

RiSKWa-Querschnittsthema „Non-Target Analytik und Datenbanken“

M. Letzel (LfU), U. Dünnbier (BWB), F. Lesske (HSWT), M. Luthardt (HSWT), W. Schulz (LW), W. H. Weber (LW), M. Sengl (LfU), T. Letzel (TUM)
Marion Letzel, Bayerisches Landesamt für Umwelt, Tel: 0881/185-122; E-Mail: marion.letzel@lfu.bayern.de

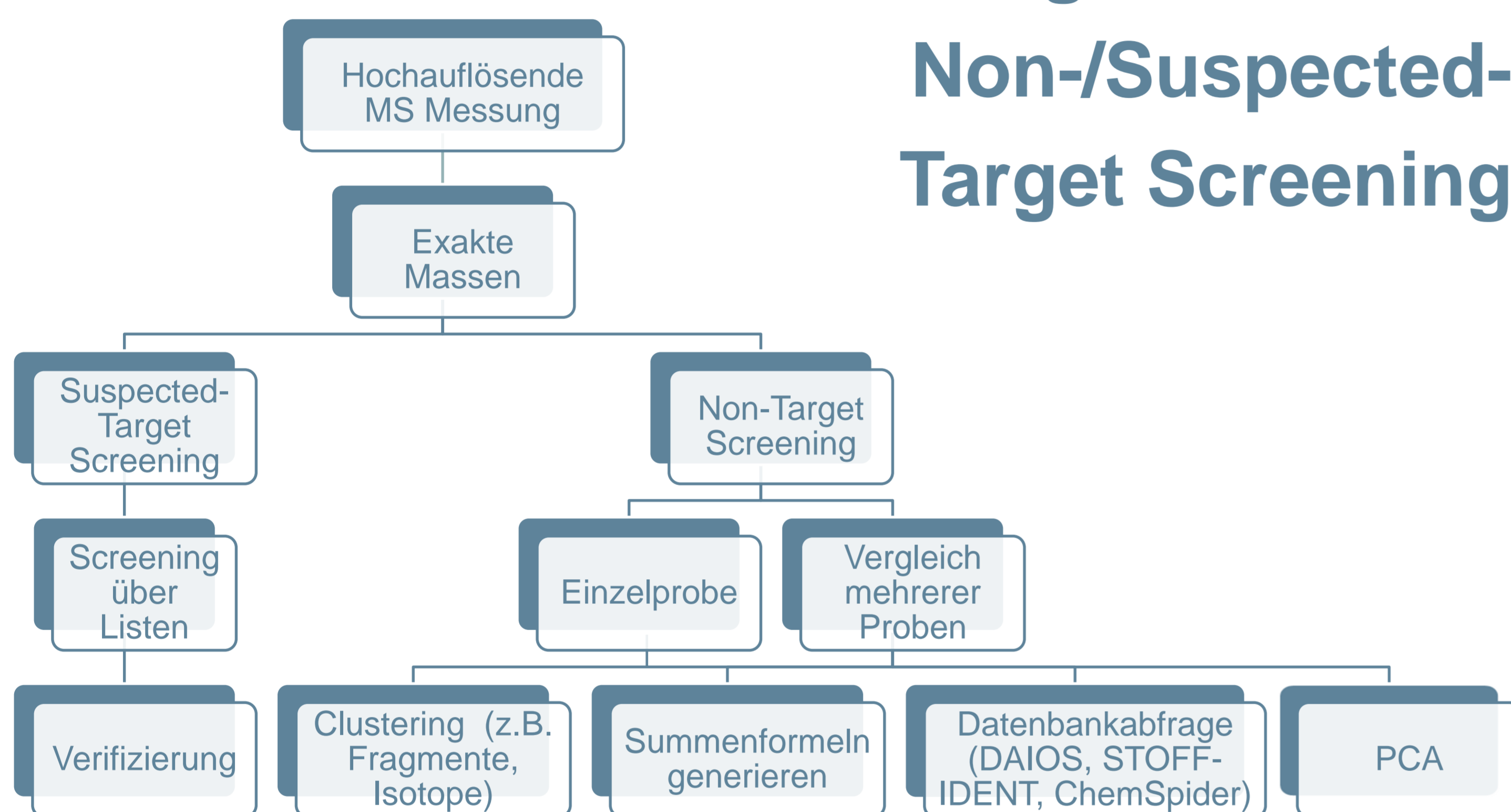
RiSKWa

- BMBF-Fördermaßnahme „Risikomanagement von neuen Schadstoffen und Krankheitserregern im Wasserkreislauf“
- 12 Verbundprojekte
- Themenfelder Risikocharakterisierung und –management, Technologien zum Emissions-/Immissionsmanagement sowie Kommunikations- und Bildungsmaßnahmen
- Projektübergreifender Dialog in Querschnittsthemen (QT) zu bestimmten Arbeitsschwerpunkten

Non-Target Analytik und Datenbanken

- Identifizierung bislang unbekannter Spurenstoffe und Transformationsprodukte im Wasser über LC-HRMS-Analytik
- Herausforderung: Effiziente Nutzung der Daten, Datenmanagement
- Ziele QT: Diskussion der Vorgehensweise bei der Non-Target Analytik, Optimierung der Software, Erstellung bzw. Optimierung von Datenbanken zur Unterstützung der Non-Target Analytik
- Aktivitäten QT: Durchführung von bisher 5 Workshops mit RiSKWa-Partnern, Herstellern und Anwendern

Vorgehensweise Non-/Suspected- Target Screening



Software

- Unterschiedliche Auswertetools der Herstellersoftware wie Peak-Finding-Algorithmus, Ermittlung der Summenformel aus exakter Masse, Bestätigung der Summenformel über Isotopic Pattern Matching, Fragmentierung, automatisierte Suche nach Umwandlungsprozessen, Hauptkomponentenanalyse (PCA),
- Softwaretools der einzelnen Gerätehersteller wurden in den Workshops dargestellt und die Leistungsfähigkeit an gemeinsam analysierten Proben demonstriert
- Verbesserungsvorschläge wurden aufgenommen und teilweise eingearbeitet
- Gerätehersteller bieten interne, kommerzielle Datenbanken und Spektrenbibliotheken unterschiedlicher Größe und Ausrichtung
- Aufbau und Pflege spezifischer, gewässerbezogener „suspect-lists“ obliegt bisher den einzelnen Anwendern
- Frei zugängliche Spektrendatenbanken (z.B. MassBank) und Softwaretools (z.B. RTI-Modul) stellen zusätzliche Hilfsmittel dar

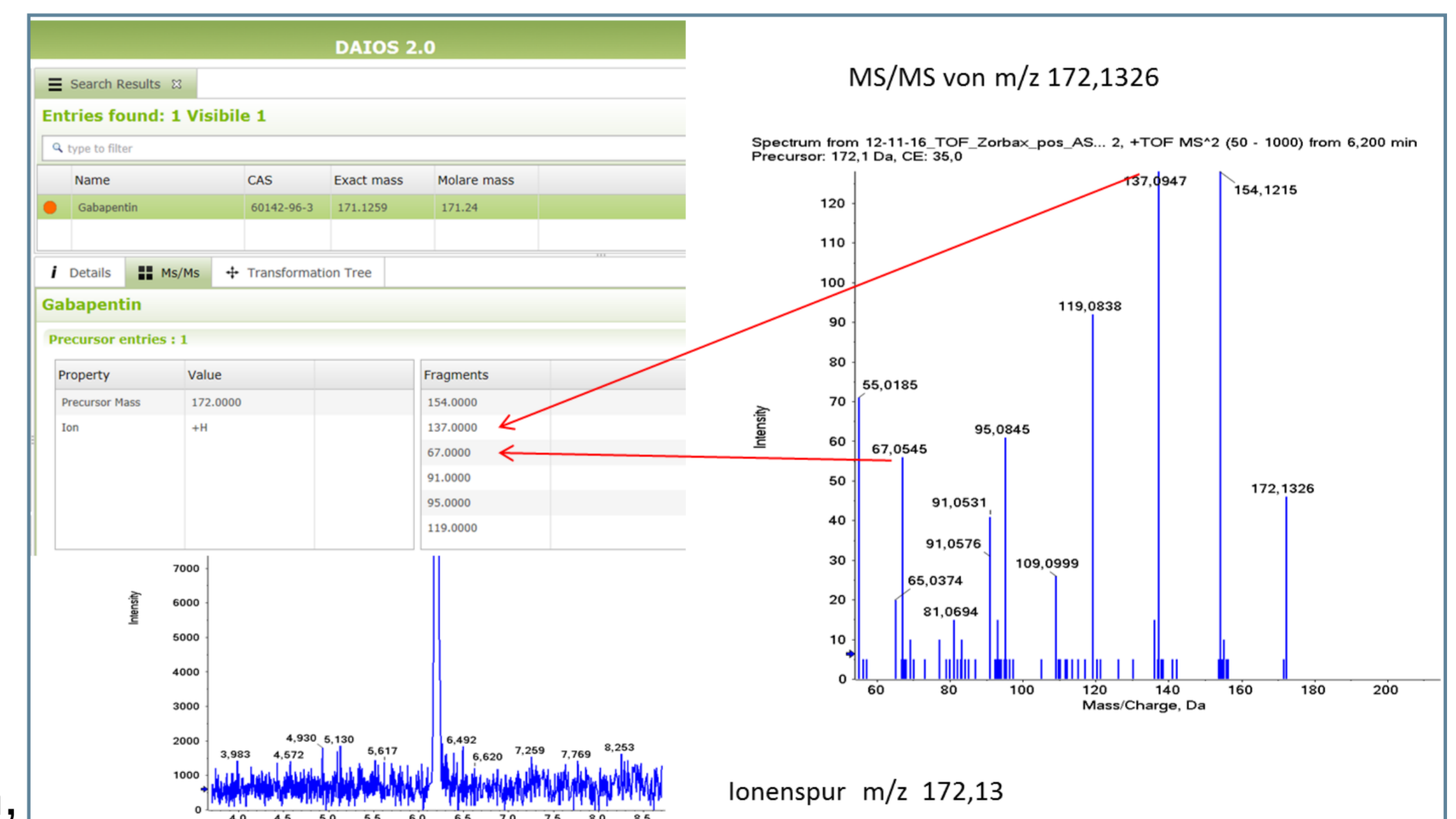
Die zwei Datenbanken im RiSKWa-Verbund: STOFF-IDENT und DAIOS

STOFF-IDENT:

- Fokus auf gewässerrelevante Spurenstoffe
- CAS-Nr., Name, exakte Masse, Strukturformel, Hydrophobizität (logP, logD), teilw. Mengen
- Automatisches Einlesen der Stoffdaten aus Zulassungslisten und öffentlichen Datenbanken
- Entwickelt in RISK-IDENT, am LfU weitergeführt

DAIOS (Database Assisted Identification of Organic Substances):

- Weiterentwicklung der bestehenden Datenbank
- Pool für analytische Daten sowie für Meta-Daten, z.B. Transformationswege und Fragmente



Integration der Werkzeuge

STOFF-IDENT

- Stoffdaten
- Gewässerrelevanz
- Industriechemikalien (REACH), Arzneimittel, Pflanzenschutzmittel, Biozide, TP, ...

RTI

- Normierung der Retentionszeit (RT)
- 10 Standards
- LogP / logD

DAIOS

- Meta-Daten (z.B. Transformation Tree)
- Struktur-Daten (z.B. Massenfragmente)
- Analytische Kommunikationsplattform

Weitere

- Datenbanken (z.B. MassBank)
- Algorithmen (z.B. Metfrag)
- Datenformate

Arbeitsplattform

Fazit

- Unter Einbezug der Gerätehersteller und Anwender konnten verschiedene Ansätze realisiert werden, um die Messdaten effizienter auszuwerten und für die Substanzidentifizierung zu nutzen
- Kooperation aller Partner im Querschnittsthema ermöglichte synergistische Entwicklung der verschiedenen Tools und Strategien
- Weiterführung der Zusammenarbeit nach Projektende wünschenswert

Danksagung

- Den Beteiligten der Projekte ASKURIS, RISK-IDENT und der DECHEMA
- Dem BMBF für die finanzielle Unterstützung im Programm FONA (Forschung für Nachhaltige Entwicklung)

gefördert vom: