

Database Assisted Identification of Organic Substances (DAIOS)

- Eine Online-Datenbank für die aquatische Umwelt

Alexander Müller¹, Wolfgang Schulz und Walter H. Weber*

Michael Müller**

¹ Universität Lüneburg, Fakultät Umwelt und Technik, Fachbereich Department Nachhaltigkeitsforschung

Bei der Identifizierung von organischen Spurenstoffen in der aquatischen Umwelt kommen unterschiedliche Analysensysteme zum Einsatz. Die Durchführung eines Non-Target-Screenings erfolgt je nach den Voraussetzungen des Labors auf unterschiedliche Weise. Jedoch spielt die Datenbankabfrage bei jedem Konzept des Non-Target-Screenings eine zentrale Rolle.

Für unpolare Stoffe erfolgt die Identifizierung gewöhnlich mittels GC-MS und Spektrenbibliothek. Bei polaren Substanzen kommt die LC-MS bzw. LC-MS/MS zum Einsatz. Ein Abgleich von MS-Spektren ist in diesem Fall nur begrenzt möglich. Deshalb ist es notwendig eine Online-Datenbank speziell für die Anforderungen der LC-MS in der aquatischen Umwelt zu erstellen.

Konzept für die Anwendung der Online-Datenbank

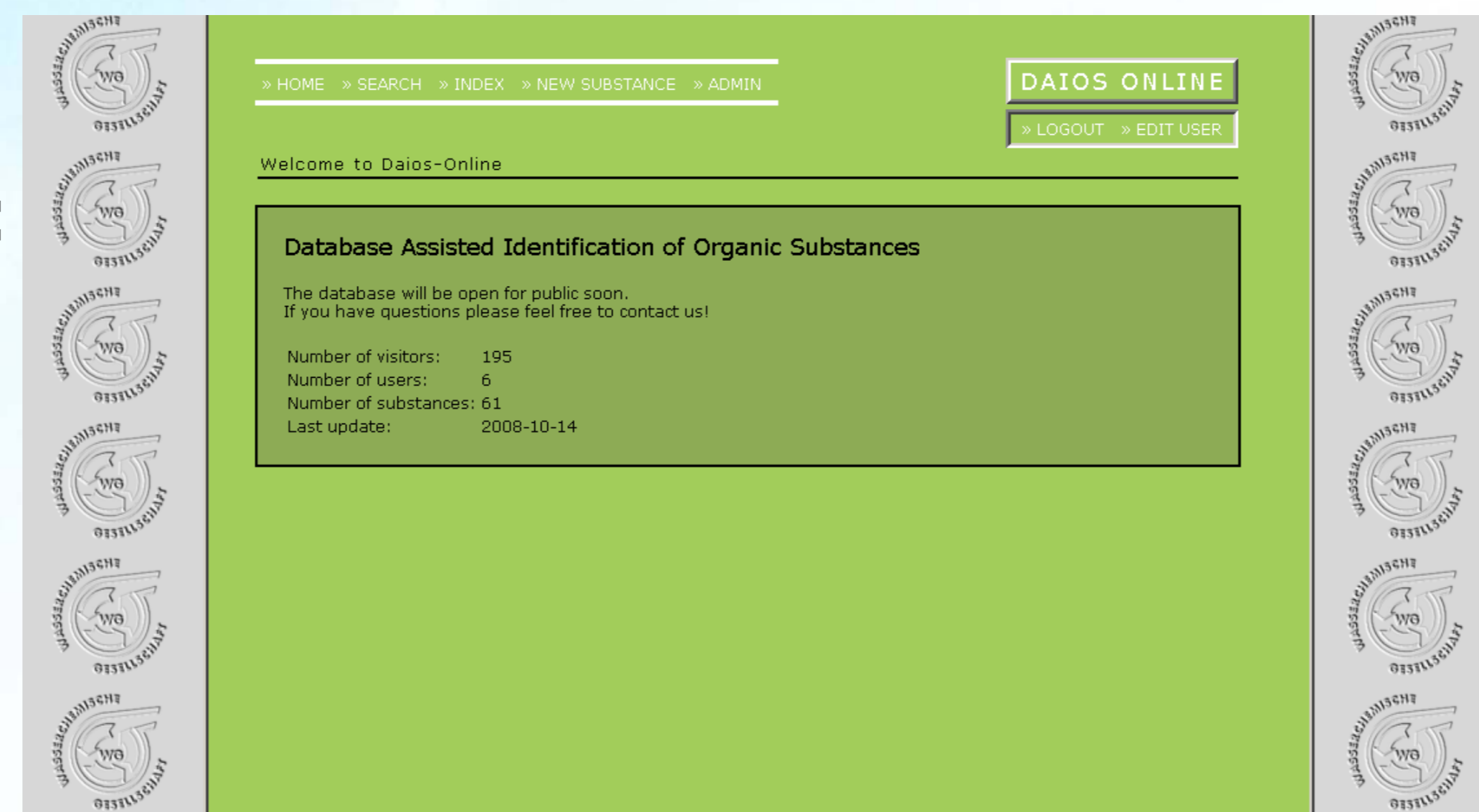
(Weitere Informationen finden Sie unter www.DAIOS-Online.de)

Kopplung LC-MS mit Low Resolution:

z.B. Ionenfalle

Triple Quadrupol

⇒ Extracted Ion Chromatogram



Kopplung LC-MS mit High Resolution:

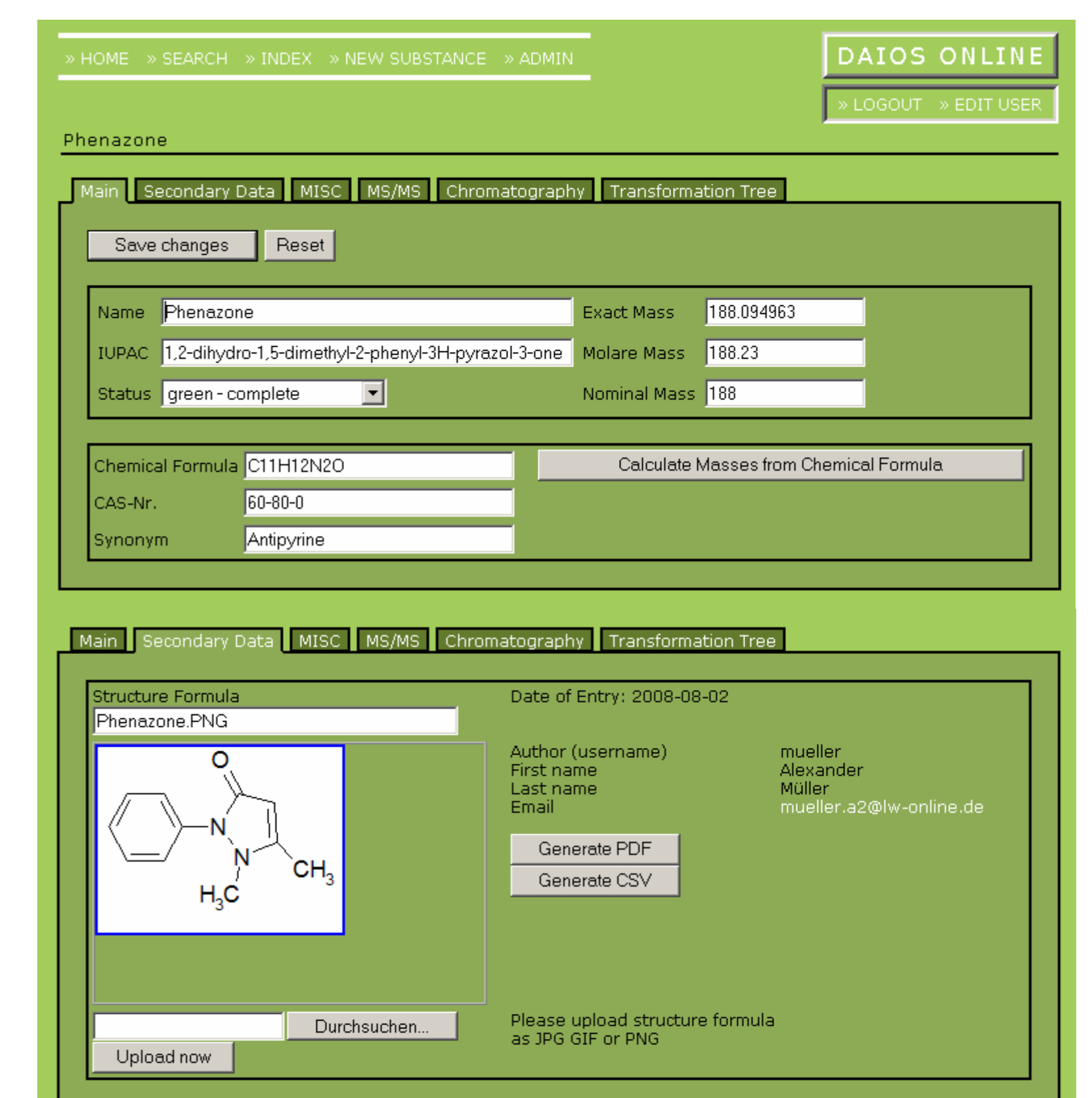
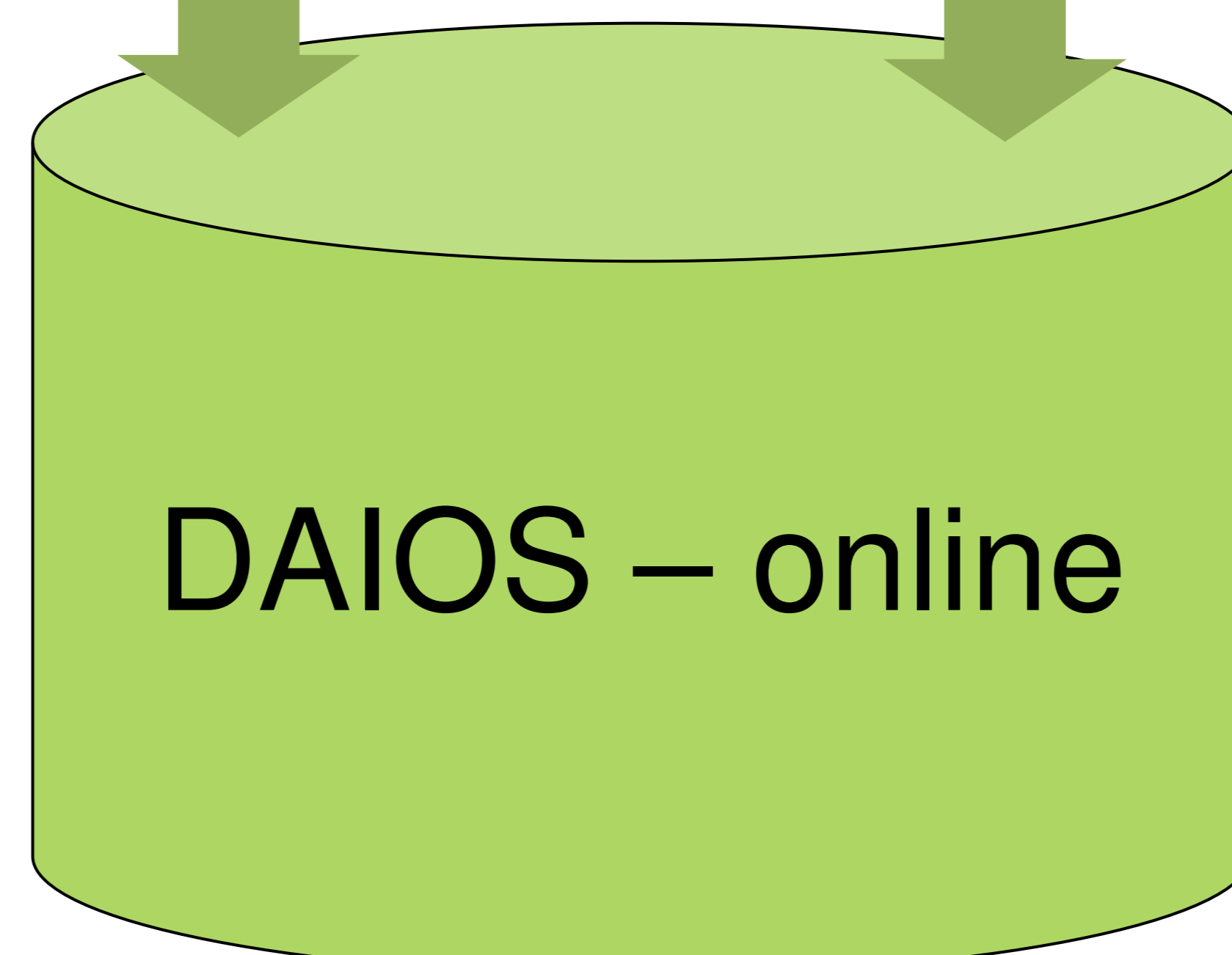
z.B. Q-TOF

Orbitrap

⇒ Extracted Ion Chromatogram

Nominelle Masse	Fragment 1	Fragment 2	...
188.1	56.1	77.0	...

Exakte Masse	Fragment 1	Fragment 2	...
188.0949	56.066	77.040	...



Zuordnung einer Substanz

Verifizierung mittels MS/MS

Identifizierung der Substanz

