

Wasseranalytik trifft Informatik



„Fortschritte in der Suspected- und Non-Target-Analytik: Softwaretools, Datenbanken und ihre Anwendung“: 90 Teilnehmer unter anderem aus Analytik und Bioinformatik.

(Foto: Bayerisches Landesamt für Umwelt, LfU)

Ende März fand in Augsburg die Fachtagung „Fortschritte in der Suspected- und Non-Target-Analytik: Softwaretools, Datenbanken und ihre Anwendung“ statt. Die zweitägige Veranstaltung war eine Weiter- und Zusammenführung früherer Veranstaltungen der Bioinformatik (etwa open-MASP) und der Wasseranalytik (beispielsweise Workshops auf dem Langenauer Wasserforum). Gleichzeitig traten hier auch die zwei im Förderschwerpunkt Nachhaltiges Wassermanagement des BMBF – genauer der Fördermaßnahme Risikomanagement von neuen Schadstoffen und Krankheitserregern im Wasserkreislauf – finanzierten Projekte Risk-Ident und Askuris zusammen auf. Sie stellten ihre Ergebnisse gemeinsam mit weiteren Forschungsstellen und massenspektrometrischen Firmenvertretern vor.

Die Fachtagung im März 2014, federführend organisiert durch das Bayerische Landesamt für Umwelt (LfU), rückte nach der letztjährigen Zusammenführung von Analytik und Informatik nun verstärkt den wasseruntersuchenden Analytikbereich in den Fokus. Der Einladung folgten dieses Jahr etwa 90 Personen, darunter viele Analytiker aus der Wasserszene und anderer Disziplinen, (Bio)Informatiker und nicht zuletzt Industrievertreter der instrumentellen Analytik. Dieses Jahr fanden sich verstärkt Teilnehmer aus dem Umfeld der analytischen Labore von Bund, Ländern und Kommunen ein.

Der Schwerpunkt der Tagung lag in der Nutzung von LC-MS in der organischen Molekülanalytik, mit Fokus auf Suspected- und Non-Target-Screening. Hier geht der Trend in Richtung akkurat und empfindlich messender Massenspektrometer. In jüngster Zeit gibt es zunehmend Bestrebungen, weitere Informationen der Analytik zu nutzen, etwa die Polarität von Molekülen oder deren wahrscheinliches Vorkommen in der Wassermatrix. Diesen Punkten widmete sich der erste Tag des Workshops. Der zweite Tag war der Umsetzung von LC-MS-Analytik mit aktueller Softwareauswertung und den jeweiligen Herstellerfirmen gewidmet.

Zunächst begrüßte Werner Reifenhäuser (Leiter der zentralen Analytik und Stoffbewertung am LfU) die Teilnehmer. Eine Einführung in das Thema präsentierte Thorsten Reemtsma (Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung, UFZ) basierend auf der Frage „Non-Target-Screening – Analytik ohne Ziel?“. Im Anschluss daran stellten Manfred Sengl (LfU) und Uwe Dünnbier (BWB) die Projekte Risk-Ident bzw. Askuris und deren jeweilige Analysestrategien vor. In der zweiten Tageshälfte wurden vertieft Hilfsmittel zum Suspected-Target-Screening behandelt, etwa der Retentionszeitindex RTI (Thomas Letzel, TU München), massenspektrometrische Datenbanken oder die Chromatographischen Hydrophobizitätsindizes CHI (Martin Krauss, UFZ) sowie die Nutzung von Datenbanken wie Daios (Wolfgang Schulz, Zweckverband Landeswasserversorgung, LW) und Stoff-Ident (Marion Letzel, LfU). Daran anschließend fand ein anderthalbstündiger Workshop zu Datenbanken und integrierten Softwareplattformen statt.

Der zweite Tag war geprägt durch mehrere Berliner Wasserproben, die Monate zuvor an verschiedene Einrichtungen versandt und dort mit den jeweiligen Screening-Techniken untersucht und mit Software ausgewertet worden waren. Es präsentierten der Reihe nach Bettina Seiwert (UfZ) mit Matthias Hofmann (Waters), Christian Zwiener (Universität Tübingen) mit Friedrich Mandel (Agilent), Wolfgang Schulz (LW) mit Detlev Schleuder (AB Sciex) und Florian Bode/Patricia van Baar (beide BWB) mit Olaf Scheibner (Thermo Fisher). Die begleitenden Diskussionsrunden zeigten, dass die – wenn auch meist ähnlichen – teilweise doch unterschiedlichen Strategien in eine gemeinsame Richtung zeigen. So endete die abschließende Plenumsdiskussion im Versuch, einen Konsens zu finden. Diese Konsensfindung soll nun unter dem Dach der Wasserchemischen Gesellschaft weitergeführt werden und Keimzelle einer – hoffentlich auch internationalen – verstärkten Zusammenarbeit sein.

Thomas Letzel, Garching
T.Letzel@tum.de

4.7.-6.7. Kuala Lumpur/Malay

International Renewable Energy and Environment Conference (IREEC-2014) – Kontakt: contact@warponline.org; <http://warponline.org/viewjc.php?id=>

6.7.-10.7. Brisbane/Australien

NanoBio Australia 2014 – Kontakt: Pet Gilmore; p.gilmore@uq.edu.au; www.2014nanobioaustralia.org.

6.7.-8.7. Istanbul/Türkei

Frontiers In Medical Sciences: Diabetes: Cancer and their Connection – Kontakt: <http://fims.maltepe.edu.tr>.

6.7.-9.7. Wilna/Litauen

Balticum Organicum Syntheticum (BOS2014) – Kontakt: Krista Voigt; bader@chem.queensu.ca; www.boschem.eu.

7.7.-8.7. London/Großbritannien

Lyophilisation – Kontakt: Daniel Lee; dlee@smi-online.co.uk; www.smi-online.co.uk/pharmaceuticals/uk/conference/lyophilisation-freeze-drying-pharma-a-biopharma.

7.7.-8.7. London/Großbritannien

European BioNetworks Summit – Kontakt: Fateja Begum; fbegum@smi-online.co.uk; www.smi-online.co.uk/pharmaceuticals/uk/conference/BioNetworks.

7.7.-9.7. Reading/Großbritannien

QP Formulation and Processing – Kontakt: Karanjit Bunge; enquiries@rssl.com; www.rssl.com/Training/QualifiedPersonnel/CourseInformation.aspx?CourseId=10

8.7.-9.7. Cambridge/Großbritannien

Biomarkers – Kontakt: Karen Saunders; k.saunders@selectbio.com; <http://selectbio.com/conferences/index.aspx?conf=BM2014>.

8.7.-10.7. Chicago, IL/USA

International Conference on Geriatric Gerontology – Kontakt: James Parker; geriatrics2014@omicsonline.com; www.omicsgroup.com/geriatrics-gerontology-conference-2014/.

8.7.-11.7. Egham/Großbritannien

European Workshop on Laser Ablation – Kontakt: Wolfgang Müller; ewla14@es.rhul.ac.uk; <http://ewla.rhul.ac.uk>.

8.7.-12.7. Trvandum/Indien

International Conference on Perspectives in Vibrational Spectroscopy (ICOPVS-2) – Kontakt: Hubert Joe; hubertjoe@gmail.com; www.icopvs.org/contact.php.

9.7.-10.7. Chester/Großbritannien

Technical Training: Introduction to Industrial Water Purification by Ion Exchange – Kontakt: Patricia Cornell; patricia.cornell@soci.org; www.soci.org/Events/DisplayEvent.aspx?EventCode=SST1910714.

9.7.-10.7. London/Großbritannien

Allergies – Kontakt: John Collins; jcoll@smi-online.co.uk; www.smi-online.co.uk/goto/allergies23.asp.