

RISK-IDENT

Arzneimittel, Reinigungsmittel, Duftstoffe – diese und viele andere Substanzen gelangen tagtäglich mit unserem Abwasser in die Kläranlagen. Werden sie dort nicht vollständig abgebaut, schädigen sie möglicherweise später im Gewässer Pflanzen und Tiere. Viele dieser Spurenstoffe werden bei Routineanalysen nicht erfasst. Auch weiß man noch wenig darüber, welche Abbauprodukte entstehen und wie sie wirken. Doch wie identifiziert man unbekannte Stoffe? Wie erfährt man, welche Risiken sie bergen?

Das Projekt RISK-IDENT ist diesen bislang unbekanntem Chemikalien im Wasser auf der Spur. Es sucht nach Methoden, um die nur in Spuren auftretenden Abbauprodukte organischer Schadstoffe zu identifizieren, das von ihnen ausgehende Risiko für Gewässerorganismen zu bewerten und den Eintrag in die Umwelt zu verringern.



PROJEKTPARTNER

HOCHSCHULE
WEIHENSTEPHAN-TRIEDSDORF
UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES



CONDIAS
CONDUCTIVE DIAMOND PRODUCTS



Zweckverband
Landeswasserversorgung



KONTAKT

ANSPRECHPARTNER

Marco Luthardt
Tel.: +49 8161 71-3067 | marco.luthardt@hswt.de

EXTERNE ANSPRECHPARTNER

Dr. Marion Letzel
Tel.: +49 881 185-122 | marion.letzel@lfu.bayern.de
Dr. Thomas Letzel
Tel.: +49 89 289 13780 | letzel@wzw.tum.de

ANMELDUNG

Hochschule Weihenstephan-Triesdorf
Fakultät Biotechnologie und Bioinformatik
Am Hofgarten 10 | 85354 Freising
Margarete Savarino
Tel.: +49 8161 71-4059 | Fax.: +49 8161 71-5116
margarete.savarino@hswt.de

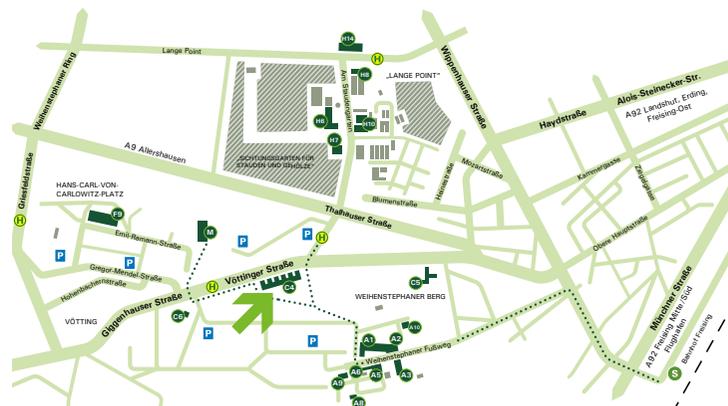
TAGUNGSGBÜHR

Die Teilnahme an der Veranstaltung ist kostenlos. Wir bitten Sie sich bis spätestens 31.03.2013 anzumelden!

TAGUNGSORT

Hochschule Weihenstephan-Triesdorf (Gebäude C4)
Weihenstephaner Berg 5
85354 Freising

Aufgrund einer Messe in München sind viele Hotels bereits ausgebucht. Eine zügige Organisation einer Unterkunft wäre von Vorteil. Restkapazitäten können bei uns erfragt werden.

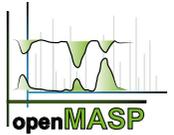


C 4 Gebäude an der Pappelallee | M Mensa

HOCHSCHULE
WEIHENSTEPHAN-TRIEDSDORF
UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES



RISK
IDENT



WORKSHOP
STOFF-IDENT &
openMASP
18. – 19.04.2013



ARBEITSPLATTFORM IM RISK-IDENT PROJEKT

Die Arbeitsplattform besteht aus Teilen des Analysetools openMASP sowie den Datenbanken STOFF-IDENT und DAIOS.

STOFF-IDENT und openMASP verwenden die Open Source Software der Eclipse-Foundation. Die nicht-gewinnorientierte Kooperation kümmert sich um die heute wohl am weitesten verbreitete freie Softwareplattform Eclipse. Durch ihre offene und modulare Struktur kamen über die Jahre viele Softwarekomponenten hinzu, sodass auf Basis von Eclipse heute eine breite Anzahl an Applikationen entwickelt werden können.

STOFF-IDENT

STOFF-IDENT nutzt Eclipse RAP, welches die grafischen Komponenten von Eclipse über einen Browser nutzbar macht. In die Datenbank wurden zunächst alle Stoffe aufgenommen, die bisher im Rahmen der REACH-Verordnung registriert werden mussten. Dies sind:

- » alle hochtonnagigen Stoffe mit einem Produktionsvolumen über 1000 t/a
- » R50/53-Stoffe (Stoffe, die sowohl sehr giftig für Wasserorganismen sind als auch in Gewässern längerfristige schädliche Wirkungen haben können) mit Produktionsvolumina über 100 t/a
- » CMR-Stoffe (Stoffe, die kanzerogen, mutagen und/oder reproduktionstoxisch sind) mit Produktionsvolumina über 1 t/a

openMASP

Weiterhin informiert der Workshop über die bislang nur intern von TUM und HSWT benutzte Software openMASP. Sie wurde entwickelt, um Daten der Massenspektrometrie zu analysieren. Darüber hinaus kann sie aber auch genutzt werden, um Wissenschaftler schnell und unkompliziert bei der Entwicklung neuer Verfahren (z.B. RTI) zu unterstützen.

ZIELGRUPPE WORKSHOP

Der Workshop wendet sich an analytisch arbeitende Personen aus dem Bereich der Flüssigchromatografie und speziell dem Bereich der Wasseranalyse. Des Weiteren sind alle Personen herzlich eingeladen, die eine zukunftsfähige ‚open source‘ Software kreieren und nutzen möchten.

PROGRAMM

18.04. C4.263

11:30 Uhr	Treffpunkt an der Mensa (für Hungerige)
12:30 Uhr	meet & greet (im Konferenzraum)
13:00 Uhr	Begrüßung Prof. Dr. Frank Leßke HSWT
13:15 Uhr	openMASP Michael Krappmann HSWT
14:00 Uhr	Eclipse Industry Working Groups Ralph Müller Eclipse Foundation
15:00 Uhr	Pause
15:30 Uhr	Das Projekt RISK-IDENT Dr. Manfred Sengl LfU
16:00 Uhr	Arbeitsplattform aus STOFF-IDENT und openMASP Marco Luthardt HSWT
17:00 Uhr	STOFF-IDENT in der Anwendung Dr. Marion Letzel LfU
19:00 Uhr	Abendessen im Bräustüberl

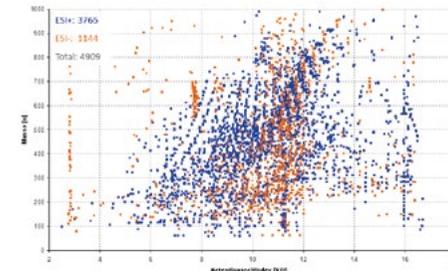
19.04. C4.263 UND C4.264

09:00 Uhr	Workshop: Hands-on STOFF-IDENT Leitung: Dr. Marion Letzel Die Datenbank STOFF-IDENT wird anhand von Fallbeispielen vorgestellt und Verbesserungsvorschläge werden diskutiert.
09:00 Uhr	Workshop: Retention Time Index (RTI) Leitung: Dr. Thomas Letzel Hersteller flüssigchromatographischer Instrumente und Software präsentieren ihre Ergebnisse aus dem ersten RTI-Ringversuch. Die bisher ein Dutzend angemeldeten Industrievertreter diskutieren dabei über Möglichkeiten und Nutzen des RTI.
13:00 Uhr	Abschlussbesprechung
14:00 Uhr	Ende

STOFF-IDENT UND openMASP

HANDHABUNG ANALYTISCHER KENNGRÖSSEN

Was ist in der Wasserprobe enthalten? Die beste Technologie, um dies herauszubekommen ist aktuell das sogenannte „Suspected-Target Screening“. Dabei vermisst man die Proben zunächst mittels klassischen Non-Target-Screening-Ansätzen, das heißt LC-MS(/MS). Anschließend werden die Daten jedoch nicht wie üblich gegen eine chemische (Spektr-)Datenbank, sondern gegen die derzeit im Aufbau befindliche Stoffdatenbank STOFF-IDENT abgeglichen, die nur potentiell im Wasser vorkommenden Substanzen enthält. Zunächst werden per Flüssigkeitschromatografie und Massenspektrometrie die Retentionszeit und die (exakte) Masse ermittelt. Mithilfe eines Referenzmixes und der Retentionszeit wird der RTI berechnet. Dieser und die (exakte) Masse werden mit der Datenbank STOFF-IDENT und der Arbeitsplattform abgeglichen. Als Ergebnis erhält man Summenformel und Strukturvorschläge.



RTI (RETENTION TIME INDEX)

Der RTI dient zusätzlich dazu, dass Sie

- » bei regelmäßiger Nutzung des Referenzmixes automatisch eine Validierung Ihrer Chromatographie (über RTI), Ihrer massenspektrometrischen Spezifität (über m/z), und Ihrer massenspektrometrischen Sensitivität (über die Signalfäche) durchführen können,
- » ihre Chromatographie direkt mit anderen Laboren, die ebenfalls den Referenzmix nutzen, abgleichen können,
- » den logP (später auch logD) für unbekannte Moleküle über Chromatographie angeben können (ähnlich der OECD GUIDELINE FOR TESTING OF CHEMICALS 117,)
- » den RTI als einfaches Vorhersagewerkzeug einsetzen können.