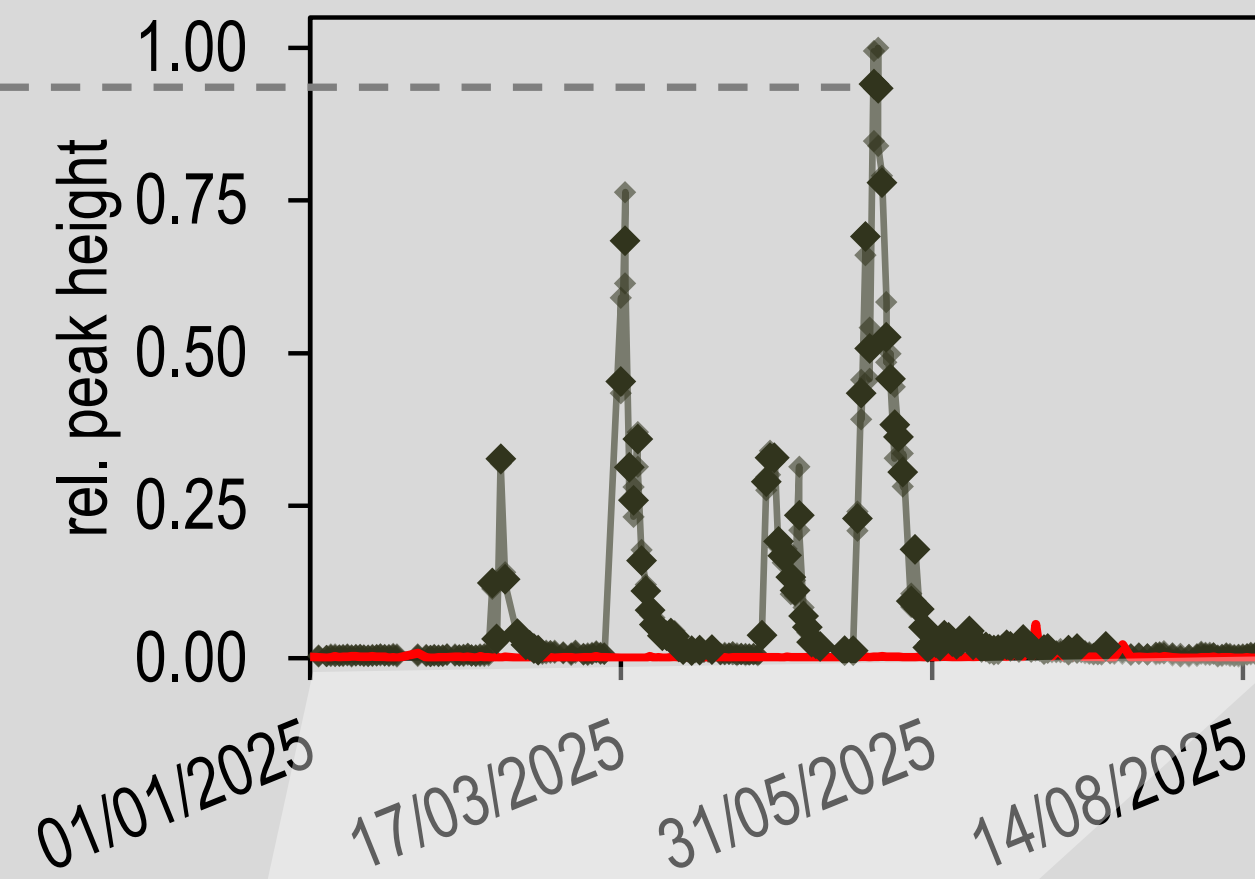
Langenau



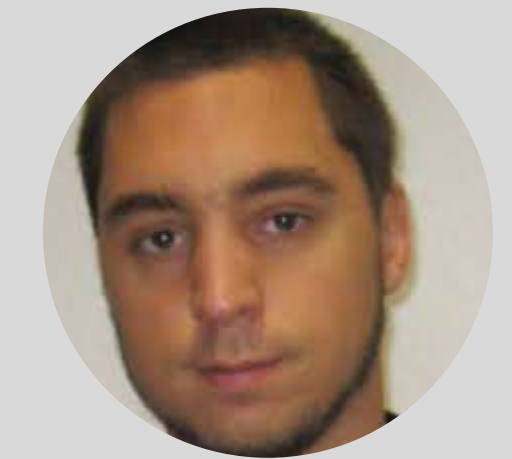
Trinkwasser, Langenau



Donau, Leipheim



(5-Ethyl-2-methyl-2-oxido-1,3,2-dioxaphosphinan-5-yl)methyl-methylmethylphosphonat

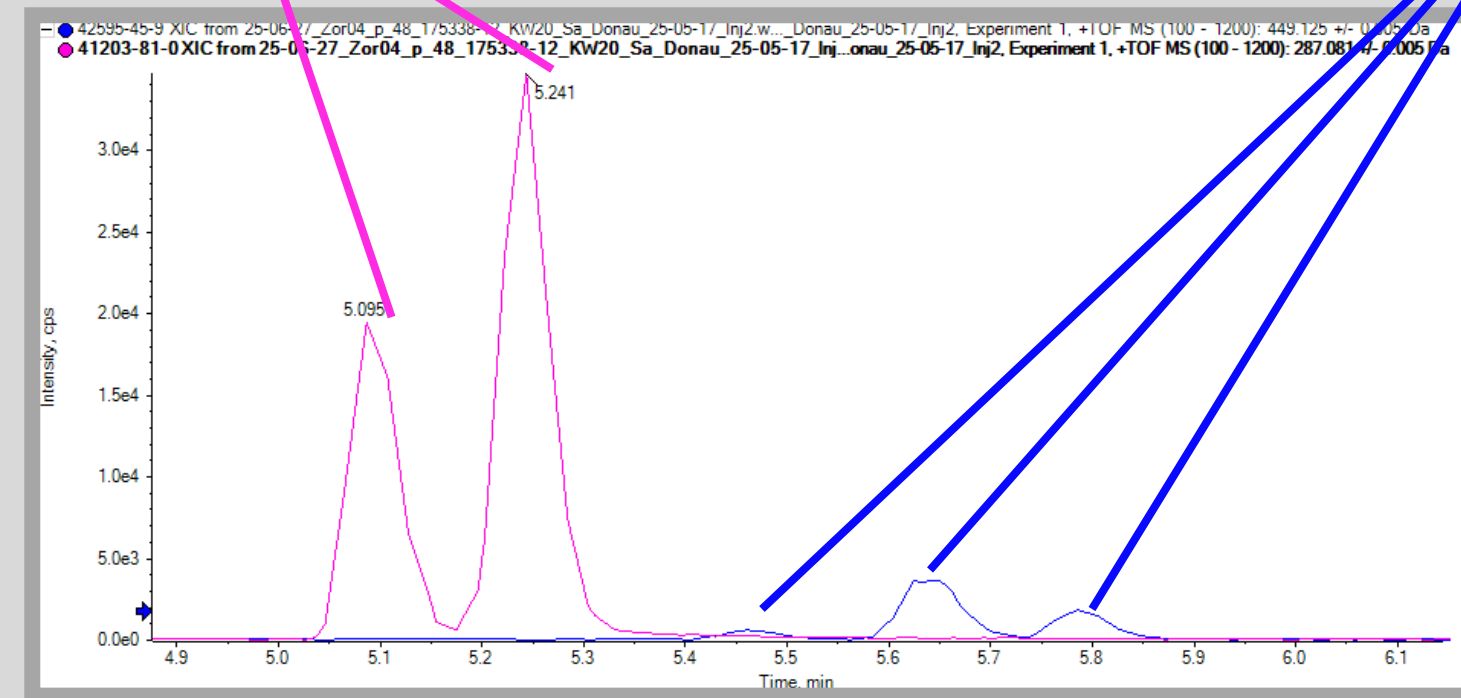
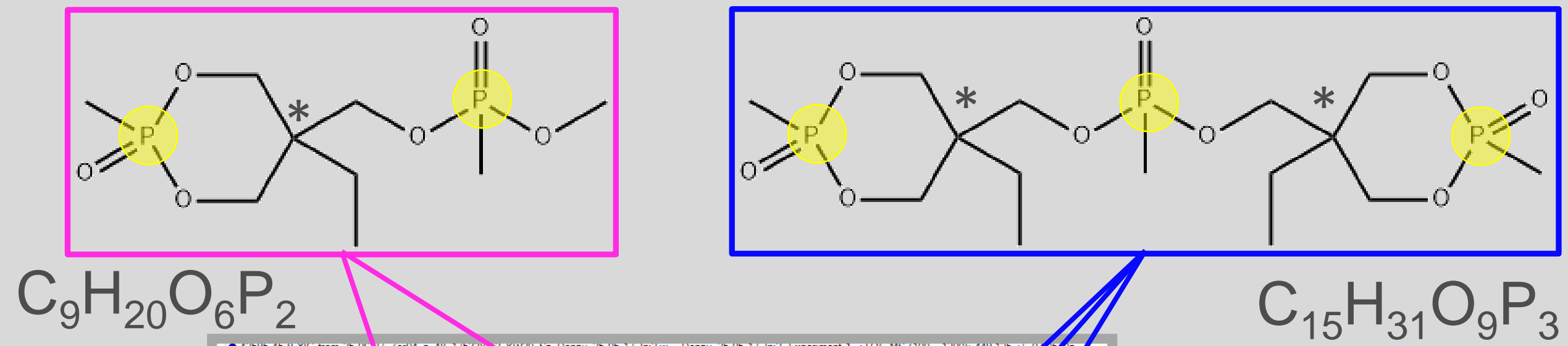


Uwe Kunkel,
LfU Bayern

- Halogenfreies Flammenschutzmittel
- Hohe Peaks im Abwasser der Textilindustrie

Quantifizierung

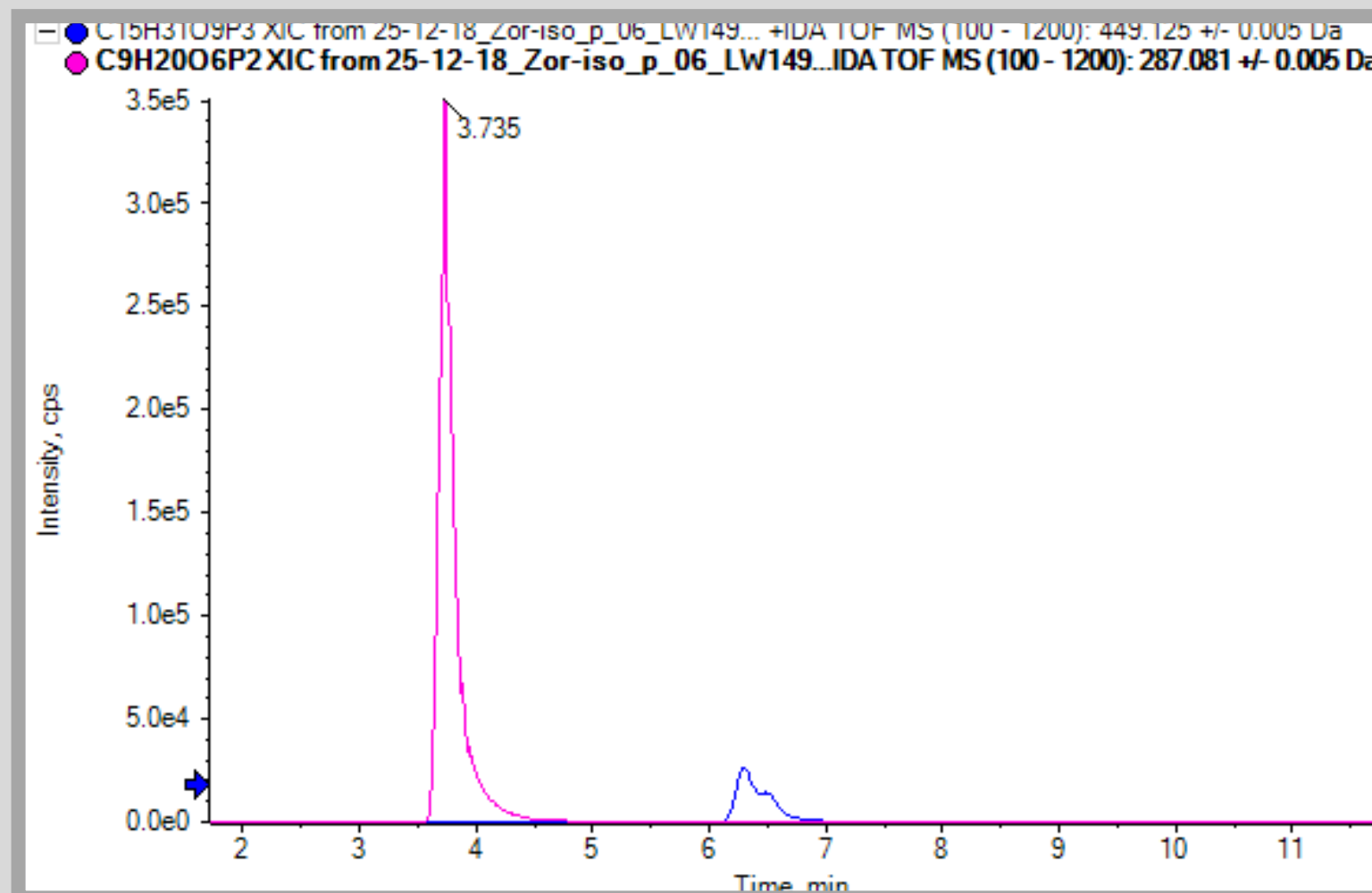
- Standard nicht sauber



Reinheitsbestimmung mit ICP-MS

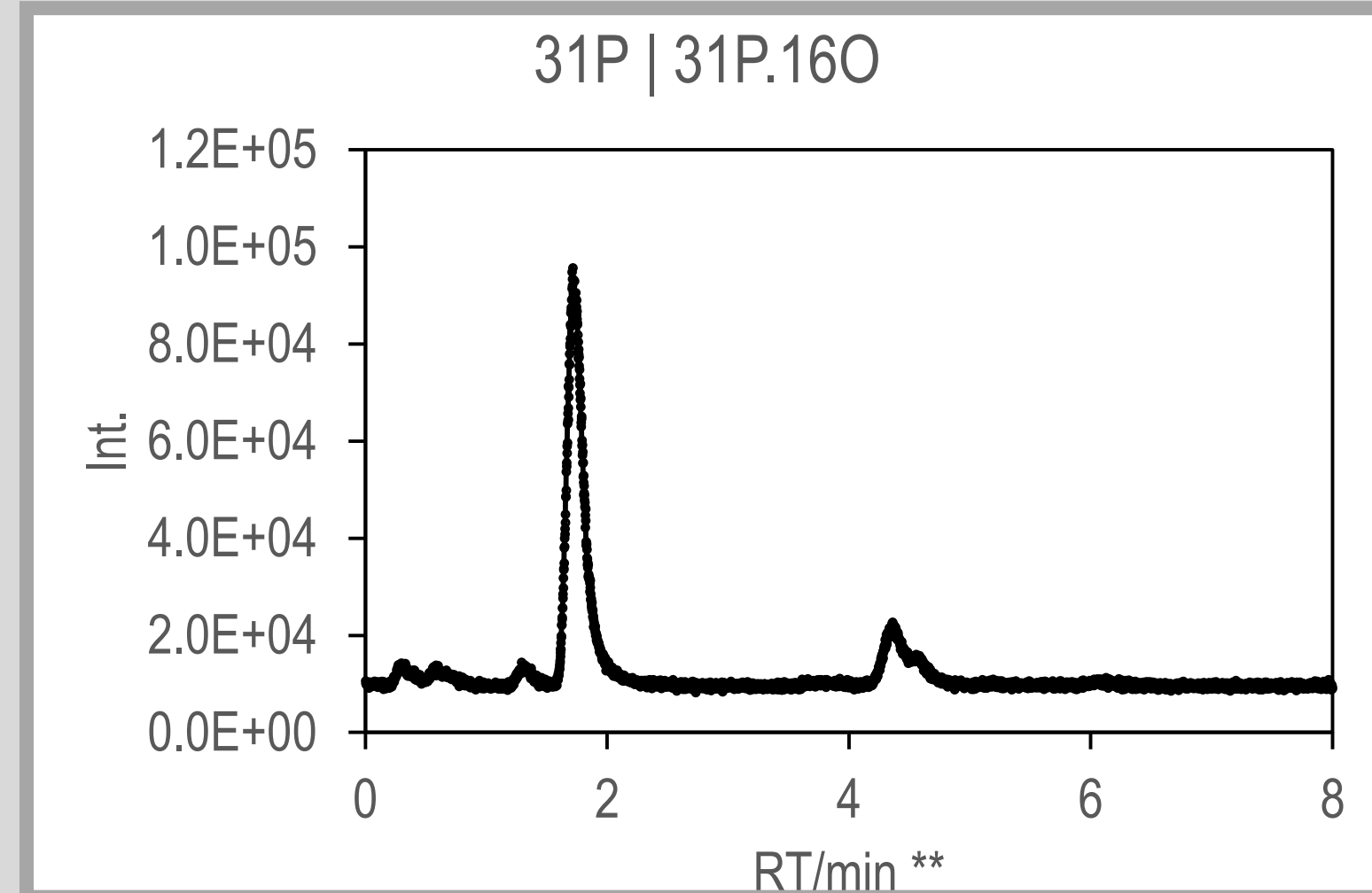
- Isokratische Trennung

LC-HRMS

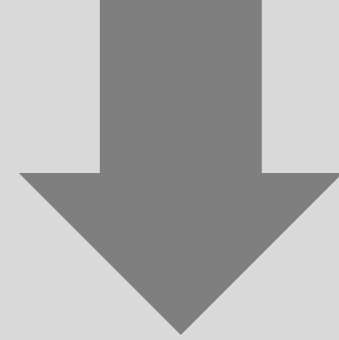


Erstbewertung mit WBA

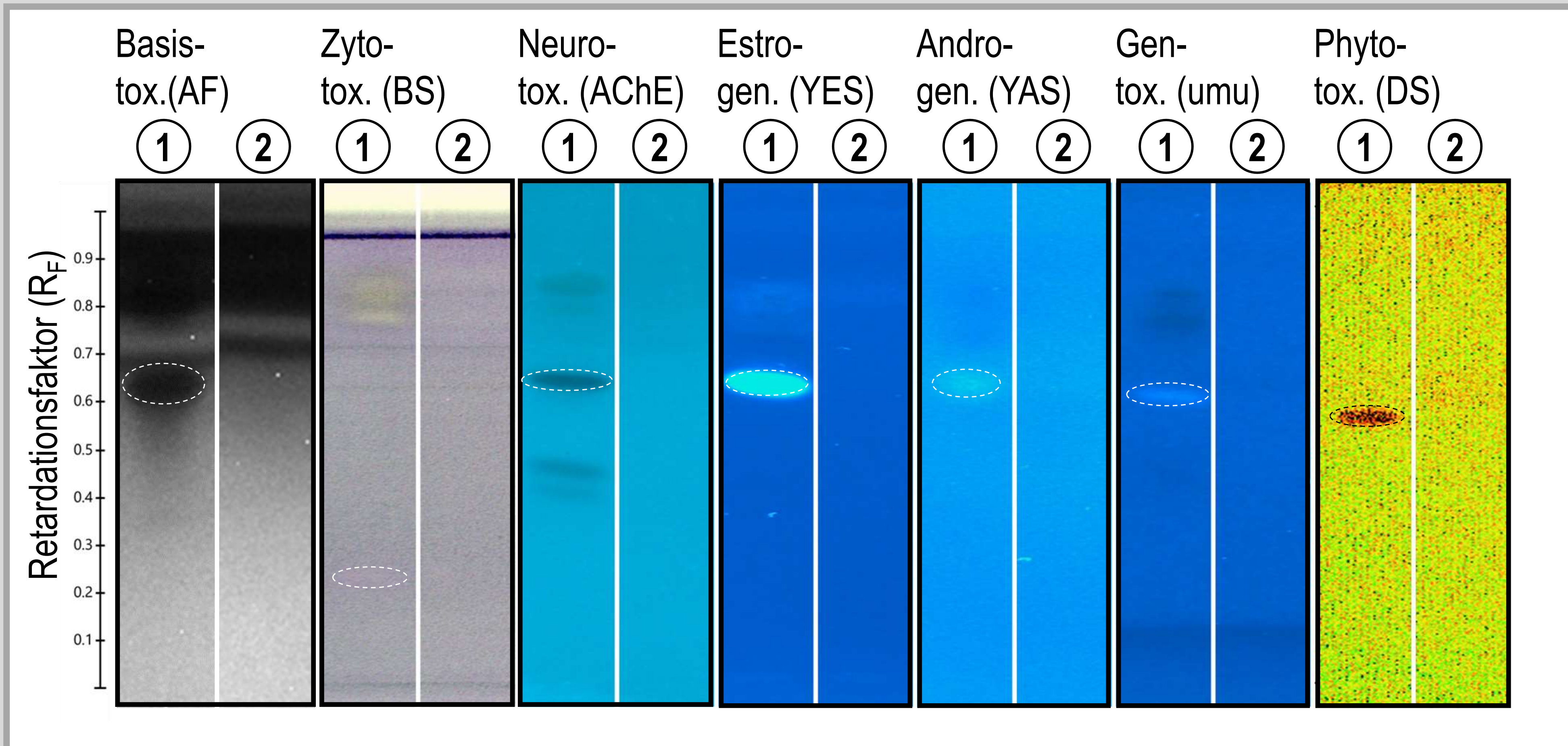
LC-ICP-MS



finale Quantifizierung
noch ausstehend!

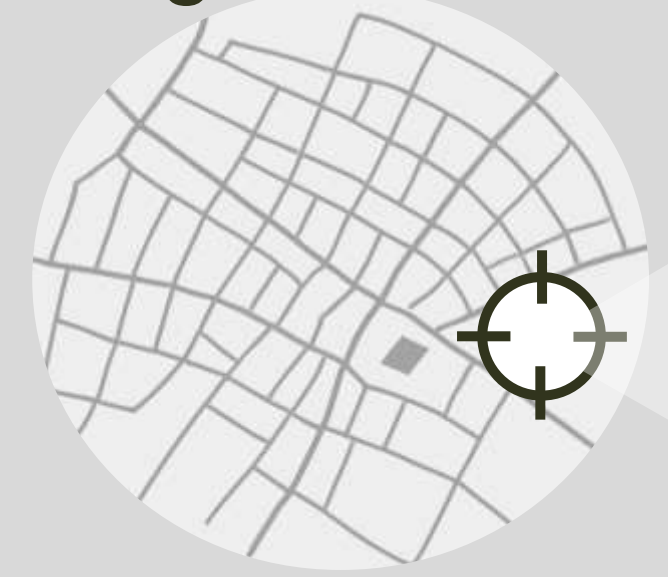


LW-Testbatterie: keine Effekte (hochkonzentrierter Standard, 10 µg auf Platte)

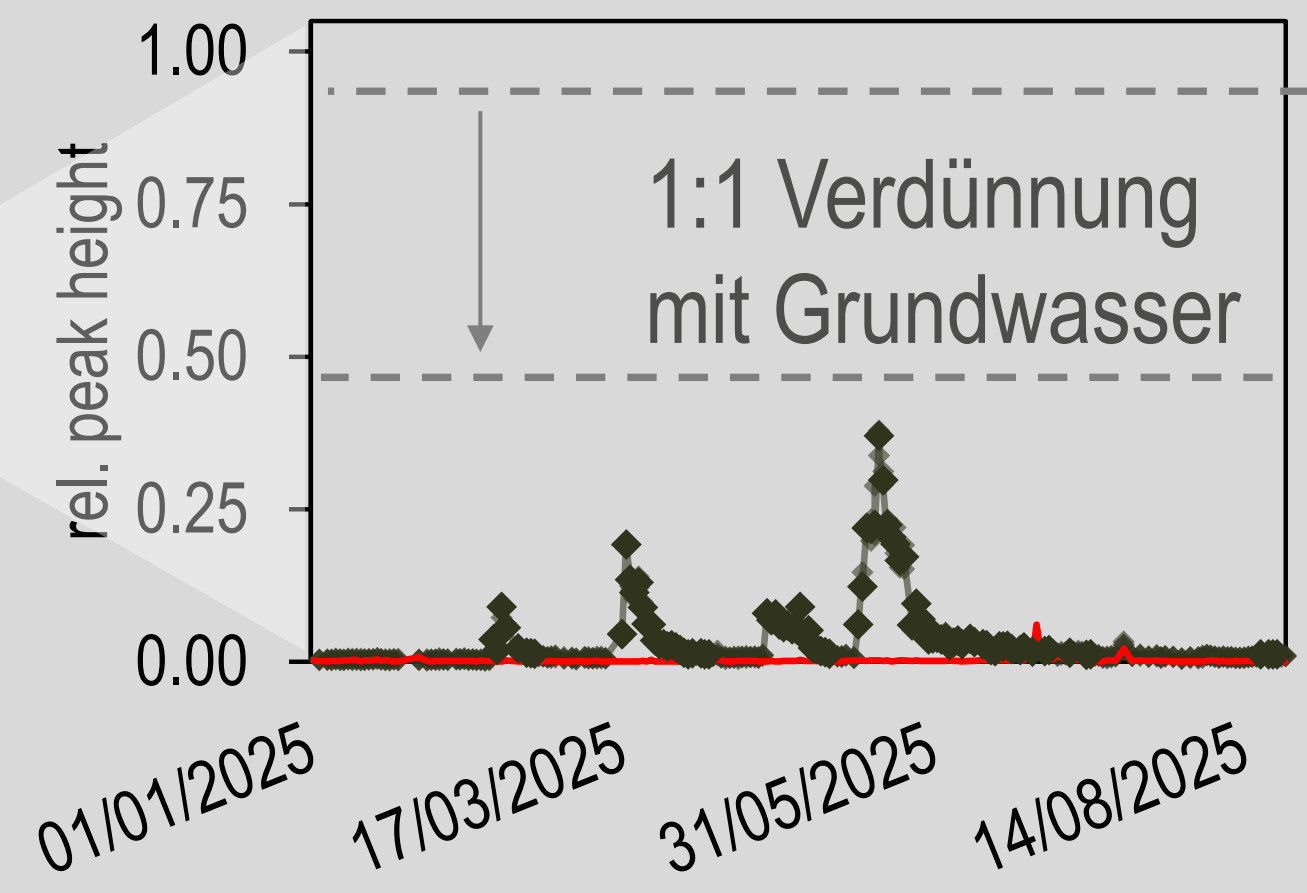


... weitere Tox-Tests laufen aktuell beim UBA

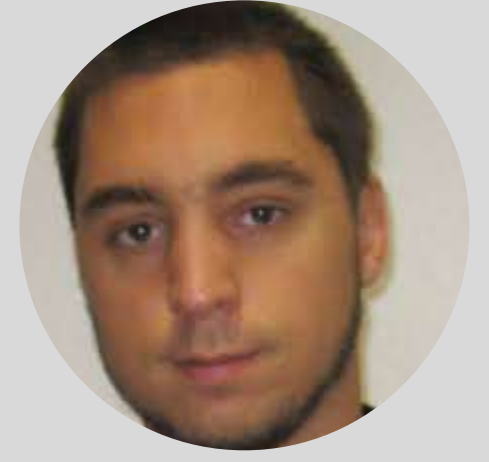
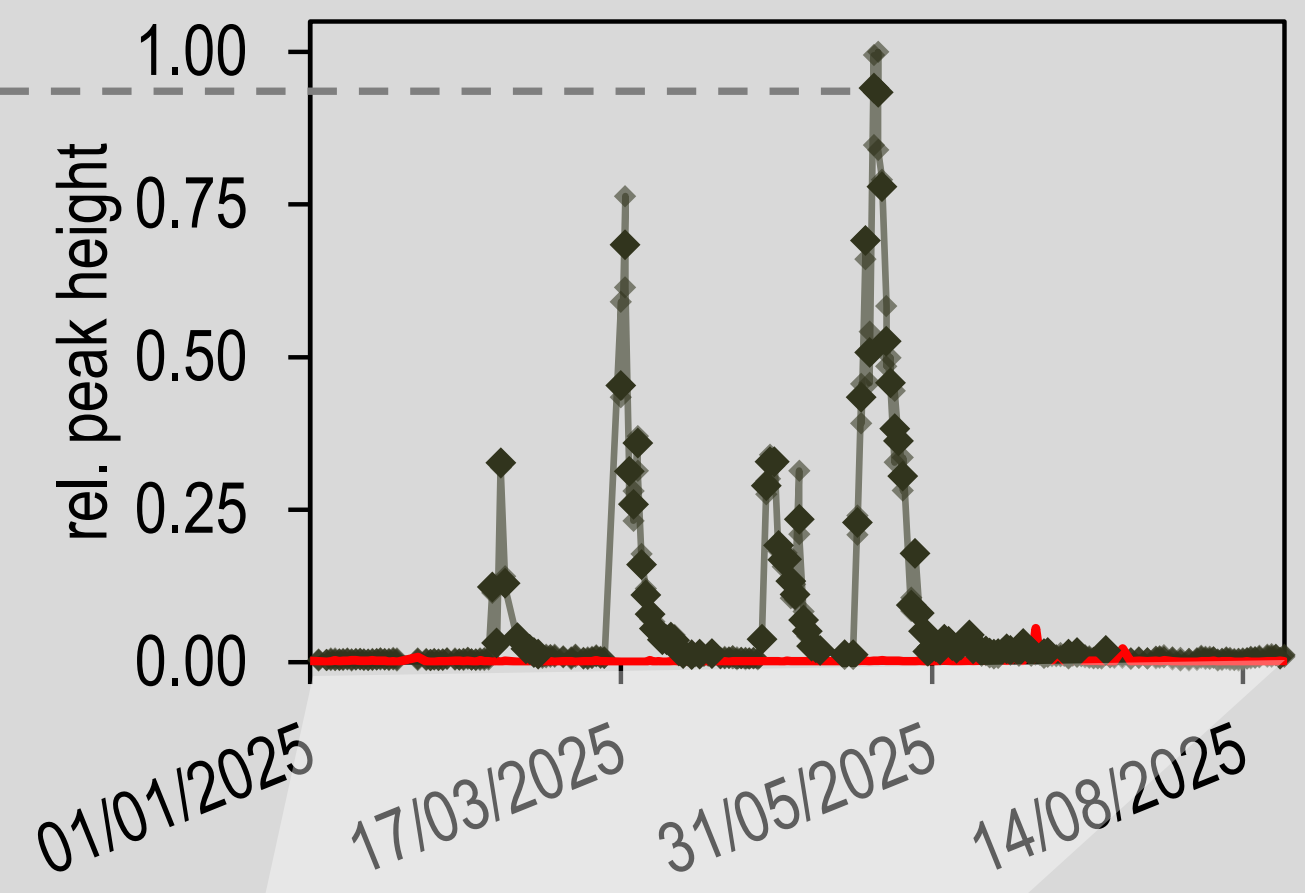
Langenau



Trinkwasser, Langenau

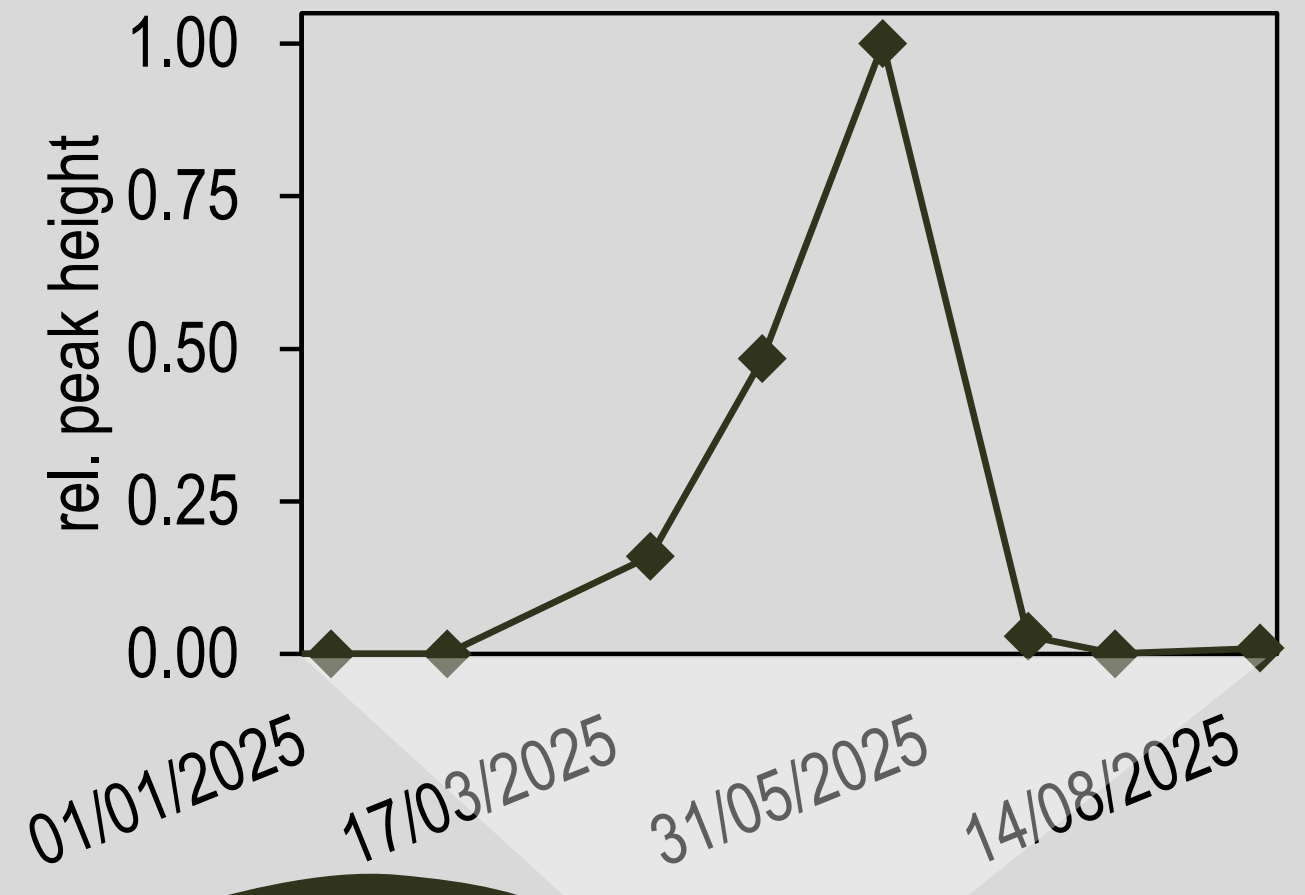
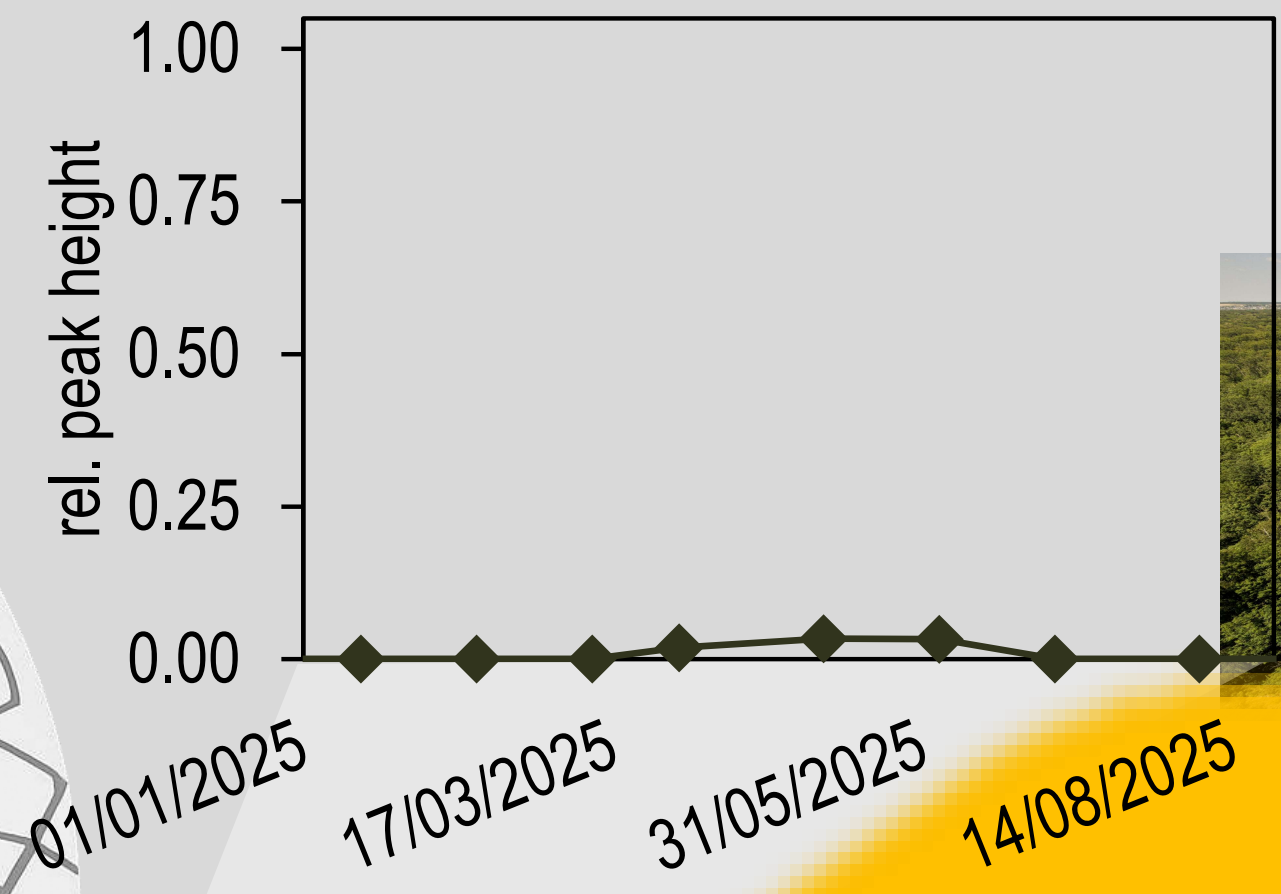
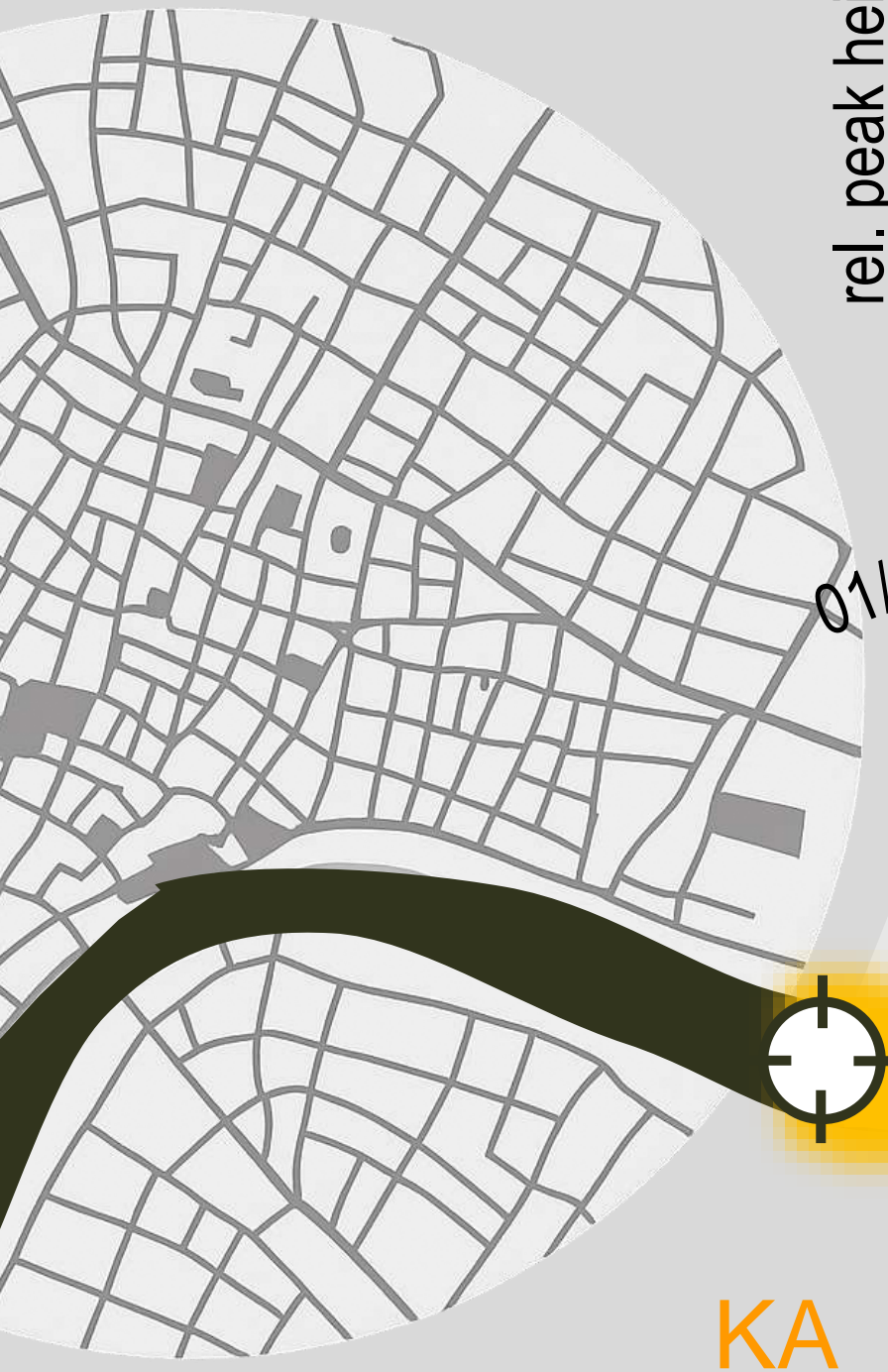


Donau, Leipheim



Uwe Kunkel, LfU Bayern

Neu-Ulm/ Ulm

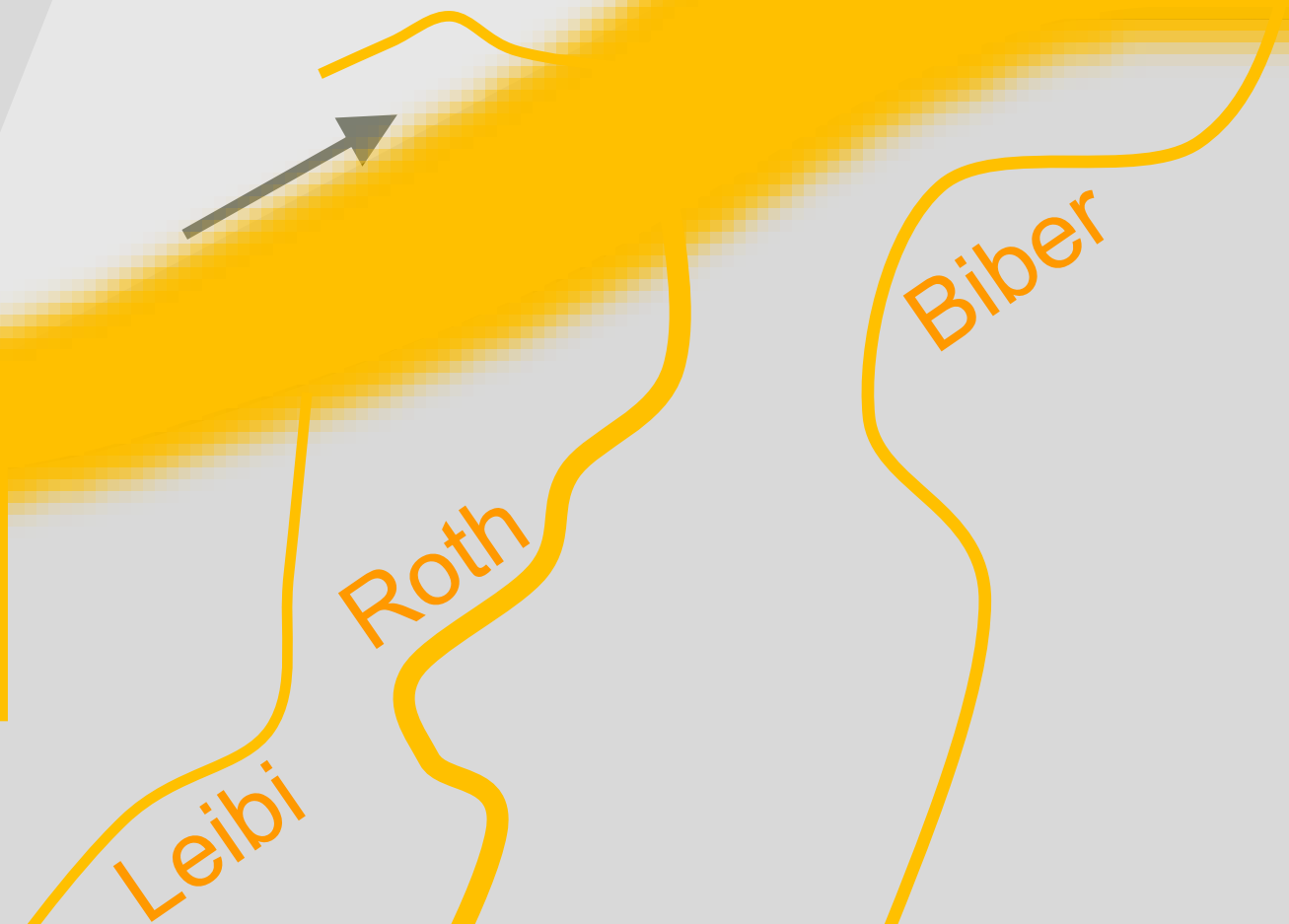


Leipheim

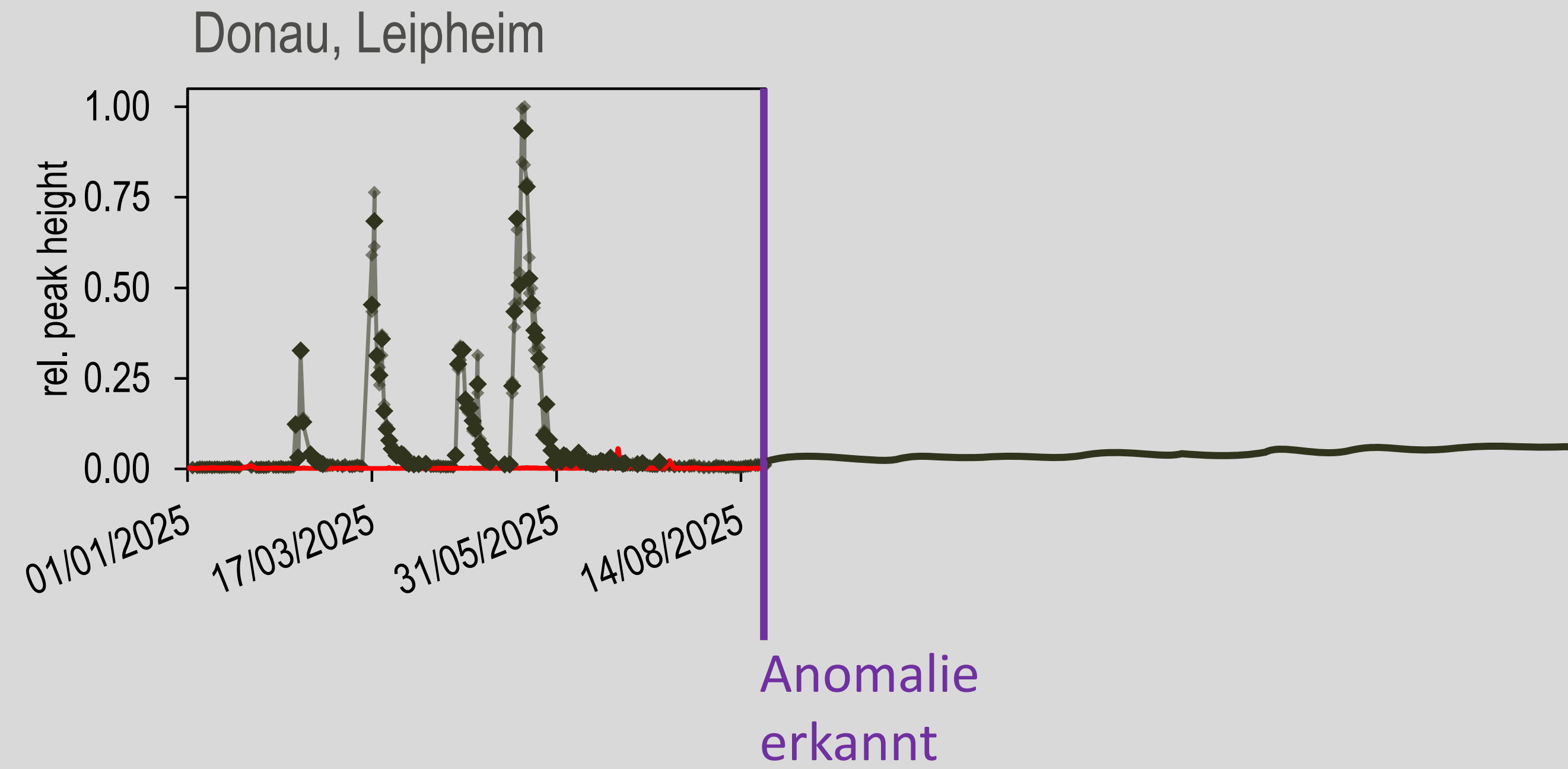


Dillingen

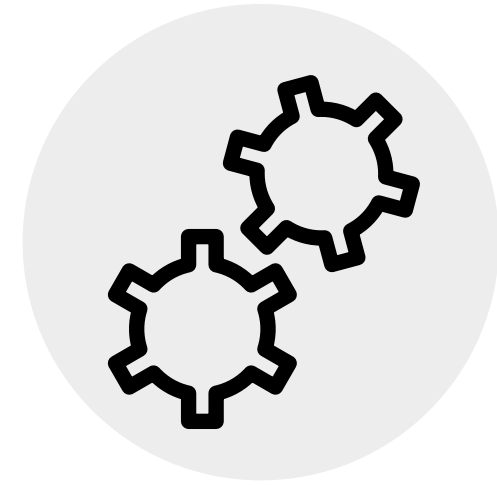
KA



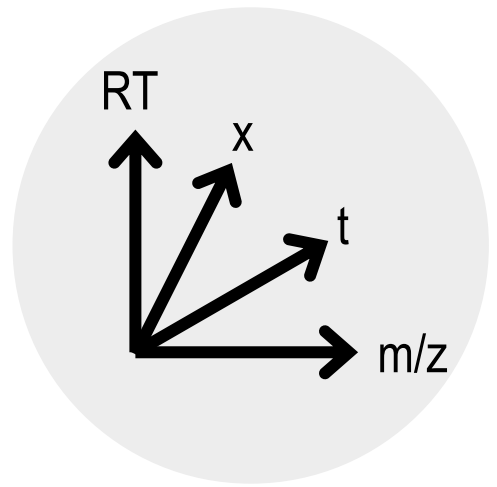
- oberstromige Probenahme nicht mehr möglich
 - Behörden kontaktiert
 - Regierungspräsidium
 - Landratsamt
 - Gewerbeaufsicht
- **keine Daten zu den Stoffen**



Fazit



Breiteres Bild bei Prozessbewertung
(Transformationsprodukte!)



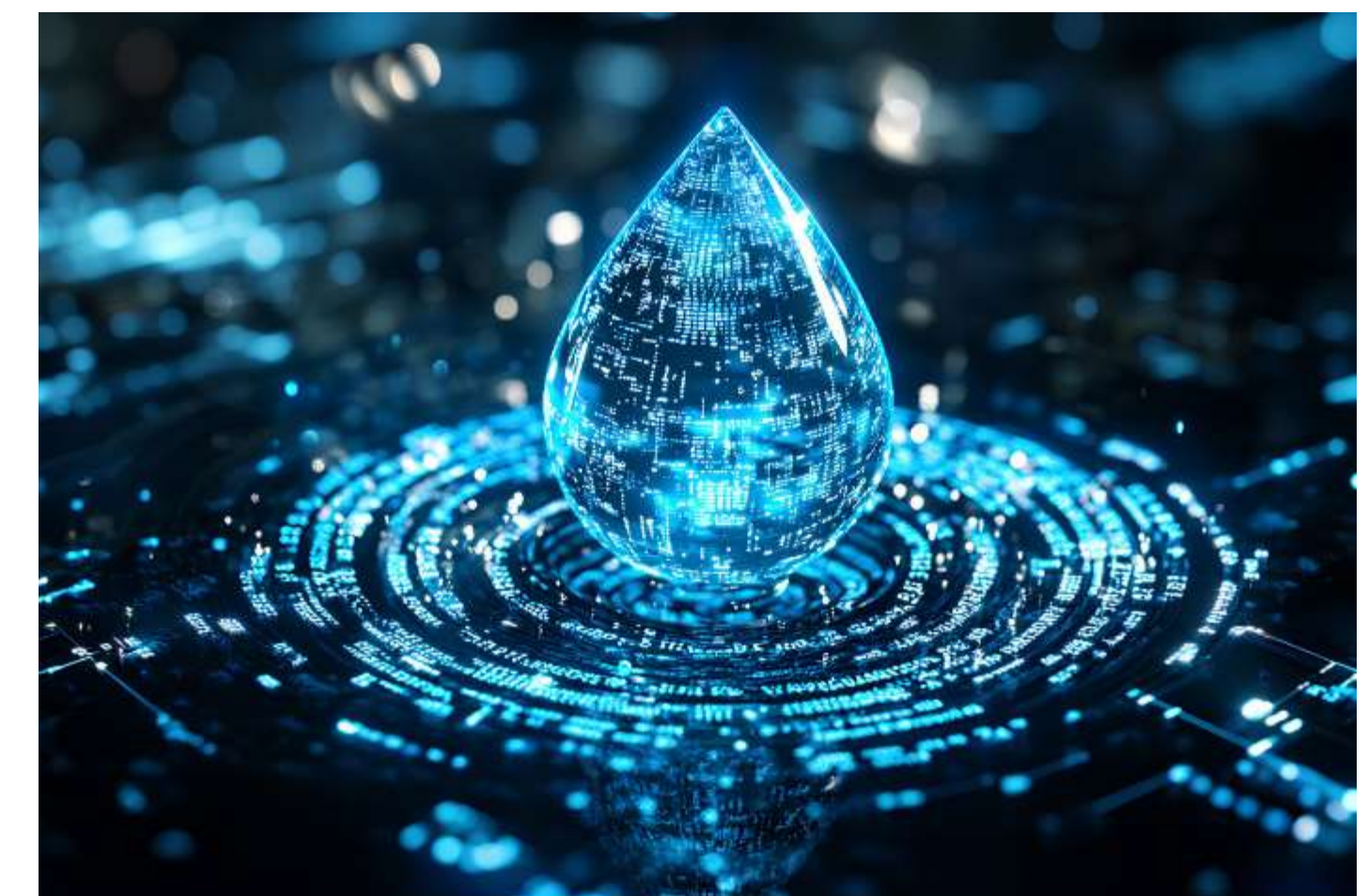
Datenschatz: zeitlich und örtlich aufgelöste NTS-Daten
(z.B. Spurenstofftracking, Retrospektive Analysen)



Zukunft: Laborübergreifendes NTS
(z.B. Quellensuche, Belastungskarten)



Aktuelle Workflows zu langsam!



< Forschungsprojekte

01. Dezember 2024

K2I-Xplore

Künstliche und kollektive Intelligenz zum Spurenstoff-Tracking: explorative Realisierung als TRINK-HelpDESK-Analytikmodul (W 202408).



📍 Wasserwerk Langenau

7 km
~1400 m³/s

📍 Pumpwerk



NTS im Pumpwerk?

vorher

nachher

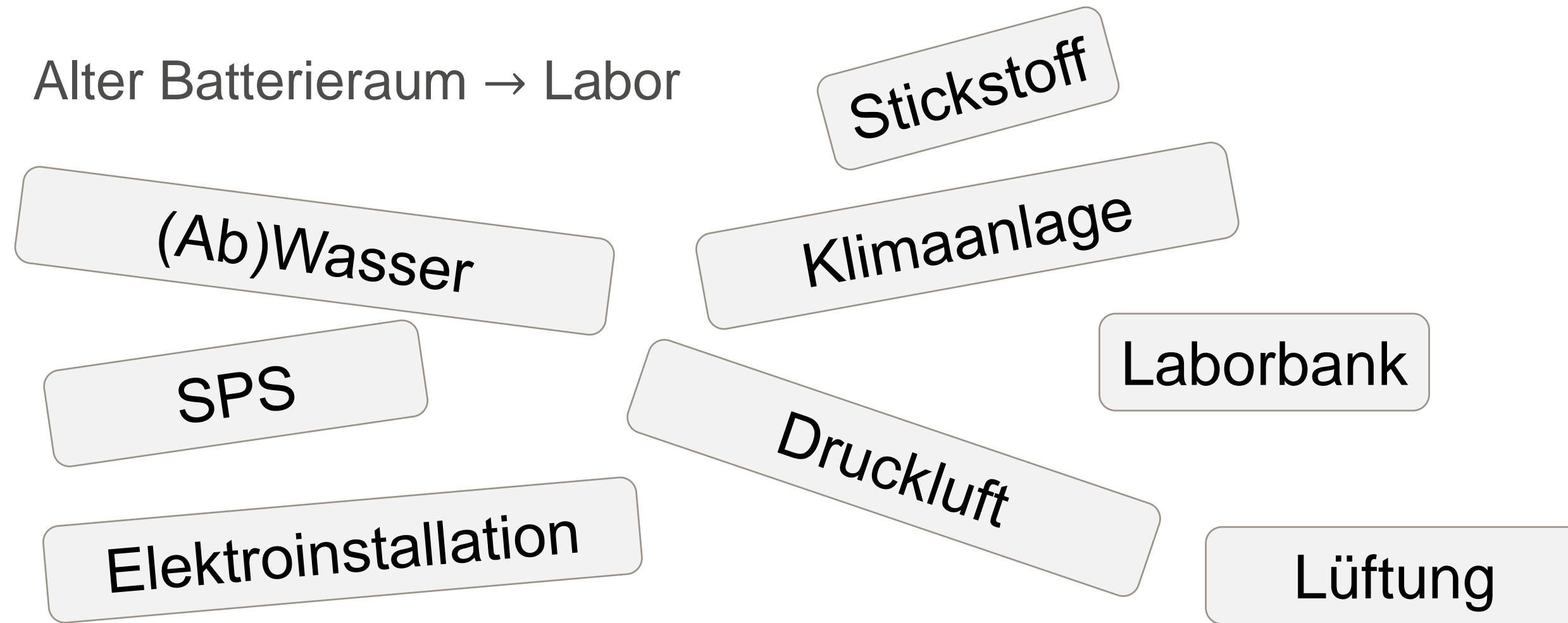


*motivated by
eawag & BfG*

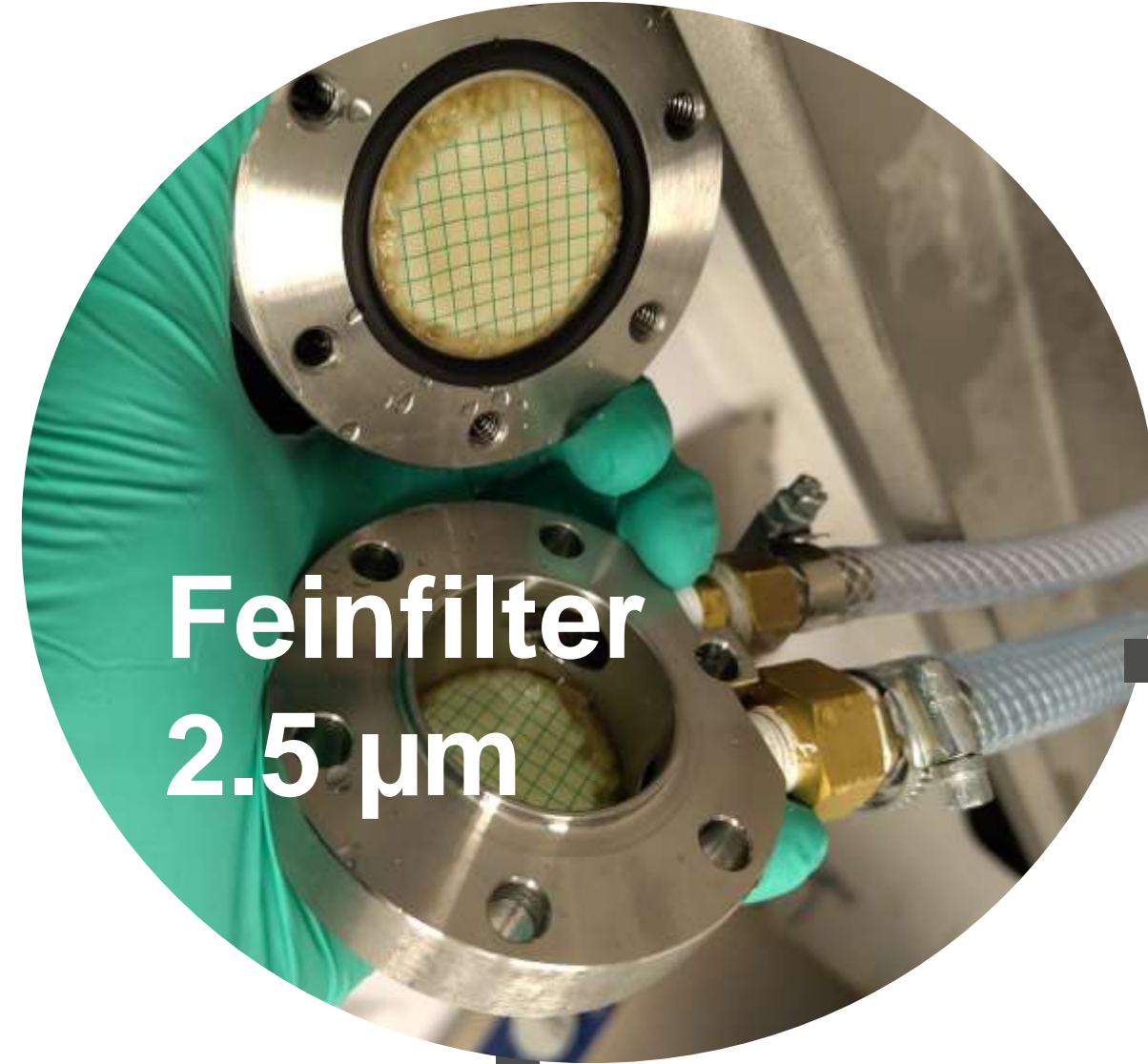
**fast
online**



- Alter Batterieraum → Labor



How to...

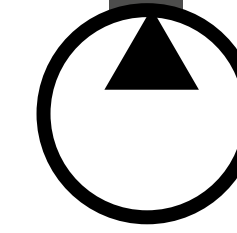


waste

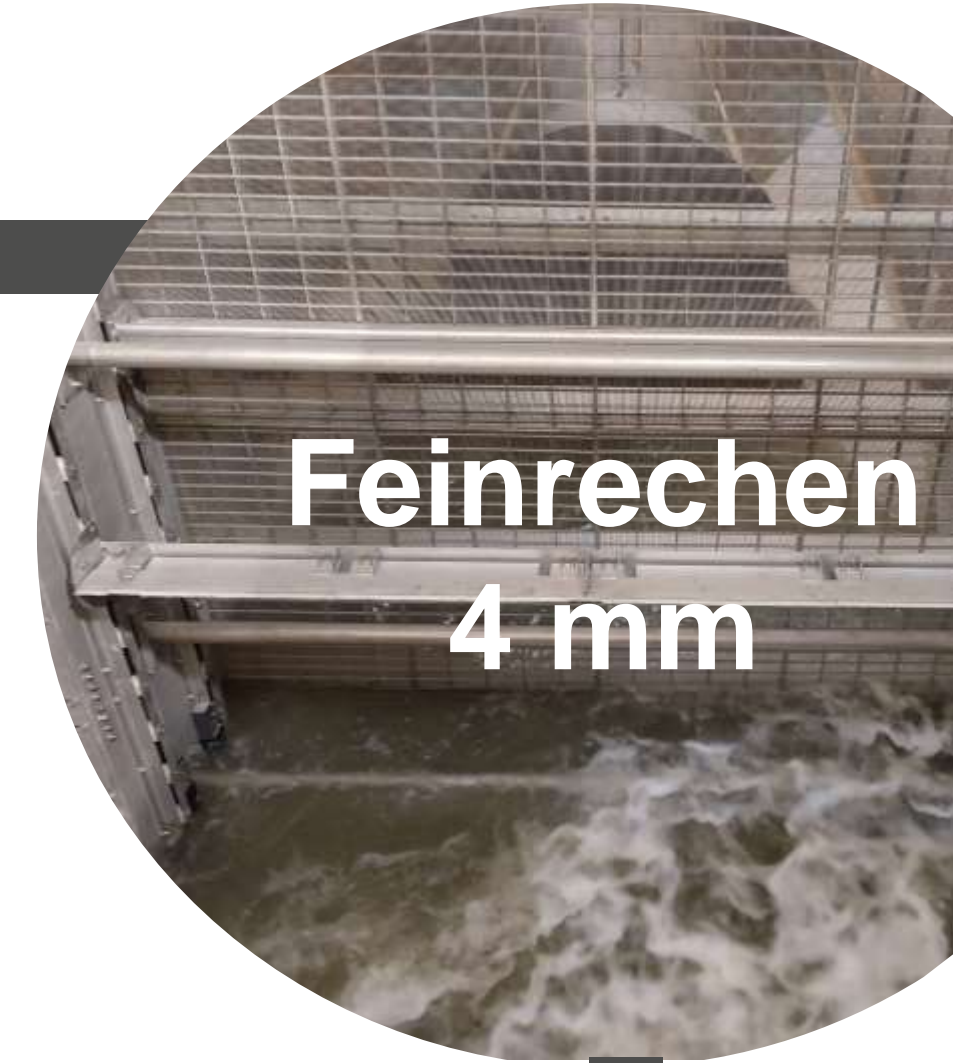


waste

15 L/min

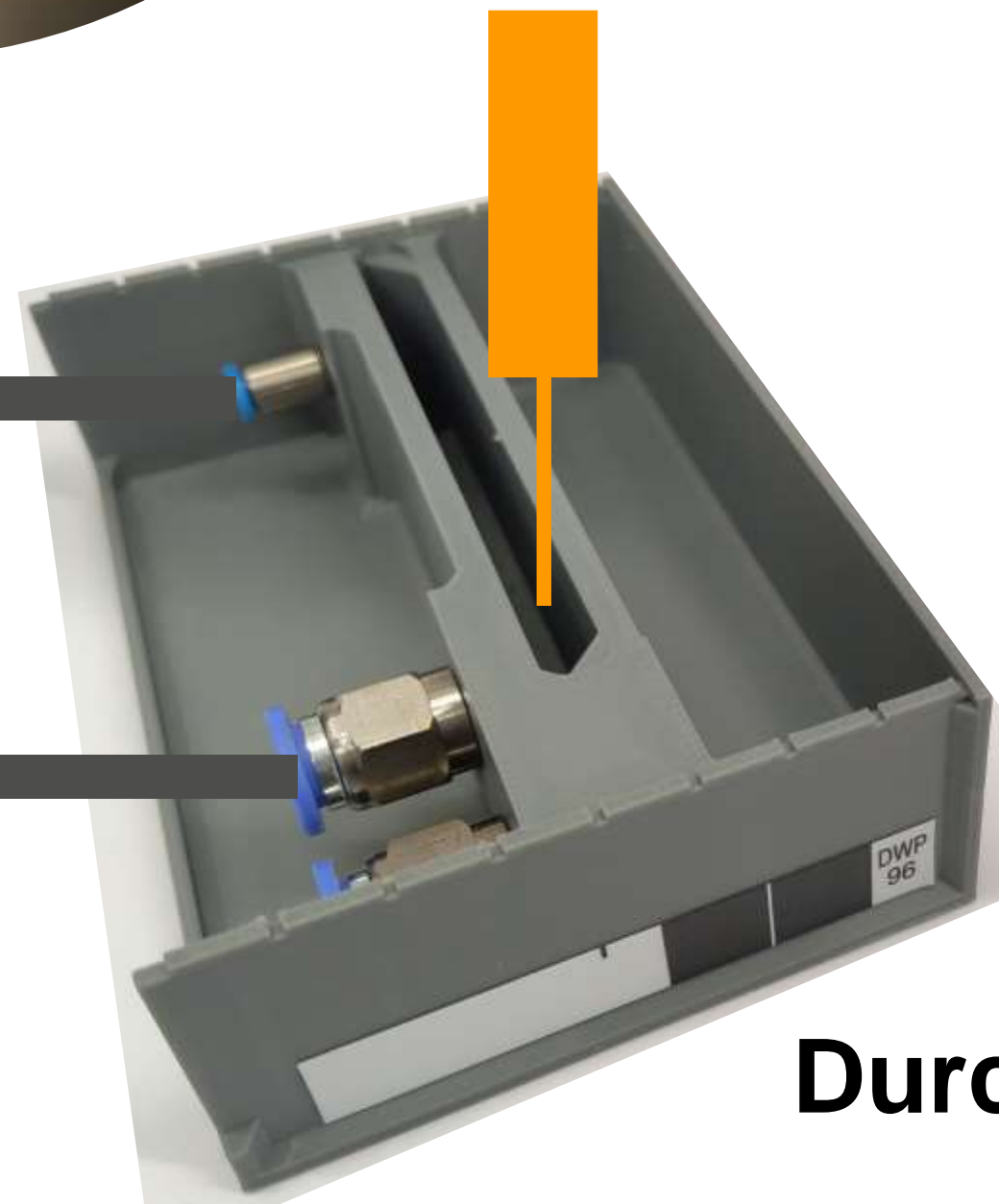


1400 L/s



0.2 L/min

LC-HRMS



waste



Δt (Probe, Alarm)

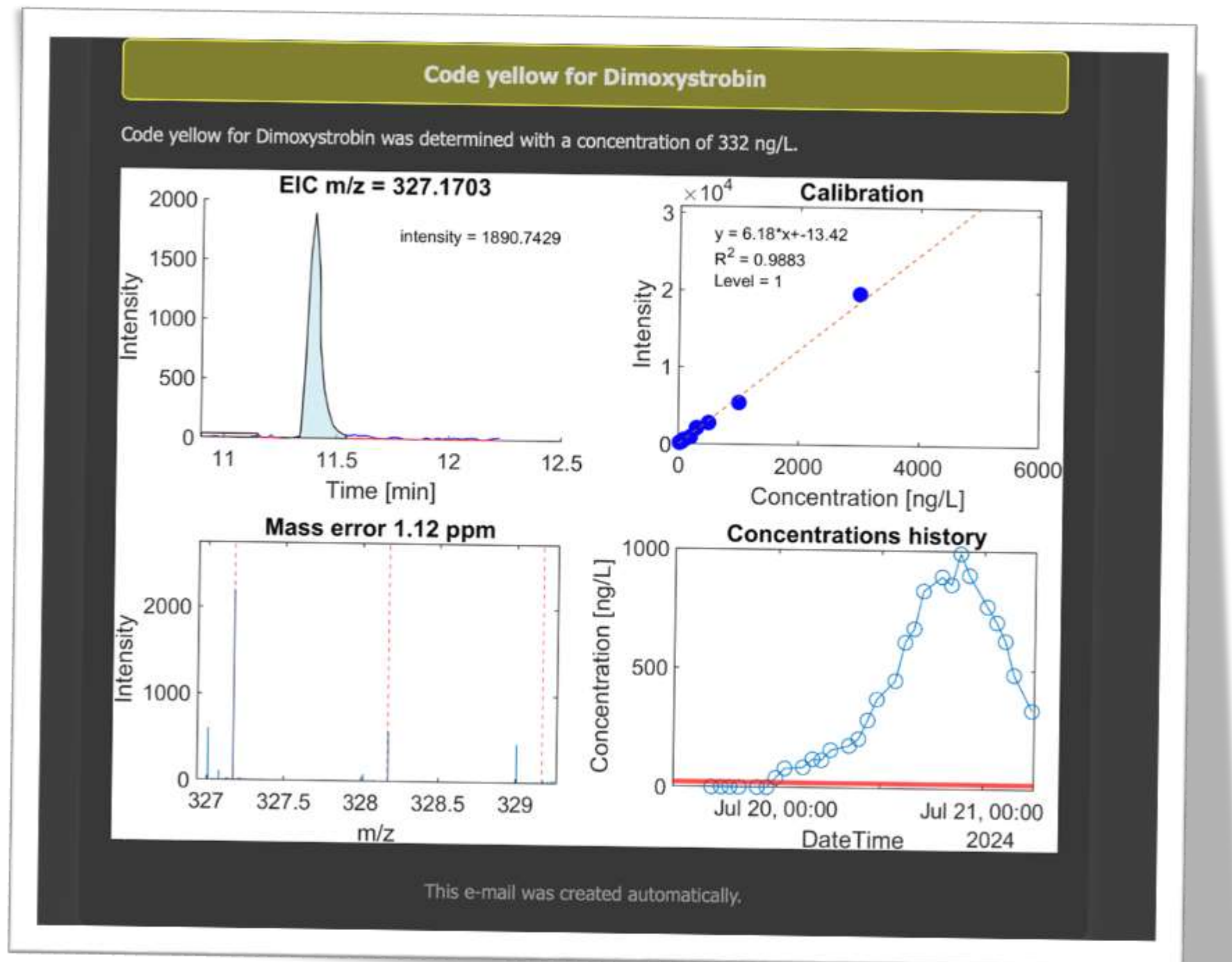
Analysis ESI+ 30 min

Analysis ESI- 30 min

Auswertung 5 min

35 – 65 min

Alarmierung per Mail



später über Zentralwarte und Bereitschaftsdienste

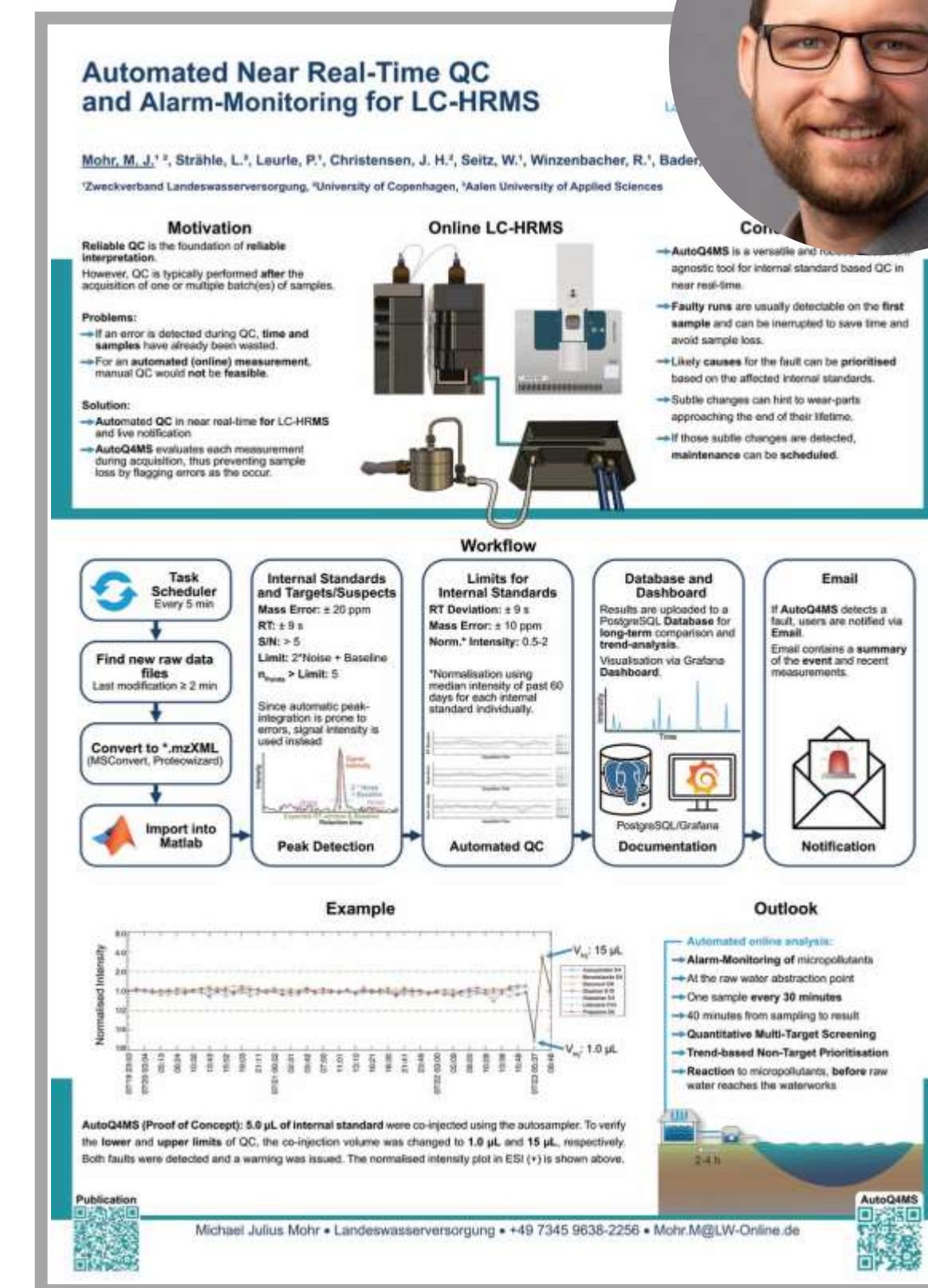
Dissertation
Michael Mohr



Speicherung und Visualisierung



Auswertung



Mohr, J. M. et al. (2026), RCM
<https://analyticalsciencejournals.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/rcm.70052>

📍 Wasserwerk Langenau

Δt (Pumpwerk, Wasserwerk)
= 2 – 4 h

»Wissen, was kommt, bevor's ankommt«

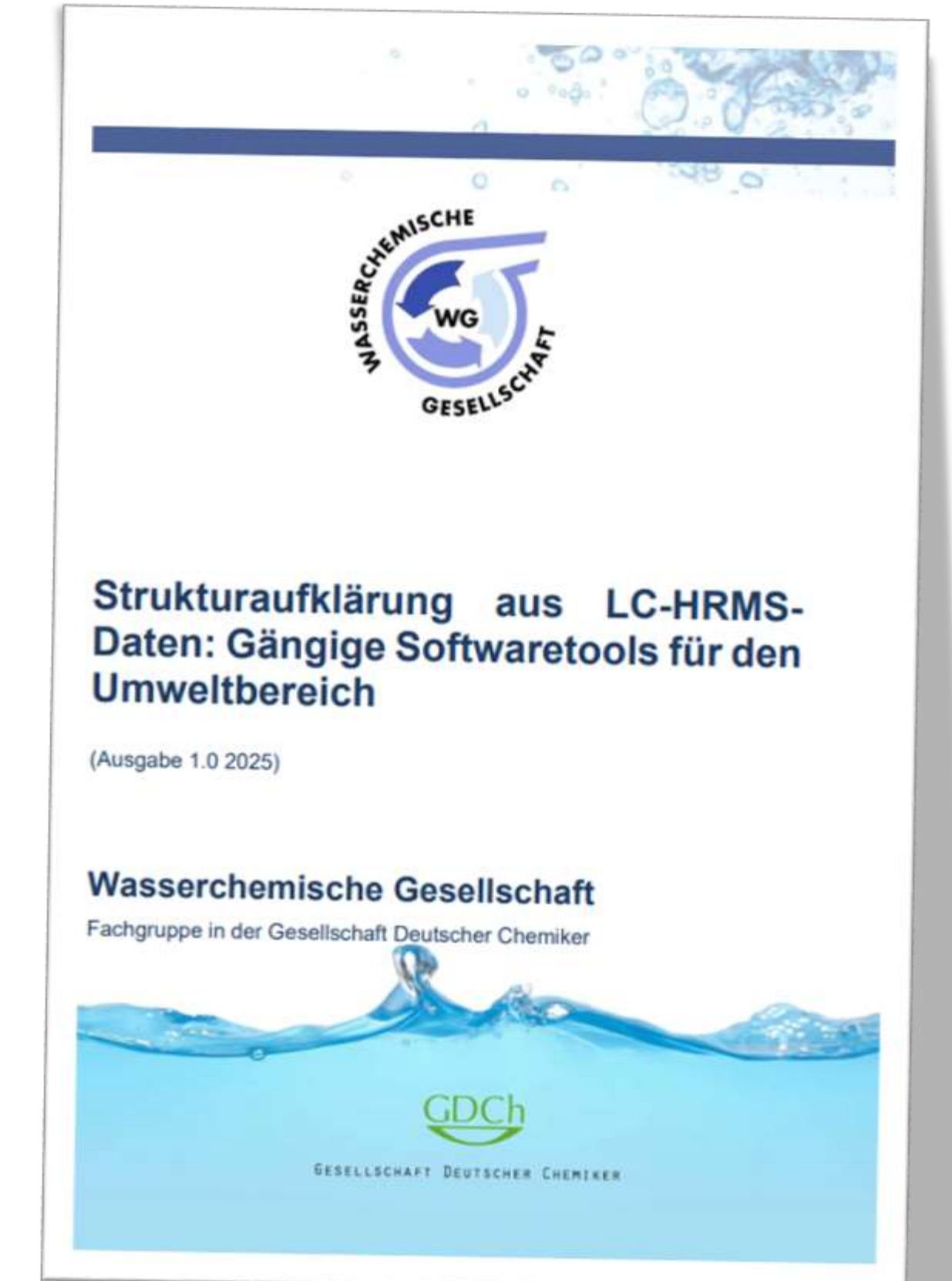
📍 Donau, Leipheim

Fachausschuss Non-Target-Screening

- FA-NTS besteht aus 4 Gruppen
 1. Identifikation
 2. Inter-lab NTS
 3. Semiquant NTS
 4. Validierung
- **NEU**
 - Leitfaden 2.0
(Validierung, QS, Statistik)
 - Tipps zur Strukturaufklärung



https://www.gdch.de/fileadmin/downloads/Netzwerk_und_Strukturen/Fachgruppen/Wasserchemische_Gesellschaft/Publikationen/Leitfaden_NTS_DE_V2_final.pdf



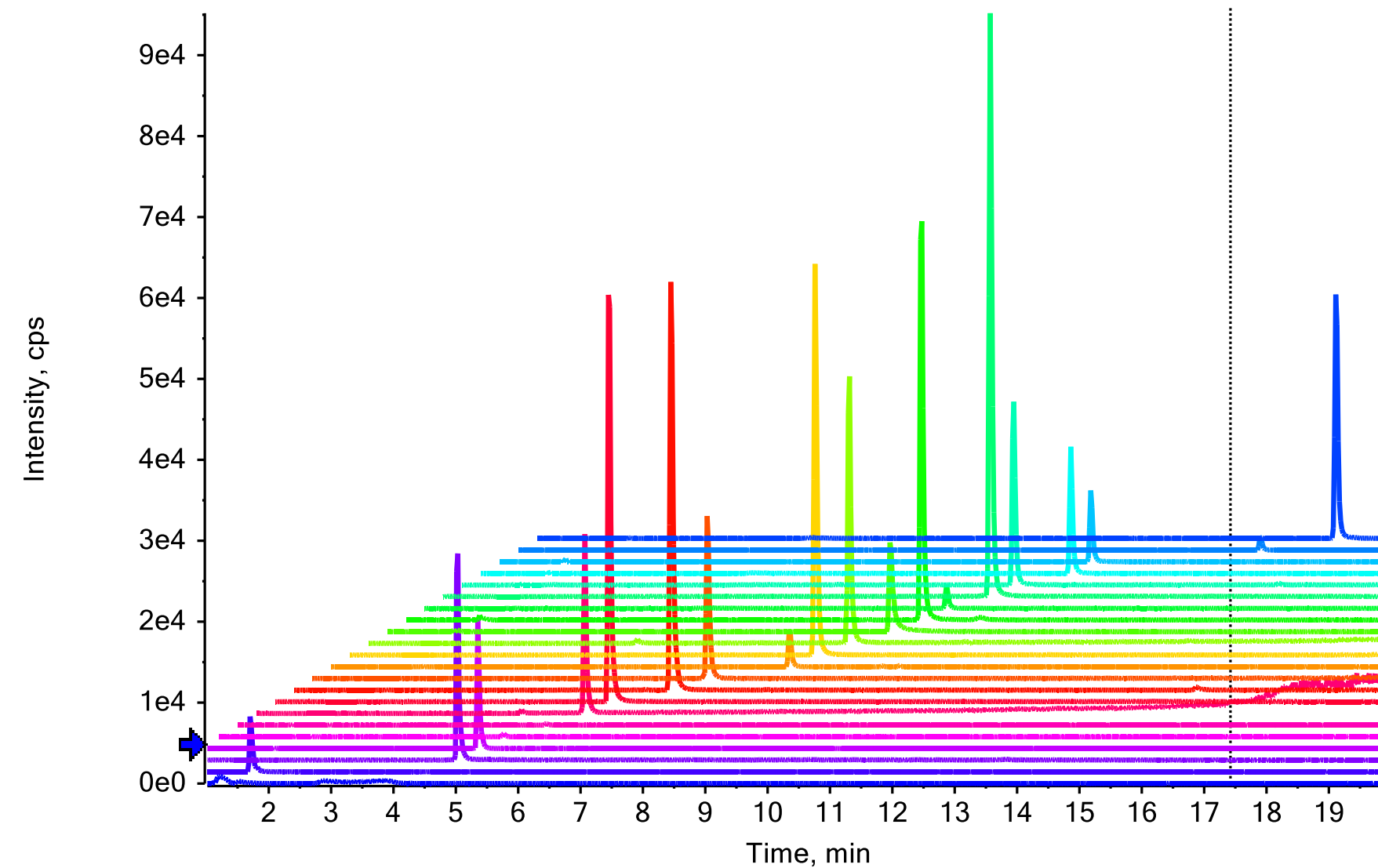
https://www.gdch.de/fileadmin/downloads/Netzwerk_und_Strukturen/Fachgruppen/Wasserchemische_Gesellschaft/Publikationen/2025-04-25_Leitfaden_Strukturaufklaerung_aus_LC-HRMS-Daten.pdf

Fachausschuss Non-Target-Screening

- Isotopenmarkierte Standards zur
 - Qualitätssicherung
 - Erkennung von Matrixeffekten
 - besseren Vergleichbarkeit bei der laborübergreifenden NTS-Auswertung
- Mischung bei Neochema erhältlich

<https://www.neochema.com/Pharma-Dx-Mix-22/R01243>

Produkt-ID:
R01243-WaaAN5



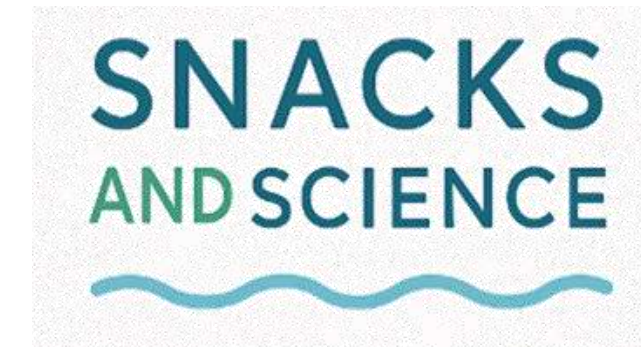
Name	Chemical Formula
Acesulfam-D4	2H4 C4HNO4S
Metformin-D6	2H6 C4H5N5
Sotalol D7	2H7 C12H13N2O3S
Iopromid-D3	2H3 C18H21I3N3O8
Saccharin D4	2H4 C7HNO3S
Hydrochlorothiazide 13C,D2	13C1 2H2 C6H6ClN3O4S2
Benzotriazole D4	2H4 C6HN3
Metoprolol-d7	2H7 C15H18NO3
Chloridazon-D5	2H5 C10H3ClN3O
Sulfamethoxazol-D4	2H4 C10H7N3O3S
Bromacil-D3	2H3 C9H10BrN2O2
Simazine-D10	2H10 C7H2ClN5
Carbamazepin-D10	2H10 C15H2N2O
Telmisartan-D3	2H3 C33H27N4O2
Irbesartan D4	2H4 C25H24N6O
Bentazon-(isopropyl)-D6)	2H6 C10H6N2O3S
DEET_D7	2H7 C12H10NO
Diuron-D6	2H6 C9H4Cl2N2O
Bezafibrat D6	2H6 C19H14ClNO4
Darunavir D9	2H9 C27H28N3O7S
Fipronil 13C4	13C4 C8H4Cl2F6N4OS
Diflufenican-D3	2H3 C19H8F5N2O2

Don't miss it!

WASSER 2026
10.-13. May 2026
Kiel

Society of water chemistry
founded in Kiel in 1926

Keynote presentations
Scientific presentations
Coloured Poster Night
Awards



Science Slams
Networking Dinner
City tours

**Vielen Dank für Ihre
Aufmerksamkeit!**

Tobias Bader
Bader.T@lw-online.de



*Betriebs- und Forschungslabor
der Landeswasserversorgung*

