

Querschnittsthema Non-Target-Screening / Datenbanken im RiSKWa-Verbund

U. Dünnbier (BWB), T. Letzel (TUM), W. Schulz (LW), W.H. Weber (LW), M. Sengl (LfU), M. Letzel (LfU)

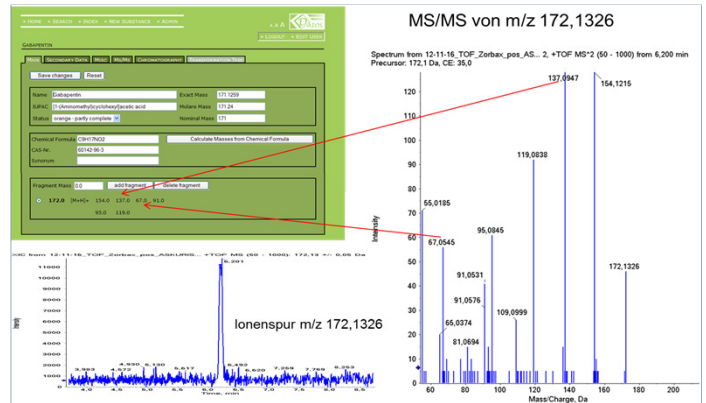
Datenbanken und Workshops

Wie identifiziert man bislang nicht zuordenbare Spurenstoffe im Wasser? Beispielsweise die Abbauprodukte bekannter Chemikalien? Um in Zukunft Wasserversorgern und Laboratorien Vergleichsdaten anbieten zu können, wird im RiSKWa-Verbund die Datenbank STOFF-IDENT aufgebaut und DAIOS (Database Assisted Identification of Organic Substances) optimiert. Diese Datenbanken enthalten die Eigenschaften bzw.

analytischen Kenngrößen bekannter Chemikalien und ihrer Abbauprodukte, die in die Gewässer gelangen könnten. Um die Vorgehensweise des Non-Target-Screenings zu diskutieren, die Gerätesoftware zu optimieren und die Datenbank den zukünftigen Nutzern näher zu bringen, bieten RiSKWa-Projekte Workshops an. Bislang fanden drei Workshops statt, zwei sind in Vorbereitung.

Die zwei Datenbanken im RiSKWa-Verbund zum Non-Target-Screening: STOFF-IDENT und DAIOS

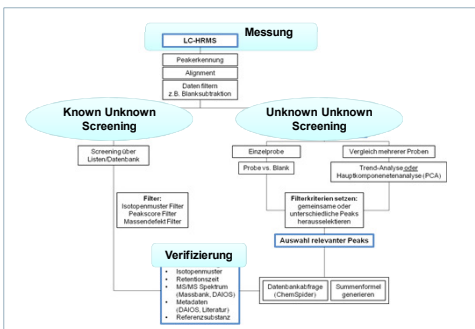
STOFF-IDENT								
Stoffbezeichnung	Abbauprodukte Verhalten bei Prozessen	Eigenschaften						
Name: IUPAC CAS-Nr. EC-Nr. Summenformel/exakte Masse Struktur (mol-File, Smiles code)	Bildung von Abbauprodukten in der aquatischen Umwelt: Vorhersage aus Pathway-Prediction System der University Minnesota	<table border="1"> <tr> <th>physikalisch</th> <th>Fragmente</th> <th>Toxizität</th> </tr> <tr> <td>Dampfdruck Wasserlöslichkeit Henrykonstante Kow, Dow pKa Kd</td> <td>MetFrag</td> <td>Hinweise auf Gewässergefährdung (R50/53)</td> </tr> </table>	physikalisch	Fragmente	Toxizität	Dampfdruck Wasserlöslichkeit Henrykonstante Kow, Dow pKa Kd	MetFrag	Hinweise auf Gewässergefährdung (R50/53)
physikalisch	Fragmente	Toxizität						
Dampfdruck Wasserlöslichkeit Henrykonstante Kow, Dow pKa Kd	MetFrag	Hinweise auf Gewässergefährdung (R50/53)						
Anwendung technischer Einsatz	Auftreten im Gewässer	Bemerkung Herkunft der Daten						
Gruppe: Arzneimittel, Pflanzenschutzmittel, Biozid, Metaboliten, ... REACH: ERC (environmental release category), SU (sector of enduse)	bereits erfolgter Nachweis	z.B. aus REACH, Datenbank, ... Vorgehensweise beschreiben						



1. Workshop „Non-Target-Analytik“ am 26./27.04.2012 in Berlin

Im ersten Workshop des RiSKWa-Projektverbundes haben rund 20 Fachleute aus Forschung und Praxis den Workflow für die Non-Target-Analytik erarbeitet. Als Beispiel dienten die Abläufe von Kläranlagen. Weiterhin wurde beraten, welche Datenbanken als Quelle herangezogen und welche statistische und mathematische Modelle genutzt werden könnten. Zur Unterstützung der Analytik soll eine Software entwickelt werden.

Am Workshop nahmen unter anderem die Berliner Wasserbetriebe (BWB) und die Landeswasserversorgung (LW), die Technische Universität München (TUM), die Hochschule Weihenstephan-Triesdorf (HSWT) sowie Vertreter der Firmen Agilent, Waters und AB SCIEX teil.



Im Workshop wurde der erste gemeinsame Workflow für das Non-Target-Screening erarbeitet.

3. Workshop „STOFF-IDENT & openMASP“ am 18./19.04.2013 in Freising

Im dritten Workshop stellten die Projektpartner aus LfU, TUM und HSWT interessierten Fachleuten die von ihnen neu entwickelte Datenbank STOFF-IDENT vor. Deren Software beruht auf dem Programm „openMASP“ und nutzt Eclipse-Framework. Anschließend erläuterten die Referenten den Retentionszeit-Index (RTI) sowie einen dazu durchgeführten Ringversuch.

Am zweiten Tag trafen sich zwei Arbeitsgruppen: Die eine befasste sich mit dem analytischen Modul des Retentionszeit-Index; die andere Gruppe testete die Datenbank STOFF-IDENT; die Projektpartner zeigten erste Anwendungsszenarien sowie weitere Tools, wie die Berechnung des RTI, und bekamen wertvolle Anregungen.

Zu den rund 40 Teilnehmern gehörten Analytiker, Bioinformatiker sowie Vertreter namhafter Hersteller von hochauflösenden Massenspektrometern (HRMS).



4. Workshop „Stand der Softwareentwicklung in der Non-Target-Analytik“ im Rahmen des Langenauer Wasserforums am 11./12.11.2013 in Langenau

Im vierten Workshop wird der Stand der Softwareentwicklung in der Non-Target-Analytik vorgestellt. Es wird erläutert, wie Komponenten aus LC-HRMS-Datensätzen identifiziert werden können. Auch in diesem Workshop beteiligen sich die Firmen AB SCIEX, Agilent, Bruker Daltonik, Thermo Scientific und Waters sowie die ewag.

2. Workshop „Non-Target-Screening“ im Rahmen des Langenauer Wasserforum am 14.11.2012 in Langenau

Im Vorfeld des zweiten Workshops hatten ausgewählte Firmen identische Wasserproben bekommen. Aufgabe war es, diese mit den derzeitigen Möglichkeiten ihrer aktuellen Software für das Non-Target-Screening zu analysieren. Im Workshop stellten die Firmen ihre Vorgehensweise sowie die Möglichkeiten und Ergebnisse vor und berieten über die notwendigen Anforderungen an eine neue Software.

Teilgenommen haben Mitarbeiter der AP Analytik von den BMBF-Projekten ASKURIS, RISK-IDENT und TransRisk sowie Vertreter der ewag (Schweiz) und der Firmen Agilent, Thermo Fischer, Waters und AB SCIEX.

Ausblick: 5. Workshop „Non-Target-Screening und STOFF-IDENT“ am 27./28.03.2014 in Augsburg

Der fünfte Workshop dieser Reihe wird die dann anwendbare Datenbank STOFF-IDENT sowie die aktualisierte Version von DAIOS vorstellen und erläutern. Verschiedene Anwendungsbeispiele werden demonstriert, der aktuelle Stand der Software wird mit den Firmen diskutiert. Außerdem werden neue Strategien für das Monitoring vorgestellt.

Der Workshop wird als gemeinsame Veranstaltung von RISK-IDENT und ASKURIS durchgeführt. Er richtet sich deutschlandweit an eine große Zielgruppe: Anwender aus der Analytik, Geräteentwickler, Laboratorien, Pharmafirmen sowie staatliche Umweltbehörden.