

GC-Fingerprint, GC-MS-Identifikation und GC-MS-Screening

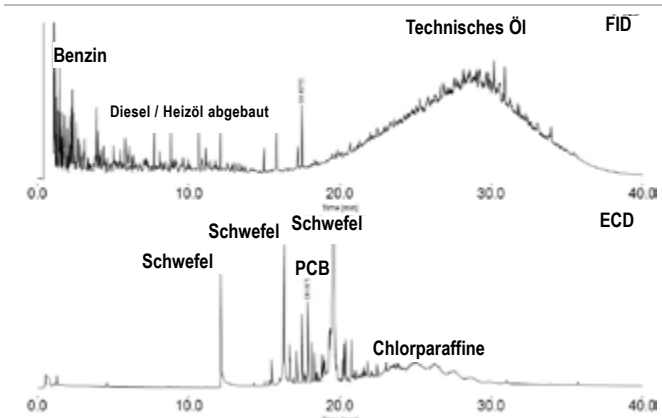
Im Gegensatz zu gezielten Analysen (engl. target analysis) wie zum Beispiel bei der Purge-and-Trap-Methode nach EPA 524.2 (S. 54) wird bei Fingerprint- und Screening-Analysen nach unbekanntem Substanzen oder Substanzgemischen gesucht (non-target analysis). Zuerst werden die organischen Substanzen aus der Probe extrahiert und danach gaschromatografisch aufgetrennt. Die Substanzen werden dann entweder mit einer Kombination von Flam-

men-Ionisation und Electron-Capture (FID/ECD) oder mit einem Massenspektrometer (MS) detektiert und aufgezeichnet. Für die GC-Fingerprint Untersuchung wird das aufgezeichnete Chromatogramm qualitativ ausgewertet. Bei der MS-Aufzeichnung kann anschließend ein Vergleich des Massenspektrums mit einer Spektrenbibliothek durchgeführt werden. Im Idealfall resultiert eine genaue Identifikation einzelner Substanzen.

Die Bachema AG bietet drei verschiedene non-target Methoden an, welche nachfolgend detaillierter beschrieben sind.

Allen drei Methoden gemeinsam ist, dass sie sich auf gaschromatografisch erfassbare flüchtige bis mittelflüchtige Substanzen beschränken.

Preise der Untersuchungen sind in der Preisliste zu finden: S. 15 für Wasserproben und S. 33 für Feststoffproben.

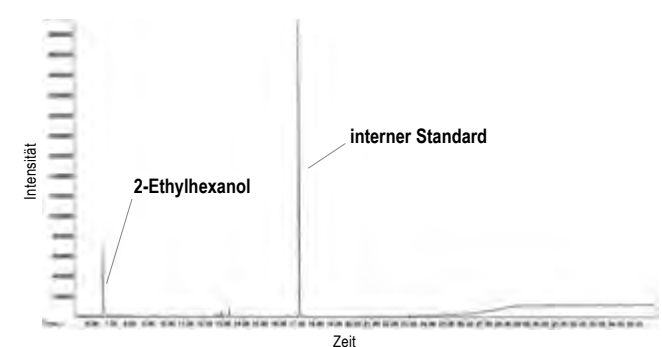


FID- und ECD-Chromatogramm (unten) einer kontaminierten Bodenprobe

GC-Fingerprint

Bei dieser Methode wird ein Extrakt der Probe mittels Gaschromatographie aufgetrennt und mit FID und ECD detektiert.

Der GC-Fingerprint eignet sich besonders für Kontaminationen im Alltagsbereich. Bei Kohlenwasserstoff-Belastungen kann die Art der Verunreinigung typisiert werden (Benzin, Heizöl, Hydrauliköl, Teeröl inkl. PAK, Biodiesel usw.). Mit dem ECD-Detektor können chlorierte Lösungsmittel, PCB, Chlorparaffine und Phthalate nachgewiesen werden. Der Untersuchungsbericht der Bachema enthält jeweils eine qualitative Auswertung des Chromatogramms.

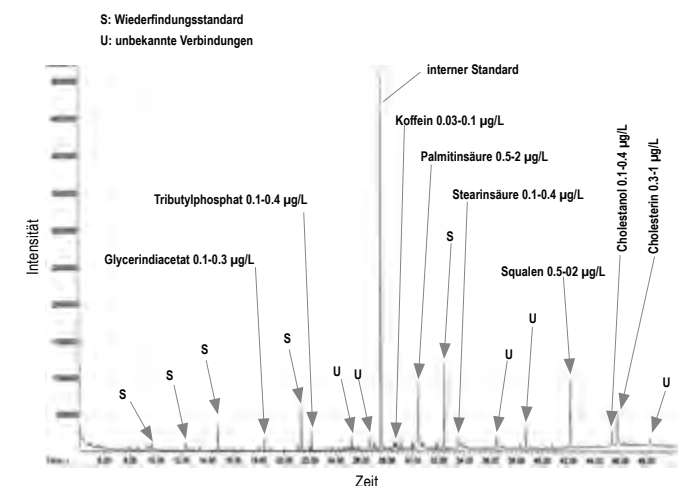


Chromatogramm einer beanstandeten Trinkwasserprobe

GC-MS-Analyse mit Identifikation

Bei dieser Methode wird ein Extrakt der Probe mittels Gaschromatographie aufgetrennt und mit dem Massenspektrometer (MS) detektiert. Von jeder aufgezeichneten Substanz wird ein Massenspektrum aufgezeichnet, welches mit Spektrenbibliotheken verglichen wird. Im Idealfall resultiert eine genaue Identifikation der Substanz.

Die GC-MS-Analyse mit Identifikation eignet sich für gezielte, fallabhängige Abklärungen, z.B. wenn einzelne Signale im oben beschriebenen GC-Fingerprint genauer identifiziert werden sollen. Der Untersuchungsbericht der Bachema enthält jeweils eine detaillierte Auswertung des Chromatogramms mit halbquantitativen Konzentrationsschätzungen.



Chromatogramm einer Flusswasserprobe, welche wenige hundert Meter unterhalb des Auslaufs einer Kläranlage entnommen wurde.

GC-MS-Screening für Wasserproben

Diese Methode ist eine Weiterentwicklung der GC-MS-Analyse mit Identifikation. Im Unterschied dazu werden zwei Extraktionen bei unterschiedlichem pH-Wert durchgeführt. So werden saure und basische Substanzen wie Phenole und Aniline besser erfasst. Im Weiteren wird stärker angereichert als bei den oben genannten Analysen. Die Auswertung beinhaltet eine aufwändige Datenaufbereitung (Spektrendeconvolution, Wiederfindungsberechnung u.a.), und eine halbquantitative Abschätzung der Konzentration. Das GC-MS-Screening eignet sich für den Spurenbereich (ca. 0.1 bis 1 µg/L), z.B. für schwach belastetes Grundwasser. Weil die Methode hoch empfindlich ist, stößt sie bei stärker kontaminierten Proben schnell an ihre Grenzen. Im Weiteren muss damit gerechnet werden, dass viele Substanzen nicht identifiziert werden können (siehe Beispiel links). Der Untersuchungsbericht der Bachema enthält jeweils eine detaillierte Auswertung des Chromatogramms mit halbquantitativen Konzentrationsschätzungen.