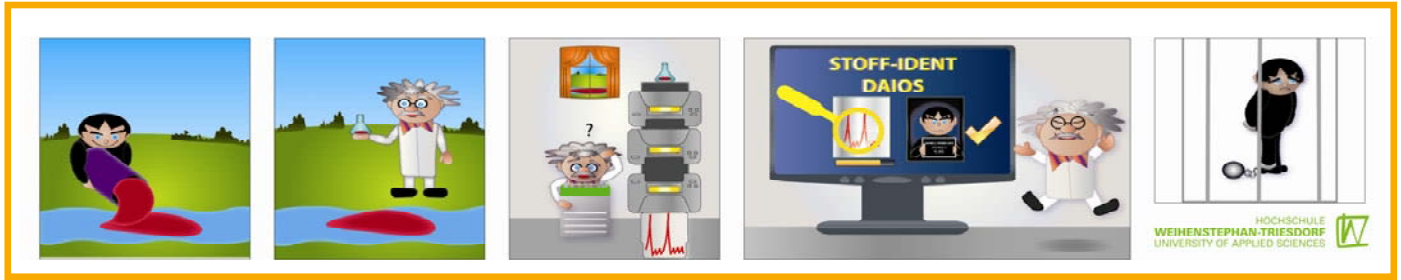


Identifizieren

Frank Leßke, Marco Luthardt (HSWT), Sylvia Große, Thomas Letzel (TUM), Alexandra Heermann, Wolfgang Schulz (LW)

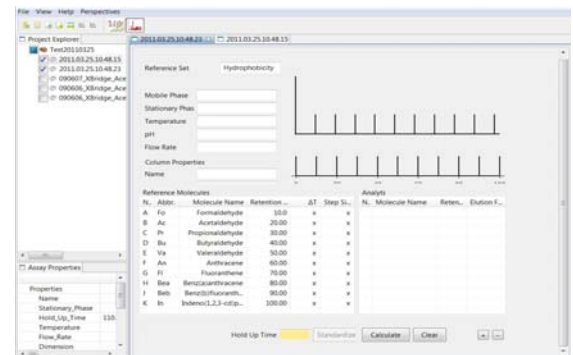
Datenbank potentiell gewässerrelevanter Stoffe (STOFF-IDENT)

- Entwicklung einer Stoffdatenbank mit webbasiertem Zugriff
- Datenimport aus verschiedenen Quellen (z.B. REACH, NORMAN)
- Interne Testphase mit ausgewählten Stoffen
- Veröffentlichung und Präsentation



Einführung eines Retentionszeitfaktors

Standardname	Retentionszeit (RT)			logP				logD		
	Langenau	LFU	TUM	Sigma logP	pubchem logP	Tomlin logP	chemicalize.org logP	ACD logP	pH 7.4 logD	Marvin pH 7.4 logD
Carbendazim	7.3	8.92	10	1.5	1.5	1.51	2.02	1.52	1.49	1.8
Carbetamide	8.8	14.5	11.8	k.A.	1.6	k.A.	1.65	1.52	1.52	1.65
Proslufocarb	16.9	21.3	20.1	k.A.	3.9	4.65	4.17	3.99	3.99	4.17



Normalisierung der RT bei bekannten logP/logD-Werten mittels selbst-programmierter Software (ab 04/12)

Der RT-Faktor ermöglicht eine Vergleichbarkeit verschiedener analytischer Labore

Non-Target-Screening

Ergebnis dargestellt als Punktwolke

Information Dependent Acquisition (IDA) relevanter Features

Ermittlung der Features aus LC-TOF/MS-Daten

