

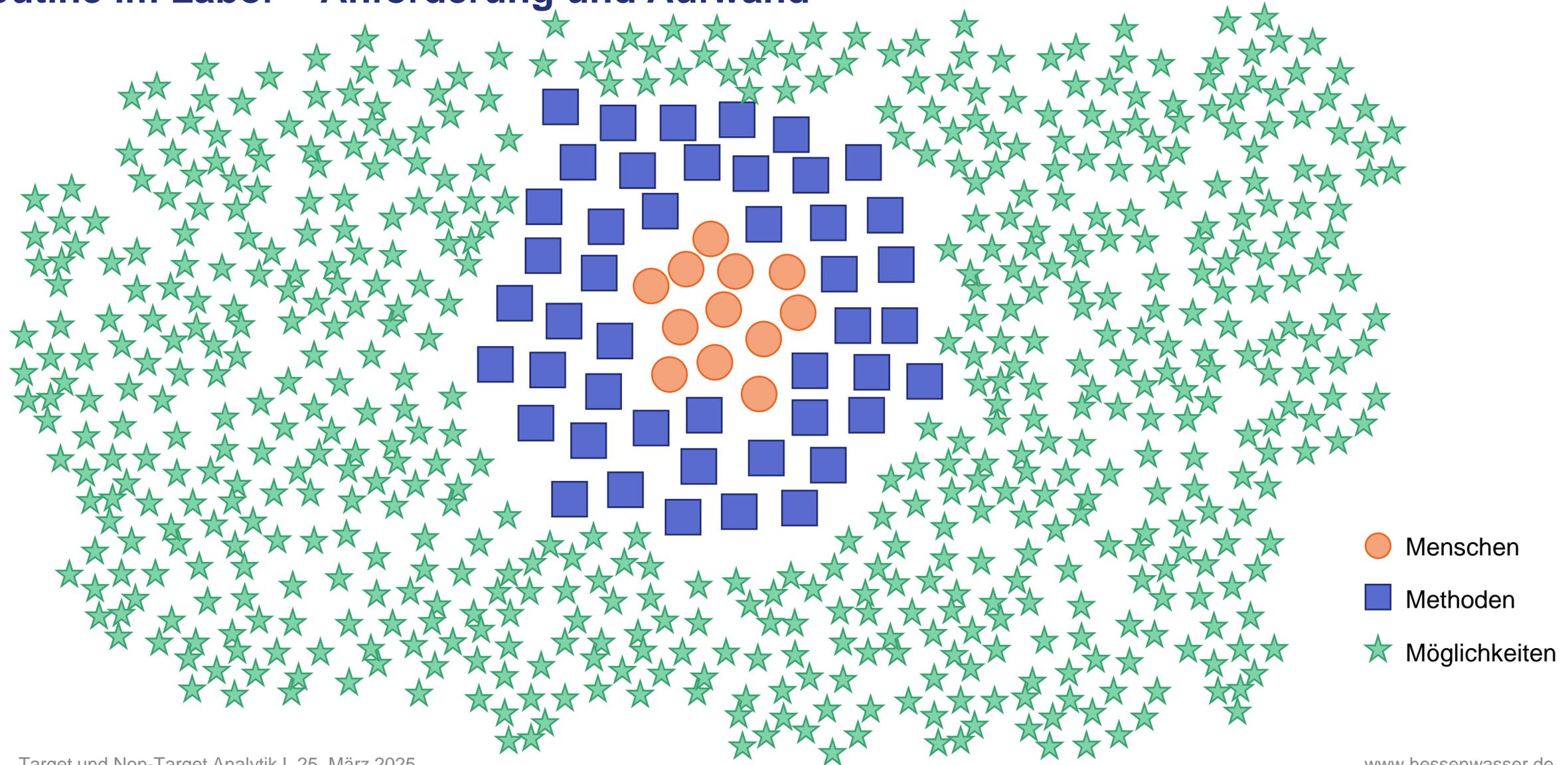
Target und Non-Target Analytik: Eine Gegenüberstellung

Sven Götz

Spurenstoffstrategie Hessisches Ried – Dialogforum I 25. März 2025

Target Analytik

Routine im Labor – Anforderung und Aufwand



Gedankenexperiment: Einführung neuer Parameter

Ein neuer Parameter (oder eine ganze Parametergruppe) soll etabliert werden, welches sind die notwendigen Aktionen?

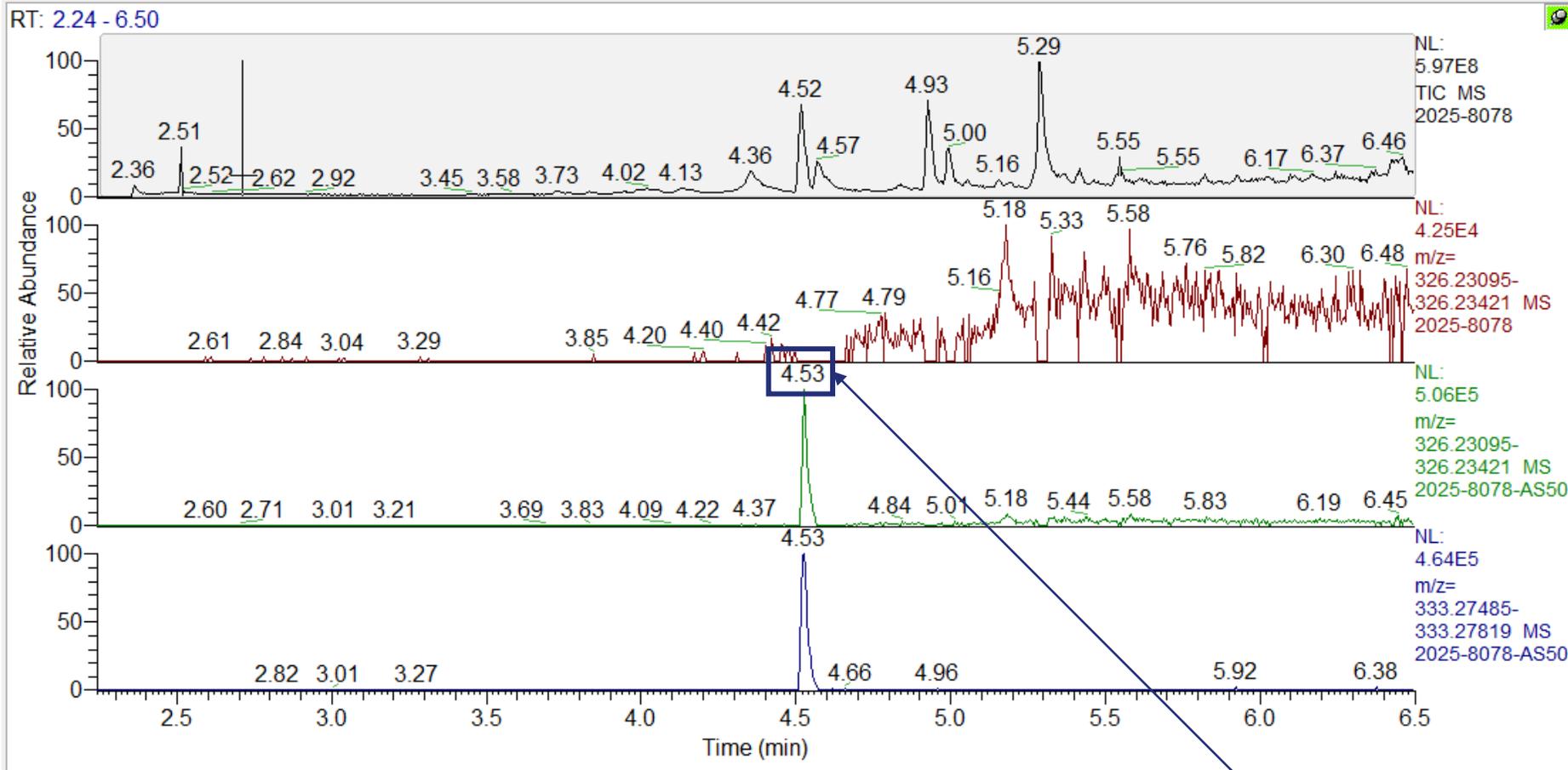
Folgender Planungsprozess wird initialisiert:

- Hintergrundrecherche: Gesetzliche Anforderungen? Bestehende Methodik? Erwartete Befunde? Erwartete Konzentrationen? ...
- Wie muss eine repräsentative Probenahme aussehen? Gibt es spezielle Anforderungen?
- Wie können die Proben gelagert werden ohne Abbau/Transformation zu fördern?
- Wie kann effizient die Matrix abgetrennt werden? -> Stichwort: Chromatographie
- Wie kann effizient die Detektion realisiert werden? -> Stichwort: Massenspektrometrie
- Wie kann die Qualität der Messung sichergestellt werden?
- Wie können die Daten valide und schnell ausgewertet werden?

Target Analytik

Ein Beispiel: Bisoprolol

(Beta-Blocker zur Behandlung von Bluthochdruck)



Alle Massen

Nur Zielmasse

Nur Zielmasse,
Probe aufgestockt

Masse des internen
Standards

Retentionionszeit der Substanz

Target Analytik

Maximaler Fokus auf Zielanalyt(en)



- Aufwendige, zielgerichtete Methodenentwicklung, um einzelne Parameter oder Parametergruppen für hoch effiziente Routine-Analytik zugänglich zu machen.

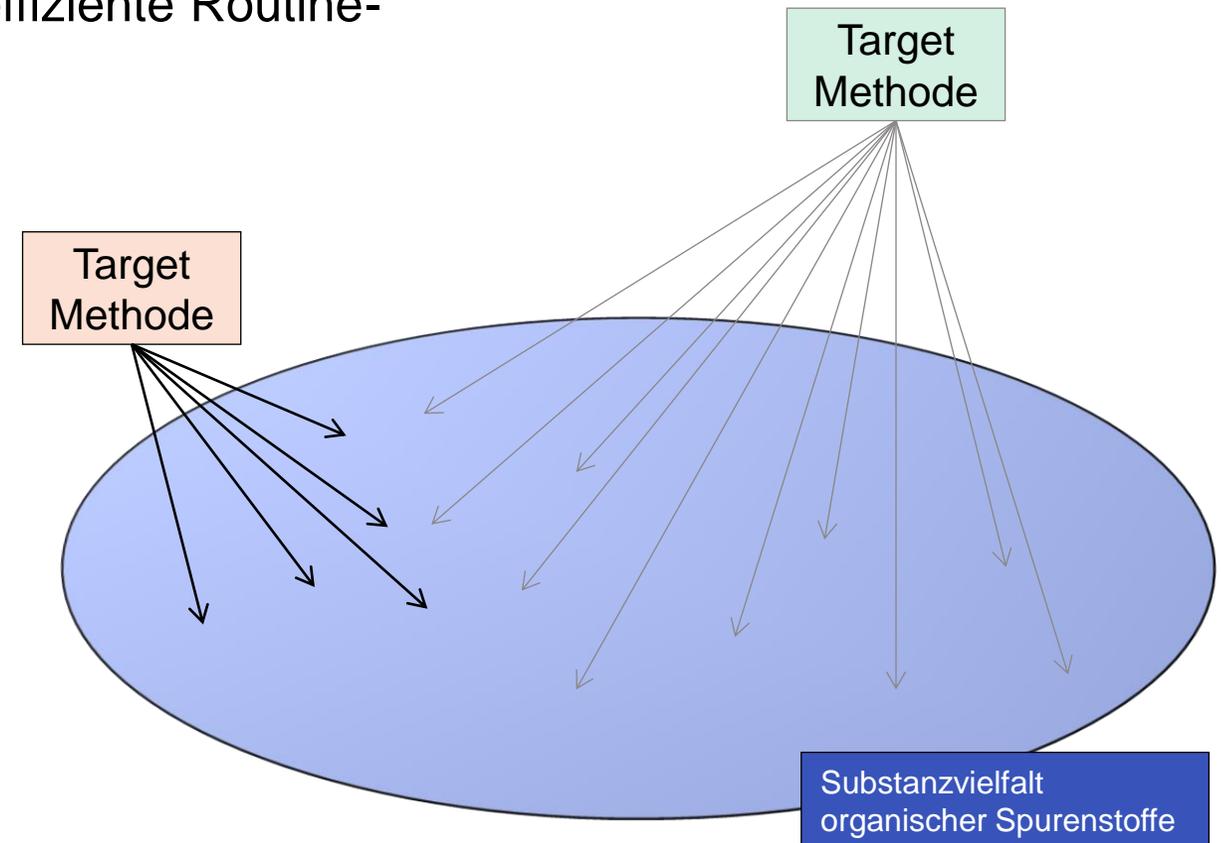
- Ziele:

- Sicher
- Hochgenau
- Schnell
- Stabil

Wieso Non-Target Analytik ?

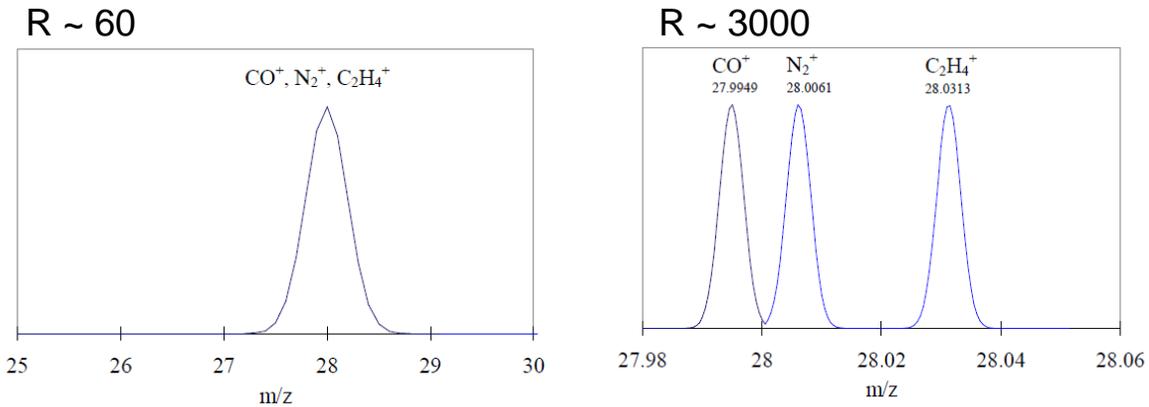
- Aber:

- Nach Etablierung unflexibel
- Einschränkung auf bestimmte Parameter



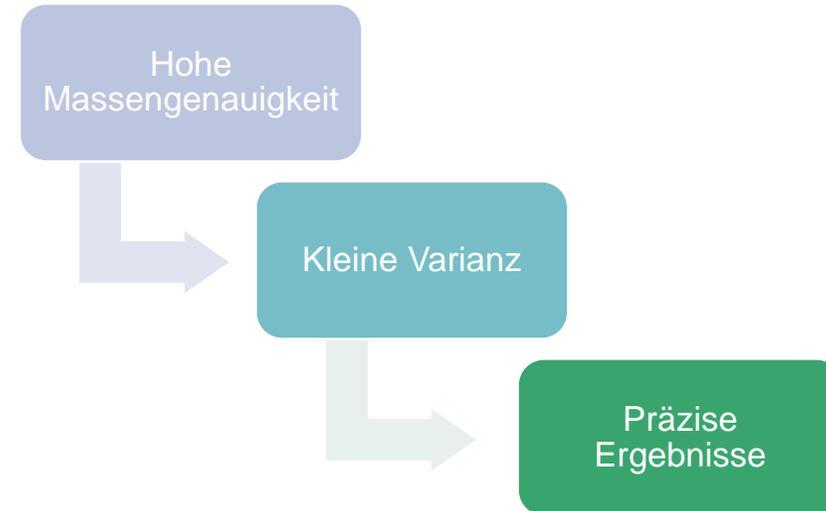
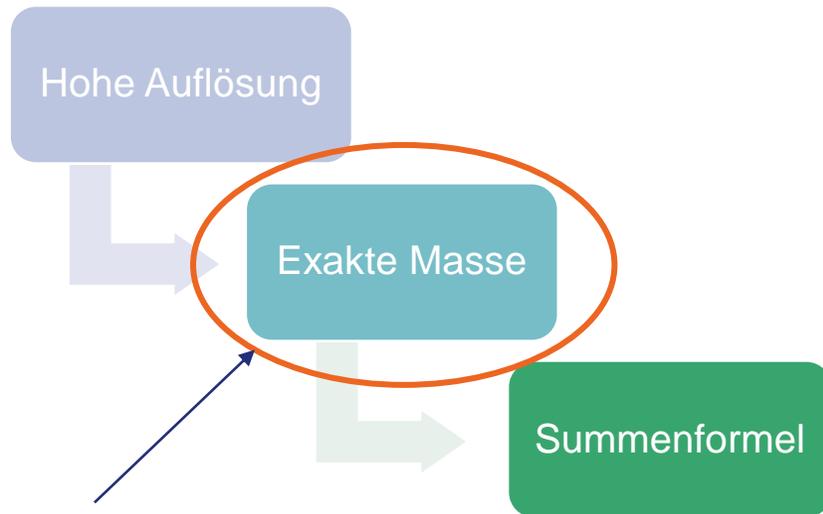
Non-Target Analytik

Exkurs: Auflösung und Massengenauigkeit



194,08038 Da:

10 ppm => $\Delta m = \pm 0,004$ -> 20 mögliche Summenformeln
2 ppm => $\Delta m = \pm 0,0008$ -> 3 mögliche Summenformeln



Primäre Messgröße

Hochauflösende Massenspektrometrie ist Schlüssel zur Non-Target Analytik

Non-Target Analytik

Exkurs: Identifikation



Signal einer Substanz

- Masse
- Summenformel

Nicht identifizierbar, allerdings
Trendanalyse möglich

Substanzvorschläge

- Weitere Metadaten vorhanden
- Strukturinformation teilweise vorhanden

Abgleich mit interner Datenbank
vorhanden, semi-quant. Aussagen
möglich. Simulation möglicher
Strukturen.

Identifizierte Substanz

- Fragmentspektrum vorhanden
- Referenzstandard vorhanden

Abgleich des Fragmentspektrum gegen
externe Datenbanken bzw. intern gegen
Messungen des Referenzstandards.
Quantitative Aussagen möglich.

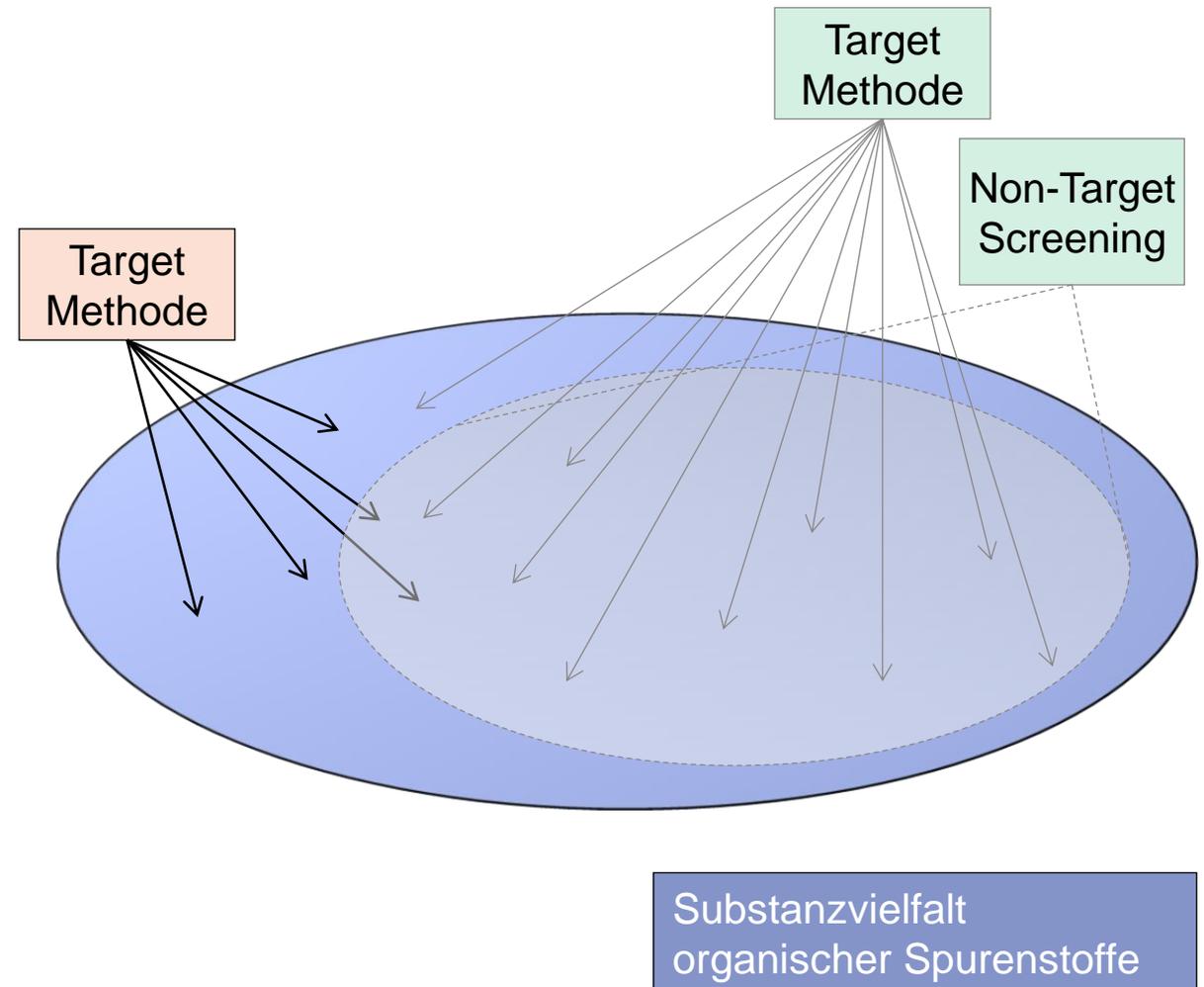


Non-Target Analytik Methodik



Kritische Punkte bei einem Non-Target Screening

- Hintergrundrecherche: Methode entscheidet über das analytische Fenster, möglichst breites Substanzspektrum erstrebenswert
- Unverfälschte Probenahme & Lagerung
- Generische Methode zur Trennung der Substanzen
- Generische Methode zur Detektion, allerdings auf hoch entwickeltem System
- Aufwendige Datenanalyse
 - Peakfinding & -alignment
 - Compound Detection
 - Abgleich mit Datenbanken
 - Priorisierung und Identifizierung

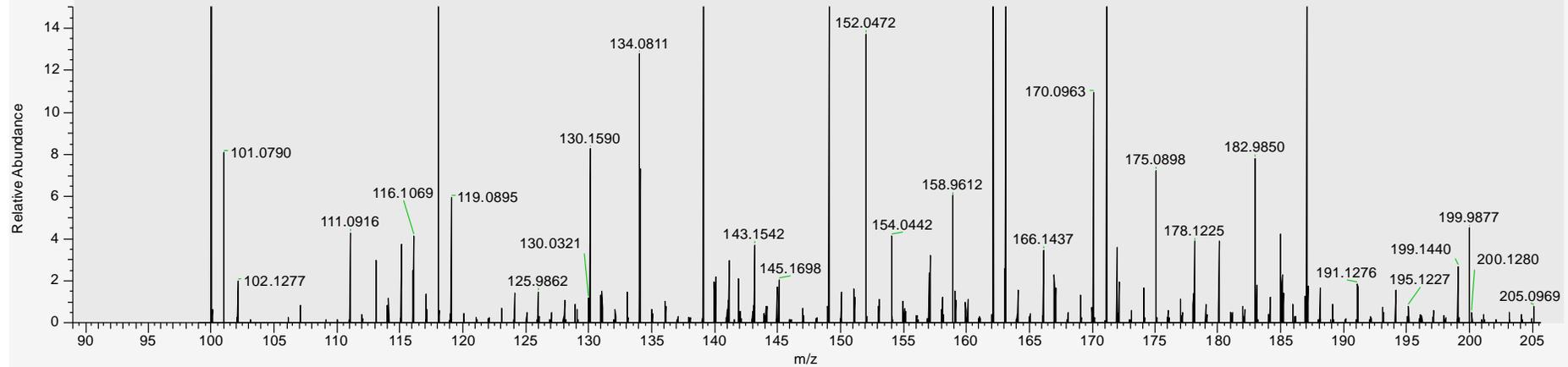


Non-Target Analytik

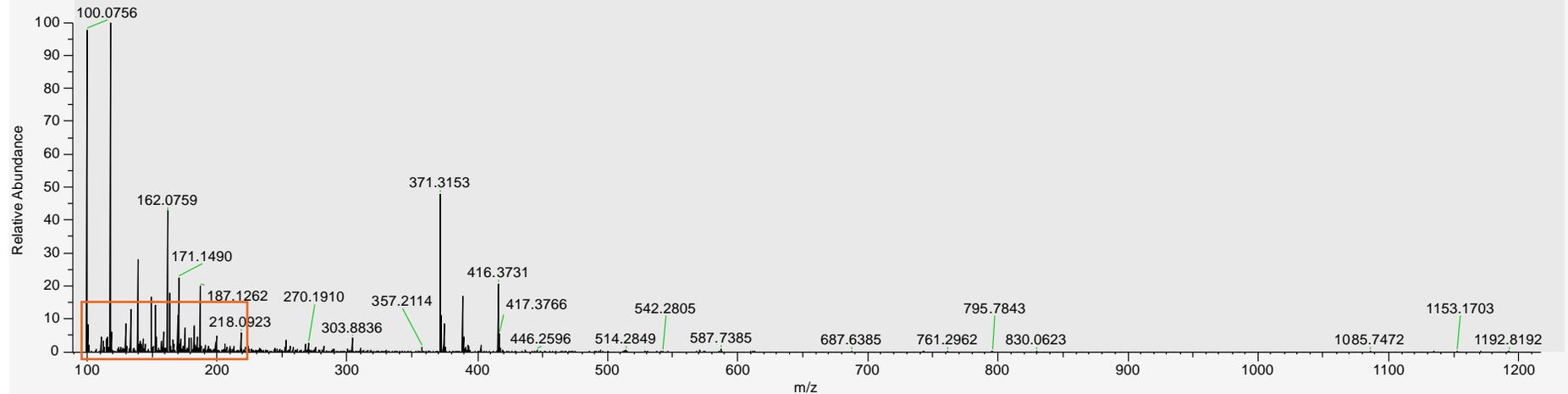
Massenspektrum



2024-20078_pos_1 #1325 RT: 3.93 AV: 1 NL: 1.69E7
T: FTMS + p ESI Full lock ms [100.0000-1200.0000]

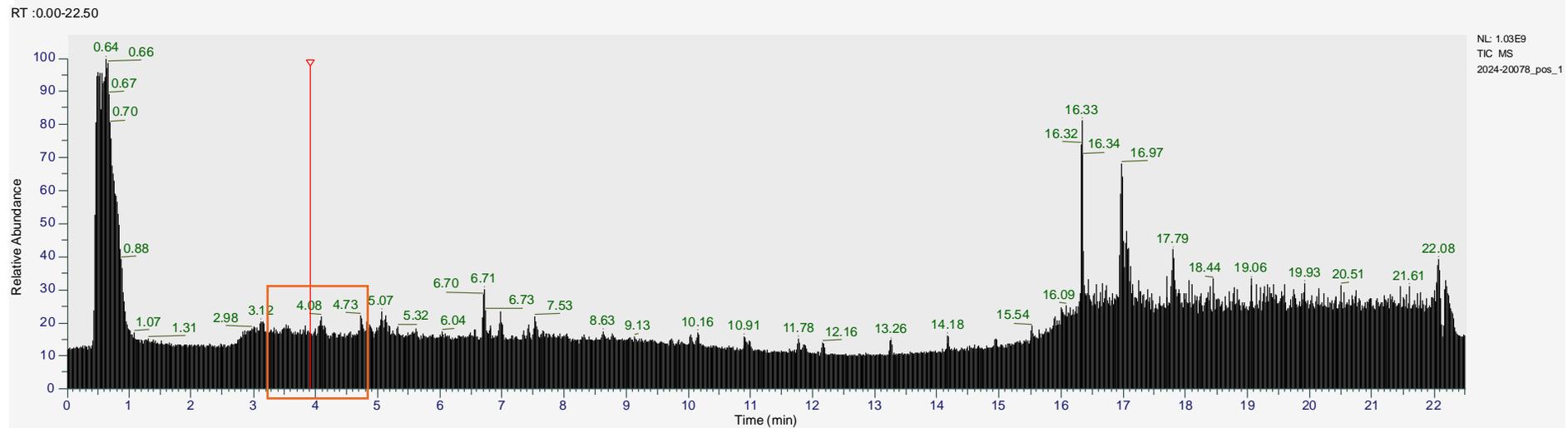
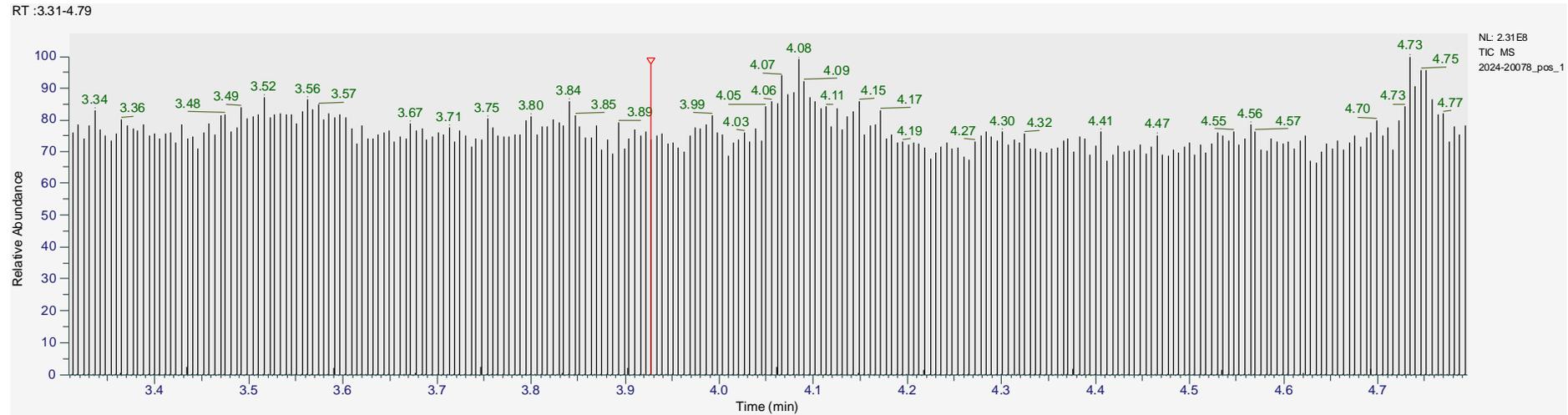


2024-20078_pos_1 #1325 RT: 3.93 AV: 1 NL: 1.69E7
T: FTMS + p ESI Full lock ms [100.0000-1200.0000]



Non-Target Analytik

Chromatogramm



Non-Target Analytik

Fokus auf neue Erkenntnisse



- Generische Methodenentwicklung, um möglichst wenige Substanzen im analytischen Schritt zu diskriminieren (Non-Target Ansatz)
- Komplexe Auswertung großer Datenmengen. Fokus der Prozessierung abhängig von Fragestellung
 - Analyse von Zeitreihen
 - Analyse von Einträgen durch Vergleich von Emissionen und Verteilung
 - Identifikation neuer Substanzen
 - Datenarchive: Datendichte & -qualität lässt nachträgliche Auswertungen zu
- Aber:
 - Immens viel aufwendiger als routinierte Target-Analytik
 - Primär qualitative Aussagekraft

Target und Non-Target Analytik

Die Gegenüberstellung



	Target	Non-Target
Methoden	Aufwendig. Optimierung aller Variablen auf Zielanalyten	Allgemeine Methodik. Möglichst wenig Diskriminierung.
Auswertung	Schnell, effizient	Aufwendig, hoch-komplex. Zielabhängig
Ergebnisse	Quantitativ, sehr geringe Nachweisgrenzen	Qualitativ & semi-quantitativ. Statistische Analysen möglich
Analytisches Fenster	Sehr eingeschränkt erweiterbar. Ergebnisse für einzelne Substanzen ab Einführung verfügbar	Nur durch Methodenwahl limitiert. Screening verfügbar. Ergebnisse von Substanzen auch retrospektiv möglich.
Vorteile	Routinefähig, hohe Aussagekraft für optimierte Substanzen, sehr geringe Nachweisgrenzen	Wenig Limitierung der detektierbaren Substanzen, retrospektiv Analytik möglich. Identifizierung neuer Substanzen. Statistische Tools zur Priorisierung und Darstellung
Nachteile	Beschränkung auf wenige Substanzen	Technisch wie personell sehr aufwendig. Langwierige Auswertungen. Aussagekraft stark abhängig von Qualität der Daten und Design der Messkampagne



**Vielen Dank
für Ihre Fragen und Anregungen!**

**Nachhaltige Wasserversorgung
www.hessenwasser.de**