



Das Analytische Forschungsinstitut für Non-Target Screening oder kurz AFIN-TS GmbH ist ein unabhängiges Ausbildungs-, Beratungs-Transfer-, Analyse- und Forschungsinstitut mit Fokus im Bereich des Non-Target Screenings.

### Das Unbekannte im Bekannten finden

Non-Target Screening (N-TS) eignet sich zum massenspektrometrischen Nachweis von neuen, unerwarteten oder bislang unbekannt organischen Substanzen in unterschiedlichen Proben und steht somit der klassischen Einzelmolekülanalytik gegenüber. Dies ist besonders in komplexen Proben von großem Vorteil. Selbst wenn Proben bereits gut charakterisiert sind, ist nie auszuschließen, dass relevante aber noch unerkannte Substanzen darin enthalten sind. Diese Art der Analytik ist universell in vielen Bereichen einsetzbar und eignet sich neuerdings vor allem auch für die Analyse von Umweltproben wie (Oberflächen)Gewässer, Luft oder Boden. Diese wird meist parallel zur klassischen quantitativen Analytik eingesetzt. So können zusätzlich zur Überwachung von bekannten Substanzen auch Neue und Unerwartete entdeckt werden. Auch die Überwachung von Behandlungs- und Aufbereitungsprozessen z.B. in Kläranlagen und deren Abwasser mittels N-TS ist möglich. Als aktuelles Beispiel sind hier u.a. Wirkstoffe wie Diclofenac oder PMTs bzw. vPvM sowie PFCs zu nennen. Besonders wirkungsvoll ist N-TS, wenn ähnliche Proben in gewisser Regelmäßigkeit analysiert werden. Durch den Vergleich der verschiedenen Messungen lassen sich direkt und statistisch Gemeinsamkeiten, Unterschiede oder zeitliche Veränderungen in der chemischen Zusammensetzung erkennen.

### Analytische Herausforderungen

N-TS unterscheidet sich stark von der klassischen zielgerichteten quantitativen Einzel- oder Multikomponentenanalytik. Anstatt gezielt auf einzelne Moleküle in der Probe zu blicken, wird beim N-TS -nicht zielgerichtet- eine Vielzahl von Signalen aufgezeichnet, die in der nachfolgenden Datenauswertung betrachtet werden können. Dabei werden ohne weiteres mehrere tausend Datenpunkte in einer Probe aufgezeichnet (Abb. 1).

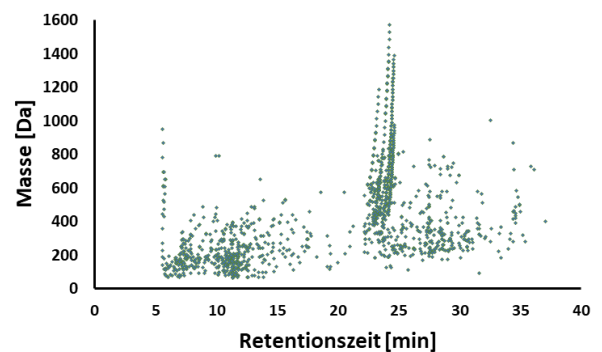
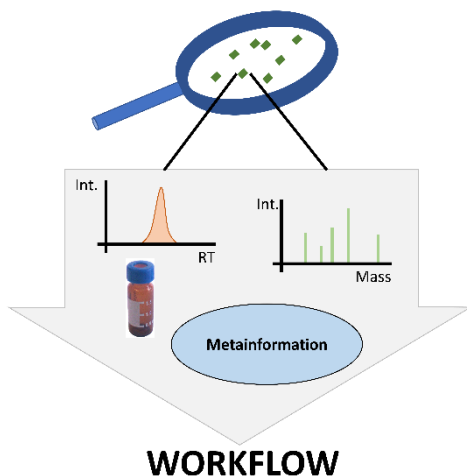


Abbildung 1: Retentionszeit- Masse-Darstellung der Non-Target Messung einer komplexen Probe

Da ein umfassender Blick auf die zu untersuchenden Proben erhalten werden soll, müssen sowohl die chromatographische Trennung, wie auch die massenspektrometrische Detektion möglichst weitreichend sein. Komplexe Proben (wie chemische Synthesen) enthalten oft ein sehr breites bzw. spezifisches Spektrum an organischen Verbindungen. Je nach Art der Probe können diese sehr polar bis sehr unpolare sein, was die Nutzung von **Umkehrphasenchromatographie (RPLC)** oder **hydrophiler Interaktionsflüssigchromatographie (HILIC)** notwendig macht. Falls polare und unpolare Analyten parallel getrennt werden sollen, sind polaritätserweiterte Trenntechniken wie **superkritische Fluidchromatographie (SFC)** oder **Kopplungen von Umkehrphasen- und HILIC-Trennung (RPLC-HILIC)** einzusetzen. Nach erfolgreicher

Trennung ist eine akkurate und möglichst **sensitive massenselektive Detektion** nötig. Dabei ist der Bereich der detektierbaren Substanzen möglichst groß zu wählen. Hierfür bieten sich vor allem hochauflösende und hochakkurate Tandem-Massenspektrometer wie Orbitrap-Instrumente oder Q-TOF Systeme an, die jeweils große Massenbereiche erfassen und gleichzeitig **Strukturinformation** zu den analysierten Molekülen liefern. Die Datenaufnahmen erfolgt grundsätzlich unbeschränkt, indem der gesamte Massenbereich über die gesamte Messdauer detektiert wird. Daraus ergibt sich zwar eine große Datenmenge die in der nachfolgenden Auswertung jedoch gut strukturiert und nachvollziehbar verarbeitet werden kann. Zu jedem Datenpunkt bestehend aus Retentionszeit, Molekularmasse, Fragmentspektren und Signalintensität (siehe Abb. 1) gibt es noch weitere Informationsebenen deren Nutzung im N-TS sehr wichtig sind. Dies können aus den Messpunkten erhaltene analytische Informationen, wie **Summenformel**, **Strukturinformation** die **Hydrophobizität** eines Analyten sein oder aber auch Metainformation, wie die **Herkunft** der Probe und deren **Vorbehandlung**. Durch die konsequente Kombination dieser Informationen in robusten Auswertungsworkflows ist es heute schon möglich nicht nur relevante Datenpunkte zu identifizieren und



der Fragestellung entsprechend zu nutzen aber auch neue Ansätze zu verfolgen.

### **Intensive professionelle Unterstützung**

Die AFIN-TS bietet Ihnen ganzheitliche, übergreifende und professionelle Unterstützung in allen Bereich des N-TS. Dies beinhaltet Ausbildung, Beratung, Unterstützung bei der Etablierung von N-TS und die Entwicklung von Workflows zu Ihren aufgabenspezifischen Fragestellungen.

AFIN-TS betreibt ein eigenes N-TS Labor dem Sie nachhaltige Studien und Projekte in Auftrag geben und mit dem Sie eine langfristige analytische Produktbegleitung starten können.

Weitere Schwerpunkte liegen in der

#### Ausbildung (personell und institutionell):

Konzepte, Seminare, In-House Schulungen und VR-Ansätze zu den Themen:

- RPLC, HILIC, SFC und polaritätserweiterte Chromatographie
- Massenspektrometrie
- N-TS (generell und speziell)

#### Beratung (personell und institutionell):

Umfassende Beratung und Unterstützung bei der Etablierung von N-TS durch:

- Erstellung von Arbeitsabläufen
- Optimierung bestehender analytischer Prozesse
- Perspektivische Etablierung und Nutzung von N-TS für Zukunftsszenarien

#### Workflows:

Entwicklung und Anpassung von Auswertungsstrategien in enger Zusammenarbeit mit Ihnen als Kunden um optimale Ergebnisse und Nutzung gewährleisten zu können.

#### **Kontakt:**

AFIN-TS GmbH

Am Mittleren Moos 48

86167 Augsburg

E-Mail: [info@afin-ts.de](mailto:info@afin-ts.de); Web: [www.afin-ts.de](http://www.afin-ts.de)