



Datenauswertungsstrategien unter Nutzung von STOFF-IDENT (SI) und DAIOS



S. Grosse*, T. Lucke*, W. Schulz*, T. Letzel*

*Analytische Forschungsgruppe, Lehrstuhl für Siedlungswasserwirtschaft,
Technische Universität München

+Zweckverband Landeswasserversorgung, Langenau

Hintergrund

- Vergleichbarkeit von Ergebnissen aus dem Non-Target-Screening (NTS) unterschiedlicher Labore aufgrund der Anwendung unterschiedlicher Datenbanken und Referenzstandards aktuell schwierig
- Datenanalyse und Substanzidentifizierung derzeit nur mit erheblichem manuellem Aufwand möglich
- Derzeit kein harmonisierter NTS-Workflow
- Einbindung von Datenbanken und Tools erforderlich

Ergebnis/Ausblick

- Erstellung einer strukturierten Vorgehensweise
- Vergleichbarkeit der Ergebnisse unterschiedlicher Labore wird durch gemeinsamen Workflow geschaffen
- Standardisierung der Vorgehensweise zur Identifikation von Spurenstoffen in der aquatischen Umwelt
- Effektive Nutzung erforderlicher Tools zur Datenanalyse über die **Arbeitsplattform FOR-IDENT**

Methodik

RPLC-HRMS(MS) (HILIC)-RPLC-HRMS
TOF
Q-TOF

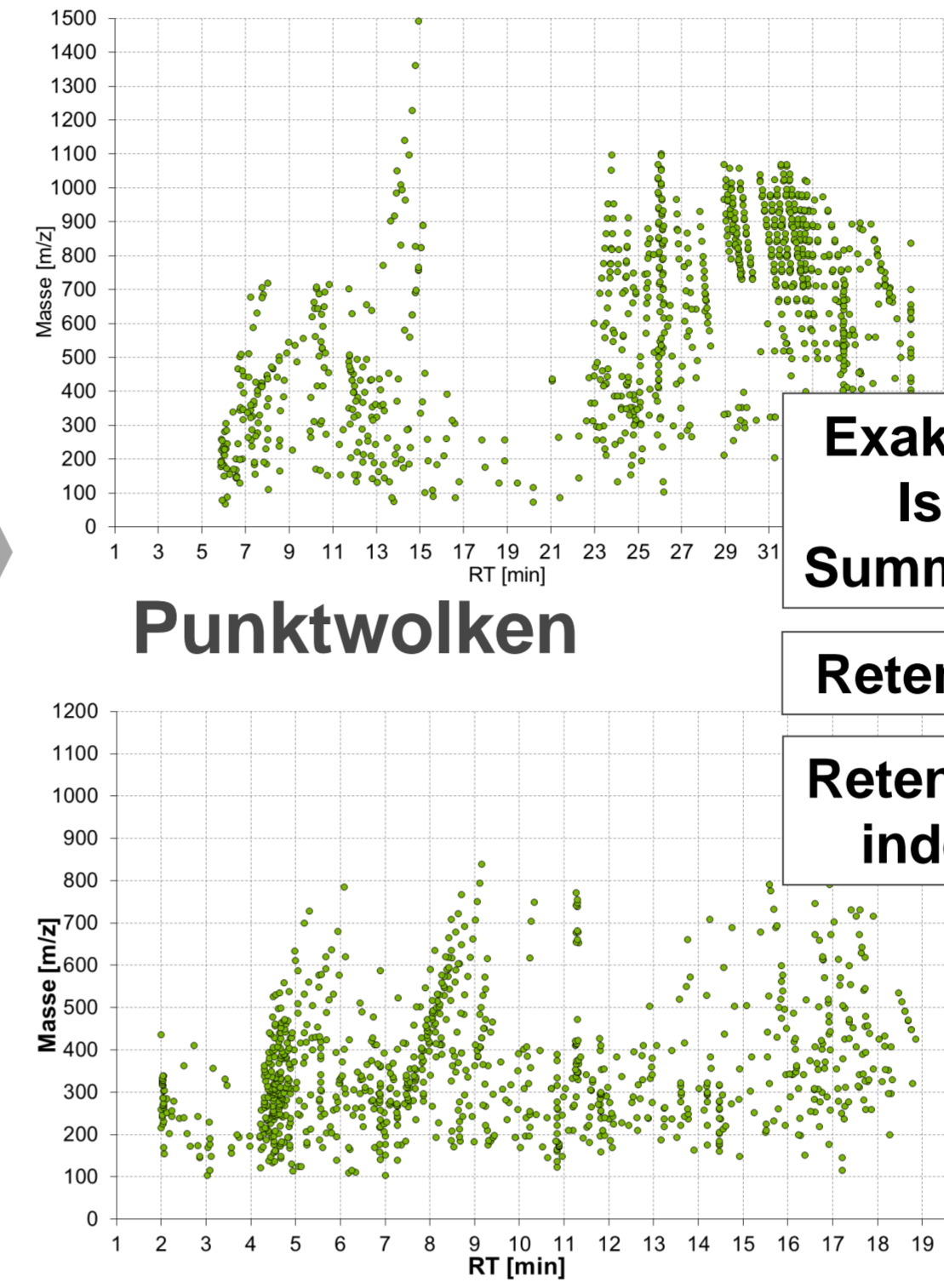


bzw.



Auswertung mittels standardisierten NTS-Workflows

Feature Finding Feature-Validierung



Exakte Masse
Isotopie
Summenformel
Retentionszeit
Retentionszeit-
index (RTI)

Datenbank- gestützte Substanz- Identifikation

Datenbank:
STOFF-IDENT



Datenbank:
DAIOS



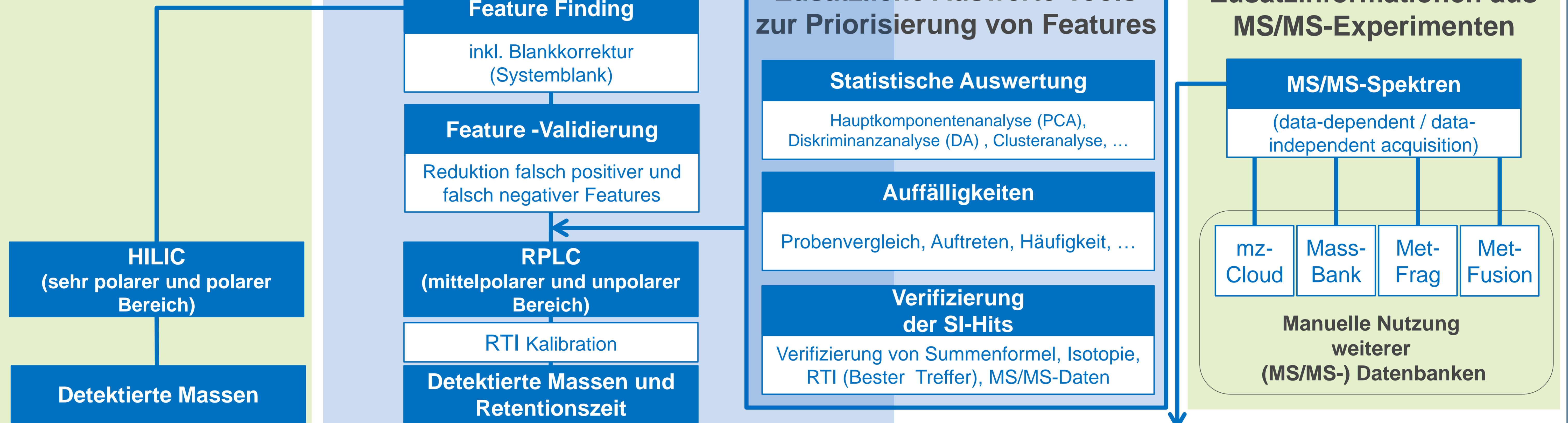
Non-Target-Screening-Workflows

Zusatzinformationen aus HILIC-HRMS

RPLC-HRMS(/MS)

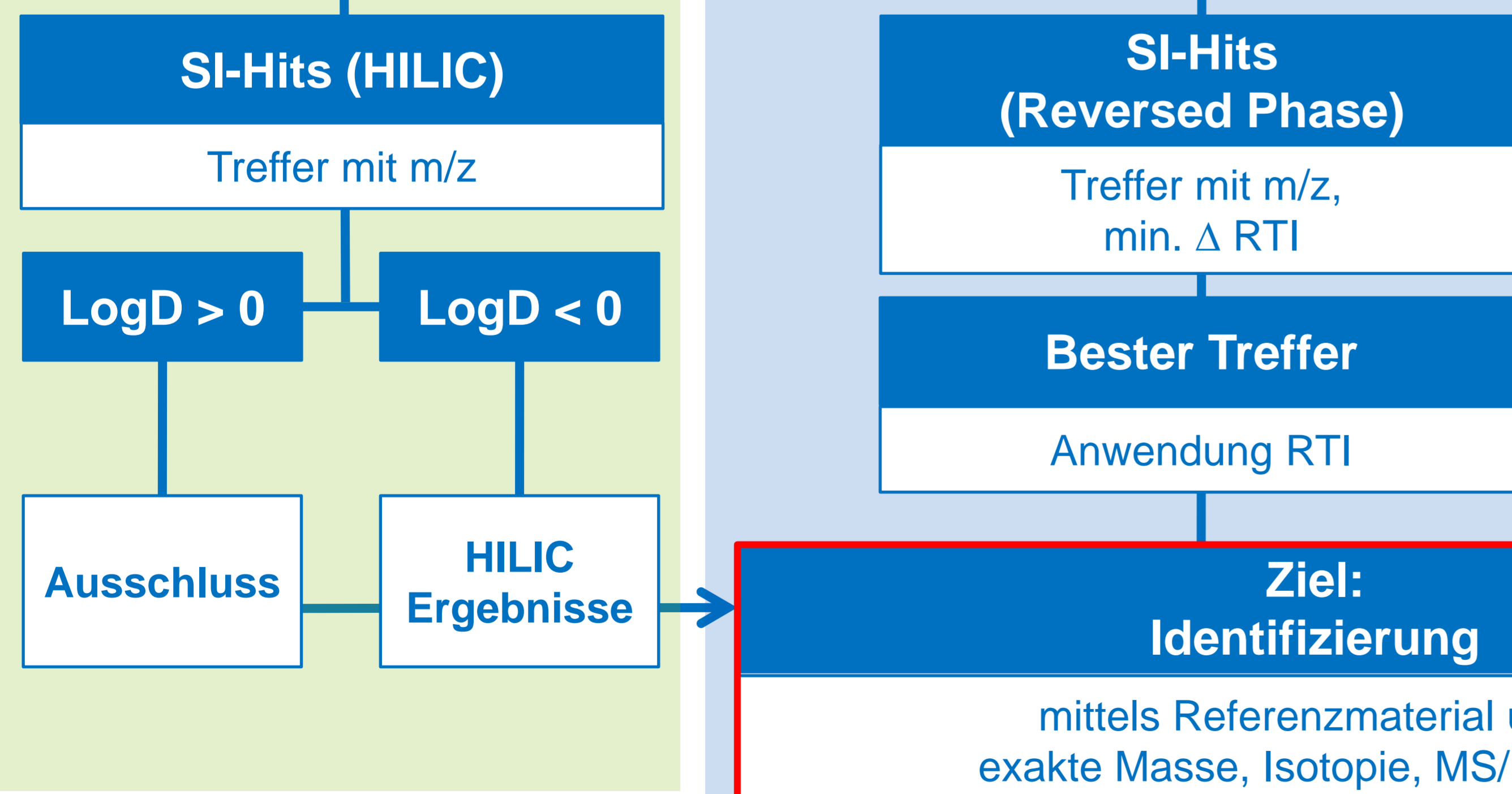
Zusätzliche Auswerte-Tools zur Priorisierung von Features

Zusatzinformationen aus MS/MS-Experimenten



?TOFF IDENT- Abfrage der Features → Export der Hits

Substanzsuche in



Suche nach Metaboliten oder Transformationsprodukten im Transformation-Tree

Danksagung

Die Autoren danken dem Projektteam RISK-IDENT für die gute Zusammenarbeit bei der Erarbeitung der Non-Target-Screening-Strategien und den Aufbau der Datenbank STOFF-IDENT. Ein weiterer Dank gilt dem Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) für die weiterführende Förderung der Weiterentwicklung der Non-Target-Screening-Strategien im Rahmen des Folgeprojektes FOR-IDENT.

