

Schlussbericht

an das Amt für Umweltschutz des Kantons Zug,
z.Hd. von Dr. Volker Lützenkirchen

Screening von organischen Spurenstoffen in ausgewählten Grundwasserproben des Kantons Zug

Adrian Müller, Karin Kiefer, Heinz Singer und Juliane Hollender
Dübendorf, Juni 2018

Kontakt: Heinz Singer

*Eawag, Umweltchemie
Überlandstrasse 133
8600 Dübendorf
Tel.: +41 58 765 5577
E-Mail: heinz.singer@eawag.ch*

1 Ausgangslage und Projektbeschreibung

Die Grundwasserqualität wird in der Schweiz im Rahmen der Nationalen Grundwasserbeobachtung NAQUA langfristig überwacht. Die Parameterauswahl in Bezug auf organische Spurenstoffe beschränkt sich aus Zeit- und Kostengründen auf einzelne Substanzen, deren Auftreten zu erwarten ist. Um die Parameterauswahl zu überprüfen und ein möglichst umfassendes Bild der Grundwasserqualität zu erhalten, beauftragte das Bundesamt für Umwelt (BAFU) die Eawag mit einem breit angelegten Target-Screening sowie einem Suspect-Screening nach Pflanzenschutzmittel-Abbauprodukten.

Infolgedessen beauftragte das Amt für Umweltschutz des Kantons Zug die Eawag zwei Grundwasserproben der Grundwasserbrunnen Hünenberg - Drällikon VFB1 (ZGG03) und Baar - Sternen VFB1 (ZGG05) mit der gleichen Analyseverfahren zu untersuchen.

1.1 Target-Screening

Im Grundwasser werden besonders polare und dadurch mobile Spurenstoffe erwartet. Daher entwickelte die Eawag eine Analyseverfahren, die auf polare Substanzen ausgerichtet ist. Hierbei werden die Wasserproben mittels Vakuumevaporation angereichert und durch hochauflösende Tandem-Massenspektrometrie gekoppelt an die Flüssigkeitschromatographie (LC-HRMS/MS) analysiert. Mithilfe von Referenzstandards können mit der angewandten Methode 519 organische Spurenstoffe identifiziert und quantifiziert werden.

1.2 Suspect-Screening

Aufgrund des Einsatzes von Pflanzenschutzmitteln (PSM) in der Landwirtschaft und im Kleingartenbereich können PSM und deren Abbauprodukte ins Grundwasser eingetragen werden. Mangels kommerziell erhältlicher Referenzstandards werden im Target-Screening jedoch nur 68 Abbauprodukte von 46 verschiedenen PSM erfasst. Daher screenete die Eawag die analysierten Grundwasserproben im Rahmen eines Suspect-Screenings nach der exakten Masse von rund 1000 PSM-Abbauprodukten. Bei positiven Treffern mit erhöhter Wahrscheinlichkeit, dass es sich tatsächlich um das jeweilige PSM-Abbauprodukt handelt, wurden die PSM-Produzenten nach Referenzstandards angefragt. Der Abschluss des Suspect-Screenings ist mit der Veröffentlichung einer internationalen Publikation im Jahr 2019 geplant, weshalb die Ergebnisse des Suspect-Screenings nicht Gegenstand dieses Berichtes sind. Die Eawag übermittelt nach Veröffentlichung dem Kanton Zug eine Liste der mit Referenzstandard identifizierten und quantifizierten PSM-Abbauprodukte. Die methodische Vorgehensweise wird in der wissenschaftlichen Publikation beschrieben.

2 Grundwasserbrunnen und Probenahme

Die Grundwasserbrunnen ZGG03 und ZGG05 liegen westlich der Gemeinde Hünenberg bzw. südlich der Gemeinde Baar und erschliessen einen oberflächennahen Porengrundwasserleiter (Abbildung 1). Gemäss Einzugsgebietsausweisung des BAFUs ist das Einzugsgebiet von ZGG03 durch Ackerbau (40%), Gras- & Viehwirtschaft (30%), Siedlung & Verkehr (20%) sowie Obst & Rebbau (5%) und unproduktive Gebiete (5%) geprägt. Das Einzugsgebiet von ZGG05 hingegen ist dominiert durch Siedlung & Verkehr (65%), desweiteren Gras- & Viehwirtschaft (20%), Obst & Rebbau (10%) und Ackerbau (5%).

Die Eawag stellte für die Probenahme die Probenahmegefässe zur Verfügung. Für die organische Spurenanalytik wurde jeweils eine neue Laborglasflasche verwendet, die zuvor bei 500° C ausgeheizt wurde. Die Proben wurden am 9. Mai 2017 durch den Kanton Zug abgefüllt, am selben Tag von der Eawag eingefroren und bei -20° C bis zur Messung gelagert. Bei der Probenahme wurden die Parameter pH, Sauerstoffgehalt, elektrische Leitfähigkeit und Temperatur bestimmt. Der pH lag im neutralen Bereich (ZGG03: 7.4; ZGG05 7.2), der Sauerstoffgehalt betrug 3.5 mg/L (ZGG03) bzw. 6.1 mg/L (ZGG05), die elektrische Leitfähigkeit 400 μ S/cm (ZGG03) bzw. 440 μ S/cm (ZGG05). Die Temperatur betrug 11.3° C (ZGG03) bzw. 11.8° C (ZGG05).

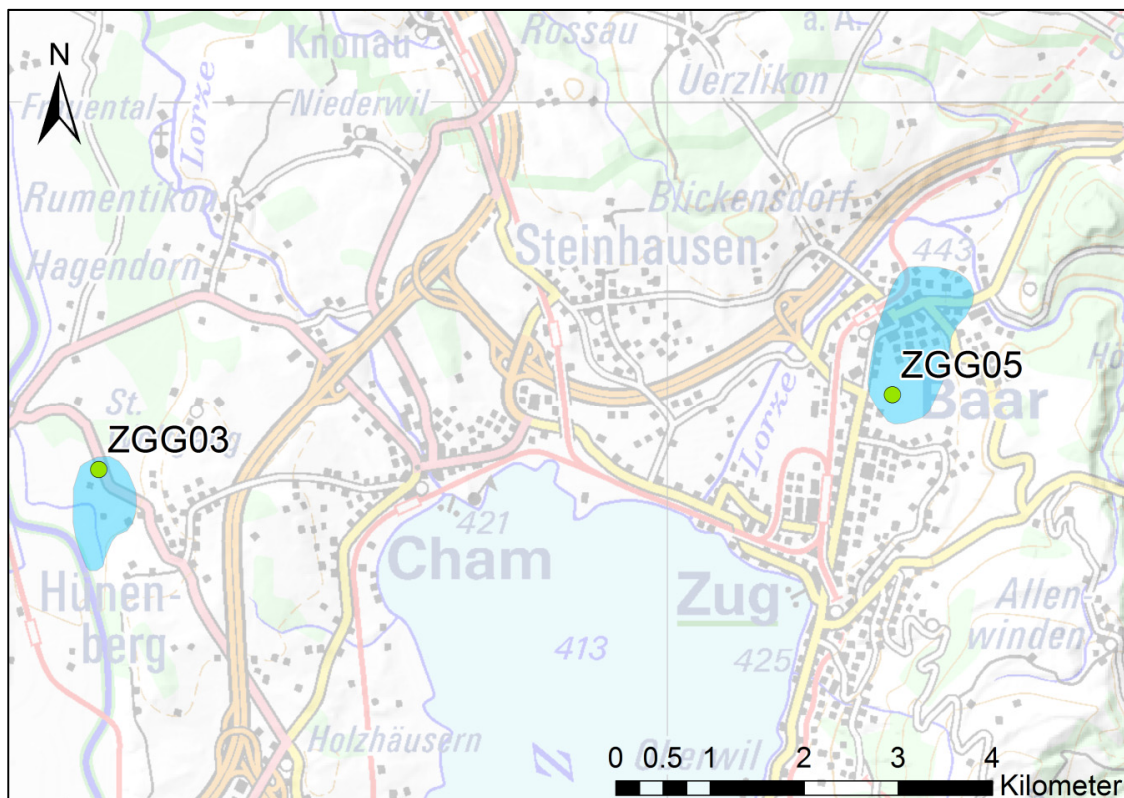


Abbildung 1: Lage der Grundwasserbrunnen mit Einzugsgebiet (blau markiert, Datengrundlage BAFU). Kartenhintergrund: swisstopo DV 5704 000 000, reproduziert mit Bewilligung von swisstopo / JA100119.

3 Probenaufarbeitung und Analytik

3.1 Probenaufarbeitung

Der pH-Wert der aufgetauten Proben lag im neutralen Bereich. Für die Aufarbeitung wurden 60 mL der Proben in die Büchi-Gläser eingewogen. Zur Kompensation von Substanzverlusten und Störungen bei der Analytik wurden die Proben mit 224 isotopenmarkierten internen Standards in einer Konzentration von 100 ng/L bzw. 500 ng/L für die Röntgenkontrastmittel und 10 ng/L für die per- und polyfluorierten Verbindungen (PFCs) gespiked. Zur Kalibration wurden 22 Standards mit 11 verschiedenen Konzentrationen im Bereich von 0.1 bis 1000 ng/L in Reinstwasser hergestellt. Bei den Röntgenkontrastmitteln lag der Kalibrationsbereich aufgrund der geringeren Sensitivität um Faktor 5 höher, die PFCs wurden nur bis 50 ng/L kalibriert. Insgesamt umfassten die Kalibrationsstandards 519 Referenzsubstanzen. Zur Überprüfung der Richtigkeit der Analyse wurden drei Proben mit je 10 ng/L (Röntgenkontrastmittel: 50 ng/L; PFCs: 1 ng/L), drei weitere Proben mit je 100 ng/L aufgestockt (Röntgenkontrastmittel: 500 ng/L; PFCs: 10 ng/L). Zur Bestimmung von Blindwerten bei der Aufarbeitung und Messung wurden neun Laborblindproben analog zu den Grundwasserproben aufgearbeitet und analysiert. Hierzu diente Reinstwasser, welches in den Laborglasflaschen eingefroren war oder am Tag der Probenaufarbeitung abgefüllt wurde.

Um polare Substanzen nicht zu verlieren, wurden die Proben durch Wasserverdampfung mit dem Büchi Syncore[®] Analyst bei 45° C und 20 mbar innerhalb von 4.5 Stunden um Faktor 150 angereichert unter Verwendung der Rückflusseinheit. Die Büchi-Gläser wurden während des Eindampfens nach etwa drei Stunden mit 1.5 mL Methanol-Reinstwasser-Gemisch (15%/85%) rückgespült, um Analytenverluste zu verringern. Nach Einengung der Proben auf ca. 0.3 mL wurden die Konzentrate mit einer Glas-Pasteurpipette in Glasvials überführt, mit Reinstwasser auf 0.4 mL aufgefüllt und bei 10'000 rpm 4 min zentrifugiert. Die Messung erfolgte innerhalb von zwei (positive Ionisierung) bis vier Tagen (negative Ionisierung).

Zur Reinigung der Büchi-Gläser wurde nacheinander Salzsäure, Leitungswasser, deionisiertes Wasser, Reinstwasser und Methanol verwendet.

3.2 Flüssigkeitschromatographie

Zur chromatographischen Trennung wurde eine Umkehrphasen-C18 Säule verwendet, die polare Stoffe gut retardiert (Atlantis[®] T3; 150x3 mm; 3 µm; Waters). Das Laufmittel bestand aus Wasser (Eluent A) und Methanol (Eluent B), jeweils mit 0.1 Vol% konzentrierter Ameisensäure angesäuert. Der Gradient startete mit 100% Eluent A (0-1.5 min). Eluent B wurde innerhalb von 17 min linear auf 95% erhöht und 10 min auf 95% gehalten. Innerhalb von 0.5 min wurde wieder auf 100% Eluent A gewechselt und die Säule reequilibriert. Im negativen Ionisierungsmodus wurde aufgrund der spät eluierenden PFCs die isokratische Phase mit 95% Eluent B um zwei Minuten verlängert. Die Flussrate betrug 0.3 mL/min, die Säulentemperatur 30° C, das Injektionsvolumen 100 µL.

3.3 Massenspektrometrie

Die Proben wurden getrennt in positiver und negativer Ionisierung gemessen. Die Ionisierung erfolgte mittels Electrospray-Ionisation (ESI) bei einer Spray-Spannung von 4 kV bzw. -3 kV. Die Transferkapillarentemperatur betrug 320°C. Für die Detektion wurde ein hochauflösendes Orbitrap-Massenspektrometer verwendet (Q Exactive Plus, Thermo Fisher Scientific Corporation), dessen Auflösung 140'000 bei m/z 200 im Fullscan-Modus (m/z 100-1000) beträgt. Für die datenabhängige Akquisition wurde das Targetion in einem Fenster von m/z 1 isoliert und fragmentiert. Die

MS/MS-Spektren wurden bei einer Auflösung von 17'500 bei m/z 200 gemessen. Die Massengenauigkeit lag unter 4 ppm.

Vor der Messung wurde eine Massenkalkulation mit einer instrumentenspezifischen Kalibrationslösung durchgeführt. Eine sogenannte Inclusion-Liste für das Auslösen einer Fragmentierung und MS/MS-Spektrenaufnahme enthielt die Targets Substanzen mit den jeweiligen Massen der Molekülonen, Polaritäten und Kollisionsenergien basierend auf dem Molekulargewicht. Falls keine Targetmasse der Inclusion-Liste detektiert wurde, wurden die intensivsten Ionen gefiltert und fragmentiert.

3.4 Auswertung Target-Screening

Die Targets wurden mit der Software TraceFinder 4.1 (Thermo Fisher Scientific) identifiziert und quantifiziert. Unterstützend wurde die Xcalibur Software (Thermo Fisher Scientific) für die Identifizierung verwendet. Die Chromatogramme der Zielanalyten wurden mit einem Massenfilter von 5 ppm aus den HRMS-Daten extrahiert. Zur Identifikation wurde die Retentionszeit und das Isotopenmuster der Peaks mit den Referenzstandards bzw. dem theoretischen Isotopenmuster verglichen. Die eindeutige Bestätigung der positiven Befunde erfolgte durch Abgleich der MS/MS-Spektren, welche in den Grundwasserproben gemessen wurden, mit den MS/MS-Spektren der Referenzstandards. Gemäss EU-Kommissions-Richtlinie 2002/657/EG wurden mit diesem Verfahren mindestens 4.5 Identifikationspunkte und damit ein eindeutiger Nachweis erreicht.

Die Quantifizierung beruhte auf dem Verhältnis der Peakflächen des Analyten zur Peakfläche des isotoopenmarkierten internen Standards. Lag kein strukturgleicher interner Standard vor, wurde der interne Standard ausgewählt, der mit dem Analyten innerhalb von ± 1.5 min koeluiert und in der besten relativen Wiederfindung resultiert. Zudem wurden die Konzentrationen mit der mittleren relativen Wiederfindung korrigiert, falls kein strukturgleicher interner Standard verwendet wurde. Zur Abschätzung der Bestimmungsgrenze wurde die Konzentration des kleinsten Kalibrationsstandards mit dem Matrixfaktor multipliziert. Der Matrixfaktor beschreibt die Signalveränderung (i.d.R. Signalreduktion) in der Probenmatrix gegenüber Reinstwasser. Lagen Befunde im Bereich der Bestimmungsgrenze vor, wurden die jeweiligen Peaks einzeln begutachtet. Falls die Peaks als gut quantifizierbar erachtet wurden, wurde die Bestimmungsgrenze entsprechend angepasst.

Die Messunsicherheit wurde abgeleitet aus der Abweichung der gemessenen Konzentration der aufgestockten Proben zur Sollkonzentration der aufgestockten Proben. Es handelt sich dabei um eine grobe Abschätzung.

3.5 Auswertung Suspect-Screening

Nach Bestandsaufnahme der in der Schweiz zugelassenen PSM wurde eine Suspect-Liste mit rund 1000 PSM-Abbauprodukten erstellt. Die PSM-Abbauprodukte stammen überwiegend aus der europäischen PSM-Zulassung. Mit der Software Compound Discoverer 2.1 (Thermo Fisher Scientific) wurde in den Grundwasserproben nach der exakten Masse der Suspects gescreent. Die Treffer wurden basierend auf dem Isotopenmuster, Retentionszeit und MS/MS-Spektren auf Plausibilität überprüft. Für die Top-Kandidaten versuchte die Eawag über die European Crop Protection Association bei den PSM-Herstellern Referenzmaterial zu beziehen. Mittels des Referenzmaterials werden die Top-Kandidaten derzeit überprüft und gegebenenfalls quantifiziert. Weitere methodische Details sind der 2019 angestrebten Publikation zu entnehmen. Die Ergebnisse des Suspect-Screenings sind nicht Gegenstand dieses Berichts.

4 Ergebnisse

Mit der beschriebenen Target-Screening-Methode konnten 519 Substanzen analysiert werden (Abbildung 2). Die Bestimmungsgrenzen lag für 34% der Analyten ≤ 1 ng/L, für 44% zwischen >1 und ≤ 10 ng/L, für 8% zwischen >10 und ≤ 25 ng/L und für 14% >25 ng/L. 30 isobare Analyten konnten mit der chromatographischen Methode nicht getrennt werden und werden als summarische Konzentrationen angegeben. Diese Substanzen wurden in den Zuger Proben nicht nachgewiesen.

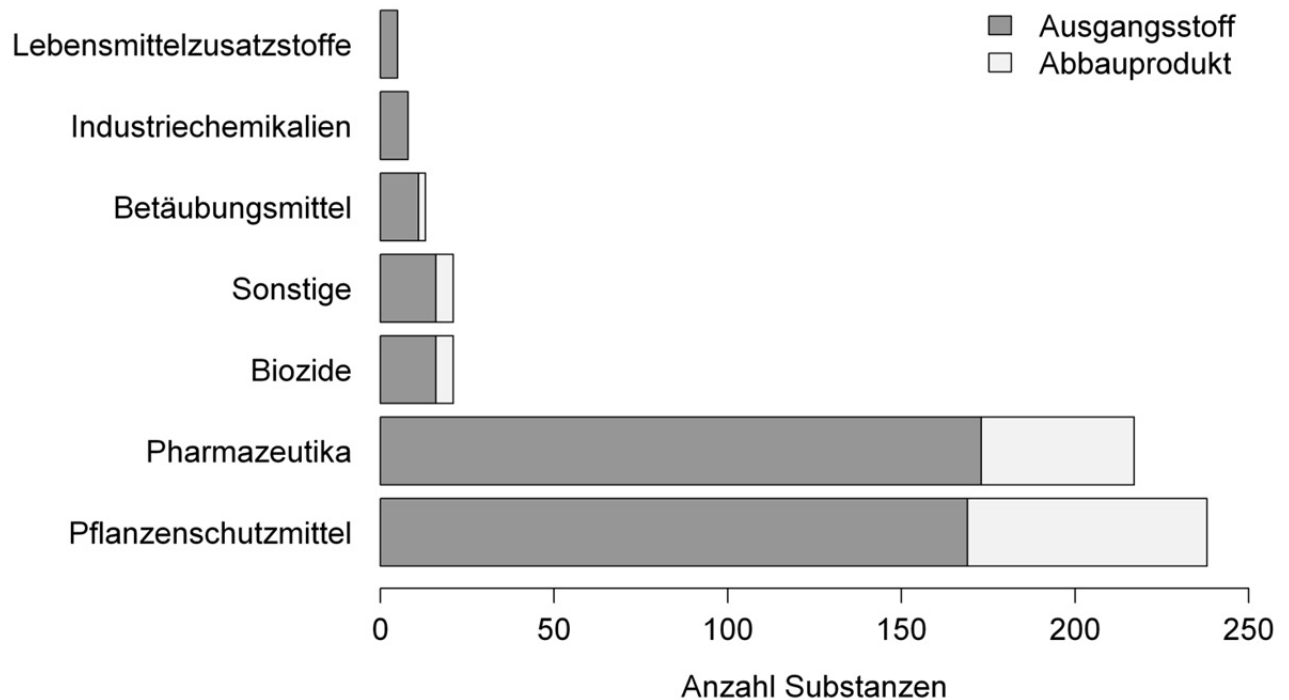


Abbildung 2: Anzahl der Targets aus den verschiedenen Gruppen (Sonstige: Körperpflegeprodukte, Korrosionsschutzmittel, Naturstoffe, PFCs und weitere).

4.1 Befunde

Von den 519 analysierten Substanzen konnten im Grundwasserbrunnen ZGG03 15 Targets bzw. in ZGG05 fünf Targets nachgewiesen werden (Tabelle 1). Die aufsummierten Konzentrationen betragen 92 ng/L (ZGG03) bzw. 28 ng/L (ZGG05). Dominierend waren dabei typische Abwasserindikatorstoffe wie der Süsstoff Acesulfam (11 bzw. 16 ng/L), das Antibiotikum Sulfamethoxazol (1.3 ng/L bzw. <0.5 ng/L) und das Korrosionsschutzmittel Benzotriazol (35 ng/L bzw. <5 ng/L) sowie die Triazin-Herbizide Atrazin und Simazin und deren Abbauprodukte. Die aufsummierte Konzentration an Triazin-Herbiziden und Abbauprodukten betrug in der Messstelle ZGG03 34 ng/L und in der Messstelle ZGG05 11 ng/L. Das Chloridazon-Abbauprodukt Chloridazon-methyl-desphenyl, dessen Konzentrationen in mehreren Schweizer Grundwasserkörpern im oberen ng/L-Bereich liegen, wurde im Grundwasserbrunnen ZGG03 nur in Spuren nachgewiesen (0.8 ng/L) bzw. lag in ZGG05 unterhalb der Bestimmungsgrenze von 0.5 ng/L.

Im Vergleich zu den 29 Proben des BAFU-Projektes handelt es sich bei den Proben des Kantons Zug um verhältnismässig unbelastete Grundwässer. Jedoch ist hier zu betonen, dass im Rahmen des BAFU-Projektes gezielt Messstellen ausgewählt wurden, die bereits im Vorfeld aufgrund hoher Konzentrationen und/oder einer grossen Anzahl an organischen Spurenstoffen auffällig waren. Die aufsummierten Konzentrationen der Zuger Proben liegen um den Faktor 10 bzw. 30 unterhalb der durchschnittlichen Summenkonzentration der BAFU-Proben (Median und arithmetisches Mittel). Die Anzahl der Befunde in den BAFU-Proben liegt im Mittel bei 20 bzw. 22 (Median bzw. arithmeti-

ches Mittel). Das Triazin-Abbauprodukt mit der höchsten Konzentration (Atrazin-desethyl-desisopropyl) wurde in 28 der 29 Proben des BAFU-Projektes nachgewiesen mit einer durchschnittlichen Konzentration von 30 ng/L (Median: 17 ng/L). Im Vergleich zu den BAFU-Proben weist die Probe ZGG03 eine hohe Konzentration an Asulam auf. Lediglich eine der 29 BAFU-Proben zeigt höhere Konzentrationen als die Probe ZGG03. Asulam wird zur Bekämpfung von Farnen und Ampfer eingesetzt. Keines der nachgewiesenen Pflanzenschutzmittel überschreitet die Anforderungen der geltenden Gewässerschutzverordnung (Anhang 2) an die Gewässerqualität von 100 ng/L.

Tabelle 1: Konzentration der Befunde in den Messstellen ZGG03 und ZGG05 (BG = Bestimmungsgrenze).

Analyt	Wirkstoffgruppe	BG (ng/L)	Messun- sicherheit* (%)	ZGG03 (ng/L)	ZGG05 (ng/L)
Acesulfam	Lebensmittelzusatzstoff	0.5	20	1.1	16
Asulam	PSM	1	40	8.4	<BG
Atrazin	PSM	0.5	20	1.7	<BG
Atrazin-2-hydroxy	PSM-Abbauprodukt	0.5	20	4.5	<BG
Atrazin-desethyl	PSM-Abbauprodukt	0.5	20	4.7	2.1
Atrazin-desethyl-2-hydroxy (Prometon-hydroxy-desisopropyl)	PSM-Abbauprodukt	0.5	40	1.1	<BG
Atrazin-desisopropyl	PSM-Abbauprodukt	0.5	20	0.9	<BG
Atrazin-desethyl-desisopropyl	PSM-Abbauprodukt	0.3	40	17	7.9
Benzotriazol	Korrosionsschutzmittel	5	20	35	<BG
Candesartan	Pharmazeutika	0.5	20	<BG	0.7
Chloridazon-methyl-desphenyl	PSM-Abbauprodukt	0.5	20	0.8	<BG
Metamitron	PSM	0.5	20	0.6	<BG
Metamitron-desamino	PSM-Abbauprodukt	0.5	40	1	<BG
Simazin	PSM	0.1	20	1	1.4
Sulfamethoxazol	Pharmazeutika	0.5	20	1.3	<BG
Terbutylazin-desethyl	PSM-Abbauprodukt	0.5	40	3.3	<BG

* Bei der angegebenen Messunsicherheit handelt es sich um eine grobe Abschätzung aus der Abweichung der gemessenen Konzentration der aufgestockten Proben zur Sollkonzentration der aufgestockten Proben.

4.2 Hinweise zu analytischen Besonderheiten

Das Target Metolachlor-ESA zeigte innerhalb der Analysesequenz eine grosse Retentionszeitverschiebung, so dass die Substanz nur in einem Drittel der Proben ausgewertet werden konnte. Die Zuger Proben konnten bezüglich Metolachlor-ESA nicht analysiert werden. Metolachlor-ESA wurde in der Mehrheit der auswertbaren Proben nachgewiesen, z.T. in Konzentrationen >100 ng/L.

Im Zeitraum nach der Messung erwarb die Eawag 19 weitere PSM-Referenzstandards, für welche anschliessend eine Einpunktkalibrierung durchgeführt wurde. Diese Targetsubstanzen wurden in den Grundwasserproben nicht nachgewiesen (<10 ng/L) und sind im Anhang in der Spalte „Bemerkung“ markiert („Einpunktkalibrierung“).

5 Zusammenfassung

Ziel des Projektes war es, die Belastung zweier Proben der Grundwasserbrunnen ZGG03 und ZGG05 mit organischen Spurenstoffen möglichst umfassend zu untersuchen. Hierzu wurde eine Multikomponentenmethode, die speziell auf mobile und damit grundwassergängige Substanzen ausgelegt ist, angewandt. Die Analysemethode erfasste 519 Analyten, wobei 78% der Analyten eine Bestimmungsgrenze ≤ 10 ng/L aufwiesen. Das Spektrum der Targetsubstanzen umfasste Wirkstoffe und Abbauprodukte, welche vorwiegend den Wirkstoffgruppen Pharmaka, PSM, Biozide und Industriechemikalien angehören. Im Vergleich zu weiteren Messstellen des NAQUA-Programms, welche mit der gleichen Methode untersucht wurden, erwiesen sich die Proben des Kantons Zug als gering belastet. Die Anforderungen an die Gewässerqualität gemäss Gewässerschutzverordnung Anhang 2 werden eingehalten.

Anhang

Die angefügten Tabellen zeigen alle analysierten Targets Substanzen mit Bestimmungsgrenze. Diese Daten wurden dem Kanton Zug auch als Excel-Datei übermittelt. Bei der angegebenen Messunsicherheit handelt es sich um eine grobe Abschätzung aus der Abweichung der gemessenen Konzentration der aufgestockten Proben zur Sollkonzentration der aufgestockten Proben.

ID Eawag	Name	Summenformel	SMILES	CAS_Nr	Wirkstoffgruppe	Klassifizierung	Metabolit von	Bemerkung	Nachweis	BG (ng/L)	Messungssicherheit* (%)	ZGG03 (ng/L)	ZGG05 (ng/L)
2822	Amphetamin	C9H13N	CC(CC1=C	300-62-9	Betäubungsmittel	Ausgangsstoff			nein	6	40		
2770	Aspartam	C14H18N2O5	C([C@@H](22839-47-0	Lebensmittelzusatzstoff	Ausgangsstoff			nein	300	40		
156	Asulam	C8H10N2O4S1	c1(S)(NC(OC	3337-71-1	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			ja	1	40	8.4	
3012	Atazanavir	C38H52N6O7		198904-31-3	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	500	40		
169	Atenolol	C14H22N2O3	CC(C)NCC(29122-68-7	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	2	20		
2670	Atenolol-desisopropyl	C11H16N2O3	NC(=O)Cc1c	81346-71-6	Pharmazeutika	Metabolit	Atenolol		nein	10	40		
697	Atenololsaeure (Metoprololsaeure)	C14H21N1O4	CC(C)NCC(56392-14-4	Pharmazeutika	Metabolit	Atenolol/Metoprolol		nein	2	40		
2846	Atomoxetin	C17H21NO	c1c(ccc1)C	83015-26-3	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	20		
2810	Atorvastatin	C33H35FN2O5	c1(c(n(CC)C	134523-03-8	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	100	40		
157	Atraton (Isobare zu Prometon-Hydroxy)	C9H17N5O	COc1nc(NC	1610-17-9	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
288	Atrazin	C8H14Cl1N5	c1(nc(nc(n1	1912-24-9	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			ja	0.5	20	1.7	
279	Atrazin-2-Hydroxy	C8H15N5O	c1(nc(nc(n1	2163-68-0	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Atrazine		ja	0.5	20	4.5	
309	Atrazin-Desethyl	C6H10ClN5	c1(nc(nc(n1	6190-65-4	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Atrazine		ja	0.5	20	4.7	2.1
277	Atrazin-desethyl-2-hydroxy (Prometon-Hydroxy-Desisopropyl)	C6H11N5O	n(c(nc1NC(19988-24-0	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Prometon/Atrazin		ja	0.5	40	1.1	
287	Atrazin-Desisopropyl	C5H8ClN5	c1(nc(nc(n1	1007-28-9	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Atrazine		ja	0.5	20	0.9	
3393	Atrazine-desethyl-desisopropyl	C3H4ClN5	C1(=NC(=N	3397-62-4	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Atrazine		ja	0.3	40	17	7.9
3358	Atrazine-desisopropyl-2-hydroxy	C5H9N5O	CCNC1=NC	7313-54-4	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Atrazine		nein	1	40		
3334	Atropine	C17H23NO3		51-55-8	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	40		
89	Azoxystrobin	C22H17N3O5	N#Cc1cccc	131860-33-8	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
2734	Azoxystrobinsaeure	C21H15N3O5	O=C(O)C(=	1185255-09-7	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Azoxystrobin		nein	1	40		
3035	Benalaxyl	C20H23NO3	O=C(N(c1c	98243-83-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	2	40		
253	Bentazon	C10H12N2O3S	c12c(C(N(C	25057-89-0	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.1	20		
3055	Benthiavalicarb-isopropyl	C18H24FN3O3S		177406-68-7	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Benthiavalicarb		nein	10	40		
301	Benzisothiazolin-3-on (BIT)	C7H5NOS	c12c(cccc2	2634-33-5	Biozid	Ausgangsstoff			nein	10	40		
166	Benzotriazol	C6H5N3	c12c(nn[nH]	95-14-7	Korrosionsschutzmittel	Ausgangsstoff			ja	5	20	35	
2823	Benzoylcegonin	C16H19NO4	O(C(=O)c1c	519-09-5	Betäubungsmittel	Metabolit	Kokain		nein	0.5	20		
209	Bezafibrat	C19H20ClNO4	c1(C(NC(Cc	41859-67-0	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	2	20		
2809	Bicalutamid	C18H14F4N2O4S	c1(c(ccc(c1	90357-06-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	15	20		
109	Bifenox-Saeure	C13H7Cl2NO5	C1=CC(=C(53774-07-5	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Bifenox		nein	4	40		
3013	Bisoprolol	C18H31NO4		104344-23-2	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
3479	Bixafen	C18H12Cl2F3N3O	c1cc(c(cc1c	581809-46-3	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	4	40		
2938	Boscalid	C18H12Cl2N2O	c1ccc(c(c1c	188425-85-6	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	1	20		
3656	Bromadiolone	C30H23BrO4		28772-56-7	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff		Einpunktkalibrierung	nein	10	40		
266	Bromazil	C9H13BrN2O2	n1(c(c(c(C	314-40-9	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	2	40		
24	Bromoxynil	C7H3Br2N1O1	c1(cc(c(O)c	1689-84-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	15	40		
3700	Bromuconazol	C13H12BrCl2N3O		116255-48-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff		Einpunktkalibrierung	nein	10	40		
3322	Bufexamac	C12H17NO3		2438-72-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	15	40		
3508	Bupirimate	C13H24N4O3S	CCCCC1=C	41483-43-6	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	10	20		
3305	Bupivacaine	C18H28N2O		2180-92-9	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
3509	Buprofezin	C16H23N3OS	O=C2N(C(=	69327-76-0	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	35	40		
2804	Candesartan	C24H20N6O3	c1(ccccc1c	139481-59-7	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			ja	0.5	20		0.7
2845	Capecitabin	C15H22FN3O6	FC=1C(=N	154361-50-9	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	3	40		
194	Carbamazepin	C15H12N2O	N1(c2c(cccc	298-46-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	40		
2701	Carbamazepin-10-11-dihydro-10-11-dihydroxy	C15H14N2O3	c12[C@@H]	58955-93-4	Pharmazeutika	Metabolit	Carbamazepine		nein	1	40		
916	Carbamazepin-10-11-epoxid	C15H12N2O2	NC(=O)N2c	36507-30-9	Pharmazeutika	Metabolit	Carbamazepine		nein	0.4	40		
278	Carbendazim	C9H9N3O2	c12c(cccc1	10605-21-7	Biozid	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
136	Carbetamid	C12H16N2O3	CCNC(=O)C	16118-49-3	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	7	40		
3040	Carbofuran	C12H15NO3	CC2(C)CC1	1563-66-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	8	40		
3512	Carboxin	C12H13NO2S	C1(C(Nc2cc	5234-68-4	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff		Einpunktkalibrierung	nein	10	40		
3327	Carisoprodol	C12H24N2O4		78-44-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	3	40		
3335	Cathine	C9H13NO		492-39-7	Betäubungsmittel	Ausgangsstoff			nein	30	40		
3015	Celiprolol	C20H33N3O4		57470-78-7	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
2772	Cetirizin	C21H25ClN2O3	N1([C@@H]	83881-52-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	3	20		

ID Eawag	Name	Summenformel	SMILES	CAS_Nr	Wirkstoffgruppe	Klassifizierung	Metabolit von	Bemerkung	Nachweis	BG (ng/L)	Messunsicherheit* (%)	ZGG03 (ng/L)	ZGG05 (ng/L)
3021	Flufenaminsaeure	C14H10F3NO2		530-78-9	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.3	40		
3483	Fluopicolide	C14H8Cl3F3N2O	Clc2cccc(Cl)2c3cc(F)(F)F	239110-15-7	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	2	40		
3484	Fluopyram	C16H11ClF6N2O	c1(ccccc1C)C(F)(F)F	658066-35-4	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	3	40		
3058	Fluoxastrobin	C21H16ClF4NO5		361377-29-9	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	2	40		
334	Fluoxetin	C17H18F3NO	c1([C@@H])c2cc(F)(F)F	54910-89-3	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	100	20		
3485	Flupyrsulfuron-methyl	C15H13F3N5O7S	COc1=CC(=O)C(F)(F)F	144740-53-4	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	100	40		
3549	Flurochloridon	C12H10Cl2F3NO	FC(F)(F)c1cc(F)cc1	61213-25-0	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	25	40		
134	Fluroxypyr (freie Saeure)	C7H5Cl2F2NO3	c1(c(c(c(Cl)Cl)F)F)O	69377-81-7	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	5	40		
97	Flusilazol	C16H15F2N3Si	n1(cncn1)C(F)(F)F	85509-19-9	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	4	40		
3524	Flutolanil	C17H16F3NO2	CC(C)OC1=CC=C(C=C1)F	66332-96-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	20	40		
3136	Fluvastatin	C24H26FNO4	O=C(O)C(C)C(F)(F)F	93957-54-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	25	40		
4105	Fluxapyroxad	C18H12F5N3O	CN1C=C(C)C(F)(F)F	907204-31-3	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff		Einpunktkalibrierung	nein	10	40		
2778	Foramsulfuron	C17H20N6O7S	c1(nc(cc(OC)N)N)S(=O)(=O)N	173159-57-4	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
3525	Fuberidazole	C11H8N2O	n2c1c(cccc1)N	3878-19-1	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff		Einpunktkalibrierung	nein	10	40		
2600	Furosemid	C12H11ClN2O5S	NS(=O)(=O)C1=CC=C(C=C1)S	54-31-9	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
2561	Gabapentin	C9H17NO2	NCC1(CC)CC1	60142-96-3	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	20	20		
660	Galaxolidon	C18H24O2	CC2(C)C1CC2C(C)C1	256393-37-0	Körperpflegemittel	Metabolit	Galaxolid		nein	50	40		
2603	Gemcitabin	C9H11F2N3O4	NC1=NC(=C)N(C1)F	95058-81-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
3265	Genistein	C15H10O5		446-72-0	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	6	40		
3253	Guanylurea	C2H6N4O	O=C(N=C)N	926-72-7	Pharmazeutika	Metabolit	Metformin		nein	100	20		
3566	Haloperidol	C21H23ClFNO2		52-86-8	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	2	40		
256	Hexazinon	C12H20N4O2	n1(C2CCCC2)N	51235-04-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	2	20		
2610	Hydrochlorothiazid	C7H8ClN3O4S2	NS(=O)(=O)C1=CC=C(C=C1)S	58-93-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	1	20		
3332	Hydrocodone	C18H21NO3		125-29-1	Betäubungsmittel	Ausgangsstoff			nein	35	40		
3201	Hydrocortison	C21H30O5	O=C4\C=C2CC(=O)CC4	50-23-7	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	8	40		
203	Ibuprofen	C13H18O2	c1([C@@H])c2cc(F)(F)F	15687-27-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	20		
2683	Ifosamid	C7H15Cl2N2O2P	ClCCN(P(=O)(Cl)Cl)O	3778-73-2	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.4	40		
2939	Imazamox	C15H19N3O4	O=C(O)C1CC1	114311-32-9	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
2709	Imidacloprid	C9H10ClN5O2	Cl-c1ncc1CN	138261-41-3	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	2	20		
3059	Imidacloprid-desnitro	C9H11ClN4O	Clc1nccc1	115970-17-7	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Imidacloprid		nein	45	40		
2956	Imidacloprid-urea	C9H10ClN3O	Clc2nccc2N	120868-66-8	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Imidacloprid		nein	0.5	40		
992	Iminostilben	C14H11N1	c1cc2Nc3ccc2cc1	256-96-2	Pharmazeutika	Metabolit	Carbamazepine		nein	55	40		
207	Indomethacin	C19H16ClNO4	COc1=CC(=O)C(F)(F)F	53-86-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	20		
3487	Iodosulfuron-methyl	C14H14IN5O6S	CC1=NC(=O)N(C1)S(=O)(=O)N	144550-06-1	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	2	40		
231	Iohexol	C19H26I3N3O9	OCC(O)CN(C)I	66108-95-0	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	25	40		
240	Iomeprol	C17H22I3N3O8	Ic1c(c(I)c(I)c(I)F)F	78649-41-9	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	100	40		
241	Iopamidol	C17H22I3N3O8	CC(O)C(=O)C(F)(F)F	62883-00-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	9	40		
3125	Ioversol	C18H24I3N3O9	CC1=CC(=O)C(F)(F)F	87771-40-2	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	75	40		
342	Ioxitalaminsaeure	C12H11I3N2O5	CC(=O)NC1=CC=C(C=C1)I	28179-44-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	25	40		
87	Ioxynil	C7H3I2NO	c1(cc(c(O)c1)N	1689-83-4	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	8	40		
305	IPBC (Iodocarb)	C8H12I2N1O2	N(C)(OCC#C)I	55406-53-6	Biozid	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
2936	Iprovalicarb	C18H28N2O3	CC(C)OC(=O)N	140923-17-7	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
2774	Irbesartan	C25H28N6O	C12(C(N)CC1)N	138402-11-6	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	10	40		
302	Irgarol	C11H19N5S1	c1(nc(NC)C)S	28159-98-0	Biozid	Ausgangsstoff			nein	1	20		
283	Irgarol-desccyclopropyl	C8H15N5S	S(C)-c(ncn1)S	30125-65-6	Biozid	Metabolit	Irgarol		nein	1	40		
286	Isoproturon	C12H18N2O1	c1(ccc(C)C)O	34123-59-6	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
285	Isoproturon-didemethyl 1-(4-Isopropenyl)urea	C10H14N2O	N(C(=O)N)C	56046-17-4	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Isoproturon		nein	2	40		
304	Isoproturon-monomethyl 1-(4-Isopropenyl)-3-methylurea	C11H16N2O	N(C(=O)Nc1)C	34123-57-4	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Isoproturon		nein	0.5	40		
2826	Ketamin	C13H16ClNO	c1([C@@H])cc(F)cc1	6740-88-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
205	Ketoprofen	C16H14O3	c1cc(ccc1)C(F)(F)F	22071-15-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	40		
154	Kresoxim-methyl	C18H19NO4	Cc1cccc1C(F)(F)F	143390-89-0	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	4	60		
3463	Kresoxim-methyl acid	C17H17NO4		1007364-30-8	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Kresoxim-methyl		nein	4	40		
2676	Lamotrigin	C9H7Cl2N5	Cl-c(ccc1)c(Cl)cc1	84057-84-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		

ID Eawag	Name	Summenformel	SMILES	CAS_Nr	Wirkstoffgruppe	Klassifizierung	Metabolit von	Bemerkung	Nachweis	BG (ng/L)	Messungssicherheit* (%)	ZGG03 (ng/L)	ZGG05 (ng/L)
2949	Lenacil	C13H18N2O2	O=C1C3=C	2164-08-1	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	1	40		
2857	Levamisol	C11H12N2S	c1([C@H]2C	14769-73-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	40		
2564	Levetiracetam	C8H14N2O2	[H]C(CC)N	1102767-28-2	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	8	40		
2572	Lidocain	C14H22N2O	CCN(CC)CC	137-58-6	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
3291	Linezolid	C16H20FN3O4		165800-03-3	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	3	40		
160	Linuron	C9H10Cl2N2O2	c1(cc(c(Cl)c	330-55-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	3	20		
3138	Lorazepam	C15H10Cl2N2O2	Clc3cccc3C	846-49-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	4	40		
2794	Losartan	C22H23ClN6O	Clc1nc(n(c1	114798-26-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	25	20		
3489	Maleic hydrazide	C4H4N2O2	c1cc(=O)[nH	123-33-1/10071-13-3	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	25	60		
3061	Mandipropamid	C23H22ClN4O		374726-62-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	4	40		
261	MCPA	C9H9ClO3	c1(c(cc(Cl)c	94-74-6	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	3	20		
2710	MCPB	C11H13ClO3	c1(c(cc(Cl)c	94-81-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	45	20		
308	Mecoprop	C10H11ClO3	c1(c(cc(Cl)c	93-65-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	1	20		
3022	Medazepam	C16H15ClN2		2898-11-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	60		
208	Mefenaminsaeure	C15H15N1O2	c1(c(ccc1)C	61-68-7	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	2	20		
3169	Mefenpyr-diethyl	C16H18Cl2N2O4	Clc1cc(Cl)c	135590-91-9	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	35	40		
3151	Melamin	C3H6N6	c1(nc(nc(n1	108-78-1	Industriechemikalie	Ausgangsstoff			nein	5	40		
3351	Memantine	C12H21N		19982-08-2	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
3062	Mepanipyrin	C14H13N3		110235-47-7	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.4	40		
3331	Meperidine	C15H21N2O		57-42-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
2827	Mephedron (4-Methylmethcathinon)	C11H15NO	Cc1ccc(cc1	1189805-46-6	Betäubungsmittel	Ausgangsstoff			nein	5	40		
3126	Mepivacaine	C15H22N2O	O=C(Nc1c(c	96-88-8	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
3290	Meptazinol	C15H23NO		54340-58-8	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
3170	Mesosulfuron-methyl	C17H21N5O9S2	O=C(Nc1nc	74223-64-6	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	4	40		
258	Mesotrion	C14H13NO7S	C1(C(C(CCC	104206-82-8	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	4	20		
263	Mesotrion-MNBA	C8H7NO6S	C(c1c(cc(cc	110964-79-9	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Mesotrion		nein	8	40		
135	Metalaxyl	C15H21N4O4	N(c1c(cccc1	57837-19-1	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
58	Metamitron	C10H10N4O1	cccc1C(=N	41394-05-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			ja	0.5	20	0.6	
4	Metamitron-Desamino	C10H9N3O1	c(ccc1C(=N	36993-94-9	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Metamitron		ja	0.5	40	1	
3127	Metaxalone	C12H15NO3	CC1=CC(OC	1665-48-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	20	40		
269	Metazachlor	C14H16ClN3O	N(c1c(cccc1	67129-08-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	4	20		
705	Metazachlor-ESA	C14H17N3O4S	O=C(N(C1=C	172960-62-2	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Metazachlor		nein	5	40		
706	Metazachlor-OXA	C14H15N3O3	O=C(C(O)=C	1231244-60-2	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Metazachlor		nein	5	40		
3171	Metconazole	C17H22ClN3O	Clc1ccc(cc1	125116-23-6	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
2828	Methadon	C21H27NO	CCC(=O)C(C	76-99-3	Betäubungsmittel	Ausgangsstoff			nein	7	20		
2829	Methamphetamine	C10H15N	c1ccc(c1)C	537-46-2	Betäubungsmittel	Ausgangsstoff			nein	5	20		
3096	Methidathion	C6H11N2O4P3S	O=C1SC(=N	950-37-8	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	5	40		
2937	Methiocarb	C11H15NO2S	O=C(Oc1cc	2032-65-7	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	15	20		
2942	Methomyl	C5H10N2O2S	C/C(=NOC	16752-77-5	Biozid	Ausgangsstoff			nein	1	20		
2935	Methoxyfenozid	C22H28N2O3	O=C(c1cc(cc	161050-58-4	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
3285	Methsuximide	C12H13NO2		77-41-8	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	35	40		
2920	Methylperfluorctansulfonamidessigsaeure (N-MeFOSAA)	C11H6F17NO4S	FC(F)(C(F)(n.a.	PFC	Ausgangsstoff			nein	0.5	60		
2621	Methylprednisolon	C22H30O5	[H]C@@(12	83-43-2	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	7	20		
2781	Metoclopramid	C14H22ClN3O2	c1(cc(C(=O)	7232-21-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	1	40		
268	Metolachlor	C15H22ClNO2	c1(N([C@@	51218-45-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
502	Metolachlor-ESA	C15H23N1O5S1	O=S(O)(CC	171118-09-5	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Metolachlor	nicht auswertbar	nein	35	40	n.b.	n.b.
67	Metolachlor-Morpholinon	C14H19N1O2	C1C(N(C(C	120375-14-6	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Metolachlor		nein	25	40		
265	Metolachlor-OXA	C15H21N1O4	CC1=CC=C	152019-73-3	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Metolachlor		nein	4	40		
172	Metoprolol	C15H25NO3	COCCC1=C	37350-58-6	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	1	20		
3172	Metosulam	C14H13Cl2N5O4S	Clc1c(ccc(C	139528-85-1	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	2	40		
3204	Metoxuron	C10H13ClN2O2	Clc1cc(ccc1	19937-59-8	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.4	40		
3063	Metrafenone	C19H21BrO5	BrC2ccc(OC	220899-03-6	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	15	20		
90	Metribuzin	C8H14N4O1S1	S(C)C(=NN	21087-64-9	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		

ID Eawag	Name	Summenformel	SMILES	CAS_Nr	Wirkstoffgruppe	Klassifizierung	Metabolit von	Bemerkung	Nachweis	BG (ng/L)	Messungssicherheit* (%)	ZGG03 (ng/L)	ZGG05 (ng/L)
93	Metribuzin-Diketo (DK)	C7H12N4O2	O=C(NN=C	56507-37-0	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Metribuzin		nein	40	40		
197	Metronidazol	C6H9N3O3	CC1=NC=C	443-48-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
128	Metsulfuron-methyl	C14H15N5O6S	c1(c(cccc1	74223-64-6	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.3	20		
3010	Mexiletine	C11H17NO	O(c1c(cccc1	5370-01-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	6	40		
3274	Mianserin	C18H20N2		21535-47-7	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	3	40		
3278	Mianserin-N-Oxide	C18H20N2O		62510-46-7	Pharmazeutika	Metabolit	Mianserin		nein	2	40		
3023	Midazolam	C18H13ClFN3		59467-64-0	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	40		
2675	Moclobemid	C13H17ClN2O2	Cl-c(ccc1C(=	71320-77-9	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
3842	Mono(2-acryloyloxyethyl)-succinate	C9H12O6	OC(=O)CC	50940-49-3	Sonstige	Ausgangsstoff			nein	75	40		
3173	Monolinuron	C9H11ClN2O2	Clc1ccc(NC	1746-81-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	1	20		
161	Monuron	C9H11ClN2O	C(N(C)C)Nc	150-68-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.4	40		
2957	Myclobutanil	C15H17ClN4	Clc1ccc(cc1	88671-89-0	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
2808	Mycophenolsaeure	C17H20O6	c12c(c(c(C(=	24280-93-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	9	40		
641	N-(4-Aminophenyl)-N-methyl-acetamid	C9H12N2O	Nc1ccc(cc1)	119-63-1	Industriechemikalie	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
248	N4-Acetyl-Sulfadiazin	C12H12N4O3S	c1nc(NS(c2c	127-74-2	Pharmazeutika	Metabolit	Sulfadiazin		nein	3	40		
245	N4-Acetyl-Sulfadimethoxin	C14H16N4O5S	C(C)(=O)Nc	24341-30-8	Pharmazeutika	Metabolit	Sulfadimethoxin		nein	4	40		
247	N4-Acetyl-Sulfamethazin	C14H16N4O3S	O=S(=O)(c1	100-90-3	Pharmazeutika	Metabolit	Sulfamethazin		nein	2	60		
299	N4-Acetyl-Sulfamethoxazol	C12H13N3O4S	c1(ccc(cc1)N	21312-10-7	Pharmazeutika	Metabolit	Sulfamethoxazole		nein	2	20		
249	N4-Acetyl-Sulfathiazol	C11H11N3O3S2	c1(ccc(NC(=	127-76-4	Pharmazeutika	Metabolit	Sulfathiazol		nein	5	20		
2830	Naltrexon	C20H23NO4	c12[C@]34[C	16590-41-3	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	3	40		
120	Napropamid	C17H21NO2	c12c(O)[C@	115299-99-7	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
202	Naproxen	C14H14O3	c12c(cc(OC	22204-53-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	20	20		
3289	Nateglinide	C19H27NO3		105816-04-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	25	40		
3398	N-Bisdesmethyl Tramadol	C14H21NO2		541505-91-3	Pharmazeutika	Metabolit	Tramadol		nein	3	40		
3565	N-Desmethyltramadol	C15H23NO2		1018989-94-0	Pharmazeutika	Metabolit	Tramadol		nein	0.5	40		
1034	N-Desvenlafaxin	C16H25N1O2	OC1(CCCC	149289-30-5	Pharmazeutika	Metabolit	Venlafaxin		nein	1	20		
2815	Neotam	C20H30N2O5	C(=O)(OC)C	165450-17-9	Lebensmittelzusatzstoff	Ausgangsstoff			nein	10	20		
129	Nicosulfuron	C15H18N6O6S	O=C(Nc1nc	111991-09-4	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
638	N-Methylacetanilid	C9H11NO	C1C1=C(N)C	579-10-2	Industriechemikalie	Ausgangsstoff			nein	40	40		
3004	N-Methyl-N-propargylbenzylamine	C11H13N	C#CCN(C)C	555-57-7	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	10	40		
2658	N-N-Didesvenlafaxin	C15H23N1O2	COC1=CC=	93413-77-5	Pharmazeutika	Metabolit	Venlafaxin		nein	1	20		
213	N-N-diethyl-3-methylbenzamid (DEET)	C12H17NO	c1(C(N(CC)C	134-62-3	Biozid	Ausgangsstoff			nein	10	20		
2784	NN-Dimethyldicyclamin N-oxid	C12H27NO	N(C)(CCCC	2605-79-0	Biozid	Ausgangsstoff			nein	5	40		
340	N-N-dimethyl-N-(4-methylphenyl)-sulfamid	C9H14N2O2S	O=S(=O)(Nc	66840-71-9	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Tolyfluamid		nein	3	40		
341	N-N-Dimethylsulfamid	C2H8N2O2S	S(=O)(=O)(N	3984-14-3	Biozid	Metabolit	Tolyfluamid/Dichlofluamid		nein	5	60		
3234	NOA407475	C8H11ClN4O5			Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Thiamethoxame		nein	1	40		
2657	N-O-Didesvenlafaxin	C15H23N1O2	OC1(CCCC	135308-74-6	Pharmazeutika	Metabolit	Venlafaxin		nein	2	20		
3277	Normianserin	C17H18N2		76134-77-5	Pharmazeutika	Metabolit	Mianserin		nein	5	40		
3024	Noscapin	C22H23NO7		128-62-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	35	40		
1053	O-Desvenlafaxin	C16H25N1O2	c1cc(ccc1O	93413-62-8	Pharmazeutika	Metabolit	Venlafaxin		nein	2	20		
3323	Olopatadine	C21H23NO3		113806-05-6	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
3099	Oryzalin	C12H18N4O6S	[O-][N+](=O	19044-88-3	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
658	Osetamivir	C16H28N2O4	CCOC(=O)C	196618-13-0	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	1	40		
659	Osetamivir-carboxylat	C14H24N2O4	CCC(CC)OC	187227-45-8	Pharmazeutika	Metabolit	Osetamivir		nein	0.6	40		
3207	Oxacillin	C19H19N3O5S	CC1=C(C(=	166-79-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	65	40		
3490	Oxasulfuron	C17H18N4O6S	O=C(OC1C(=	144651-06-9	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	2	40		
2743	Oxazepam	C15H11ClN2O2	c12C(c3ccc	604-75-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	4	20		
2858	Oxcarbazepin	C15H12N2O2	c12N(c3c(cc	28721-07-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	3	20		
3128	Oxprenolol	C15H23NO3	O(c1cccc1	6452-71-7	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	3	40		
3025	Oxybutynin	C22H31NO3		1508-65-2	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	40	40		
243	Paracetamol (3-Acetamidophenol)	C8H9NO2	CC(=O)NC1	103-90-2	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	20	40		
3288	Penciclovir	C10H15N5O3		39809-25-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	40		
3107	Penconazol	C13H15Cl2N3	Clc1ccc(cC	66246-88-6	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		

ID Eawag	Name	Summenformel	SMILES	CAS_Nr	Wirkstoffgruppe	Klassifizierung	Metabolit von	Bemerkung	Nachweis	BG (ng/L)	Messsicherheit* (%)	ZGG03 (ng/L)	ZGG05 (ng/L)
4102	Penoxsulam	C16H14F5N5O5S	COC1=CN=C2	219714-96-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff		Einpunktkalibrierung	nein	10	40		
2726	Perfluorbutansulfonsaeure (PFBS)	C4F9HSO3	C(C)(C)(F)C	29420-49-3	PFC	Ausgangsstoff			nein	7	40		
3026	Perindopril	C19H32N2O5		82834-16-0	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	3	40		
700	Pethoxamid	C16H22ClNO2	C(C)(=O)N(C)C	106700-29-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
338	Phenazon (Antipyrin- ID 2519)	C11H12N2O	CN1N(C=O)C	60-80-0	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	1	20		
3339	Phenylephrine	C9H13NO2		59-42-7	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	90	40		
2991	Picaridin (Icaridin)	C12H23NO3	O=C(O)C(C)C	119515-38-7	Biozid	Ausgangsstoff			nein	5	40		
3532	Picloram	C6H3Cl3N2O2	Clc1c(N)c(Cl)c(Cl)c1	1918-02-1	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff		Einpunktkalibrierung	nein	10	40		
3816	Picoxystrobin	C18H16F3NO4		117428-22-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	2	40		
704	Pinoxaden	C23H32N2O4	CC(C)(C)C(C)C	243973-20-8	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	200	40		
3286	Pioglitazone	C19H20N2O3S		111025-46-8	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
2990	Piperonyl butoxide	C19H30O5	O1c2ccc(ccc2)OC	51-03-6	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	25	40		
2711	Pirimicarb	C11H18N4O2	n(C)(C)C1O	23103-98-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
2859	Pravastatin	C23H36O7	C1=2C=C(C)C	81093-37-0	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	40	40		
3272	Praziquantel	C19H24N2O2		55268-74-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	40		
3243	Prednisone	C21H26O5	O=C(C)O[C]	53-03-2	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	8	40		
3129	Pregabalin-rac	C8H17NO2	CC(C)C(C)C	148553-50-8	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	6	40		
3141	Priocain	C13H20N2O	O=C(Nc1ccc	721-50-6	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
195	Primidon	C12H14N2O2	c1(ccccc1)C	125-33-7	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.7	20		
96	Prochloraz	C15H16Cl3N3O2	Cl-c(cc(Cl)c(Cl)c	67747-09-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	10	40		
3930	Prochloraz Metabolite BTS40348	C11H14Cl3NO		67747-01-7	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Prochloraz		nein	200	40		
3931	Prochloraz Metabolite BTS44595	C12H15Cl3N2O2		139520-94-8	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Prochloraz		nein	2	40		
3255	Progesteron	C21H30O2	O=C4C=C2	57-83-0	Naturstoff	Ausgangsstoff			nein	20	40		
708	Propachlor	C11H14ClNO	CC(C)N(C)=	1918-16-7	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
665	Propachlor-ESA	C11H15N1O4S1	CC(C)N(C)=	123732-85-4	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Propachlor		nein	0.5	20		
666	Propachlor-OXA	C11H13N1O3	CC(C)N(C)=	70628-36-3	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Propachlor		nein	7	20		
2945	Propamocarb	C9H20N2O2	N(C)(OCC)C	24579-73-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	10	20		
171	Propanolol	C16H21NO2	c12c(O)C(C)C	525-66-6	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	3	20		
212	Propiconazol	C15H17Cl2N3O2	c1([C@@H]2	60207-90-1	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
3499	Propoxy-carbazone	C15H18N4O7S	n1(c(n(C)=O	145026-81-9	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff		Einpunktkalibrierung	nein	10	40		
3344	Propoxyphene	C22H29NO2	CC1=C(C)C=C	469-62-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	40	40		
3175	Propyzamide	C12H11Cl2NO	Clc1cc(C)C=C	23950-58-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	1	20		
3492	Prosulfuron	C15H16F3N5O4S	FC(F)(F)CC(F)C	94125-34-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	3	40		
3176	Prothioconazole-desethio	C14H15Cl2N3O	Clc1ccccc1C	120983-64-4	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Prothioconazole		nein	5	40		
2947	Pymetrozin	C10H11N5O	O=C2N(N)C=C	123312-89-0	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	1	40		
2779	Pyraclostrobin	C19H18ClN3O4	c1(ccc(n2ccc	175013-18-0	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	9	20		
2712	Pyrimethanil	C12H13N3	c(ccc1N-c(n1	53112-28-0	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
3493	Pyroxsulam	C14H13F3N6O5S	c1(S(Nc2ncc	422556-08-9	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	2	40		
3500	Quinoclamine	C10H6ClNO2	O=C2c1c(O)C	2797-51-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
2738	Ranitidin-N-oxid	C13H22N4O4S	c1(cc(C)SCCC	738557-20-2	Pharmazeutika	Metabolit	Ranitidine		nein	30	40		
3349	Repaglinide	C27H36N2O4	CCOC1=C(C)C	135062-02-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	50	40		
2860	Ribavirin	C8H12N4O5	O=C(c1nccn1	36791-04-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	10	40		
3149	Rimantadin	C12H21N	NC(C)C13C	13392-28-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
130	Rimsulfuron	C14H17N5O7S2	CCS(=O)C(=O	122931-48-0	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	3	40		
701	Ritalinsaeure	C13H17NO2	c(ccc1C(C)=	19395-41-6	Pharmazeutika	Metabolit	Methylphenidate		nein	0.5	20		
2802	Rosuvastatin	C22H28FN3O6S	c1(nc(N)S(=	287714-41-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	4	40		
3143	Rufinamid	C10H8F2N4O	O=C(c1nnc1	106308-44-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	3	40		
262	Simazin	C7H12ClN5	c1(nc(ncn1)	122-34-9	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			ja	0.1	20		
668	Simazin-2-hydroxy	C7H13N5O1	Oc1nc(NCC	2599-11-3	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Simazin		nein	0.5	40	1	1.4
667	Simeton	C8H15N5O1	c1(nc(ncn1)	673-04-1	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
2903	Sitagliptin	C16H15F6N5O	Fc1cc(cc(F)c1	486460-32-6	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	20		
170	Sotalol	C12H20N2O3S	c1([C@@H])	3930-20-9	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	20		
2902	Spiroenlacton	C24H32O4S	O=C5O[C@@H]	52-01-7	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	40	40		

ID Eawag	Name	Summenformel	SMILES	CAS_Nr	Wirkstoffgruppe	Klassifizierung	Metabolit von	Bemerkung	Nachweis	BG (ng/L)	Messungssicherheit* (%)	ZGG03 (ng/L)	ZGG05 (ng/L)
2567	Tramadol	C16H25NO2	COC1=CC=	27203-92-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	1	20		
3310	Tramadol N-oxide	C16H25NO3	[O-][N+](C)C	147441-56-3	Pharmazeutika	Metabolit	Tramadol		nein	1	40		
3828	Triadimenol A	C14H18ClN3O2	CC(C)(C)C	170585-35-2	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	0.5	40		
3554	Triasulfuron	C14H16ClN5O5S	CC1=NC(=N	82097-50-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff		Einpunktkalibrierung	nein	10	40		
3497	Triazoxide	C10H6ClN5O	Clc2ccc1nc	72459-58-6	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	2	40		
3498	Tribenuron-methyl	C15H17N5O6S	CC1=NC(=N	101200-48-0	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	1	40		
168	Triclosan	C12H7Cl3O2	c1(Oc2c(cc	3380-34-5	Biozid	Ausgangsstoff			nein	10	20		
3181	Trifloxystrobin	C20H19F3N2O4	c1(C(F)(F)F	141517-21-7	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	45	40		
3804	Trifloxystrobin acid	C19H17F3N2O4		252913-85-2	Pflanzenschutzmittel	Metabolit	Trifloxystrobin		nein	20	40		
3542	Triflumizole	C15H15ClF3N3O	FC(F)(F)c2c	99387-89-0	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	20	40		
3182	Triflusulfuron-methyl	C17H19F3N6O6S	O=C(OC)c1c	126535-15-7	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	20	40		
199	Trimethoprim	C14H18N4O3	c1(Cc2c(nc	738-70-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	0.5	20		
2861	Trimipramin	C20H26N2	N1(c2c(CCc	739-71-9	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	30	60		
151	Trinexapac-ethyl	C13H16O5	C1CC1C(O	95266-40-3	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	1	40		
2740	Tritosulfuron	C13H9F6N5O4S	c1c(S(=O)=	142469-14-5	Pflanzenschutzmittel	Ausgangsstoff			nein	3	40		
3030	Tropium	C25H29NO3		10405-02-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	5	40		
3340	Ursodeoxycholic acid	C24H40O4	CC(CCC(=C	128-13-2	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	200	40		
2583	Valsartan	C24H29N5O3	CCCC(=O)	137862-53-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	15	20		
2795	Valsartansaeure	C14H10N4O2	O=C(O)c1cc	164265-78-5	Pharmazeutika	Metabolit	Valsartan, Losartan, Candesartan, Irbesartan		nein	2	20		
3237	Vancomycin	C66H75Cl2N9O24	C[C@H]1[C	1404-90-6	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	65	40		
645	Venlafaxin	C17H27NO2	C1CCCC(C	93413-69-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	1	20		
3396	Venlafaxine N-Oxide	C17H27NO3	OC1(C(C2=	1094598-37-4	Pharmazeutika	Metabolit	Venlafaxine		nein	0.5	40		
674	Verapamil	C27H38N2O4	COC1=C(O	152-11-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	20	40		
3146	Vildagliptin	C17H25N3O2	N#C[C@H]4	274901-16-5	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	1	20		
3840	Vinylsulfonic-acid	C2H4O3S		1184-84-5	Sonstige	Ausgangsstoff			nein	10	40		
3031	Xylometazolin	C16H24N2		526-36-3	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	2	40		
3287	Zidovudine	C10H13N5O4		30516-87-1	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	6	40		
3132	Zonisamide	C8H8N2O3S	O=S(=O)(N	68291-97-4	Pharmazeutika	Ausgangsstoff			nein	6	40		