



Non-Target Screening

in Zeiten von Climate Change, Food Fraud und Corona

Seminar

'GC meets NTS'

- Gas Chromatography
meets
Non-Target Screening -

04.02.2021
and
05.02.2021

in Augsburg, Germany

and online

PD Dr. Thomas Letzel

Das Jahr 2020 ist wahrlich ein besonderes Jahr, auch in der Analytik. Nicht nur, dass sich Ereignisse wie die analytica (1) oder Weiterbildungsseminare (2) schlagartig von Präsenzveranstaltungen in Webveranstaltungen wandeln, sondern auch, dass sich die Themen immer öfter von der ‚zielgerichteten‘ quantitativen Analytik zusätzlich in Richtung ‚nicht-zielgerichteter‘ qualitativer Analytik bewegen. Letzteres wird in unserem Fall typischerweise massenspektrometrisches Non-Target Screening (NTS) genannt und ist als Begriff der instrumentellen Analytik in den Bereichen Umweltanalytik, Lebensmittelanalytik und Metabolomics mittlerweile sehr populär. NTS-Veranstaltungen wie die SWEMSA 2019 (3) werden von vielen Einrichtungen zwar besucht, aber oft wird diese Analytik noch nicht im eigenen Labor umgesetzt. Allerdings wird in jüngster Zeit die reale und langfristige Nutzung von Non-Target Screening konkret für unterschiedlichste Fragestellungen durchdacht, was sich am erhöhten Gesprächsbedarf zeigt.

Anthropogene Spurenstoffe beeinflussen den globalen Klimawandel, verursachen aber ebenso die direkte Exposition von Umwelt und Mensch. Gerade in Gewässern und verschiedenen Wasserproben entwickelte sich das Non-Target Screening zu einer vielseitig einsetzbaren Technik mit sehr vielen Workflows und Datenauswertestrategien. Der Fokus liegt hier meistens in der Identifizierung von erhaltenen organischen Molekülen und deren Transformationsprodukten (4). In dieser Disziplin finden mittlerweile einige NTS-Strategien mit sogenannter polaritätserweiterter Chromatographie Anwendung. Diese kann neben ‚klassischer‘ (z.B. aus der RPLC eluierende) Moleküle gleichzeitig sehr polare (gut wasserlösliche) Moleküle erfassen (5). Auch in diesem Bereich der oftmals sehr stabilen und sehr polaren/mobilen Moleküle liegt der Schwerpunkt in der Charakterisierung und Identifizierung anthropogener Spurenstoffe. Das NTS bewegt sich dabei immer weiter aus dem aquatischen Umweltthema über Uferfiltrate sowie Grundwasser hin zum Trinkwasser und somit zur Lebensmittelanalytik.

Im Bereich der Lebensmittelanalytik sieht man den Bedarf von NTS bisher jedoch weniger in der Identifizierung, sondern eher in Bestimmungsmethoden zur Authentizität von Food wie Olivenöl, Vanille, und andere fälschungsanfällige Lebensmittel. Die dort zum Einsatz kommenden Non-Target Screening Techniken basieren bisher fast ausschließlich auf Nuclear Magnetic Resonance (NMR)- und Infrarot (IR)- Spektroskopie. Weitergehende physiko-chemische Informationen zu einzelnen Molekülen liefert jedoch hauptsächlich das massenspektrometrische Non-Target Screening. In Kombination mit der aus der oben erwähnten Umweltanalytik kommenden Techniken lassen sich hier oftmals zusätzlich Fragen der Molekülidentifizierung z.B. bei Moleküländerungen in Lebensmittel-Herstellungsprozessen klären.

Nicht zuletzt könnte NTS auch im direkten Corona-Umfeld eingesetzt werden, so zum Beispiel für die Qualitätssicherung von potentiell neuen Wirkstoffen auf Basis ‚kleiner Moleküle‘ sowie für das

Monitoring des Herstellungsprozesses und unterschiedliche molekulare Einflüsse oder Änderungen im Prozess. So kann nicht nur die Originalität von Wirkstoffen sichergestellt, sondern auch unbekannte Nebenprodukte charakterisiert werden, die man aus dem chemischen Prozess heraus nicht direkt erwartet würde.

Themen wie ‚NTS zur Bestimmung von Biodiversität‘ oder ‚NTS in salzhaltigen Proben‘ sind zukunfts-trächtige Bereiche mit weiterhin großem Forschungsbedarf. Diesbezüglich ist über den experimentellen und forschenden Ansatz hinaus Beratungsbedarf in kommerziellen sowie behördlichen analytischen Einrichtungen gefragt. Hier können robuste und nachhaltige Workflows, Auswertestrategien und Datenhandhabungskonzepte unter Beweis stellen, dass Non-Target Screening nicht nur eine Zukunftstechnologie ist, sondern schon in der Gegenwart angekommen ist.

Wir sind sicher, dass Non-Target Screening heutige Fragen kompetent und nachhaltig beantworten kann, aber auch, dass die Technik sich im nächsten Jahrzehnt stetig und zukunftsweisend weiterentwickeln wird.

(1) <https://www.analytica.de/de/>

(2) <https://afin-ts.de/category/seminare/>

(3) https://afin-ts.de/wp-content/uploads/2020/05/Letzel_ChromFoodEngl1909.pdf

(4) <https://pubs.acs.org/isbn/9780841231931>

(5) https://afin-ts.de/wp-content/uploads/2020/04/AFIN-TS_01_2020_Pol_Ex.pdf



Autor | Kontakt

PD Dr. Thomas Letzel

Analytisches Forschungsinstitut für Non-Target Screening - AFIN-TS GmbH
Am Mittleren Moos 48 | 86167 Augsburg | www.afin-ts.de