

Master-Abschlussarbeit

Thema:

Semiquantifizierung von MDR-relevanten stickstoffhaltigen Substanzen mittels UHPLC-QToF

Zusammenfassung:

Die Masterarbeit wurde bei dem Unternehmen Drägerwerk AG & Co. KGaA im Chemischen Testcenter der Medical Division in Lübeck angefertigt und befasst sich mit der Semiquantifizierung MDR-relevanter Substanzen mittels UHPLC-QToF.

Das Ziel dieser Arbeit war die Erstellung eines Gesamtkonzepts zur massenspektrometrischen Semiquantifizierung von stickstoffhaltigen Substanzen mittels target und non-target Analyse unter Verwendung von deuterierten Standards.

Für die Erstellung des Gesamtkonzeptes erfolgte die Datensammlung und Modellentwicklung anhand eines Trainingsset von sechs stickstoffhaltigen Substanzen und zwei internen Standards. Anschließend wurden vier Möglichkeiten der Semiquantifizierung anhand des Trainingsset mit unterschiedlichen Konzentrationen sowie unter Einfluss von Matrixeffekten validiert. Untersucht wurde die Semiquantifizierung mithilfe des Konzentrations-Peakflächen-Verhältnis von internem Standard und stickstoffhaltiger Substanz, unter Verwendung des Response Faktors der ähnlich eluierenden internen Standards, über den relativen Response Faktor als auch anhand der multiplen linearen Regression zur Vorhersage des relativen Response Faktors bei nicht verfügbaren Referenzsubstanzen. Abschließend wurde das Modell anhand eines Testset von drei stickstoffhaltigen Substanzen mit beeinflussender Matrix auf Anwendbarkeit überprüft. Der Ansatz des Konzentrations-Peakflächen-Verhältnis stellt perspektivisch die geeignetste Möglichkeit der Semiquantifizierung dar.

Verfasserin: Sarah Oßwald

Betreuer: Prof. Dr. rer. nat. Veronika Hellwig

Dipl.-Ing. Sascha Reinschmiedt

Datum der Abgabe: 13. Oktober 2023