GDCh – Ich bin dabei:

Thomas Letzel

Als nicht-akademisch und akademisch ausgebildeter Chemiker und seit fast 20 Jahren als Ausbilder nicht-akademischer und akademischer ChemikerInnen trete ich nun seit Januar 2019 als stellvertretender Vorsitzender der Arbeitsgruppe Berufliche Bildung der GDCh verstärkt dafür ein, dass unser deutsches –weltweit einzigartiges- chemisches Berufsbildungssystem Bestand haben kann. In Zeiten der Akademisierung ist es wichtig, die Berufsbilder startend mit technischen Schulen (z.B. CTA), der dualen Ausbildung (z.B. zum Chemielaboranten) über Chemieingenieure der Hochschulen und das duale Studium hin zur „klassischen“ universitären Chemieausbildung (mit Promotion) klar einzuordnen und als gleichwertige Berufe in den unterschiedlichen Bereichen der Chemie zu verstehen. Lassen Sie uns dieses aktuelle Zukunftsthema weiterhin gemeinsam über die gesamte GDCh und ihre Fachgruppen hinweg diskutieren, konkretisieren und die Ergebnisse der Politik sowie Öffentlichkeit vermitteln.

- in den GDCh Mitteilungsblättern (67. Jahrgang; 07/08 2019; Seite 101) -

GDCh

esellschaft
eutscher Chemiker

achgruppe
nalytische Chemie

itteilungsblatt
/2019

GDCh
Analytische
Chemie

ISSN 0939-0065

Analytics+

Eine Open-access-E-Learning-Plattform für die instrumentelle Analytik

Entstanden ist die Idee der barrierefreien Wissensvermittlung in der analytischen Forschungsgruppe AFG der TU München vor über zehn Jahren, als mit dem „Chemnixblog (Schüler fragen – Wissenschaftler antworten)“ ein wissenschaftsvermittelnder Jugend-Blog gestartet wurde.[1] Weiter reifte sie, als im Internationalen Jahr der Chemie 2011 die Initiative „Wissenschaft vermitteln“ zusammen mit Kollegen der Fachgruppe Analytische Chemie bundesweit öffentlichkeitswirksame Aktionen durchführte wie Kindergartenpatenschaften und Kinderunivorlesungen zur analytischen Chemie (das Mitteilungsblatt berichtete).[2–4]

In gerade diesen Jahren kam aber auch immer mehr das Bewusstsein auf, dass es vielen jugendlichen chemischen Auszubildenden im Zuge der schnellen Entwicklungen in der modernen instrumentellen Analytik nicht mehr möglich ist, Schritt zu halten. Dies ist bis heute zum einen der rasanten Entwicklung der Technologien selbst geschuldet, zum anderen der Tatsache, dass es für Auszubildende nur eingeschränkte, bis nicht vorhandene Möglichkeiten gibt, sich Erfahrung direkt an den Geräten zu holen. So war ein Vorstoß aus dieser Zeit, Kurse in analytischer Chemie als überbetriebliche Blockpraktika anzubieten. Dabei sollten neben Studierenden besonders zukünftige Fachkräfte aus der nicht-akademischen Berufsbildung betreuten Zugang zu Geräten in akademischen Einrichtungen (wie der TU München, TUM) bekommen. Leider wurde das Angebot damals von den Ausbildungsstätten nicht angenommen, so dass es den Anschein hatte, dieses Vorhaben würde scheitern. Aber es kam anders.

So nahm in Ländern wie Georgien, Griechenland, Polen und der Türkei das Interesse an speziellen, modularen Schulungen in instrumenteller Analytik zu und besonders der gesamtheitliche Ansatz zur chemischen Berufsausbildung. Die Ausbildungssysteme dieser Länder kannten bis dahin fast ausschließlich nur akademische Ausbildung in der Chemie. Dies sollte sich mit Hilfe von EU-Förderung in den kommenden Jahren ändern. Im Rahmen von mehreren europäischen Leonardo-da-Vinci-Projekten wurde in den Jahren 2009 bis 2013 eine grundsätzliche internationale Einführung und partnerschaftliche Harmonisierung der nicht-akademischen dualen Ausbildung in fünf Ländern erreicht. Im Rahmen des Projekts EU Chemlab entstanden detaillierte Curricula und Lehrpläne zur Ausbildung von Chemielaboranten mit Schwerpunkt analytische Chemie nach Richtlinien der Industrie- und Handelskammer und zusätzlich ein Netzwerk zum internationalen Austausch von Auszubildenden zwischen Laboratorien dieser Länder und Deutschland.[5] Dabei wurde auch eine erste Open-access-Plattform erstellt, mit Beschreibungen zu chemischen Experimenten und praktischen Modulen in der instrumentellen Analytik. Sie ist bis heute (nach Anmeldung) frei nutzbar.[6]

Der internationale Bedarf an analytischen und bioanalytischen Lehrmaterialien nimmt seitdem weiter stetig zu. Diesem Umstand geschuldet wurde nach offiziellem Ende des EU-Chemlab-Projekts die Idee der Open-access-Plattform weiterentwickelt und als Open-access-E-Learning-Tool konzipiert.

Resultat ist die nun unter dem Namen Analytics+ englischsprachige E-Learning-Lehrplattform.[7] Diese zunächst durch Mitarbeiter der TUM erstellte und befüllte Online-Lehrplattform wurde in den Jahren ihrer Entwicklungs- und Entstehungszeit überwiegend durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung (über den TUM Lehrfond und das Projekt FOR-IDENT) finanziell unterstützt und auf einem internen Server betrieben. Nachdem im Laufe der Jahre mehrere hundert Studenten sie nutzten, kommentierten, bewerteten und optimierten, steht sie seit 2018 allen für barrierefreie Wissenserweiterung öffentlich zur Verfügung. →

Die Plattform

Der Aufbau von Analytics + ist der Abbildung zu entnehmen. Die in drei Level gegliederten Lerninhalte wollen Wissen auf eine umfassende, nachhaltige und vor allem spielerische Art vermitteln. Die Plattform ermöglicht es Lernenden, sich ortsunabhängig auf den drei Wissensstufen (Lernen, Üben und Anwenden) und in den für sie relevanten Bereichen weiterzubilden. Dieses Konzept erlaubt und fördert selbstständiges Lernen und Üben ebenso wie betreutes Üben und Anwenden. Autodidaktisch genutzte Medien lassen sich auch komplementär zu Dozententätigkeiten einsetzen und in Absprache mit lehrenden Einrichtungen nutzen. Damit alle Nutzer das Lehrmaterial anpassen, weiterentwickeln und weitergeben können, sind viele der Texte und Bilder unter sehr freier CC-Lizenzierung publiziert, durch CC BY-SA 4.0.[8)]

Level 1

Es enthält grundlegendes chemisches Wissen und ausführlichen Inhalt zu (bio-)analytischen Themen und stellt dieses übersichtlich und verständlich in Graphik- und Textformat dar. Es umfasst Erläuterungen zu Probenanreicherungen, chromatographischen Trennmethoden, Spektroskopie, Massenspektrometrie sowie bioanalytisches Material zu elektrophoretischen Trenntechniken und Immunoassays. Neben der Beschreibung der Techniken liegt ein Schwerpunkt auf Datenauswertung und -interpretation (zum Beispiel bei massenspektrometrischen Non-Target-Screenings).

Das Einbinden externer Inhalte wie Handbüchern, Foliensätzen, Anwendungsbeispielen und erläuternden Filmen soll ganzheitliches Verständnis fördern. So stellen Firmen wie Agilent Technologies, Deutsche Metrohm, GE Healthcare Life Sciences, Knauer, Phenomenex, Restek und andere kostenfrei (Video-)Tutorials und/oder Simulatoren zur Verfügung. Diese Materialien wurden (und werden) kontinuierlich durch die Betreiber der Plattform auf ihre Lehrinhalte hin überprüft; nur für gut befundenes Material kommt auf die Plattform. So lassen sich bestehende Lehrmaterialien industrieller Partner zielführend mit einbinden, ohne dass der Eindruck entsteht, es handele sich um eine Werbeplattform.

Die Verlinkung frei zugänglicher analytischer Fachartikel von zum Beispiel Analytik-News, sepscience.com, „The Analytical Scientist" und peer-reviewten Open-access-Publikationen runden das Ganze ab.[9–11)]

Bei Vorhandensein anderer geprüfter Plattformen (etwa deutsche Chemgapedia) wird auf diese Lehrtools verwiesen, um redundante Lehrmaterialien zu vermeiden und um auch anderen Ansätzen eine Bühne zu geben.[12)]

Level 2

Es ermöglicht die Wiederholung und Vertiefung des in Level 1 angeeigneten Wissens. Dies geschieht unter anderem in Form eines Wörterbuches, das die wichtigsten Begrifflichkeiten kurz und übersichtlich nochmals darstellt.

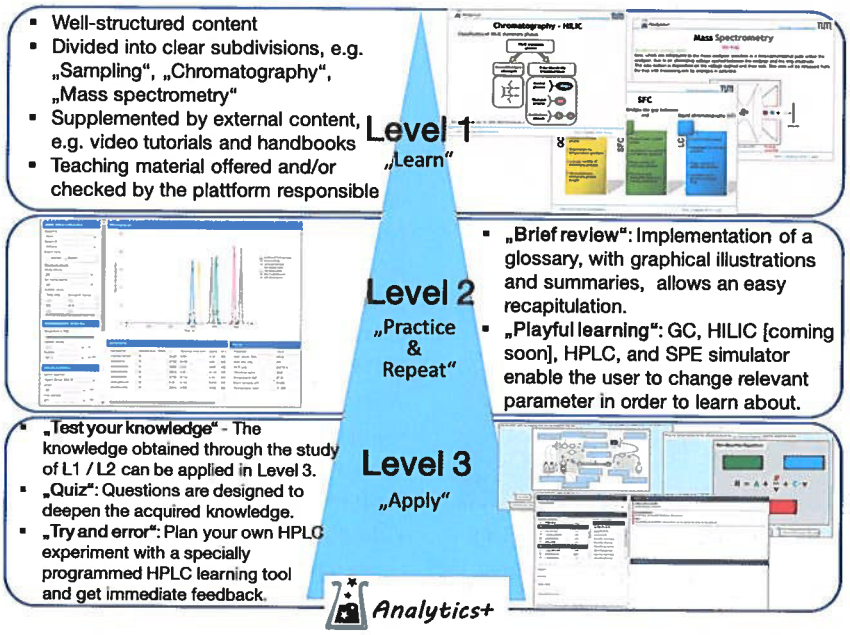
Besonders zielführend und beeindruckend ist in Level 2 die Möglichkeit, Festphasenextraktion sowie Flüssig- und Gaschromatographie in Form von SPE-, HPLC- und GC-Simulator-Software-Tools spielerisch kennenzulernen.[13–15)] Mitte dieses Jahres wird dazu noch ein HILIC-Simulator kommen; weitere Simulatoren sind in Planung.

Über selbst bestimmte Einstellungen werden Effekte im Simulator direkt visualisiert. So wird einfach und prinzipiell dargestellt, was passiert, wenn man bei einem Gerät „an diesem oder jenem Knopf dreht". Es handelt sich bei den chromatographischen Simulatoren (bis auf GC) nicht um Vorhersagewerkzeuge von Retentionszeiten, sondern sie dienen ausschließlich dazu, physikochemische Effekte anschaulich darzustellen. So erhalten Lernende sofort einen visuell eindeutigen Eindruck von Änderungen und gewinnen Erfahrung in Darstellung und Auswertung.

Hier lassen sich auch (von Dozenten und Lehrern) gestellte Aufgaben üben und lösen. Einige Berufsschulen oder CTA-Schulen setzen den HPLC-Simulator schon jetzt im Praxisunterricht (am Computer) ein, um chromatographische Trennungen direkt am Bildschirm nachvollziehbar zu machen. Im späteren realen Praktikumsunterricht wird dann schon Erfahrung mitgebracht.

Level 3

In ihm wird das Gelernte zunächst in Form von Quizfragen abgefragt, die sich an den Inhalt von Level 1 und 2 anlehnen.



Aufbau von Analytics +

Der Lernende kann auch eine Chromatographie und eine Festphasenextraktion ausgehend von konkreten Fragestellungen selbstständig planen und umsetzen. Hierfür kommen wieder die Simulatoren zum Einsatz, diesmal allerdings nicht mehr im Übungsmodus. Im Prüfungsmodus gibt es für jede Einstellung der Parameter ein unmittelbares Feedback. Eine Farbcodierung der Antwort und ein direkter Kommentar verstärkt bei jedem Schritt den Lerneffekt.

Dem Lernkonzept sind ausreichend Alternativen hinterlegt, da eine Entscheidung in der Analytik selten völlig richtig oder falsch ist. Bei der Extraktion ist es beispielsweise so, dass man prinzipiell „vieles mit der SPE" machen kann, je nach Probencharakteristik gibt es aber bessere Alternativen. Diese Alternativen sind mit objektorientierten Entscheidungsstrukturen in den Simulatoren hinterlegt.

Ein weiteres Gedankenspiel auf Level 3 wäre es, die Entscheidungsmöglichkeiten einzuschränken, um zum Beispiel die vorhandene Ausstattung in einem Labor zu simulieren. Diese Einschränkung kann entweder durch den Dozenten oder zufällig erfolgen. Eine Aufgabe könnte wie folgt lauten: „In Ihrem Labor ist Ausstattung ABC vorhanden, analysieren Sie damit das Molekül XY aus der Matrix Z." Es ist auch denkbar, dass diese Aufgabe nicht lösbar ist und der Lernende Alternativvorschläge machen kann, wie etwa in ein Labor mit entsprechender instrumenteller Ausstattung zu gehen. So müssen sich die Lernenden Gedanken zum strategischen Vorgehen in der instrumentellen Analytik machen und realisieren schnell, dass man improvisieren kann oder manchmal muss.

Letztlich kann man die Ansätze und Simulatoren auf Level 3 auch für klassische Prüfungszwecke einsetzen.

Die Vision

Die Lehrplattform Analytics+ ist ein Beispiel barrierefreier und kostenloser Lernmöglichkeit unter Zuhilfenahme neuer Medien, Technologien und Konzepte. Digitalisierung und E-Learning ist so real im Alltag der lernenden Jugend verankert, dass sich die lehrende Generation darauf einlassen muss. Es bleibt zu hoffen, dass beide Generationen diese Plattform als gemeinsame Ausgangsposition nutzen.

Inhalte und Anwendungen in Analytics+ werden mit Beteiligung vieler Partner aus Wissenschaft, öffentlicher Hand, aus Industrie und den Lehranstalten weite Verbreitung finden und könnten dadurch inhaltlich und technologisch stark erweitert werden. So freuen sich die Entwickler und Betreiber von Analytics+ auf einen Besuch am Poster auf der ANAKON 2019 in Münster. Gerne diskutieren wir weitere zukünftig notwendige und geplante Module für die barrierefreie Nutzung sowie Möglichkeiten zur Finanzierung oder Sponsoring dieser Inhalte.

Die GDCh-Arbeitsgruppe Berufliche Bildung (AGBB) befasst sich derzeit mit der Erstellung eines strategischen Papiers, unter anderem zur zukünftigen Einbindung von professionellen E-Learning-Strategien in die chemische Berufsbildung.[16] Gerne können Sie in dieser Arbeitsgruppe mitdiskutieren und sich einbringen für eine starke Zukunft der jungen Generation analytischer Chemiker.

Der bisher in Analytics+ praktizierte Ansatz „Wissen vermitteln – ohne persönliche Daten abzugreifen" kann weiterhin gelingen, wenn Datenschutz und Persönlichkeitsrechte von allen Beteiligten ernst genommen werden (so werden zum Beispiel keine Besuchszahlen der entsprechenden Seiten weitergegeben).

Thomas Letzel,
Technische Universität München

Literatur

1) *http://www.chemnixblog.de/*
2) *http://www.afin-ts.de/Ueber-uns/Wissenschaft-vermitteln/*
3) *T. Letzel, Nachrichten aus der Chemie 2011, 59, 1202.*
4) *T. Letzel, Mitteilungsblatt der Analytischen Fachgruppe der GDCh 2011, 4, 7–9.*
5) *T. Letzel, Nachrichten aus der Chemie 2011, 59, 1119–1121.*
6) *http://www.eu-chemlab.eu*
7) *https://analyticsplus.wordpress.com*
8) *https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.de*
9) *https://www.analytik-news.de*
10) *https://www.sepscience.com*
11) *https://theanalyticalscientist.com*
12) *http://www.chemgapedia.de/vsengine/topics/de/Chemie/index.html*
13) *https://analyticsplus.wordpress.com/spe-simulator/*
14) *https://analyticsplus.wordpress.com/get-active/hplc-simulator/*
15) *https://analyticsplus.wordpress.com/gc-simulator/*
16) *https://www.gdch.de/netzwerk-strukturen/fachstrukturen/ag-berufliche-bildung.html*

Dankeschön

Ganz besonders bedanke ich mich bei meiner Analytics+- Mitbegründerin Johanna Grassmann, den vielen enthusiastischen Mitarbeitern am Projekt, besonders Christine Kaufmann und Susanne Minkus, den Kollegen der HSWT Marco Luthardt, Tobias Placht, Veronika Wörle, Fabian Schmerbeck und August Gilg, dem Bundesministerium für Bildung und Forschung für die langjährige finanzielle Unterstützung sowie den Sponsoren.
Den vielen auf der Plattform mit ihren Lehrmaterialien zu findenden Institutionen sei gedankt für die kostenlose und barrierefreie Nutzbarkeit. Falls Sie direkt komplementäres Lehrmaterial, freie Videos oder anderes zur Verfügung stellen wollen, so lassen Sie es uns wissen.
Nicht zuletzt sei der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie und der GDCh-Arbeitsgruppe Berufliche Bildung für finanzielle und ideelle Unterstützung gedankt.

Why using an e-learning platform ?

Analytical chemistry is an increasingly evolving scientific field and needed in each discipline. However, several techniques and methods often hardly can be practiced directly on the analytical systems.

Thus we provide clearly structured theoretical and practical content about methods like GC, HPLC, SPE, and mass spectrometry
as well as simulators for practicing.

No matter if you are an apprentice, a pupil, a student, a teacher, a scientist or another interested person,
you can use this website anytime for free!

Learn -> Practice -> Apply

Content

- Lessons on basic chemistry, sample prep, chromatography, mass spectrometry, bio-analytical methods and others
- External content such as video tutorials, handbooks or slide shows
- GC, HPLC and SPE simulators to apply what you 'know 'and what you 'plan'
- Glossary with brief summaries and graphics
- "Test your knowledge" and make quizzes

Analytics+

- the e-learning platform -

Your essential training in Analytical Chemistry!

www.analyticsplus.org

CC BY SA

by
PD Dr. J. Graßmann,
Dr. C. Kaufmann,
Susanne Minkus,
and PD Dr. T. Letzel
(all TUM)

partially funded by
the TUM Lehrfond and FOR-IDENT
(both BMBF funding)

SPONSORED BY THE
Federal Ministry of Education and Research

if you want to support these public pages
please contact T.Letzel@tum.de

Massenspektrometrisches Non-Target Screening

Open Access Strategien in Ausbildung, Auswertung und digitaler Datennutzung

Dr. Thomas Letzel

Nicht zielgerichtete Analytik durch Chromatographie gekoppelt mit Massenspektrometrie ist in Durchführung und Auswertung eine sehr anspruchsvolle Aufgabe, die vor allem auch frei zugängige Lern- und Auswertesoftware benötigt. Hier ein paar Vorschläge.

Massenspektrometrische Screening Techniken (in Kombination mit chromatographischen Trenntechniken), wie z.B. das Non-Target Screening (NTS), sind als Messprinzip aber auch als Daten-Auswertestrategie schon seit Jahren ein großes Thema in der wissenschaftlichen Diskussion. Dabei tat sich neben der ‚klassischen' Metabolomics-Szene besonders die umweltanalytische Community hervor, welche sowohl die Einordnung und Definitionen der Screening-Ansätze eingehend diskutierte sowie diese schließlich auch gemeinschaftlich kategorisierte. So entstand beispielsweise aus unserem Hause schon 2013 ein Überblicksartikel zu den Definitionen [1], des Weiteren wurde in den folgenden Jahren mit Kollegen die Kategorisierung [2] sowie wissenschaftliche Anwendungen [3,4] publiziert und das alles fand schließlich einen ersten Höhepunkt in der Veröffentlichung eines 2-bändigen Buches mit insgesamt 21 Kapiteln internationaler Kollegen im vergangenen Jahr [5]. Gleichzeitig mit der Diskussion um Non-Target Screening nahm auch die Erkenntnis zu, dass es bei dieser Art der Analytik nicht mehr zielführend und effizient ist, wenn jedes Labor bzw. jede Einrichtung als ‚Einzelkämpfer' unterwegs ist. Ebenso steigt in jedem Labor der Bedarf an geschulten und erfahrenen Experten in diesem Sektor der instrumentellen Analytik. Dieser Bereich hatte in den letzten Jahren allerdings damit zu kämpfen, dass die nicht-akademische Ausbildung (z.B. zum Laboranten sowie Chemisch-Technischen-Assistenten) im Vergleich zur akademischen Ausbildung in Chemie und anderen analytisch-orientierten Studiengängen offensichtlich zurückstehen musste. Da so aber ein zunehmender Mangel an Experten für anspruchsvolle instrumentelle Analytik (wie z.B. der Massenspektrometrie) entstand ist es nun längst an der Zeit dem entgegenzuwirken und neue bzw. moderne Wege der Ausbildung zu gehen um auch wieder verstärkt junge Interessenten im nicht-akademischen Umfeld zu finden. Einer dieser Wege ist die vermehrte Nutzung von kostenfreien Apps durch Jugendliche. So gibt es mit dem Chemnix-Blog [6] und dem Analytics+-Tool [7] zwei open-access (e-learning) Tools (siehe Abb. 1), die gezielt Jugendliche bzw. Auszubildende ansprechen und ihnen den Zugang zu interessanter Analytik ermöglichen. Da beide Lernwerkzeuge fachlich organisiert und betreut sind, ist auch sichergestellt, dass die Jugendlichen (und nicht nur die) sowohl einen spannenden Einstieg in das Thema finden aber gleichzeitig auch korrekte Informationen und Lerninhalte kostenfrei zur Verfügung gestellt bekommen. Der Chemnix-Blog beantwortet in kurzweiliger Art und Weise unterschiedlichste Fragen aus den Naturwissenschaften während sich Analytics+ direkt mit der analytischen Ausbildung beschäftigt. Die Analytics+ e-learning Plattform arbeitet auf drei Wissensstufen, nämlich Lernen, Üben und Anwenden. In diesem Rahmen können interessierte Personen neben Grundlagenmaterial auch SPE-[8], HPLC-[9] und GC-[10] Simulatoren nutzen und so ihre Erfahrung in instrumenteller Analytik erweitern. Mitte des Jahres 2019 wird zur Familie der Simulatoren noch ein HILIC-Simulator kommen und Weitere sind in Planung. Auch ist ein Prüfungsansatz mit Zertifizierung (zum Nachweis der erfolgreichen Anwendung von Analytics+) in Vorbereitung. Dies

Abb. 1: Open-Access Programme zur barrierefreien Nutzung

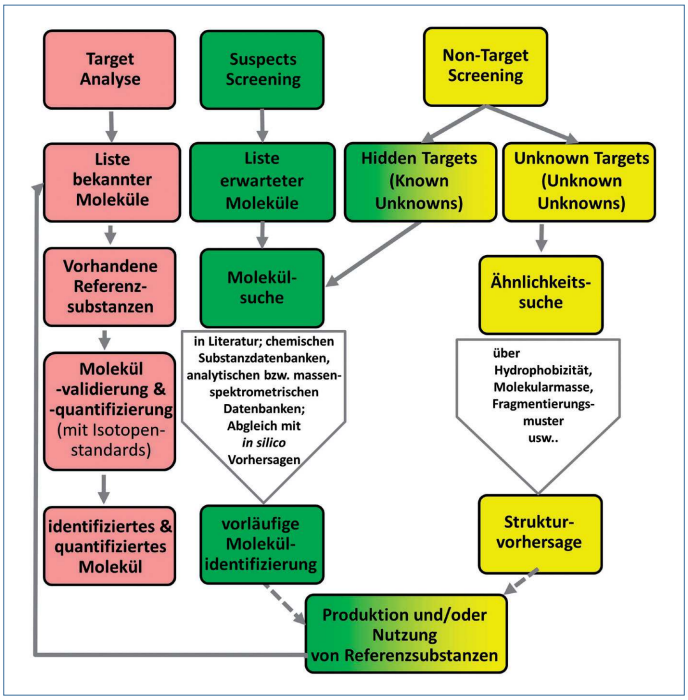


Abb. 2: Schema von Screening-Techniken

soll sicherstellen, dass dieses Open-Access-Konzept (inkl. der Simulator-Nutzung) auch nachhaltig eingesetzt werden kann. Die Verwendung der Materialien und der Simulatoren ist in dem Tool Analytics+ ebenso erklärt wie die derzeit stark genutzten Screening Strategien, z.B. NTS [11]. Das massenspektrometrische Non-Target Screening ist generell ein Teil der ‚Screening-Familie' (siehe Abb. 2) und ist folgendermaßen zu definieren: ‚NTS beinhaltet eine möglichst umfassende und nicht-zielgerichtete Analyse (überwiegend organischer Moleküle) kombiniert mit angepassten Workflows zur Datenanalyse und statistischer Dateninterpretation.' Abbildung 2 zeigt dabei die Aufspaltung der nicht-zielgerichteten Analyse in sogenannte ‚Hidden Targets' und ‚Unknown Targets'. Ersteres führt über die Abfrage von Stoffdatenbanken sowie analytische Datenbanken oftmals zur Identifizierung von sogenannten ‚Unknowns'. Zweiteres sind die realen unbekannten Substanzen und können bisher lediglich beschrieben und verglichen werden (bleiben somit ‚Unknown').

Eine bekannte und in den letzten sieben Jahren durch mehrere öffentliche Einrichtungen (siehe auch den Abschnitt ‚Dankeschön') unterstützte Stoffdatenbank ist die sogenannte STOFF-IDENT [12] und kann mit Nutzung der freien Non-Target Screening Plattform FOR-IDENT [13] zur Unterstützung in der Identifikation von Molekülen zu Rate gezogen werden. Hierbei werden über die FOR-IDENT Plattform (siehe auch Abb. 1) die in der LC-MS Analytik derzeit erhaltenen Informationen zu Retentionszeit, akkurate Masse, Signalintensität sowie Fragmentspektren über Retentionszeitnormierung, Summenformelbildung und einen Vergleich mit in silico Fragmentierungs-Software in konkrete physiko-chemische Information wie logD, Summenformel und chemische Bindungen übergeführt. Diese physiko-chemischen Informationen können dann von der FOR-IDENT Plattform [13] mit den Molekülen (hinterlegt in den Stoffdatenbanken STOFF-IDENT [12] und PLANT-IDENT (wird Mitte 2019 online geschalten)) abgeglichen werden. Dies führt dann zu Vorschlägen der Identifizierung die abschließend mit Referenzmaterialien bestätigt werden müssten. Weitere open-access Datenbanken für diese Auswertestrategie in weiteren Bereichen wie Lebensmittel, Forensik etc. sind in Vorbereitung.

So konnten mit dieser Auswertestrategie in der Vergangenheit einige Moleküle gefunden werden die ursprünglich mit Non-Target Screening Messungen wie beispielsweise im Oberflächengewässern [3], Hausstaub [14], und Rotwein [15] noch unbekannt waren. Diese Strategie der Auswertung verbreitet sich derzeit weltweit und es bleibt zu hoffen, dass noch viele Moleküle über diese Stoffdatenbanken erkannt werden können. So würde aus der nicht-zielgerichteten Analytik eine systematische (zunächst) identifizierende Analytik werden und neben den Experten in dem Bereich würden sich auch schnell angehende Experten bis hin zur interessierten öffentlichen Gesellschaft damit zurechtfinden. Der freie Zugang wäre da.

Dankeschön

Ganz besonders bedanken möchte ich mich zuerst bei meiner langjährigen Kollegin und Analytics+ Mitbegründerin PD Dr. Johanna Graßmann, dann den vielen enthusiastischen Mitarbeitern an den open-access Projekten sowie den vielfältigen weiteren ideellen und materiellen Unterstützern. Den Kollegen der HSWT sei ganz herzlich für die Erstellung und zur Verfügung Stellung des ‚SPE- und HPLC Simulators' auf open-source Basis gedankt sowie der professionellen Umsetzung von FOR-IDENT mit den Datenbanken STOFF-IDENT und PLANT-IDENT. Wir danken dem Partner LfU für die extrem gut gepflegte und qualitativ hochwertige Stoffdatenbank STOFF-IDENT sowie allen Risk-Ident und FOR-IDENT Projektpartnern ebenso wie den vielen Nutzern für deren Testung und Unterstützung. Dies alles wurde nur realisierbar mit der langjährigen finanziellen Unterstützung durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung (über das Projekt FOR-IDENT-Nachhaltigkeit (im RiSKWa Programm mit dem Kennzeichen 02WRS1456A und den Vorläuferprojekten FOR-IDENT und Risk-Ident). Im Bereich der Analytics+-Plattform danken die Organisatoren zusätzlich noch dem TUM Lehrfond für finanzielle Unterstützung sowie den mittlerweile zahlreichen Sponsoren die die nachhaltige Nutzung und Weiterentwicklung nun mit Ihrer finanziellen Unterstützung sicherstellen. Zur Erstellung der Stoffdatenbank PLANT-IDENT sei dem Bayerischen Staatsministerium für Umwelt und Verbraucherschutz für finanzielle Unterstützung in den letzten drei Jahren gedankt. Nicht zuletzt danke ich der GDCh Fachgruppe Analytische Chemie und der GDCh Arbeitsgruppe Berufliche Bildung für finanzielle und ideelle Unterstützung. So sehen wir sehr positiv in die Zukunft von NTS und zukünftigen Experten sowie der weiteren Verbreitung und langanhaltender Nutzung von Plattformen in ‚open-access e-learning' und zur ‚open-access Datenauswertung'.

[1] T. Letzel: Non-Target Screening, Suspected-Target Screening und Target Screening – von Technologien und Philosophien, von Datenbanken und vom Handwerk. (Molekülgenaue Detektivarbeit); Labor & More, 2013, 4, 30-35. (open access).
[2] T. Letzel, T. Lucke, W. Schulz, M. Sengl, M. Letzel: In welche Klasse kommst Du? OMI (organische Moleküldentifizierung) im Wasser mittels LC-MS(/MS): Schritte von „Unbekannt" zu „Identifiziert" – ein Diskussionsbeitrag.; Labor & More, 2014, 3, 52-58. (open access).
[3] E.L. Schymanski, et al.. Non-target screening with high resolution mass spectrometry: Critical review using a collaborative trial on water analysis.; Analytical and Bioanalytical Chemistry 2015, 407 (21), 6237-6255.
[4] T. Letzel, et al.. LC-MS Screening Techniques for Waste Water Analysis and Analytical Data Handling Strategies: Sartans and Their Transformation Products as an Example Chemosphere 2015, 137, 198-206.
[5] J. E. Drewes and T. Letzel (Editors) Assessing Transformation Products of Chemicals by Non-Target and Suspect Screening – Strategies and Workflows (Volume 1 and 2) e-book (ACS Symposium Series 1241 and 1242), American Society of Chemistry (09.12. 2016), Hardcover book, Oxford University Press (10.05. 2018) Vol.1: ISBN13: 9780841231931, Vol.2: ISBN13: 9780841231955
[6] http://www.chemnixblog.de/
[7] https://analyticsplus.wordpress.com/
[8] https://analyticsplus.wordpress.com/spe-simulator/
[9] https://analyticsplus.wordpress.com/get-active/hplc-simulator/
[10] https://analyticsplus.wordpress.com/gc-simulator/
[11] https://analyticsplus.wordpress.com/lessons/workflows/
[12] https://www.lfu.bayern.de/stoffident/
[13] https://water.for-ident.org/
[14] P. Rostkowski, et al.. The Strength in Numbers: Comprehensive Characterization of House Dust using Complementary Mass Spectrometric Techniques Analytical and Bioanalytical Chemistry 2019, https://doi.org/10.1007/s00216-019-01615-6
[15] G. Greco, S. Grosse, and T. Letzel. HILIC-RP HPLC-API-ToF MS for the determination of polar and apolar organic molecules in wines. Journal of Separation Science 2013, 36 (8), 1279-1388.

Autor | Kontakt

PD Dr. Thomas Letzel
Technische Universität München | Lehrstuhl für Siedlungswasserwirtschaft
Am Coulombwall 3 | 85748 Garching | www.tum.de
Analytisches Forschungsinstitut für Non-Target Screening GmbH
(AFIN-TS GmbH) | Augsburg | www.afin-ts.de