

BMBF-Verbundvorhaben FOR-IDENT
Langenau 10. - 11.11.2015

DAIOS

Database Assisted Identification of Organic Substances

W. Schulz, N. Egetenmeyer, T. Lucke
und R. Winzenbacher

Zweckverband Landeswasserversorgung

Wasserchemische Gesellschaft

Fachgruppe in der GDCh

Home Kontakt Jobbörse Impressum

WASSERCHEMISCHE WG GESELLSCHAFT

Startseite Termine DEV Publikationen Downloads & Infos Lehrveranstaltungen

Willkommen bei der Wasserchemischen Gesellschaft!

Wasser

"Wasser ist H₂O, zwei Teile Wasserstoff, ein Teil Sauerstoff. Aber dann gibt es noch eine dritte Komponente, die es zu Wasser macht, und niemand weiß, welche das ist." (D.H. Lawrence, 1885 - 1930)

Wasser ist das Elixier des Lebens – alle Lebensprozesse finden im Wasser statt.

Wasser macht die Erde bewohnbar und ist durch nichts zu ersetzen.

Wasser betreibt die globale Klima-Maschine, Wasser ist das universelle Löse- und Transportmittel.

Die Qualität des Wassers bestimmt unser Leben.

Wasser gilt als wichtigster Rohstoff des 21. Jahrhunderts.

Schutz, Aufbereitung, Sicherung der Qualität, Nutzung sowie Bewirtschaftung des Wassers sind zentrale Aufgaben von globaler Bedeutung.

Veranstaltungen der Wasserchemischen Gesellschaft

Montag, 26. Mai 2014

[Wasser 2014 Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft](#)

Wasser 2014

Einladung

GDCh Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft

Wasser 2014

Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft

26. - 30. Mai 2014

Hamburg

www.gdch.de/wasser2014

Aktuelles aus der Wasserchemie in 2014 bei der Aktuellen Wochenschau der GDCh

Im Wochentakt werden neue Beiträge mit...

<http://www.wasserchemische-gesellschaft.de/de/>

Fachausschuss (FA) Non-Target-Screening

Die Wasserchemische Gesellschaft
Über uns
Organisation
Vorstand
Ehrenvorsitzende
Sekretariat
Hauptausschüsse
Fachausschüsse
Hauptausschuss I
Hauptausschuss II
Hauptausschuss III
Veranstaltungen
Jahrestagungen
"Vom Wasser"
Chroniken
Jobbörse

Fachausschüsse - Hauptausschuss II

- Stoffe und Gewässergüte -

FA Biologische Verfahren zur Beurteilung der Gewässergüte



Leitung: Dr. Tamara Grummt
Umweltbundesamt Dienstgebäude Bad Elster
Heinrich-Heine-Straße 12
08645 Bad Elster

Tel.: +49 37437 76 354
Fax: +49 37437 76 219
e-Mail: tamara.grummt@uba.de

FA Non Target Screening



Leitung: Dr. Wolfgang Schulz
Zweckverband Landeswasserversorgung
Betriebs- und Forschungslaboratorium
Am Spitzigen Berg
89129 Langenau

e-Mail: schulz.w@lw-online.de
Tel.: +49 7345 9638-2291
Fax: +49 7345 9638-2290

Fachausschuss „Non-Target-Screening“ im Hauptausschuss II Wasserchemische Gesellschaft

- Ziel: Aufbau einer Datenbank (DAIOS)
zur Identifizierung von Substanzen in der LC-MS
- 2009 Gründung des FA in Berlin
Leitung FA: Wolfgang Schulz
- 2010 -2012 4 Sitzungen in Frankfurt (3) / Langenau (1)
- 2013 Workshop in Augsburg in Verbindung mit
Risk-Ident und Askuris
- 2014 Workshop non Target Screening in Augsburg

Name	Adresse	
Dünnbier, Uwe	Labor der BWB	1
Geiß, Sabine	Thüringer Landesanstalt für Umwelt und Geologie	2
Gordalla, Birgit	Bereich Wasserchemie Engler-Bunte-Institut Universität Karlsruhe	3
Jekel, Martin	TU Berlin FG Wasserreinhaltung, Sekr. KF 4	4
Kerl, Wolfgang	Umweltanalytik und Wasser/Dampf-Überwachung BASF SE	5
Lange, Frank Thomas	DVGW-Technologiezentrum	6
Müller, Alexander	Zweckverband Landeswasserversorgung	7
Peschka, Manuela	Hochschule Fresenius	8
Petri, Michael	ZV Bodensee-Wasserversorgung	9
Putschew, Anke	TU Berlin	10
Reupert, Rolf	Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz NRW Dienststelle Düsseldorf	11
Rörden, Ocke	RheinEnergie AG	12
Sawal, George	Umweltbundesamt FG II 2.5 Labor für Wasseranalytik	13
Schulz, Wolfgang	Zweckverband Landeswasserversorgung	14
Theobald, Norbert	Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie	15
Werres, Friedrich	IWW Rheinisch-Westfälisches Institut für Wasserforschung	16
Zühlke, Sebastian	INFU, TU Dortmund	17

2009

HRMS

Name	Adresse	
Dünnbier, Uwe	Labor der BWB	1
Geiß, Sabine	Thüringer Landesanstalt für Umwelt und Geologie	2
Kerl, Wolfgang	Umweltanalytik und Wasser/Dampf-Überwachung BASF SE	3
Lange, Frank Thomas	DVGW-Technologiezentrum	4
Petri, Michael	ZV Bodensee-Wasserversorgung	5
Putschew, Anke	TU Berlin	6
Reupert, Rolf	Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz NRW Dienststelle Düsseldorf	7
Rörden, Ocke	RheinEnergie AG	8
Sawal, George	Umweltbundesamt FG II 2.5 Labor für Wasseranalytik	9
Schulz, Wolfgang	Zweckverband Landeswasserversorgung	10
Theobald, Norbert	Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie	11
Zühlke, Sebastian	INFU, TU Dortmund	12
Zwiener, Christian	Uni Karlsruhe Engler-Bunte-Institut,	13
Fink, Angelika	Hessenwasser GmbH & Co. KG	14
Schlüsener, Michael	Bundesanstalt für Gewässerkunde	15
Kowal, Sebastian	IWW Rheinisch-Westfälisches Institut für Wasserforschung	16
Will, Joanna	Ruhrverband	17
Wittchen, Martin	Gelsenwasser	18

2014

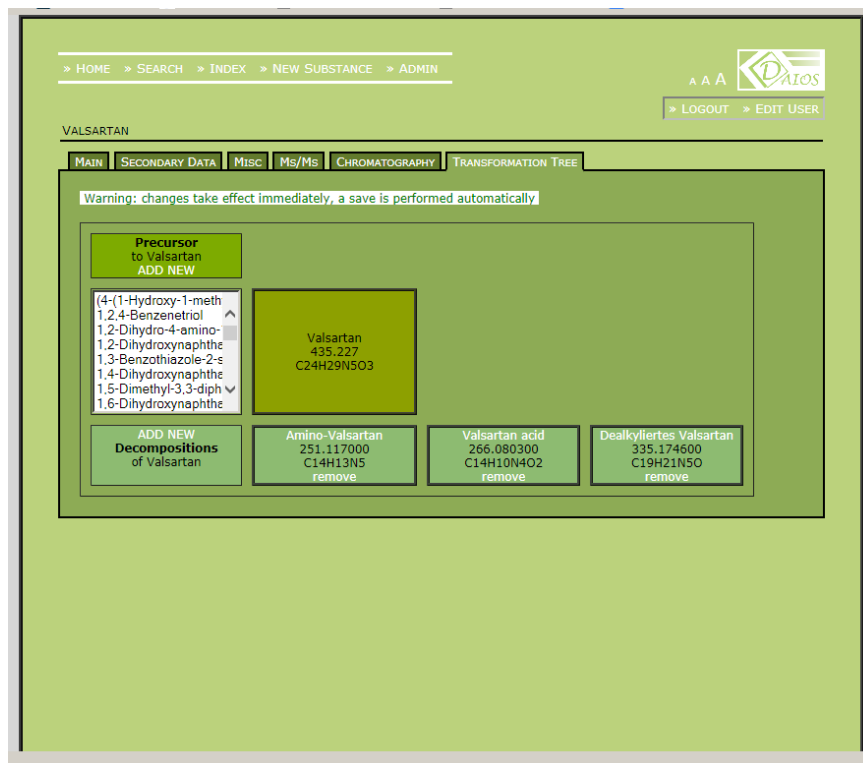
Database conceived for the non-target screening



Database Assisted Identification of Organic Substances

Database Assisted Identification of Organic Substances (DAIOS)

- Ausgangspunkt: Aufbau einer Datenbank zur Unterstützung der Identifizierung von organischen Spurenstoffen in der aquatischen Umwelt



- Neuprogrammierung von DAIOS im Projekt ASKURIS (Fertigstellung April 2014)

Home

Search

Edit

User administration

DAIOS 2.0

Edit User Properties

Contact

Logout

Mass

Meta

Index

Search

Clear

Mass range

to

Exact mass

+/- unit

Precursor mass

+/- unit

Mass fragments

+/- unit

History

Clear

Details

Ms/Ms

Transformation Tree

View Raw Data

Download Molfile

Stoff-Ident Database Search with RTI-Calculation (Bavarian environmental Agency)

Hit of Valsartan for
monoisotopic mass 435.2270

Logo: UMWELTMINISTERIUM BAYERN

Startseite Wir Stellenangebote Ausschreibungen Kontakt Impressum

Bayerisches Landesamt für Umwelt

Themen: Umweltqualität, Wirtschaft, Kommunen, UmweltWissen, Publikationen, Veranstaltungen, Presse

Themen A-Z Abfall Altlasten Analytik/Stoffe Boden Energie Geologie Lärm Luft Natur Strahlung Wasser

Suche Suspected target screening

Über Kontakt Benutzer Ausloggen

Suspected target screening

+ Datei hinzufügen Ausführen

pH: 3.00

ppm: 5

Ionisierung: +H

Stationäre Phase: C18

Dateien: Compounds for SI.xls

Filter: Bereichsfilter (z.B. 1.45-2.54) Nur Beste

Target identifier	Best match	Monoisotopic mass	Δ mass	logP	Δ logP	Name	CAS	EC Number	Elemental formula	SMILES
436.2343 / 10.80	X	435.2270	0.0006	5.00	2.51	valsartan	137862-53		C ₂₄ H ₂₉ N ₅ O ₃	CCCCC(=O)N(Cc1ccc(cc1)-C(=O)N(C)C)C(=O)N(C)C
252.1230 / 11.59	X	251.1158	0.0006	2.71	-0.11	Dipropyl pyridine-2,5-dicarboxy	136-45-8	205-245-9	C ₁₃ H ₁₇ N ₂ O ₄	CCCC(=O)N(C)C(=O)N(C)C
208.1333 / 4.83	X	207.1259	0.0004	2.22	2.09	Cidopirox	29342-05-4		C ₁₂ H ₁₇ N ₂ O ₂	Cc1cc(C2CCCCC2)n(O)c(=C
209.1174 / 7.05	X	208.1099	0.0003	1.82	0.44	[[p-(2-methoxyethyl)phenoxy]r	56718-70-4	260-353-3	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	COCCc1ccc(OCC2CO2)cc1

RTI standard

RTI calculation for ALL compounds

Kalibrationsdaten							Ziele							
Stoffname	RTI	logP	RT Mittel	rt1	rt3	rt2	Identifizier	RTI	logP	Exakte Masse	RT Mittel	rt1	rt3	rt2
Metformin	50.0	-1.36	1.2	1.2			252.1230 / 11.59	112.9	2.82	252.1230	11.6	11.6		
Chloridazon	87.2	1.11	6.4	6.4			267.0878 / 7.27	92.3	1.45	267.0878	7.3	7.3		
Carbetamide	95.3	1.65	7.8	7.8			336.1814 / 9.04	101.4	2.05	336.1814	9.0	9.0		
Monuron	99.5	1.93	8.2	8.2			436.2343 / 10.80	107.9	2.49	436.2343	10.8	10.8		
Metobromuron	104.2	2.24	10.2	10.2			207.1735 / 11.57	113.2	2.83	207.1735	11.6	11.6		
Chlorbromuron	113.4	2.85	11.7	11.7			207.1735 / 4.19	70.6	0.01	207.1735	4.1	4.1		

Entries found: 1 Visible 1

	Name	CAS	Exact mass	Molare mass
●	Valsartan	137862-53-4	435.2270	435.52

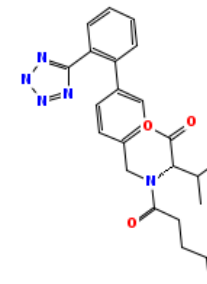
[i Details](#)
[Ms/Ms](#)
[Transformation Tree](#)

Valsartan

[View Raw Data](#)
[Download Molfile](#)

General information

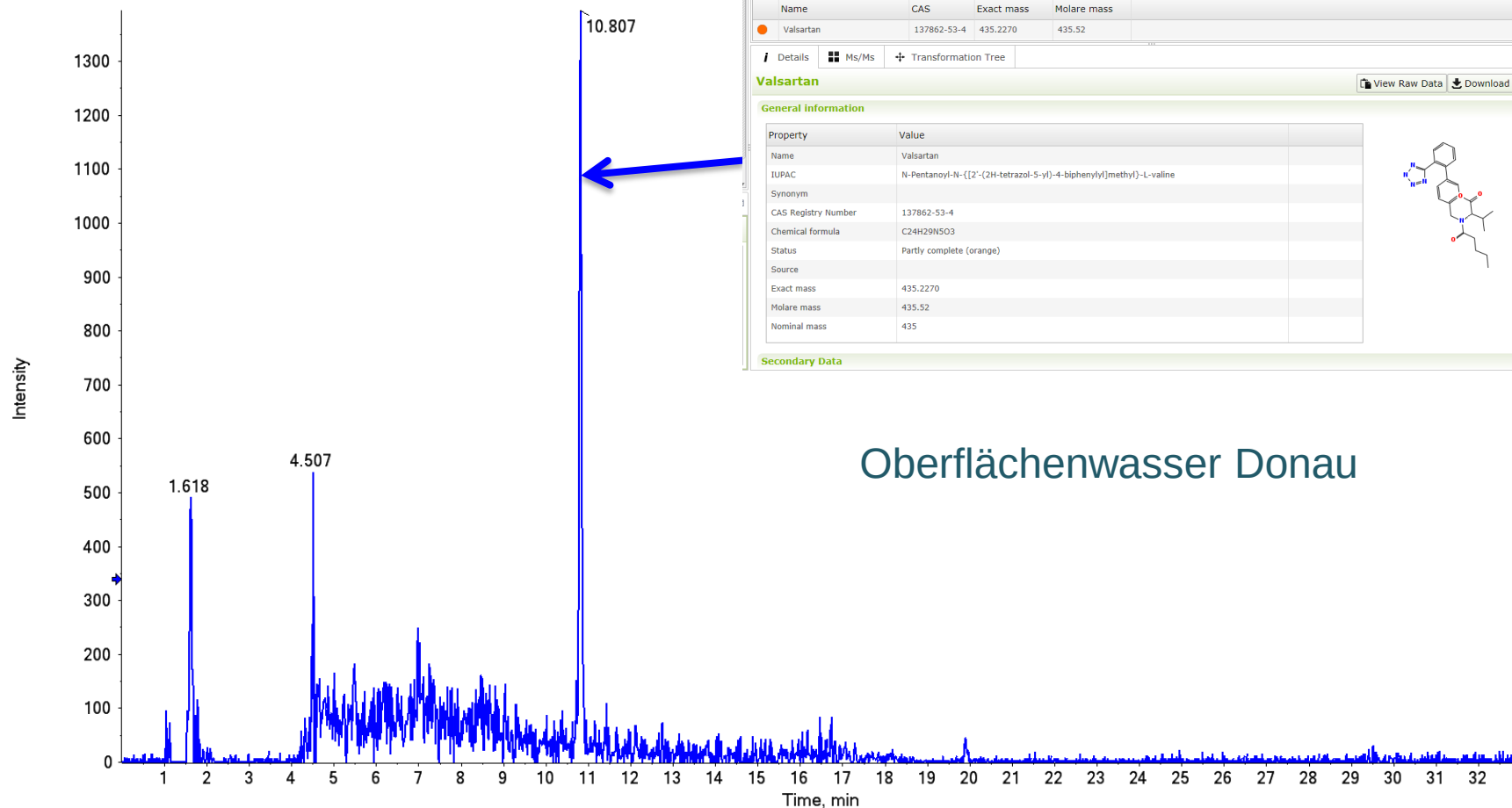
Property	Value
Name	Valsartan
IUPAC	N-Pentanoyl-N-{[2'-(2H-tetrazol-5-yl)-4-biphenyl]methyl}-L-valine
Synonym	
CAS Registry Number	137862-53-4
Chemical formula	C ₂₄ H ₂₉ N ₅ O ₃
Status	Partly complete (orange)
Source	
Exact mass	435.2270
Molare mass	435.52
Nominal mass	435



Secondary Data

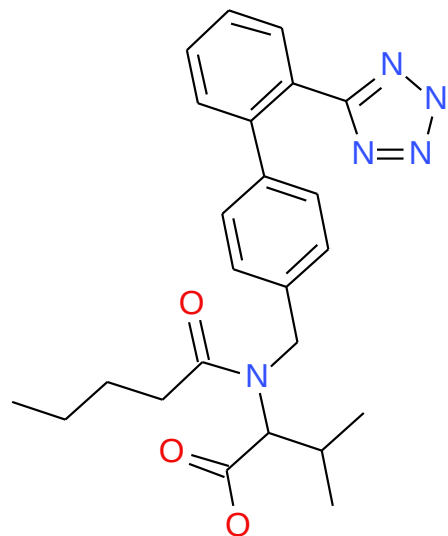
XIC (extracted ion chromatogram) von Valsartan

Valsartan XIC from 14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_Donau_04-03-14_05.wiff (sample 1)

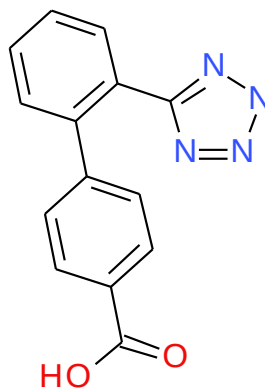


Oberflächenwasser Donau

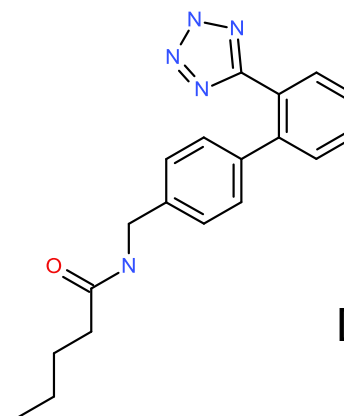
Transformation Tree



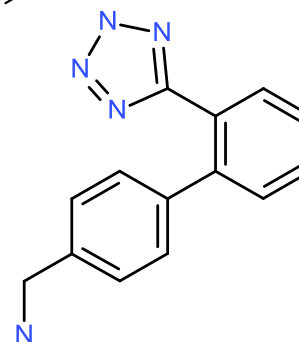
Valsartan



Valsartansäure



Desalkyliertes Valsartan



Amino-Valsartan

Search Edit User administration
DAIOS 2.0 Edit User Properties Contact Logout

Mass Meta Index

Search Clear

Mass range: to

Exact mass: +/- ppm

Precursor mass: +/- unit

Mass fragments: +/- unit

History Clear

Mass: Exact mass = 435.227 ± 5.0 ppm;

Search Results

Entries found: 1 Visible 1

type to filter

Name	CAS	Exact mass	Molare mass
Valsartan	137862-53-4	435.2270	435.52

Details Ms/Ms Transformation Tree

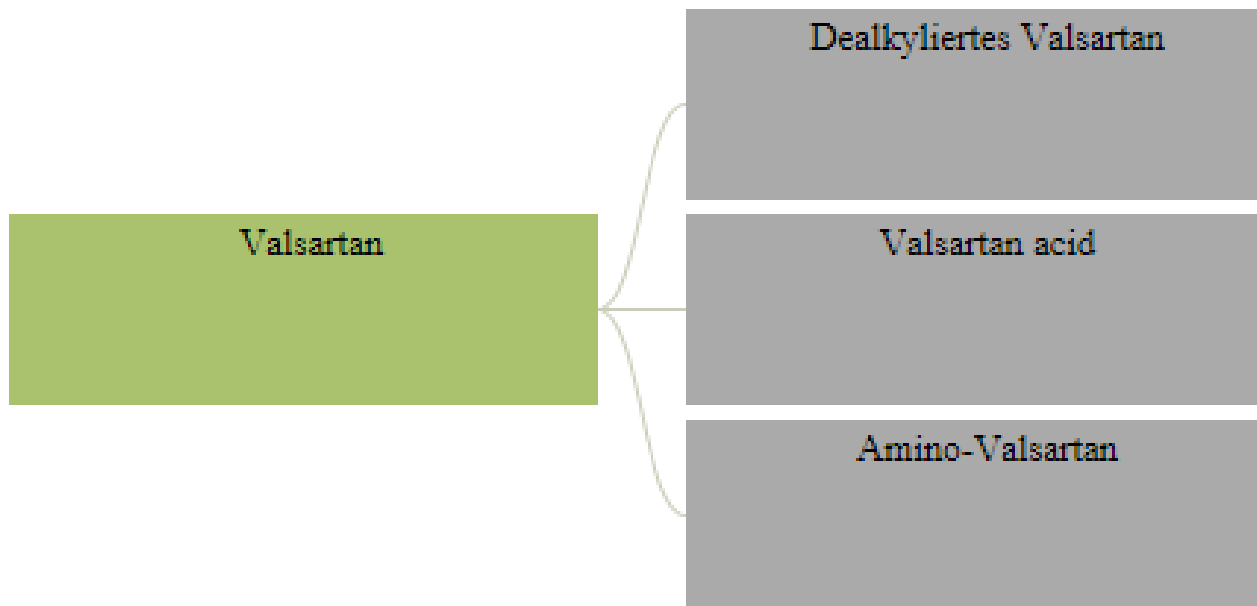
Valsartan Info

Valsartan

Dealkyliertes Valsartan

Valsartan acid

Amino-Valsartan



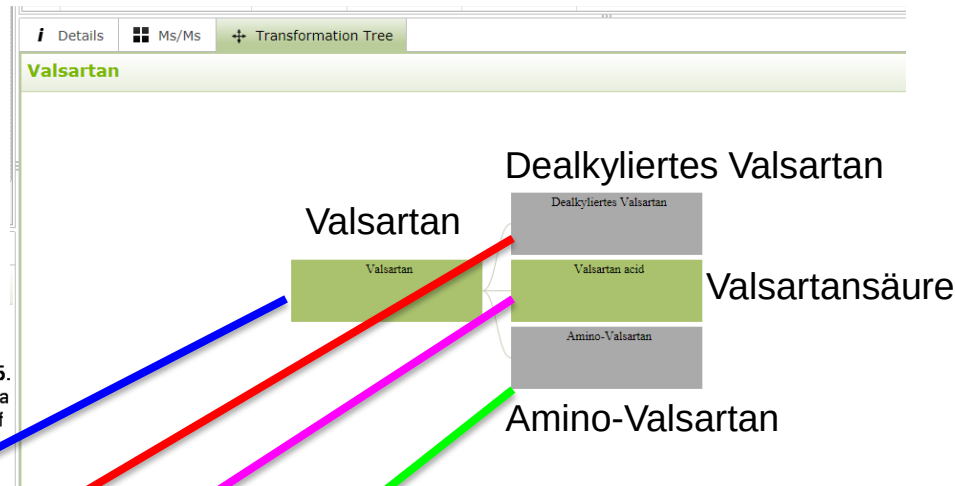
contact  Logout

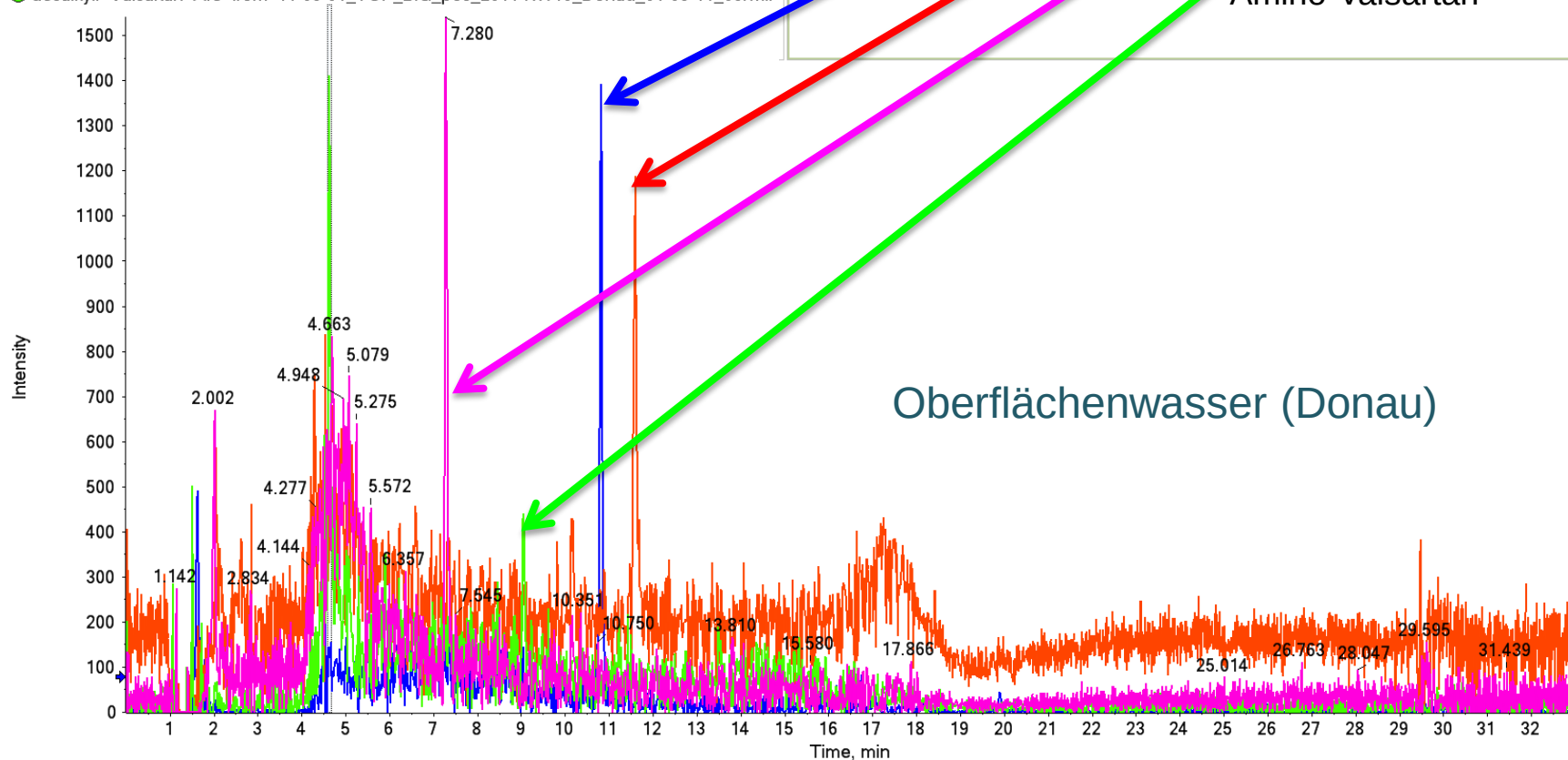
 

 Info

XICs von Valsartan und seinen Transformationsprodukten

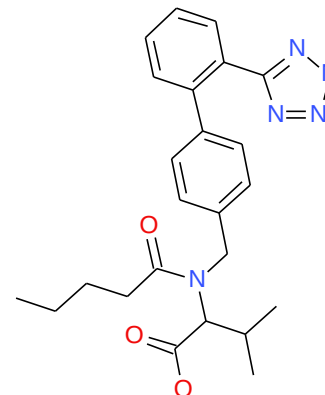


- Valsartan XIC from 14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_Donau_04-03-14_05.wiff (sample)
- Valsartansaeure XIC from 14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_Donau_04-03-14_05.
- Aminovalsartan XIC from 14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_Donau_04-03-14_05.wiff (sa)
- desalkyl. Valsartan XIC from 14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_Donau_04-03-14_05.wiff



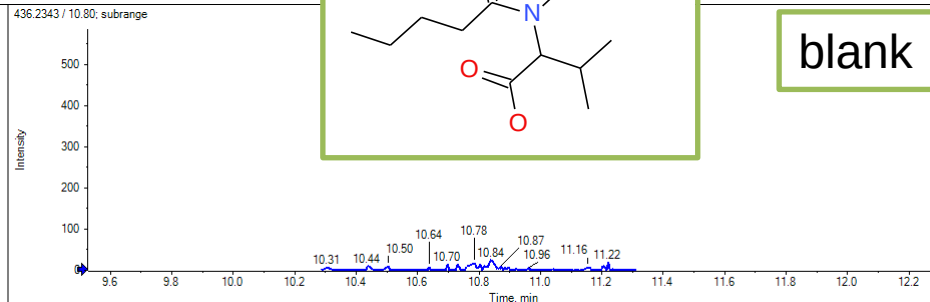
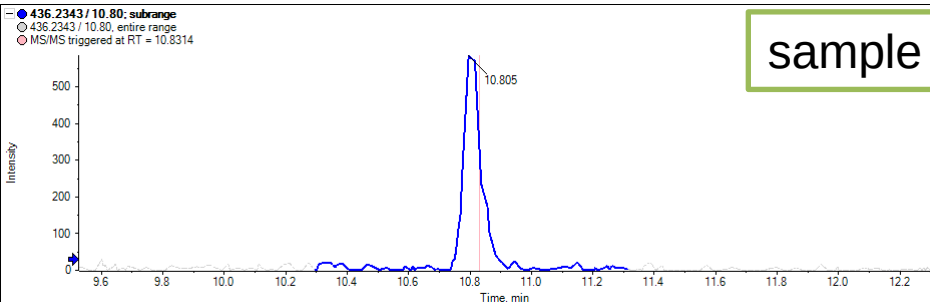
Identification using DAIOS Database with IDA-MS/MS

Valsartan



sample

blank



MasterView New Session

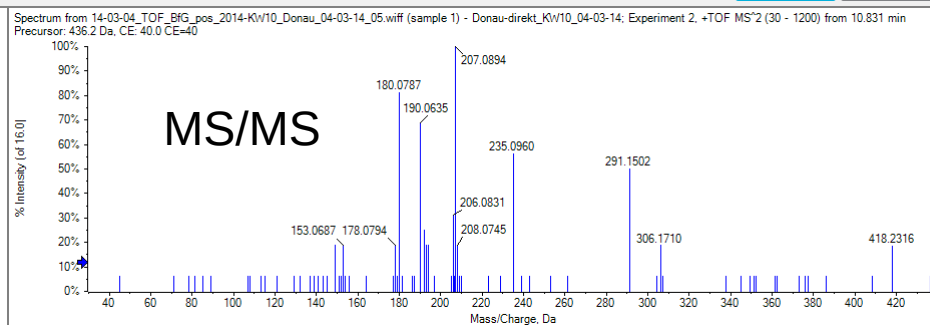
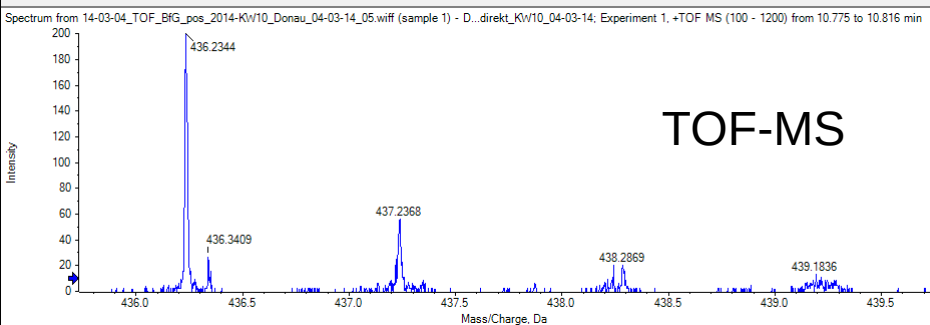
Ctrl	Wiff file Name	Sample Name	Number of positive results	Name	Formula	Isotope	Mass (Da)	Adduct	Int Std	Extraction Mass (Da)	Width (Da)	Width (ppm)	Found At RT (min)	Formula Finder Result	Fragment Mass (Da)	Expected RT (min)	RT Width (min)	Found At Mass (Da)	Error (ppm)	Isotope Ratio Difference (%)
✓	14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_Donau_04-03-14_05	Sample 1	9592	435.8099 / 17.82		0	435.80992			435.80992	0.005	11.473	17.84	No Formula Found		17.82	1	435.80988	-0.1	
✓	14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_0uL-Injektion_01	Sample 1	7436	436.0924 / 4.79		0	436.09235			436.09235	0.005	11.465	4.6	C17H25NO6S3		4.79	1	436.09146	-2	
				436.12479 / 4.90		0	436.12479			436.12479	0.005	11.465	4.69	C25H17N5OS		4.9	1	436.12249	-5.3	
				436.1288 / 4.81		0	436.12881			436.12881	0.005	11.465	4.74	C21H25NO5S2		4.81	1	436.12454	-9.8	
				436.1636 / 5.16		0	436.16357			436.16357	0.005	11.464	4.99	C23H17N9O		5.16	1	436.16275	-1.9	
				436.2343 / 10.80		0	436.23427			436.23427	0.005	11.462	10.81	C24H29N5O3		10.8	1	436.23443	0.4	
				436.3413 / 9.61		0	436.34134			436.34134	0.005	11.459	9.61	C26H45NO4		9.61	1	436.34148	0.3	
				436.3415 / 2.52		0	436.34151			436.34151	0.005	11.459	2.84	C19H45N7O2S		2.52	1	436.34177	0.6	
				436.3416 / 6.08		0	436.34161			436.34161	0.005	11.459	6.13	C19H45N7O2S		6.08	1	436.34239	1.8	

Positive result: equal or better ✓✓●●● 0

Sample: 14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_... Control: 14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_...

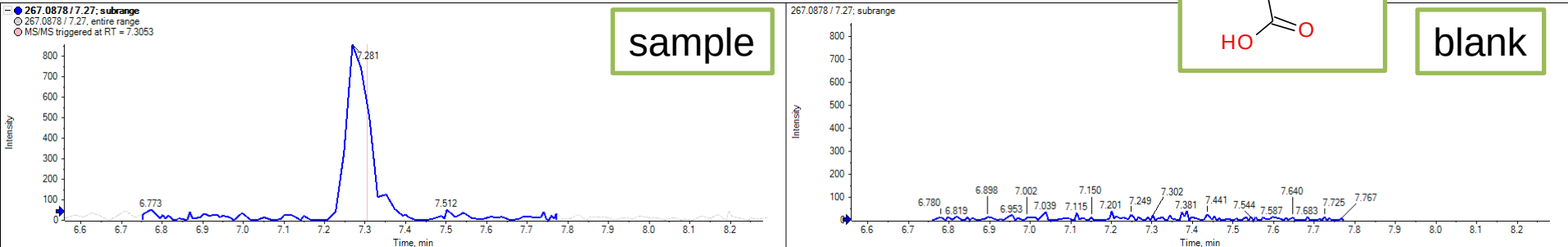
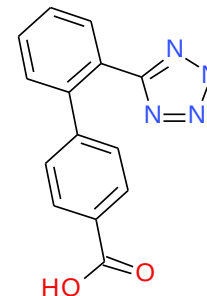
Rows 9720

Process Cancel



Identification using DAIOS Database with IDA-MS/MS

Valsartan Acid



MasterView New Session

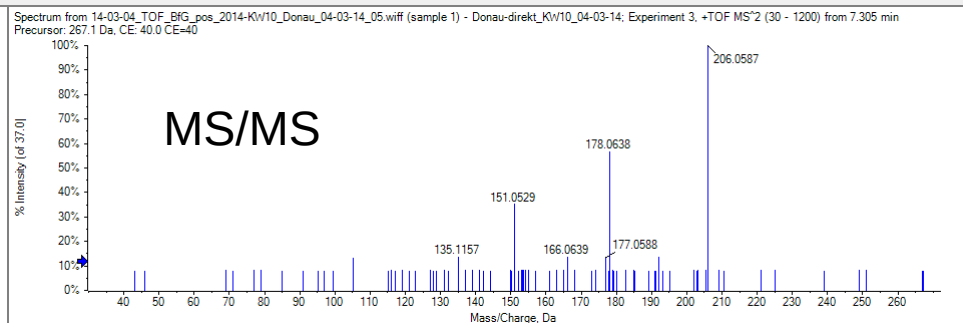
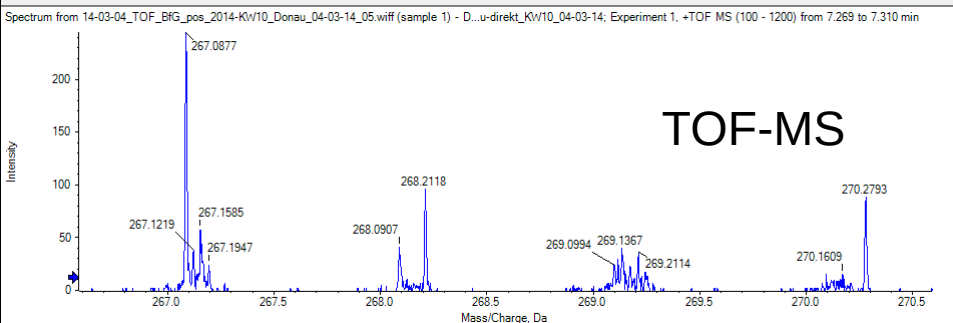
CTR	Wiff file Name	Sample Name	Number of positive results
✓	14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_Donau_04-03-14_05	Sample 1	9692
✓	14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_0uL-Injektion_01	Sample 1	7436

Name	Formula	Isotope	Mass (Da)	Adduct	Int. Std.	Extraction Mass (Da)	Width (Da)	Width (ppm)	Found At RT (min)	Formula Finder Result	Fragment Mass (Da)	Expected RT (min)	RT Width (min)	Found At Mass (Da)	Error (ppm)	Isotope Ratio Difference (%)	F (t)
266.9974 / 3.52		0	266.99742			266.99742	0.005	18.727	3.73	C8H10O6S2		3.52	1	266.9992	6.7		
266.9985 / 2.50		0	266.99849			266.99849	0.005	18.727	2.84	C12H2N4O2S		2.5	1	266.99752	-3.6		
266.9998 / 4.24		0	266.99977			266.99977	0.005	18.727	3.75	C8H10O6S2		4.24	1	266.99877	-3.7		
267.0867 / 4.90		0	267.08666			267.08666	0.005	18.721	4.96	No Formula Found		4.9	1	267.08571	-3.6		
267.0878 / 7.27		0	267.08779			267.08779	0.005	18.72	7.28	C14H10N4O2		7.27	1	267.08768	-0.4		
267.1209 / 6.52		0	267.12094			267.12094	0.005	18.718	6.16	C10H22N2O2S2		6.52	1	267.12168	2.8		
267.1210 / 5.20		0	267.12102			267.12102	0.005	18.718	5.29	C10H14N6O3		5.2	1	267.12009	-3.5		
267.1215 / 5.95		0	267.12151			267.12151	0.005	18.718	5.95	C14H18O5		5.95	1	267.12157	0.2		
267.1308 / 4.65		0	267.13075			267.13075	0.005	18.717	4.65	No Formula Found		4.65	1	267.13172	3.6		

Positive result: equal or better ✓✓●●● 0

Sample: 14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_... Control: 14-03-04_TOF_BfG_pos_2014-KW10_...

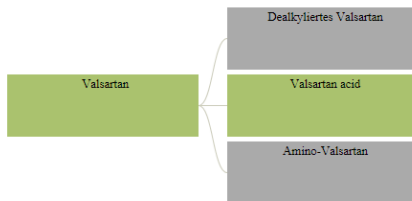
Rows 9720



Vergleich von MS/MS Daten aus DAIOS mit IDA-Spektrum

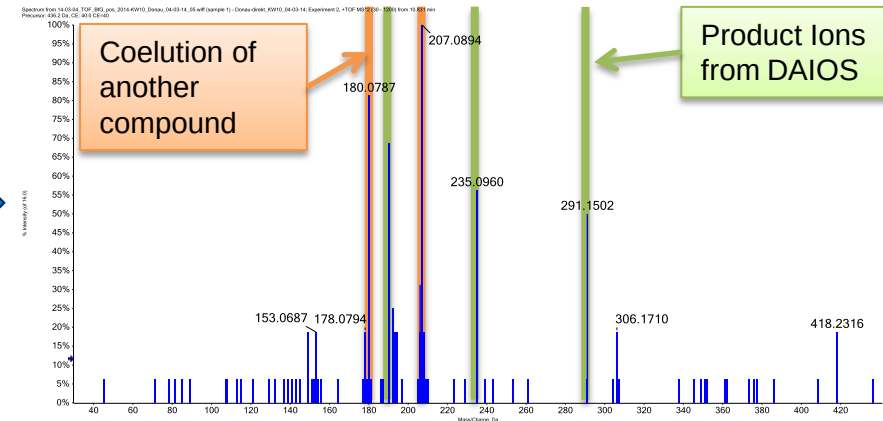
Database Hit
Valsartan mit
MS/MS-Data

Details Ms/Ms Transformation Tree			
Valsartan			
Precursor entries : 2			
Property	Value	Fragments	
Precursor Mass	434.2198	350.0000	
Ion	-H	178.0000	
Property	Value	Fragments	
Precursor Mass	436.2343	207.0000	
Ion	+H	291.0000	
		235.0000	
		190.0000	
		362.0000	

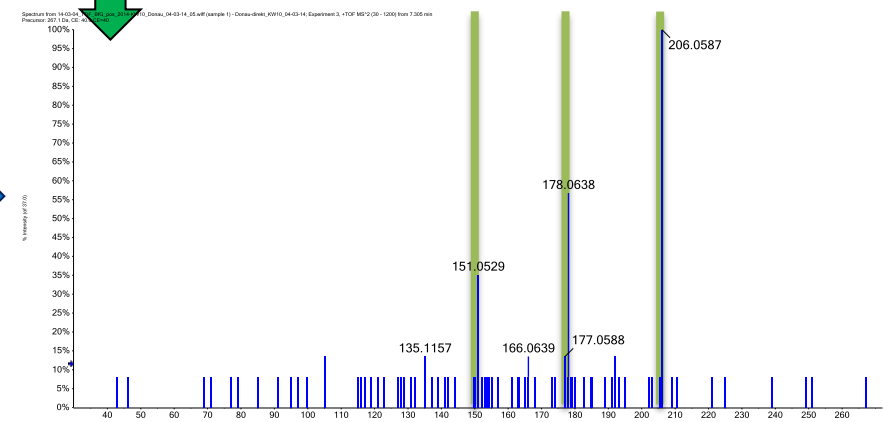


TP von DAIOS:
Valsartan Acid
mit MS/MS-Data

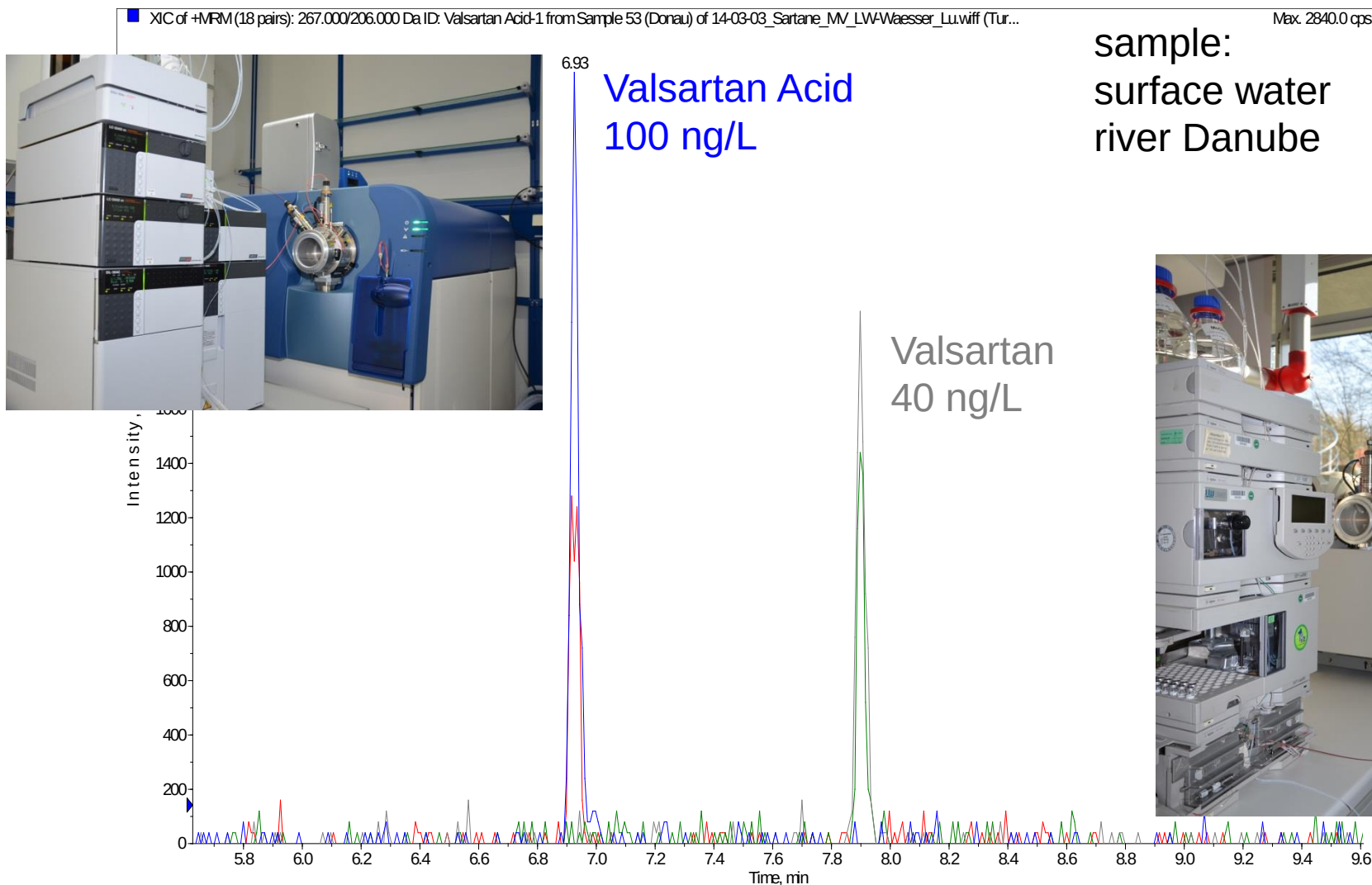
Details Ms/Ms Transformation Tree			
Valsartan acid			
Precursor entries : 2			
Property	Value	Fragments	
Precursor Mass	265.0731	165.0000	
Ion	-H	193.0000	
Property	Value	Fragments	
Precursor Mass	267.0876	206.0000	
Ion	+H	178.0000	
		151.0000	



Database assisted identification
of unknown compounds



Quantification of Valsartan and Valsartan Acid with API 4000



Search

Edit

User administration

DAIOS 2.0

Edit User Properties

Contact

Logout

Mass

Meta

Index

A

B

C

D

E

F

G

H

I

J

K

L

M

N

O

P

Q

R

S

T

U

V

W

X

Y

Z

1

2

3

4

5

6

7

8

9

History

Clear

Index: 1

Isoproturon

Index: 4

4-(Dimethylamino)phenol

4-Formylaminoantipyrine (FAA)

4-Methylaminoantipyrine (MAA)

4-Amino-2,3-dimethyl-1-phenyl-3-pyrazolin-5-one

4-Methylaminoantipyrine (MAA)

4-Formylaminoantipyrine (FAA)

4-Amino-2,3-dimethyl-1-phenyl-3-pyrazolin-5-one

Search Results

Entries found: 14 Visible 14

type to filter

Name	CAS	Exact mass	Molare mass
1,2-Dihydroxynaphthalene	574-00-5	160.0524	160.17
1,4-Dihydroxynaphthalene	571-60-8	160.0524	160.17
4-Amino-1-Naphthol	2-74-0	159.0684	159.19
5-Amino-1-naphthol	83-55-6	159.0684	159.19
8-Amino-2-naphthol	118-46-7	159.0684	159.19
3-Amino-2-naphthol	5417-63-0	159.0684	159.19
1,6-Dihydroxynaphthalene	575-44-0	160.0524	160.17
2,6-Dihydroxynaphthalene	581-43-1	160.0524	160.17
1,7-Dihydroxynaphthalene	575-38-2	160.0524	160.17

Details

Ms/Ms

Transformation Tree

4-Methylaminoantipyrine (MAA)

Info

Dimethylaminoantipyrine (DMAA)

Metamizol

4-Methylaminoantipyrine (MAA)

4-Formylaminoantipyrine (FAA)

4-Amino-2,3-dimethyl-1-phenyl-3-pyrazolin-5-one (AA)

4-Formylaminoantipyrine (FAA)

Acetylaminantipyrine (AAA)

derzeit:

1452 Subsstanzeinträge

318 angemeldete Nutzer