

**AUFRUF der TU München an alle LC-MS-Labore**  
**ZUR KOSTENFREIEN TEILNAHME AN EINEM RINGVERSUCH**  
**ZUR EVALUIERUNG DES RETENTIONSZEITINDEX (RTI)**

Bei Interesse senden Sie bitte baldmöglichst ein E-Mail an T.Letzel[at]wzw.tum.de und Sie bekommen die entsprechenden Informationen, Unterlagen und Referenzsubstanzen von uns zugesandt.

Sie bekommen von uns **einen Referenzmix** der ca. ein Dutzend verschiedene organische Substanzen enthält, sowie eine **Lösung mit mehreren ‚unbekannten‘ Substanzen**.

Alle Komponenten der beiden Lösungen werden Ihnen allerdings zuvor bekanntgegeben (in Art und Konzentration), so dass Sie das 'Verschmutzungspotential' selbst abschätzen können.

Sie sollten beide Lösungen mindestens **einmal mit Ihrer(n) derzeit im Labor etablierten LC-MS Methode(n) vermessen** und sich die Retentionszeiten notieren.

Bei den Methoden sollte es sich zunächst um klassische C18-Phasen handeln (keine polar embedded oder gemischte stationäre Phasen), die mobile Phase und der Gradient sind jedoch frei wählbar, der pH ist frei wählbar und auch ob unpolar- /polar- /not- endcapped Säulen genutzt werden ist freigestellt. Wir liefern Ihnen ein Formblatt mit, in das Sie bitte entsprechende Angaben zur Methode eintragen.

Über eine Software die wir ab/seit Mai 2012 unter „openMASP.hswt.de“ zur Verfügung stellen (werden), sind diese Retentionszeiten auf logP-Werte zu normieren. Diese Werte würden Sie dann unserer Studie zur Verfügung stellen und wir verwerten diese in unserer Kampagne zu Etablierungs- und Evaluierungszwecken.

Dieser Ringversuch dient zusätzlich dazu, dass Sie

a) bei regelmäßiger Nutzung des Referenzmixes automatisch eine **Validierung** Ihrer Chromatographie (über RTI), Ihrer massenspektrometrischen Spezifität (über m/z), und Ihrer massenspektrometrischen Sensitivität (über die Signalfläche) durchführen können,

b) Ihre Chromatographie direkt mit anderen Laboren, die ebenfalls den Referenzmix nutzen, **abgleichen** können,

c) den **logP** für unbekannte Moleküle über Chromatographie angeben können (ähnlich der *OECD GUIDELINE FOR TESTING OF CHEMICALS 117*), sowie

d) den RTI als einfaches **Vorhersagewerkzeug** einsetzen können.

Zur kurzen Erläuterung des Vorhabens:

In heutigen (targeted und non-targeted) LC-MS Analysen kommt die Umkehrphasenchromatographie häufig in Kopplung mit der Massenspektrometrie zum Einsatz. Dabei wird zur Identifizierung (un)bekannter organischer Moleküle überwiegend die massenspektrometrische Information genutzt (akkurate Masse und Strukturinformation durch Tandem-MS), während die Retentionszeit der Moleküle (und damit der logP bzw. logD) oft jedoch vernachlässigt wird. Und wenn ein Chromatographiewert berücksichtigt wird, dann ist es die Retentionszeit bei der gerade genutzten Trennmethode ohne Übertragbarkeit auf andere Methoden.

Zur allgemein besseren Nutzung der Chromatographie etablieren wir deshalb den sogenannten Retentionszeitindex (auch RTI) mit oben erwähnten Einsatzmöglichkeiten (a-d).

Aus den Erfahrungen dieses Ringversuchs heraus wollen wir (mit weiteren Ringversuchen) zukünftig auch Modelle entwickeln, die auch der Bestimmung von logD und der Nutzung von Hydrophilic Interaction Liquid Chromatography (HILIC) gerecht werden.

Wir freuen uns auf Ihre Teilnahme und sichern Ihnen professionellen Umgang mit Ihren Daten zu!

Mit herzlichen Grüßen, Thomas Letzel