

STOFF-IDENT: Stand der Datenbank gewässerrelevanter Stoffe als Beitrag zur Identifizierung bislang unbekannter Spurenstoffe

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

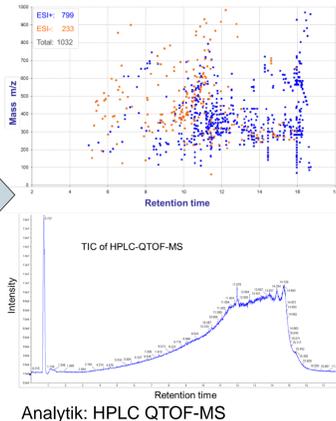
Warum noch eine Datenbank?



Probenahme



Wasserproben im Labor



Analytik: HPLC QTOF-MS

monoisotopische Masse
=> Summenformel



Retentionszeit



RT ↓ logP ↑
openMASP: RTI-Modul
Retention-Time-Index
siehe Poster von Grosse et al.

STOFF-IDENT

Vorteile:

- Weniger aber wahrscheinlichere Hits (gewässerrelevante Stoffe)
- Gleichzeitige Nutzung der Summenformel oder monoisotopischen Masse und logP (über RT im RTI-Modul)

Beispiel: C14H10N4O2

- Suche in ChemSpider: 355 Hits
- Suche in STOFF-IDENT: 1 Hit => Valsartan acid als Vorschlag (Bestätigung des Strukturvorschlags mit Referenzsubstanz)

Einbettung im System:

STOFF-IDENT

- Stoffdaten
- Gewässerrelevanz: zugelassene Stoffe wie REACH, HAM, ...

RTI (suspected-target screening)

- Normierung der Retentionszeit (RT)
- 10 Standards

DAIOS

- Meta-Daten (z.B. Konzentrationen in der Umwelt)
- Struktur-Daten (z.B. Massenfragmente)
- Analytische Kommunikationsplattform

Weitere

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

Arbeitsplattform RISK-IDENT

Potenziell gewässerrelevante Stoffe

Aktueller Stand:

- 450 Arzneimittelwirkstoffe
- 2480 unter REACH registrierte Chemikalien (bis Feb 2013, ohne Anorganik und Stoffgemische)
- Ausgewählte Transformationsprodukte aus Literatur

Was kommt noch rein?

- weitere Arzneimittel
- Biozide
- PSM
- PSM-Metabolite
- Duftstoffe
- Ausgewählte Transformationsprodukte aus Literatur

insgesamt 2981 Stoffe (Stand 08/2013)

Probleme und Lösungsansätze

- Für die unter REACH registrierten Industriechemikalien war geplant die Daten der öffentlich zugänglichen REACH-Dossiers zu verwenden (keine Lizenz/Erlaubnis).
➢ weitere Datenquellen wie chemicalize.org, UBA
- Von den ca. 2300 bis März 2012 unter REACH registrierten Stoffe (nur organische Einzelsubstanzen) durfte das UBA nur Daten zu 176 Stoffe bereitstellen (Copyright). Zu ca. 1550 relevanten Arzneimittelwirkstoffen gibt es zu ca. 440 Daten (neu zugelassene), jedoch durfte das UBA nur zu 13 Stoffen die Daten weitergeben (Copyright).
➢ berechnete Werte aus chemicalize.org
- Datenvalidität: Wie gut sind berechnete logP-Werte? Wie gut sind experimentelle logP-Werte?
➢ Mittelwert aller verfügbaren logP-Werte (Mannhold et al. 2009)

Ranking	Monoisotopic mass	Δ mass	Name	CAS	Elemental formula	SMILES	IUPAC
1	435.2270	0.0070	Valsartan	137862-53-4	C ₂₄ H ₂₉ N ₅ O ₃	CCCCC(=O)N(CC1=CC=C(C=C1)C2=CC=CC=C2)N3C4=CC=CC=C4N3C2=CC=CC=C2	(2S)-3-methyl-2-[N-[(4-12)]

Roadmap

Workshop OpenMASP & STOFF-IDENT
Freising, 18./19.4.2013

Workshop STOFF-IDENT
Augsburg, 27./28.3.2014

2012

2013

2014

RISK-IDENT System

Prototyp 1

- einfache Abfragen nach Eigenschaften
- Daten einfügen
- nur REACH-Daten
- nur Projektmitglieder

Prototyp 2

- Reimplementierung auf Basis der Erfahrungen des ersten Prototyps
- erweiterter Funktionsumfang & Daten
- flexible Architektur
- erweiterter Benutzerkreis (auf Anfrage)

Prototyp 3

- feature freeze, keine neuen Funktionen oder Eigenschaften
- gemeinsame Plattform STOFF-IDENT und DAIOS
- nochmals erweiterter Benutzerkreis

Finalisieren

- intensive Benutzertests
- Fehler beheben
- Portierung auf Lifesystem
- Dokumentation (Benutzer, Administration)

nach Projektende

- Aktualisierung der REACH-Stoffe durch das LfU
- Weiterbestehen der Datenbank am LfU

Fotos: LfU

Bei Interesse an der Nutzung von STOFF-IDENT wenden Sie sich bitte an: marco.luthardt@hswt.de

gefördert von:



Bayerisches Landesamt für Umwelt



HOCHSCHULE WEIHENSTEPHAN-TRIESDORF UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES



Zweckverband Landeswasserversorgung



Technische Universität München



CONDIA CONDUCTIVE DIAMOND PRODUCTS