

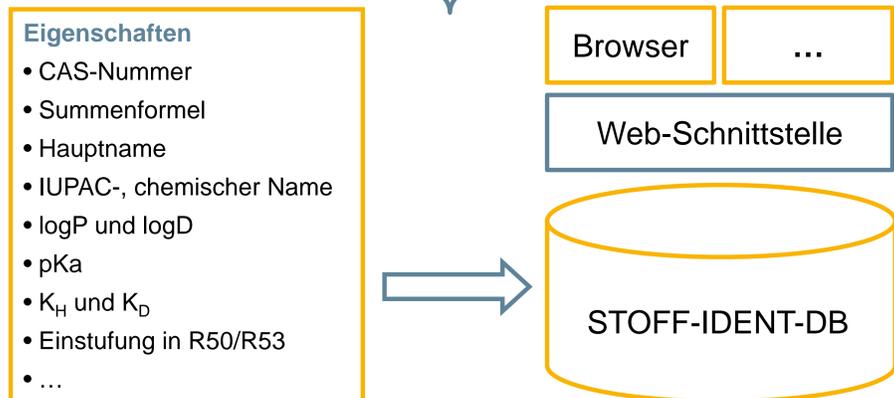
STOFF-IDENT: Datenbank gewässerrelevanter Stoffe zur Unterstützung des suspected target-screenings

M. Luthardt, F. Leßke (HSWT), W. Schulz (LW), T. Letzel (TUM), A. Bayer, M. Letzel, M. Sengl (LfU)

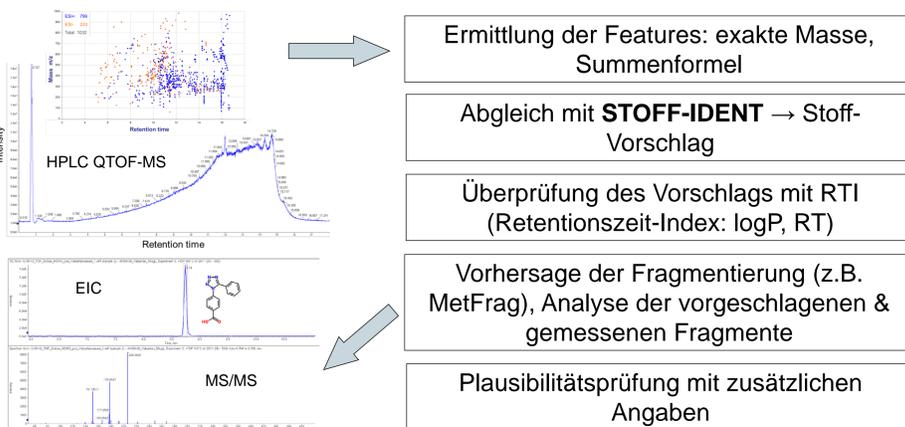
STOFF-IDENT

Datensätze für potenziell gewässerrelevante Stoffe:

- Bisher unter REACH registrierte Stoffe (>1000 t/Jahr; Einstufung in R50/50 >100 t/Jahr; CMR (Cat. 1+2) ≥ 1 t/a)
- Pflanzenschutzmittel und Metaboliten
- Biozid-Wirkstoffe
- Human- und Tierarzneimittelwirkstoffe
- Duftstoffe
- Priorisierte Substanzen (z.B. NORMAN list of emerging pollutants)
- Transformationsprodukte aus Vorhersagemodellen generiert (z.B. University of Minnesota Pathway Prediction System UM-PPS, CATALOGIC, ZENETH)



Anwendung im Suspected-Target Screening:



RISK-IDENT System = STOFF-IDENT + DAIOS

Das RISK-IDENT System ist eine integrative Komponente, die die Einzelkomponenten STOFF-IDENT, DAIOS (database assisted identification of organic substances) und andere Datenquellen zusammenfügt. STOFF-IDENT stellt dabei eine für alle offene und leicht zugreifbare Stoff-Datenbank zur Verfügung. DAIOS ergänzt diese Datenbasis um weitere Meta-Informationen. Auf dieser Plattform können sich Analytiker zu Fragen der Identifizierung austauschen. Zudem sollen auf dem System externe Datenquellen und Interpretationstools einfach integriert werden können.



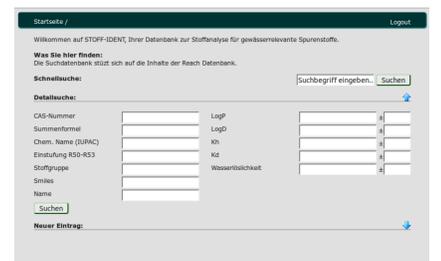
STOFF-IDENT Prototyp 1

Features

- Datenimport aus REACH (nur HTML-Schnittstelle)
- Suche nach Stoffen über ihre Eigenschaften
- Manuelles Einfügen von Datensätzen
- Einfaches Benutzermodell
- Zugriff auf die Daten über einfaches JSON-Format

Wissenswertes

- Realisiert als Studentenprojekt an der HSWT
- Intern in Gebrauch seit 08/2012
- Plattform für erste Benutzertests
- Offenbarte Mängel in der Datenqualität (z.B. logP unterschiedlich berechnet) und der Zugänglichkeit der REACH-DB
- Unterschiedliche Genauigkeit der Daten (z.B. exakte Masse mit nur 3 Nachkomma-Stellen statt der geforderten 4)



CAS-Nummer	Name	Name (EUPAC)
2049-95-8	tert-pentylbenzene	(1,1-dimethylpropyl)benzene
947-19-3	hydroxycyclohexyl phenyl ketone	(1-hydroxycyclohexyl)phenyl ketone
2690-21-4	citronic acid	(1-hydroxycyclohex-1-en-1-yl)acetic acid
15214-60-8	2-acetylthio-3-methylpropanoic acid	(1Z)-2-(2-methyl-1-methylthioethyl)acetic acid
25383-06-6	di-propenylphosphonic acid	(1Z)-prop-1-en-1-ylphosphonic acid
30018-10-7	(2-ethoxy-1-methyl-2-acetylthioethyl)triphenylphosphonium bromide	(2-ethoxy-1-methyl-2-acetylthioethyl)triphenylphosphonium bromide
1843-05-6	octabenzene	(2-hydroxy-4-octylphenyl)ethane
34590-94-8	(2-methoxymethylthio)propanal	(2-methoxymethylthio)propanal
68-26-8	retinol	(2E,4E,6E,8E)-3,7-dimethyl-2,6-octadien-1-ol
807-27-2	lysine hydrochloride	(2S)-2,6-diaminohexanoic acid hydrochloride
16088-62-3	(S)-2-acetoxypentane	(2S)-2-acetoxypentane
42399-49-5	(2S,4S)-2,3-dihydro-3-hydroxy-2-(4-methoxyphenyl)-1,5-benzothiazepin-4(5H)-one	(2S,4S)-2,3-dihydro-3-hydroxy-2-(4-methoxyphenyl)-1,5-benzothiazepin-4(5H)-one
599-04-2	1-hydroxy-7,7-dimethyl-7-oxobicyclo[2.2.1]heptane	(1R,7R)-7,7-dimethyl-7-oxobicyclo[2.2.1]heptan-1-ol
852-67-5	1,4,3,6-tetrahydro-D-glucitol	(3R,5R,6R,8R)-2,3,3,5-tetrahydroxyhexane-1,4-diol

Roadmap

