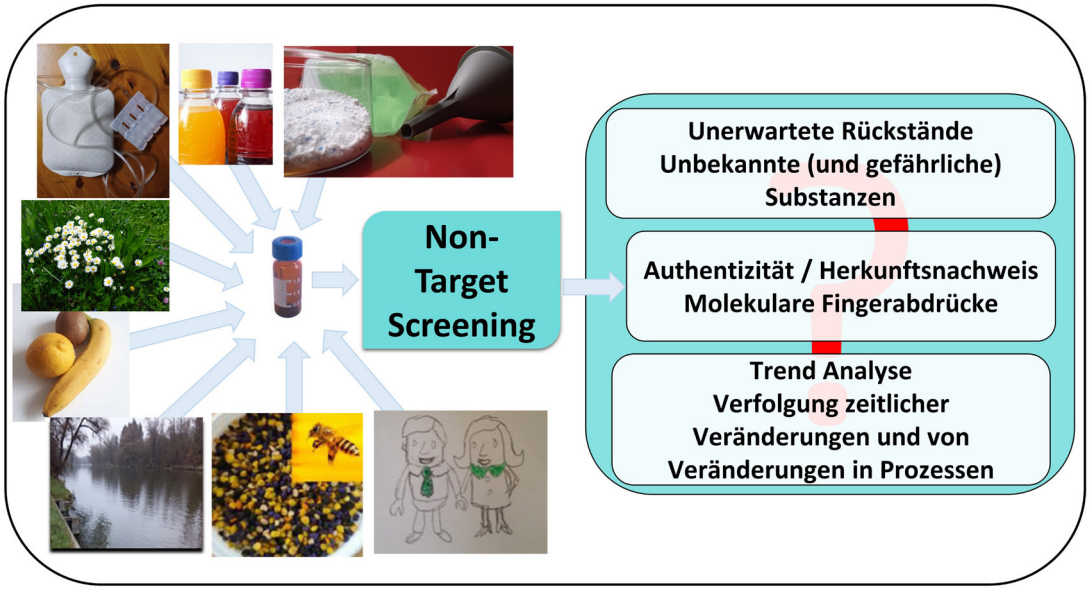
Non-Target Screening im Laboralltag

Auf dem Weg zur retrospektiven Datennutzung von validierten Daten in Routinelaboratorien

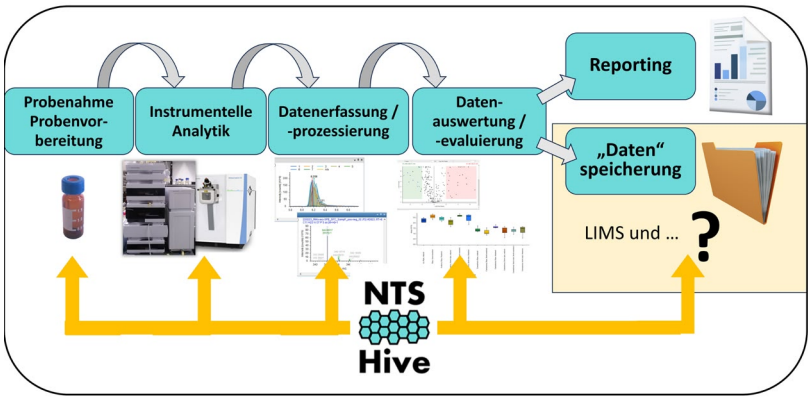


In zahlreichen Bereichen, wie z. B. chemische und pharmazeutische Prozesse, Lebensmittel und Lebensmittel-Kontaktmaterialien, medizinische Kontaktmaterialien sowie Umweltproben (wie Grund-, Oberflächen- oder Abwasser), Bienenpollen sowie klinische Proben bzw. Metabolomics) hat NTS in den letzten Jahren in den Routine-Einsatz gefunden. Bild: AFIN-TS

Zunächst ein kurzer Rückblick: Der Begriff (massenspektrometrisches) Non-Target Screening (NTS) wurde 1997, also vor knapp dreißig Jahren, erstmals in einer wissenschaftlichen Publikation von K. Bester et al. für Wasseranalysen mit GC-MS erwähnt [1]. Seitdem hat sich einiges getan. Und ein Non-Target Screening erfolgte in LC-MS-Studien an Lebensmitteln und Wasserproben. Im Jahr 2014 wurde von Schymanksi et al. ein erstes Schema zu Identifizierungsklassen von Verbindungen im NTS definiert [2]. In 2019 gab es dann erstmals (von der „Deutschen Wasserchemischen Gesellschaft" der GDCh) einen umfassenden und praktischen NTS-Leitfaden für Wasseranalysen mit LC-MS, der zuletzt 2025 aktualisiert wurde [3]. Diese beinhaltet erstmals auch den Vorschlag für einen branchenrelevanten NTS-Referenzmix, Kapitel zur Validierung und Qualitätssicherung sowie ein erheblich erweitertes Kapitel zur statistischen Auswertung.

Doch wie steht es heute um das NTS und dessen alltägliche Nutzung in Routinelaboren? In den dreißig Jahren seit der ersten Erwähnung des Begriffes NTS wurden alle analytischen Schritte von der Probenahme über die Probenvorbereitung bis hin zur instrumentellen Analytik (in Chromatographie und Massenspektrometrie) konsequent weiterentwickelt und auf das „massenspektrometrische Erfassen von geladenen Features" optimiert. Vom einstigen akademischen Messen im und Suchen nach dem Unbekannten hat sich NTS mittlerweile zu einer gut etablierten, dokumentierten und routinetauglichen Analysenstrategie weiterentwickelt. Diese kann neue und spannende Einblicke mit verschiedensten Fragestellungen in unterschiedlichen Proben aus verschiedensten Anwendungsbereichen möglich machen.

Neben der instrumentellen Analytik hat sich in diesem Rahmen auch die (neu zu denkende) strategische Versuchsplanung, sowie entsprechend auch die (neu zu denkende) Datenprozes-



Schematische Darstellung eines retrospektiv nutzbaren Workflow-Konzepts, das auf einer Open-semantic-lab-Plattform („NTS-HIVE") basiert, einer Plattform als ganzheitlicher Kern für Datenspeicherung, -verarbeitung und -interpretation sowie als Ausgangspunkt für die Anwendung in Systemen für intelligente Datennutzung. Bild: AFIN-TS

sierung, -handhabung und -interpretation weiterentwickelt [4]. Dies geht so weit, dass diese Strategien heute als Pipelines schon zielführend und nachhaltig in Routinelaboren genutzt werden. Das klappt natürlich umso besser, je größer die vorherige analytische Erfahrung bzw. je besser die professionelle Unterstützung beim Einstieg in das Thema sind. Beispielsweise unterstützt das Unternehmen Analytisches Forschungsinstitut für Non-Target Screening GmbH (kurz: AFIN-TS) dies nun schon fast ein Jahrzehnt sehr erfolgreich. Dabei zeigt sich die zunehmende Bereitschaft in den Einrichtungen, Weiterbildungsangebote für die Labormitarbeitenden in Anspruch zu nehmen. Neben Forschungslaboratorien, die teilweise sehr „schnelllebig" sind (und messen), ist die Aufgabenstellung in Dienstleistungs-Laboratorien, in Behördenlaboratorien und anderen anwendenden Laboren eher langfristig und wiederkehrend. Bild 1 zeigt hierzu einige Sektoren, in denen NTS in den letzten Jahren (auch) in die Routine Einzug gefunden hat, und eine repräsentative Auswahl der dabei zu beantwortenden Fragen.

Der Alltag von Routinelaboren zeichnet sich durch häufig wiederkehrende Aufgaben und Proben aus, die oftmals in ihrem Umfeld eingeordnet und somit verglichen werden sollen. Für solche Labore ist von besonderer Bedeutung, robust, reproduzierbar, langfristig, nachhaltig, aber auch vorausschauend zu arbeiten. Im „NTS-Alltag" bedeutet dies, dass Labore immer sowohl die instrumentelle Analytik im Auge haben als auch die Datenhandhabung. So liefern diese Einrichtungen im Alltag typischerweise valide und nachvollziehbare Aussagen zu den Proben. Die praktischen Analyseschritte bzw. -prozesse führen letztendlich zu zahlreichen Datensätzen, sowohl in der instrumentellen Analytik selbst als auch in der Datenerfassung, Datenprozessierung, Datenverwertung sowie Datenevaluierung [5]. Die Handhabung, Speicherung und Verfügbarhaltung der verschiedenen Daten(-ebenen) stellte bisher die größte Herausforderung im NTS dar, birgt aber gleichzeitig, wie oben beschrieben, eine sehr große Chance, alltägliche Daten aus der Routine in einem äußerst weitreichenden digitalen Feld nutzen zu können. Dies eröffnet die Möglichkeit, Daten in retrospektiver Sichtweise nutzbar zu halten.

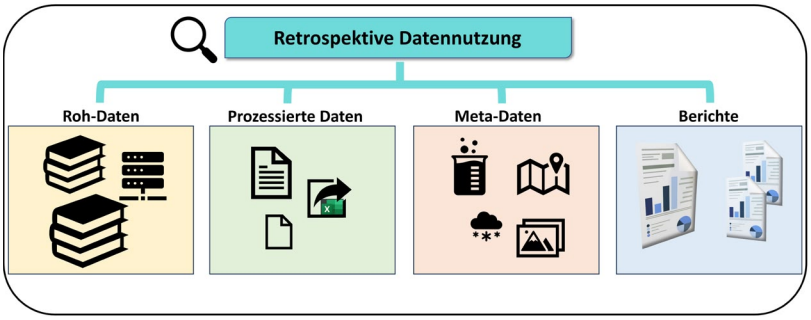
Herausforderung: Maschinenlesbarkeit und Schnittstellen

Ein weiterer Blick richtet sich heute vor allem auch auf den Einsatz moderner Softwarestrategien. Die analytische Gemeinschaft (mit instrumenteller Analyse wie Chromatographie, Spektroskopie und Massenspektrometrie) diskutiert derzeit über die „Daten-Goldmine" bzw. den „Daten-Ozean" und deren Erfassung in neuen Softwarelösungen, maschinellen Lern-Workflows und KI-Anwendungen. Derzeit müssen die Daten zunächst aus Archiven (wie oft in Labor-Informations-Management-Systemen (LIMS)) und unstrukturierten Datenseen (wie oft in NTS-Projekten) an die „Oberfläche" gebracht und in maschinenlesbare, gut strukturierte Inhalte umgewandelt werden. Dies ist letztlich auch die Basis für den validen Einsatz von Machine-Learning-Tools und heutigen KI-Lösungen. Diese Werkzeuge benötigen allesamt ein Qualitätsmanagement (QM) für analytische Daten mit Qualitätssicherung (QA) und Qualitätskontrolle (QC). Daher haben Routinelabore mit ihrer Struktur genau die richtigen Voraussetzungen für das „Heben dieses Datenschatzes (aus Goldmine oder Ozean)". Die bereits in den Routinelaboren etablierten Datenspeicherungskonzepte (z. B. archivierende LIMS oder elektronische Laborbücher (ELN)) und andere digitale Ansätze mit QM, QA sowie QC können nun über Vernetzung in neuen zukunftsfähigen Datennutzungs-Konzepten wie auf einer Plattform nach dem Open-Semantic-Lab (OSL)-Konzept, entwickelt am Fraunhofer-Institut für Silicatforschung ISC (www.isc.fraunhofer.de), kombiniert werden. Zusätzlich können Daten über Schnittstellen maschinenlesbar und aktiv sowie „FAIR" [6] hinterlegt bzw. nutzbar sein.

Bild 2 spiegelt schematisch die Ebene und den Workflow zur digitalen Informationserfassung bzw. -nutzung auf solch einer Plattform – hier „NTS-HIVE" genannt – wider. Auf dieser Grundlage ist es dann möglich, Daten aus dem NTS gemeinsam mit Daten aus der (klassischen) quantitativen Analytik zu verarbeiten und diese in ein spezielles sowie angepasstes (v. a. interaktives) Reporting der Daten zu überführen. In Bild 3 sind die die wichtigsten Bereiche von anfallenden Daten skizziert. Dabei sind heutzutage Daten wie „Rohdaten" eindeutig verlinkt, werden Daten wie „prozessierte Daten und Metadaten" direkt nutzbar vorgehalten und Berichte in einem interaktiven (aber qualitätsgesicherten) Format abgebildet.

Das Beispiel NTS-Hive basiert auf dem Open Semantic Lab [7], erweitert um strukturierte Metadaten und ermöglicht eine dauerhafte Verfügbarhaltung von NTS-Daten, quantitativen Daten, Geräteparametern und alle (proben-)relevanten Informationen. Auf dieser Ebene ist dann möglich, datensatzübergreifend, NTS-Daten mittels verschiedener weiterer Auswertungsprogramme und Tools zielführend und retrospektiv miteinander zu verarbeiten. Dadurch können vorherige Priorisierungen, Annotationen und Identifizierungen von NTS-Daten zuverlässiger und auf breiterer Basis gehandhabt und berichtet werden. Sie eröffnet dabei die Möglichkeit der retrospektiven Datenbetrachtung und -bewertung im Alltag der Laboratorien, was bislang so nicht oder nur mit großem Aufwand möglich war.

Mit der gerade zunehmenden Etablierung von einzelnen „Machine-learning"-Tools und weitergehenden KI-Lösungen (wie bspw. dem Ansatz der sog. deterministischen [8] und der sog. agentischen KI-Plattformen [8, 9]) werden diese Daten nun tiefgehend und weitreichend eben auch im Nachgang auf relevante Inhalte untersucht. In Kombinationen einer „NTS-HIVE"-Lösung und entsprechenden KI-Plattformen werden derzeit Non-Target-Screening-Daten u.a. aus der Wasseranalytik in retrospektiven und lernenden Ansätzen mit Zukunftstechnologien erfolgreich genutzt. Erste Ergebnisse dieser neuartigen Kombination der Datenanalyse sind sehr erfolgreich.



Schematische Darstellung der Datenspeicherung und -nutzung auf einer Plattform zur retrospektiven Auswertbarkeit von analytischen Daten. Bild: AFIN-TS

[9] Xianghu Wang et al. Agentic AI for Structural Elucidation and Discovery of Drug Metabolites from Mass Spectrometry Data, bioRxiv 2026.06.23.734138; https://doi.org/10.64898/2026.06.23.734138

AUTOREN
Dr. Stefan Bieber, Dr. Thomas Letzel
Analytisches Forschungsinstitut für Non-Target Screening GmbH, Augsburg
info@afin-ts.de
www.afin-ts.de

Literatur:

[1] K. Bester, H. Hühnerfuss, W. Lange, N. Theobald, Results of non-target screening of lipophilic organic pollutants in the German Bight I: benzothiazoles, Science of The Total Environment, Volume 207, Issues 2–3, 1997, Pages 111-118, https://doi.org/10.1016/S0048-9697(97)00252-0

[2] Schymanski, E.L. et al. (2014) Identifying Small Molecules via High Resolution Mass Spectrometry: Communicating Confidence; Environmental Science & Technology 48 (4) 2097–2098.

[3] W. Schulz et al. (2025) Leitfaden zur Anwendung des Non-Target-Screenings mittels LC-ESI-HRMS in der Wasseranalytik; ISBN 978-3-947197-25-5; Ausgabe 2.0 2025;

[4] S. Bieber and T. Letzel (2025) Analytik neu gedacht; Nachrichten aus der Chemie (GDCh), 73 (1), 47-49.

[5] S. Bieber und T. Letzel (2025) Retrospektiver Einsatz von Non-Target Screening: Moderne Datenspeicherung, -nutzung und -interpretation; Wasserforum-Sonderpublikation zum 16. Langenauer Wasserforum 11, 50/51.

[6] https://www.go-fair.org/ (zuletzt 07.07.2026)

[7] https://github.com/OpenSemanticLab (zuletzt 07.07.2026)

[8] Aivett Bilbao, From raw signals to AI and omics-agnostic algorithms for multidimensional mass spectrometry, International Journal of Mass Spectrometry, Volume 523, 2026, 117608, https://doi.org/10.1016/j.ijms.2026.117608.