



GDCh

Gesellschaft
Deutscher Chemiker

Fachgruppe
Analytische Chemie

Chemometrie an der Uni Hamburg

Rückblick Analytica 2022

Nachruf Maria Moreno Bondi

Mitteilungsblatt
3/2022



ISSN 0939-0065



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER



**Arbeitskreis
Analytik mit Radionukliden &
Hochleistungsstrahlenquellen
(ARH)**

Vorsitz 2021-2024
Prof. Dr. Ulrich W. Scherer
Mannheim
u.scherer@hs-mannheim.de

**Arbeitskreis
Archäometrie**

Vorsitz 2019-2022
Dr. Stefan Röhrs
Berlin
s.roehrs@smb.spk-berlin.de

**Arbeitskreis
Chemische Kristallographie**

Vorsitz 2021-2024
Prof. Dr. Iris Oppel
Aachen
iris.oppel@ac.rwth-aachen.de

**Arbeitskreis
Chemometrik &
Qualitätssicherung**

Vorsitz 2020-2023
Dr. Claudia Beleites
Wölfersheim
claudia.beleites@chemometrix.gmbh

**Arbeitskreis
Chemo- & Biosensoren**

Vorsitz 2021-2024
Prof. Dr. Antje Baeumner
Regensburg
antje.baeumner@ur.de
Prof. Dr. Fred Lisdat
Wildau
Dr. Mark-Steven Steiner
Bernried

**Fachgruppe
Analytische Chemie**



Vorstand 2020-2023

Vorsitz
Prof. Dr. Carolin Huhn
Tübingen
carolin.huhn@uni-tuebingen.de

Stellvertretender Vorsitz

Dr. Michael Arlt
Darmstadt

Dr. Martin Wende
Ludwigshafen

Beisitz
Dr. Jens Fangmeyer
Leverkusen

Prof. Dr. Uwe Karst
Münster

Dr. Björn Meermann
Berlin

Prof. Dr. Tom van de Goor
Waldbronn/Marburg

Dr. Maria Viehoff
Darmstadt

**Deutscher Arbeitskreis
für Analytische Spektroskopie
(DAAS)**

Vorsitz 2019-2022
Dr. Martin Wende
Ludwigshafen
martin.wende@basf.com

**Arbeitskreis
Elektrochemische
Analysenmethoden (ELACH)**

Vorsitz 2020-2023
Prof. Dr. Frank-Michael Matysik
Regensburg
frank-michael.matysik@chemie.uni-r.de

**Arbeitskreis
Prozessanalytik (PAT)**

Vorsitz 2021-2024
Maik Müller
Oberursel
ak-prozessanalytik@gdch.de

**Arbeitskreis
Separation Science**

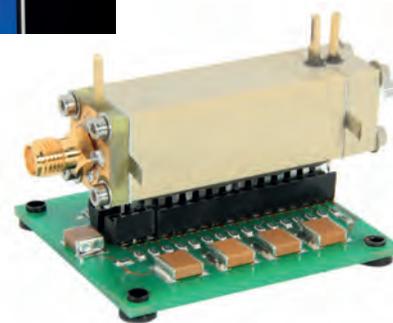
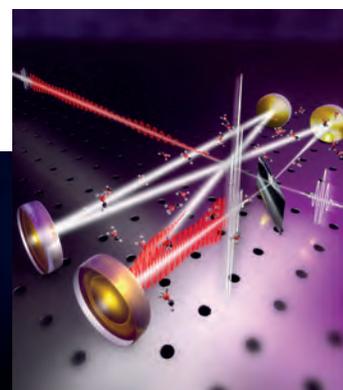
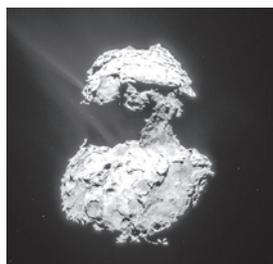
Vorsitz 2020-2023
Dr. Martin Vogel
Münster
martin.vogel@uni-muenster.de

Industrieforum Analytik

Sprecher
Dr. Joachim Richert
Ludwigshafen
joachim.richert@basf.com

Mitglieder

Editorial	4
Aus den Arbeitskreisen	
Neues vom AK ARH	5
Analytik in Deutschland	
Chemometrie komplexer Materialsysteme	6
Chemie Aktuell	
Nanopartikel retten historische Gebäude	8
Komet Chury ist überraschend komplex	9
Deep Learning trotz spärlicher Datenlage	10
Molekulare Musik ordentlich aufgedreht	11
Nanosensor spürt Pestizide auf Obst auf	12
Medien	
ABC in Kürze	13
Analytica und Analytica Conference 2022	
Das Labor von morgen	15
Sessions auf der Analytica Conference	17
Tagungen	
Nordic Conf. on Plasma Spectrochemistry	33
International Mass Spectrometry Conf.	35
Ankündigungen	38
Preise & Stipendien	
EXIST-Gründerstipendium	38
INNOspaceMasters	39
Herbert Knauer Science Award	40
Ausschreibungen	40
Personalien	
Geburtstage	40
Zum Tode von Maria C. Moreno Bondi	41
GDCh-Fortbildungen	42
Impressum	34



Editorial

Liebe Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie,

haben Sie das auch so vermisst? Sich endlich wieder einmal mit Kolleginnen und Kollegen gemeinsam vor Ort auszutauschen, die Diskussionen in einem Vortragssaal und nicht vor einem Bildschirm zu führen, direkten Kontakt an den Messeständen zu haben und Dinge auch wieder haptisch zu erleben, die zwanglosen und zufälligen Begegnungen während der Kaffeepause oder bei einem gemeinsamen Abendessen zu erleben? All das war in den letzten Monaten in vielfacher Form wieder möglich. Diejenigen von Ihnen, die bereits eine Konferenz, ein Seminar oder eine Ausstellermesse besucht haben, wie die *analytica* im Juni in München oder die *ACHEMA* Ende August in Frankfurt am Main, wissen, wie bereichernd solche Präsenzveranstaltungen sind – trotz aller pandemiebedingten Vorsicht, die sicherlich auch weiterhin notwendig ist.

Elektronische Plattformen haben uns in den letzten zweieinhalb Jahren geholfen, die Kontakte innerhalb der wissenschaftlichen Community nicht abreißen zu lassen. Viele von uns haben dabei mit großer Kreativität neue Formate des virtuellen Austausches entwickelt, die sicherlich auch in Zukunft weiter genutzt werden – nicht, weil die Pandemie uns noch Jahre beschäftigen soll, sondern vielmehr, weil diese Formate sich in der Regel rasch, kostengünstig und ohne große Zugangsbarrieren nutzen lassen. Dennoch: Die persönliche Begegnung bleibt unverzichtbar – vor allem für Nachwuchswissenschaftler:innen, die beginnen, ihre fachlichen und persönlichen Netzwerke zu knüpfen.

Es ist daher umso erfreulicher, dass die Planungen für Konferenzen und Symposien der nächsten Zeit Gestalt annehmen. In der letzten Ausgabe des Mitteilungsblatts fanden Sie an dieser Stelle bereits die Einladung zur nächsten ANAKON, die im April 2023 von Martina Marchetti-Deschmann, Erwin Rosenberg und Victor Weiss an der Technischen Universität Wien ausgerichtet wird.

Im Editorial dieser Ausgabe des Mitteilungsblatts möchte ich nun Ihr Augenmerk auf eine Konferenz richten, auf die viele von uns schon seit langem mit Vorfreude warten und die nach einer Verschiebung um zwei Jahre vom 18. bis 22. Juni 2023 in Düsseldorf stattfinden wird: die HPLC 2023 – das 51. International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques.

Nach Baden-Baden im Jahr 1983, Hamburg 1993 und Dresden 2009 ist es Michael Lämmerhofer von der Universität Tübingen und Oliver J. Schmitz von der Universität Duisburg-Essen gelungen, diese renommierte Tagungsserie der Flüssigchromatographie nun zum vierten Mal nach Deutschland zu holen.



Martin Vogel

Alle, die an der HPLC 2009 teilgenommen haben, werden sich sicherlich noch an die zahlreichen spannenden Beiträge und die fröhliche Atmosphäre an der Elbe erinnern.

Mit der Wahl des Tagungsortes Düsseldorf haben die beiden Chairmen der HPLC 2023 eine wichtige Voraussetzung bereits jetzt erfüllt: Rheinische Lebensart und Fröhlichkeit sowie eine attraktive Altstadt und die Lage am Rhein garantieren mit Sicherheit eine unbeschwerte und entspannte Tagungsatmosphäre. Und die zentrale Lage im Herzen Europas sowie die hervorragende Anbindung an Ziele in der ganzen Welt werden viele Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler von überall her (inklusive Köln!) zur HPLC 2023 nach Düsseldorf locken. Informieren Sie sich daher regelmäßig auf www.hplc2023-duesseldorf.com über Neuigkeiten zu dem Event der analytischen Trenntechniken im Jahr 2023, über Einreichungsmöglichkeiten für Ihre Beiträge, über Plenarvorträge und Keynote Lectures, über Short Courses und Postersessions und – last but not least – über ein attraktives Rahmenprogramm in Düsseldorf.

Seien Sie im Juni 2023 in jedem Fall dabei – Sie sind herzlich eingeladen. Die beiden Chairmen sowie alle Organisatorinnen und Organisatoren freuen sich, Sie im nächsten Jahr in Düsseldorf begrüßen zu dürfen.

Herzliche Grüße

Martin Vogel
Universität Münster
Vorsitzender des AK Separation Science

Neues vom AK Analytik mit Radionukliden und Hochleistungsstrahlenquellen (ARH)

■ Der Arbeitskreis plant ab dem kommenden Wintersemester ein neues regelmäßiges Seminar im Hybridformat: An einer Hochschule soll ein Hauptvortrag von etwa 30 Minuten Länge zu jeweils einem Thema aus dem Interessenbereich des Arbeitskreises gehalten werden; dieser Vortrag wird gleichzeitig als Webkonferenz an weitere Hochschulen und Privatpersonen übertragen. Ergänzt wird der Hauptvortrag durch eine 20 Minuten lange Präsentation einer Nachwuchskraft, also von Masteranden oder Doktoranden zu einem Aspekt ihrer Arbeit.

Relevante Themen sind:

- Analytik mit Großgeräten, Arbeiten mit Beschleunigermassenspektrometrie (Silke Merchel, Uni Wien), Arbeiten mit Synchrotronstrahlenquellen
- Aspekte der Endlagerung, Tätigkeit der Bundesgesellschaft für

Endlagerung (Rebecca Querfeld, BGE), Diffusionsexperimente zur Untersuchung der Radionuklidemigration (KIT)

- Einsatz von Radiotracern, Aktivierung von Maschinenbauteilen (Jürgen Daul, Zyklotron AG), Entwicklung eines Teststands zur Untersuchung der Filterleistung (Niklas Heiß, HS Mannheim)

Das genaue Programm und die Termine sind derzeit in der letzten Planungsphase und werden zu Beginn des Wintersemesters veröffentlicht.

Unser Nachwuchsseminar SAAGAS, das sich seit seiner Gründung mit Aktivierungsanalyse und Gamma-spektrometrie beschäftigt, war für den kommenden Februar 2023 geplant. Das Organisationsteam besteht aus Mitarbeitenden des Forschungszentrums Jülich und der Universität zu Köln. Da die Situation für den kommenden Herbst und Winter

bezüglich Covid-Maßnahmen weiter sehr unsicher ist und wir nicht wissen, ob die vorgesehenen Räumlichkeiten an der Universität zu Köln verfügbar sein werden, hat der Vorstand beschlossen, unser Seminar SAAGAS ein weiteres Mal zu verschieben. Es wird auch darüber nachgedacht, die Inhalte an die aktuellen Arbeitsgebiete des Arbeitskreises anzupassen – auch, weil es nur noch sehr wenige Einrichtungen gibt, an denen Aktivierungsanalyse durchgeführt werden kann. Der TRIGA-Reaktor in Mainz beispielsweise hat nur noch eine begrenzte Betriebsdauer und soll dann nach Beschluss der rheinland-pfälzischen Landesregierung stillgelegt werden. Da wir weiterhin guten Zuwachs an Jungmitgliedern haben, ist eine solche Reform sicherlich geboten.

Ulrich W. Scherer



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Inhouse-Kurse



Profitieren Sie von unserem langjährigen Know-how und nutzen Sie zahlreiche Vorteile!

- ✓ Individualität und Effizienz
- ✓ Kosten- und Zeitersparnis
- ✓ Übung an gewohnten Geräten

fb@gdch.de · T: +49 69 7917-364 · www.gdch.de/inhouse

Analytik in Deutschland

Chemometrie komplexer Materialsysteme

Die Arbeitsgruppe an der Hamburg School of Food Science entwickelt Algorithmen, um komplexe Daten zu analysieren, etwa bei der Authentifizierung von Lebensmitteln oder der Untersuchung von Schriftartefakten.

■ Komplexe biologische Materialien wie Lebensmittel lassen sich durch moderne Analysetechniken, zum Beispiel auf der Grundlage von Massenspektrometrie oder Spektroskopie, umfassend charakterisieren und klassifizieren. Die dabei erzeugten Daten sind hochdimensional, sind also durch eine große Zahl verschiedener Variablen von vergleichsweise wenigen Proben gekennzeichnet. Um diese Daten auszuwerten, werden Algorithmen entwickelt, die auf spezifischen Datenanalysemethoden basieren.

Die seit 2020 an der Hamburg School of Food Science bestehende interdisziplinäre Arbeitsgruppe „Chemometrie komplexer Materialsysteme“ arbeitet an der Schnittstelle zwischen Methodenentwicklung und -validierung von chemometrischen und bioinformatischen Verfahren und deren praktischer Anwendung. Dabei werden Ideen und Methoden aus der (Bio-)Informatik und Statistik weiterentwickelt und angewendet, um komplexe Daten zu analysieren, beispielsweise aus der (Bio-)Physik, (Lebensmittel-)Chemie, Medizin und sogar aus analytischen Bereichen der Geisteswissenschaften. Ein Schwerpunkt liegt dabei auf Omik-Datensätzen (Genomik, Proteomik, Metabolomik usw.), also auf Daten, die aus der Analyse einer zellulären Analytgruppe wie dem Genom, Proteom, Metabolom usw. stammen und somit deren Gesamtheit repräsentieren.

Um diese Daten umfassend zu nutzen, werden multivariate Verfahren eingesetzt: Alle Variablen des Datensatzes werden gleichzeitig analysiert, anders als bei klassischen statistischen Verfahren. Diese Methoden unterteilen sich in unüberwachte Verfahren, die ohne zusätzliche Informationen angewendet werden, und in

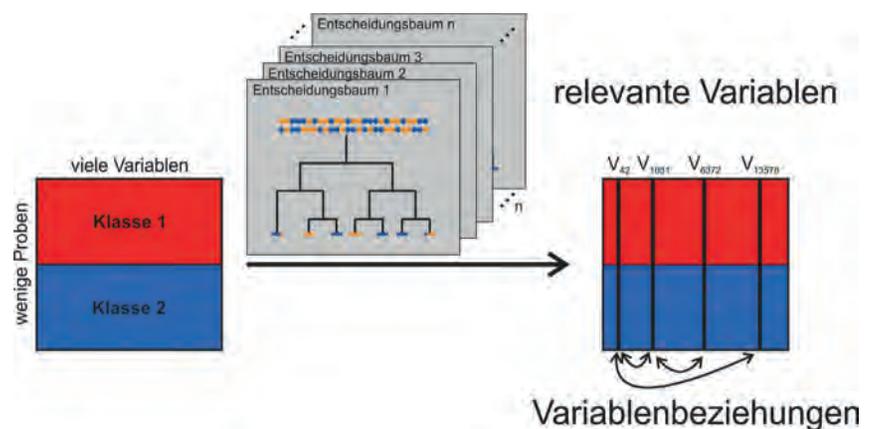


Abb. 1. Anwendung von Random Forest zur Charakterisierung hochdimensionaler Daten

überwachte Verfahren, bei denen Klassifizierungsmodelle anhand von Proben mit bekannten Klassenzugehörigkeiten trainiert werden. Letztere Verfahren, auch als maschinelle Lernverfahren bezeichnet, werden häufig als Blackbox eingesetzt. Dies bedeutet, dass man nur die jeweilige Klassenzugehörigkeit der Probe als Ergebnis erhält, während die Zusammenhänge, die zu dieser Entscheidung führen, unbekannt bleiben.

Ein Hauptziel unserer Forschung ist es, Proben über ihre Blackbox-Klassifizierung hinaus zu charakterisieren und dabei auch Daten aus verschiedenen Analysetechniken zu kombinieren. Dies bedeutet, dass jeweils relevante Variablen selektiert und deren Wechselwirkungen, auch über die Datensätzen verschiedener Analysetechniken hinweg, untersucht werden, um die Eigenschaften der Probe so detailliert wie möglich zu erfassen. Ein methodischer Schwerpunkt liegt hierbei auf Random-Forest-Verfahren, welche auf vielen Entscheidungsbäumen basieren und, auch aufgrund ihrer geringen Komplexität, viele Vorteile bieten (Abbil-

dung 1). Um Parameter der Datenprozessierung und das verwendete chemometrische Verfahren für eine spezifische Anwendung zu optimieren, wenden wir auch statistische Versuchspläne an (Design of Experiment).

Lebensmittelauthentifizierung

■ Da die Arbeitsgruppe an der Hamburg School of Food Science angesiedelt ist, stellt die Lebensmittelauthentifizierung ein zentrales Forschungsgebiet für die Algorithmik dar. Dabei wird untersucht, wie die Eigenschaften von Lebensmitteln, etwa deren Herkunft und Zusammensetzung, deren analytischen Fingerabdruck beeinflussen (Abbildung 2). Dieser analytische Fußabdruck wird durch verschiedene Techniken generiert und dient der Authentifizierung. Beispielsweise erhält man durch Next-Generation Sequencing oder durch Methoden der Massenspektrometrie und Spektroskopie einen genetischen, metabolischen, elementspezifischen oder proteinbasierten Fingerabdruck. Diese Fingerabdrücke lassen sich dann für

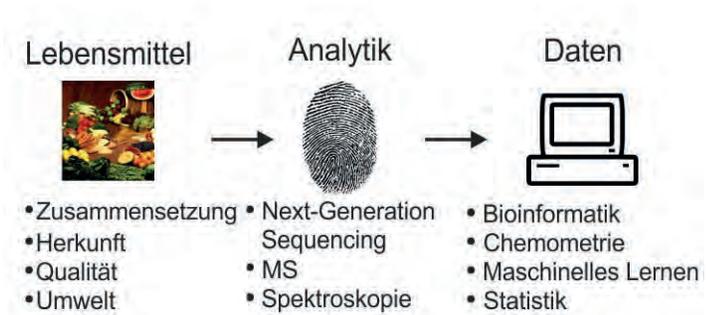


Abb. 2. Wesentliche Aspekte bei der Authentifizierung von Lebensmitteln

die Klassifizierung und Charakterisierung nutzen oder für eine umfassende Analyse mit höherer Klassifizierungsgenauigkeit auch kombinieren (Data Fusion).

Forschungsergebnisse in praktische Anwendungen umzusetzen ist essenziell, um brauchbare Verfahren für die Lebensmittelauthentifizierung zu entwickeln. Deshalb arbeiten wir auch mit Industriepartnern, zum Beispiel Handelslaboren, zusammen und entwickeln Algorithmen für den direkten Einsatz vor Ort. Anwendbarkeit und Reproduzierbarkeit der Messung und Auswertung spielen dabei eine wesentliche Rolle.

Schriftartefakte

Ein weiteres Gebiet, in dem wir spezifische Algorithmen entwickeln, um komplexe Daten zu analysieren, ist die Analyse von Schriftartefakten im Rahmen des Exzellenzclusters „Understanding Written Artefacts“. Hier wenden wir in Zusammenarbeit mit Kollegen und Kolleginnen aus verschiedenen Fachbereichen modernste Sequenzierungstechniken an, um zur Charakterisierung der biologischen Identität und des historischen Hintergrunds der Schriftartefakte beizutragen. Dabei steht insbesondere die interdisziplinäre Forschung mit Wissenschaftlern und Wissenschaftlerinnen aus den Geistes-

wissenschaften im Vordergrund. Die Charakterisierung und Klassifizierung der Artefakte hängt zum Beispiel vom Produktionsmaterial, dem Erhaltungszustand und den Umweltbedingungen ab, denen es im Laufe der Zeit ausgesetzt war. Die DNA-Analyse des Manuskriptmaterials ist besonders anspruchsvoll, da es sich dabei um sogenannte „ancient DNA“ handelt, welche sich durch Oxidation und Hydrolyse über Jahrzehnte oder Jahrhunderte verändert hat. Dies führt unter anderem zur Fragmentierung und zur Umwandlung einzelner Basen durch Desaminierung. Abbildung 3 gibt einen Überblick über die DNA-Analyse von Palmblattmanuskripten, deren Untersuchung einen Schwerpunkt des Exzellenzcluster darstellt.

Oberflächenverstärkte Raman-Streuung (SERS)

Bei SERS werden Raman-Signale von Nanopartikeln um mehrere Größenordnungen verstärkt, wodurch man lokale Informationen aus der Umgebung der Nanopartikel erhält. Bei der Analyse komplexer biologischer Proben wie Zellen ist es jedoch recht schwierig, die SERS-Spektren umfassend zu nutzen, da sie durch die Überlagerung der Signale vieler verschiedener Biomoleküle und durch wechselnde Umgebungsbedingungen gekennzeichnet sind. Das Ziel unserer Arbeit ist es, effiziente Algorithmen zu entwickeln, um diese komplexen Daten umfassend zu nutzen. Kürzlich haben wir anhand von simulierten Datensätzen gezeigt, dass die von uns entwickelten Random-Forest-basierten Verfahren besonders vielversprechend dafür sind. Dies konnten wir auch anhand von Daten aus Experimenten mit lebenden Zellen demonstrieren, bei denen wir Informationen über die Zusammensetzung und Interaktion von Lipidkomponenten mit Antidepressiva erhielten. Dies war mit etablierten Verfahren nicht möglich.

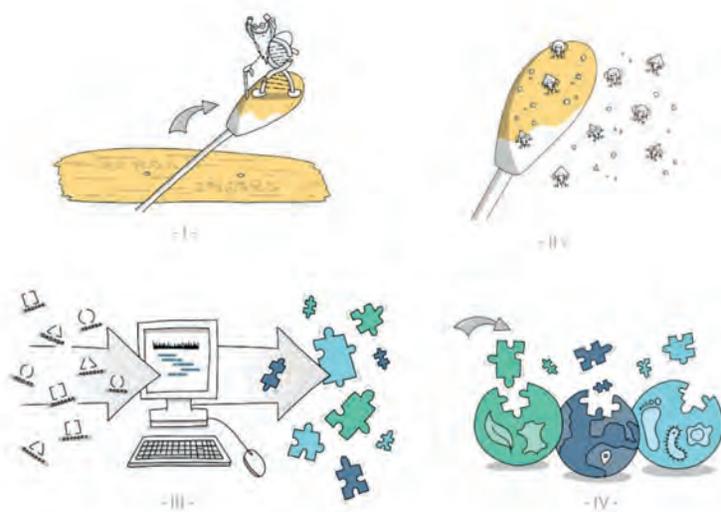


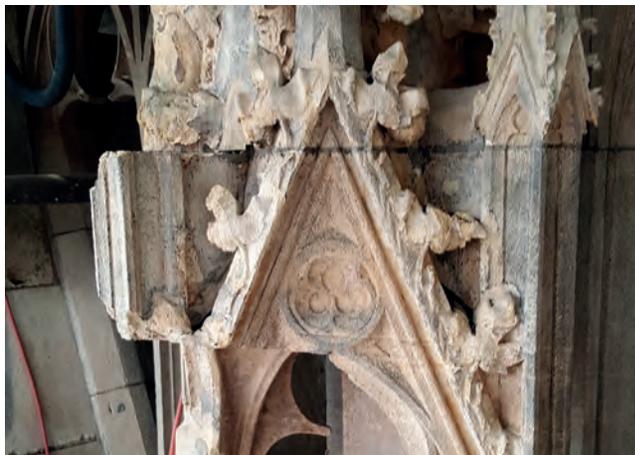
Abb. 3. Workflow bei der genetischen Analyse von Palmblattmanuskripten. I: Extraktion von (ancient) DNA. II: Man erwartet, dass verschiedene Arten von DNA vorhanden sind: endogene DNA aus dem Material selbst und exogene DNA aus anderen Quellen wie dem Mikrobiom (zum Beispiel Bakterien). III: Es werden verschiedene bioinformatische Verfahren angewendet. Zu den grundlegenden Verfahren gehören das Assembly der Sequenz (Zusammensetzen) und das Alignment (Vergleich) mit Referenzsequenzen. IV: Die Ergebnisse dieser Experimente können Hinweise geben über Produktionsmaterial, Herkunft und Lagerung des analysierten Manuskripts. (Graphik: J. Vogel, freisinn.net)

Stephan Seifert, Jule Hansen,
Lucas Voges
Hamburg School of Food Science –
Institut für Lebensmittelchemie
Universität Hamburg
stephan.seifert@chemie.uni-hamburg.de

Chemie Aktuell

Nanopartikel retten historische Gebäude

Forschungsteam untersucht bei DESY Nanokristalle für mehr Festigkeit von Sandstein



Deutlich sichtbare Verwitterungen am Stephansdom in Wien
(Fotos: Archiv der Dombauhütte St. Stephan)



Arbeiten am Stephansdom in Wien

■ Viele historische Gebäude wurden aus Sandstein gebaut, etwa der Wiener Stephansdom. Sandstein lässt sich leicht bearbeiten, hält aber der Verwitterung schlecht stand. Er besteht aus Sandkörnern, die relativ schwach aneinander gebunden sind, daher bröckeln im Lauf der Jahre immer wieder Teile des Gesteins ab, oft sind aufwendige Restaurierungen notwendig.

Man kann die Widerstandskraft des Gesteins aber erhöhen, indem man sie mit speziellen Nanopartikeln aus Silikat behandelt. Die Methode wird bereits eingesetzt; was dabei allerdings genau passiert und welche Nanopartikel dafür am besten geeignet sind, war bisher unklar. Ein Forschungsteam der Technischen Universität (TU) Wien und der Universität Oslo konnte nun durch aufwendige Experimente an DESYs Röntgenlichtquelle PETRA III und mit mikroskopischen Untersuchungen in Wien genau klären, wie dieser künstliche Härtingsprozess abläuft, und dadurch bestimmen, welche Nanopartikel dafür am besten geeignet sind. Die Ergebnisse sind im Fachblatt *Langmuir* veröffentlicht.

„Man verwendet eine Suspension, also eine Flüssigkeit, in der die

Nanopartikel zunächst frei herumschwimmen“, erklärt Forschungsleiter Markus Valtiner von der TU Wien. „Wenn diese Suspension in das Gestein gelangt, dann verdunstet der wässrige Anteil, die Nanopartikel bilden stabile Brücken zwischen den Sandkörnern und verleihen dem Gestein zusätzliche Stabilität.“ Diese Methode wird in der Restaurierungstechnik bereits angewandt, aber man wusste bisher nicht genau, welche physikalischen Prozesse dabei ablaufen. Wenn das Wasser verdunstet, dann kommt es zu einer ganz speziellen Art der Kristallisation: Normalerweise ist ein Kristall eine regelmäßige Anordnung einzelner Atome. Doch nicht nur Atome, sondern auch ganze Nanopartikel können sich in einer regelmäßigen Struktur anordnen – man spricht dann von einem „kolloidalen Kristall“.

Die Silikat-Nanopartikel finden sich beim Trocknen im Gestein zu solchen kolloidalen Kristallen zusammen und erzeugen dadurch gemeinsam neue Verbindungen zwischen den einzelnen Sandkörnern. Dadurch wird die Festigkeit des Sandsteins erhöht. Um diesen Kristallisationsprozess genau zu beobachten, nutzte das Forschungsteam der TU Wien die

brillante Röntgenstrahlung von PETRA III. An der Messstation P21.2 analysierten sie damit die Kristallisation während des Trocknungsprozesses.

„Das war sehr wichtig, um genau zu verstehen, wovon die Stärke der entstehenden Bindungen abhängt“, sagt Hauptautorin Joanna Dziadkowiec von der Universität Oslo und der TU Wien. „Wir haben unterschiedlich große Nanopartikel in unterschiedlicher Konzentration verwendet und den Kristallisationsprozess mit Röntgenanalysen untersucht.“ Dabei wurde gezeigt, dass die Größe der Partikel für die optimale Festigkeit entscheidend ist.

Dazu wurden an der TU Wien außerdem die Haftkraft gemessen, die durch die kolloidalen Kristalle entsteht. Dafür wurde ein eigenes Interferenzmikroskop verwendet, das auf die Messung winziger Kräfte zwischen zwei Oberflächen spezialisiert ist. „Wir konnten zeigen: Je kleiner die Nanopartikel, umso mehr verstärken sie den Zusammenhalt zwischen den Sandkörnern“, sagt Joanna Dziadkowiec. „Wenn man kleinere Partikel verwendet, entstehen mehr Bindungsstellen im kolloidalen Kristall zwischen zwei Sandkörnern, und

mit der Zahl der beteiligten Partikel steigt damit auch die Kraft, mit der sie die Sandkörner zusammenhalten.“

Wichtig ist auch, wie viele Partikel in der Emulsion vorhanden sind. „Je nach Partikelkonzentration verläuft der Kristallisationsprozess leicht unterschiedlich, und das hat einen Einfluss darauf, wie sich die kolloidalen Kristalle im Detail ausbilden“, sagt Markus Valtiner. Die neuen Erkenntnisse sollen nun dazu dienen, Restaurierungsarbeiten dauerhafter und zielgenauer zu machen.

Quelle: TU Wien

Originalveröffentlichung

J. Dziadkowiec, H.-W. Cheng, M. Ludwig, M. Ban, T. P. Tausendpfund, R. von Klitzing, M. Mezger, M. Valtiner, „Cohesion Gain Induced by Nanosilica Consolidants for Monumental Stone Restoration“, *Langmuir* 2022.

doi: 10.1021/acs.langmuir.2c00486

Chemisch gesehen ist Komet Chury überraschend komplex

Forschende unter der Leitung der Universität Bern identifizierten einen unerwarteten Reichtum an komplexen organischen Molekülen bei einem Kometen. Dies gelang dank der Analyse von Daten, die während der Rosetta-Mission der ESA vom Kometen 67P/Churyumov-Gerasimenko, kurz Chury, gesammelt wurden.

■ Kometen sind Fossilien aus der Urzeit und den Tiefen unseres Sonnensystems und sind Überbleibsel der Entstehung von Sonne, Planeten und Monde. Einem Team unter der Leitung der Chemikerin Nora Hänni vom Physikalischen Institut der Universität Bern, Abteilung Weltraumforschung und Planetologie, ist es nun gelungen, erstmals eine ganze Reihe komplexer organischer Moleküle bei einem Kometen zu identifizieren. Dies berichten die Forschenden in einer Studie, die in der renommierten Fachzeitschrift *Nature Communications* veröffentlicht wurde. Solche orga-

nischen Stoffe, die durch Kometeneinschläge auch auf die frühe Erde gelangten, könnten dazu beigetragen haben, das kohlenstoffbasierte Leben, wie wir es kennen, in Gang zu setzen.

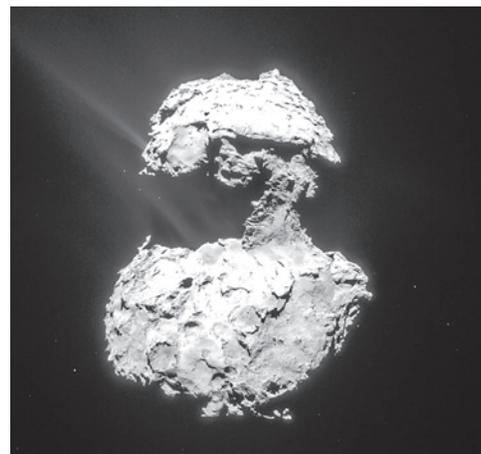
Genauere Analyse dank Berner Massenspektrometer

■ Mitte der 1980er Jahre schickten die großen Raumfahrtagenturen eine Flotte von Raumfahrzeugen aus, um am Halleyschen Kometen vorbeizufiegen. An Bord befanden sich mehrere Massenspektrometer, die die chemische Zusammensetzung sowohl der Kometenkoma – der dünnen Atmosphäre, die durch die Sublimation von Kometeneis in der Nähe der Sonne entsteht – als auch von Staubpartikeln untersuchten. Die von diesen Instrumenten gesammelten Daten verfügten jedoch nicht über die erforderliche Auflösung, um eine eindeutige Bestimmung der Zusammensetzung des Kometen zu ermöglichen.

Mehr als 30 Jahre später hat das hochauflösende Massenspektrometer ROSINA, ein Instrument unter der Leitung der Universität Bern an Bord der ESA-Raumsonde Rosetta, zwischen 2014 und 2016 Daten über den Kometen 67P/Churyumov-Gerasimenko, auch bekannt als Chury, gesammelt. Diese Daten gestatten den Forschenden nun zum ersten Mal, Licht in den komplexen organischen Haushalt von Chury bringen.

Das Geheimnis lag im Staub verborgen

■ Als Chury sein Perihel erreichte, den sonnennächsten Punkt, wurde er sehr aktiv. Das sublimierende Kometeneis erzeugte einen „Ausfluss“, der Staubpartikel mit sich zog. Die abgestoßenen Partikel wurden durch die Sonneneinstrahlung auf Temperaturen aufgeheizt, die über denen liegen, die typischerweise auf der Kometenoberfläche herrschen. Dadurch gelangten größere und schwerere Moleküle in die Gasphase und konnten vom hochauflösenden Massenspektrometer ROSINA-DFMS (Rosetta Orbiter Sensor for Ion and Neutral Analysis-Double Focusing Mass Spectrometer) gemessen wer-



Gas und Staub steigen von Churys Oberfläche auf, während sich der Komet dem sonnennächsten Punkt auf seiner Umlaufbahn nähert. (Foto: ESA/Rosetta/NAVCAM)

den. Die Astrophysikerin Kathrin Altwegg, Hauptverantwortliche für das ROSINA-Instrument und Mitautorin der neuen Studie, sagt: „Aufgrund der extrem staubigen Bedingungen musste sich die Raumsonde auf eine sichere Distanz von etwas mehr als 200 Kilometer über der Kometenoberfläche zurückziehen, damit die Instrumente unter stabilen Bedingungen arbeiten konnten.“ So war es möglich, Teilchen aufzuspüren, die aus mehr als einer Handvoll Atome bestehen und die zuvor im Kometenstaub verborgen geblieben waren.

Die Interpretation der komplexen ROSINA-Daten ist eine Herausforderung. Dem Berner Forschungsteam ist es jedoch gelungen, eine Reihe komplexer organischer Moleküle zu identifizieren, die bisher noch nie in einem Kometen nachgewiesen wurden. „Wir haben zum Beispiel Naphthalin gefunden, das für den charakteristischen Geruch von Motenkugeln verantwortlich ist. Auch fanden wir Benzoesäure, ein natürlicher Bestandteil von Weihrauch. Und wir identifizierten Benzaldehyd, das weithin verwendet wird, um Lebensmitteln ein Mandelaroma zu verleihen, und viele weitere Moleküle“, erklärt die Chemikerin des ROSINA-Teams Nora Hänni. Diese komplexen organischen Stoffe würden den Geruch von Chury offenbar noch vielfältiger als bisher ange-

nommen machen, aber auch angenehmer, so Hänni.

Abgesehen von wohlriechenden Molekülen wurden im organischen Haushalt von Chury auch viele mit sogenannter präbiotischer Funktionalität identifiziert (zum Beispiel Formamid). Solche Verbindungen sind wichtige Zwischenstufen bei der Synthese von Biomolekülen, zum Beispiel Zucker oder Aminosäuren. „Es scheint deshalb wahrscheinlich, dass einschlagende Kometen – als wesentliche Lieferanten von organischem Material – auch zur Entstehung von kohlenstoffbasiertem Leben auf der Erde beigetragen haben“, erklärt Hänni.

Ähnliche organische Stoffe in Saturn und Meteoriten

■ Neben der Identifizierung einzelner Moleküle führten die Forschenden auch eine detaillierte Charakterisierung des gesamten Ensembles komplexer organischer Moleküle im Kometen Chury durch, um ihn in den größeren Kontext des Sonnensystems einordnen zu können. Parameter wie die durchschnittliche Summenformel dieses organischen Materials oder die durchschnittliche Bindungsgeometrie der darin enthaltenen Kohlenstoffatome sind für diverse wissenschaftliche Bereiche von Bedeutung, von der Astronomie bis zur Sonnensystemforschung.

„Es hat sich herausgestellt, dass der komplexe organische Haushalt von Chury im Durchschnitt identisch ist mit dem löslichen Teil der organischen Materie von Meteoriten“, erklärt Hänni. „Starke Ähnlichkeiten gibt es – abgesehen von der relativen Menge der Wasserstoffatome – auch zum organischen Material, das auf Saturn von seinem innersten Ring herabregnet, wie es mit dem INMS-Massenspektrometer an Bord der NASA-Raumsonde Cassini nachgewiesen wurde.“

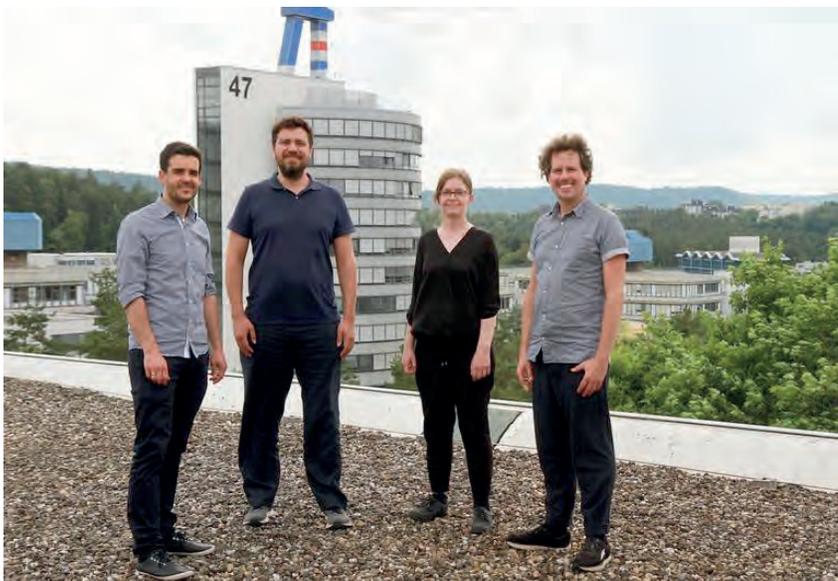
Quelle: Universität Bern

Originalpublikation

N. Hänni, K. Altwegg, M. Combi, S. A. Fuselier, J. De Keyser, M. Rubin, S. F. Wampfler, "Identification and characterization of a new ensemble of cometary organic molecules", *Nature Communications* 2022,13, 3639.
doi: 10.1038/s41467-022-31346-9

Deep Learning trotz spärlicher Datenlage

DFG-Forschungsgruppe nimmt chemische Prozessdaten in den Blick



Sie arbeiten gemeinsam an neuen Deep-Learning-Methoden: Fabian Jirasek, Stephan Mandt, Sophie Fellenz und Marius Kloft (von links). (Foto: TU Kaiserslautern)

■ Die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) fördert die neue Forschungsgruppe „Deep Learning auf dünn besetzten chemischen Prozessdaten“ für vier Jahre mit rund 3,5 Millionen Euro. Koordiniert wird sie an der Technischen Universität Kaiserslautern (TUK). Die Gruppe arbeitet daran, Verfahren des Deep Learning, eines Teilgebiets der Künstlichen Intelligenz, für die chemische Industrie nutzbar zu machen. Das ist bislang nicht möglich, insbesondere aufgrund der spärlichen Datenlage. Das interdisziplinäre Team aus Informatik und Verfahrenstechnik entwickelt dazu neue Methoden. Diese sollen dabei helfen, Fehler in chemischen Prozessen frühzeitig aufzuspüren, um Unfälle und Abschaltungen abzuwenden.

Millionen Bilder innerhalb von Sekundenbruchteilen nach einem Schlagwort wie zum Beispiel „Strand“ durchsuchen oder die Spracherkennung nutzen, um sich ein Lied in seinem Streamingdienst vorspielen zu lassen: So etwas macht Deep Learning möglich. Mithilfe von riesigen Datenmengen lernen Algorithmen dazu; sie klassifizieren, sortieren und

filtern Daten. Die Technologie kommt in vielen Bereichen zum Einsatz, etwa in der Medizin, der Landwirtschaft oder der Robotik.

Bei Prozessen der chemischen Industrie ist dies aber bislang nicht der Fall. „Es gibt hier viel weniger Daten als etwa bei einer Bildersuche im Netz, teilweise sind gar keine Daten vorhanden oder Unternehmen stellen sie nicht zur Verfügung“, sagt Marius Kloft, der an der TU Kaiserslautern das Lehrgebiet Intelligente Systeme und die Arbeitsgruppe Maschinelles Lernen leitet sowie Sprecher der neuen DFG-Forschungsgruppe ist. „Zudem sehen häufig auch alle Daten gleich aus, was das Lernen hier deutlich erschwert.“ Beispielsweise wird in einer chemischen Anlage über einen langen Zeitraum hinweg immer derselbe Prozess bei denselben Bedingungen gefahren, wie die Umsetzung von Rohstoffen zu Produkten. Sensoren messen dann immer die gleiche Temperatur, den gleichen Druck und so weiter.

Genau in solchen Bereichen möchte die neue Forschungsgruppe dennoch Deep-Learning-Methoden zum Einsatz bringen. Dabei kommt

der Gruppe zugute, dass sie interdisziplinär aufgestellt ist. Anders ließe sich die Entwicklung solcher neuer Verfahren auch nicht realisieren. Neben Informatiker Kloft und Informatikprofessorin Heike Leitte sind an der TUK Verfahrenstechnikprofessor Hans Hasse beteiligt sowie Juniorprofessor Fabian Jirasek, der zum Maschinellen Lernen in der Verfahrenstechnik forscht, und Juniorprofessorin Sophie Fellenz, die sich ebenfalls mit dem Maschinellen Lernen befasst. Das Besondere bei Fellenz und Jirasek ist, dass die Carl-Zeiss-Stiftung ihre Juniorprofessuren als Tandem mit 1,5 Millionen Euro fördert; ihr gemeinsames Ziel ist es, das Maschinelle Lernen mit der physikalischen Modellierung zusammenzuführen. Davon profitiert nun auch die neue DFG-Forschungsgruppe.

„Für uns steht weniger die Anzahl als die Qualität der Daten im Vordergrund“, fährt Kloft fort. Das Team geht dabei zwei Wege. Zum einen führt es im Labor selbst chemische Prozesse durch, um experimentelle Daten zu erheben, zum anderen generiert es auch synthetische Daten. „Jedes Experiment ist aufwendig und teuer. Uns geht es daher vor allem darum, die richtigen Daten zu erheben, also die, von denen die Deep-Learning-Methoden am meisten lernen können“, ergänzt Jirasek. Dazu kommt auf dem Campus in Kaiserslautern zum einen eine Batch-Destillationsanlage zum Einsatz, mit der Daten dynamischer Prozesse erhoben werden. Weiterhin wird beim Projektpartner, der Technischen Universität München, am Standort Straubing eine kontinuierliche Produktionsanlage für synthetische Kraftstoffe im Pilotmaßstab betrieben.

„Diese Anlagen sind mit einer Vielzahl von Sensoren ausgestattet, um unterschiedlichste Daten aufzunehmen, wie zum Beispiel Druck und Temperatur, aber auch Videos vom Innenleben oder die Zusammensetzung der eingesetzten Mischungen“, so der Juniorprofessor weiter.

Neben den Daten aus dem Labor werden weitere Daten mithilfe von physikalischen Simulationen und

Verfahren der Künstlichen Intelligenz generiert. Eine besondere Herausforderung dabei ist, diese so realistisch wie möglich zu machen. „Wir verfolgen dazu zwei Ansätze“, erläutert Juniorprofessorin Fellenz. „Zum einen entwickeln wir Methoden, um den Stil der Experimentaldaten zu erlernen und diesen dann auf Simulationsdaten zu übertragen.“ Solche Methoden gibt es bereits, um die Tonalität von Texten zu verändern. In der Forschungsgruppe werden diese nun auf die Zeitreihendaten von chemischen Prozessen übertragen, welche genau wie Wörter in einem Text als sequenzielle Daten aufgefasst werden können. „Zum anderen beziehen wir physikalische Gesetzmäßigkeiten, zum Beispiel aus der Thermodynamik, direkt in unsere Modelle ein, sodass wir auch realistische Daten aus Bereichen generieren können, in denen wir keine Messungen haben,“ fährt die Informatikerin fort.

Ziel der nächsten vier Jahre ist es, mit den neuen Deep-Learning-Methoden Anomalien oder Fehler in chemischen Anlagen frühzeitig zu erkennen, aber auch passende Gegenmaßnahmen zu identifizieren. Dies ist von hoher praktischer Relevanz, da jeder Ausfall einer Anlage zumindest teuer ist, im schlimmsten Fall eine Gefahr für Mensch und Umwelt darstellt.

Langfristiges Ziel der Forschungsgruppe ist es, Methoden zum autonomen Betrieb von Anlagen in der chemischen Industrie zu entwickeln. Mit ihren Arbeiten will die Gruppe zudem die Prozesssimulation in der Verfahrenstechnik vorantreiben, indem sie neuartige Werkzeuge entwickeln und darin auch Datentypen einbinden wird, die derzeit noch gar nicht betrachtet werden.

Quelle: TU Kaiserslautern

Molekulare Musik ordentlich aufgedreht

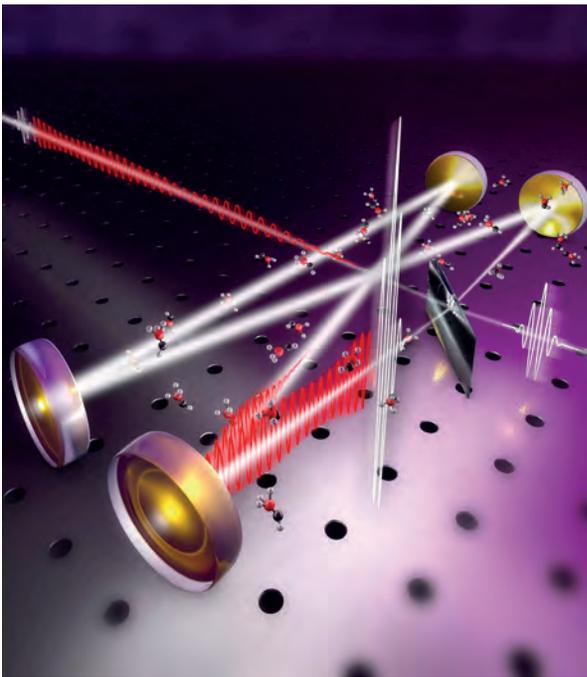
Laserphysiker des attoworld-Teams am Max-Planck-Institut für Quantenoptik haben mithilfe eines optischen Resonators die Schwingungen von niedrig konzentrierten Molekülen identifiziert.

■ Werden Moleküle mit Laserlicht bestrahlt, beginnen sie charakteristisch zu schwingen und ebenfalls Licht auszusenden. Bei niedrigen Konzentrationen ist diese Abstrahlung aber sehr schwach. Eine Gruppe von Wissenschaftlern unter der Leitung von Joachim Puppeza im attoworld-Team des Max-Planck-Instituts für Quantenoptik (MPQ) und der Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU) zeigt in Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern der University of British Columbia und des Leibniz-Instituts für Photonische Technologien in Jena nun einen Weg, die Abstrahlung der Moleküle nach ihrer Anregung zu verstärken und so die molekulare Laserspektroskopie erheblich zu verbessern.

Wenn ein Musiker eine Gitarrensaiten zupft, beginnt sie zu vibrieren und gibt einen Ton mit einer für das Instrument charakteristischen Tonhöhe, Klangfarbe und Modulation ab. Dasselbe geschieht, wenn ein Gasmolekül von einem ultrakurzen Laserpuls getroffen wird: Es absorbiert einen Teil der Energie des Laserpulses. Seine Atome beginnen zu vibrieren. Statt einer Schallwelle sendet das Molekül eine charakteristische optische Wellenform aus, die spektroskopisch nachgewiesen werden kann. Diese Wellenform enthält Informationen über die molekulare Zusammensetzung des Gases. Leider ist diese „Musik der Moleküle“ sehr leise. Denn nur ein winziger Teil der im Puls enthaltenen Energie wird in die langsam abklingenden Lichtwellen umgewandelt, die diese wertvollen Informationen enthalten.

Zeitlich überlappende Laserpulse

■ Die Forschenden haben nun einen Weg gefunden, die molekularen Antworten auf sich wiederholende ultra-



Verstärkung von Laserpulsen (weiß) und molekularen Antworten (rot) in einem passiven optischen Resonator (Graphik: C. Hackenberger)

kurze Laserpulse im sogenannten molekularen Fingerabdruck-Spektralbereich zu verstärken. In dem Fingerabdruck-Spektralbereich haben organische Moleküle ihre charakteristischen Resonanzen. Dazu schickten die Physiker die Pulse in einen mit Gas gefüllten optischen Resonator. In dem Resonator wurden die zugeführten Laserpulse über mehrere Spiegel in sich selbst zurückgeführt, so dass sich die Pulse mit ihren Vorgängern und Nachfolgern am Ende zeitlich überlagern. Dadurch werden die Pulse und die molekularen Antworten verstärkt. Die attoworld-Laserphysiker haben nun erstmals diese optischen Wellenformen der verstärkten molekularen Antworten aus dem Resonator wieder ausgekoppelt und mit feldaufgelöster Spektroskopie abgetastet.

Dafür galt es einige Herausforderungen zu meistern. „Bisher konnten passive optische Überhöhungsresonatoren nur Bandbreiten von weniger als 20 Prozent der optischen Zentralfrequenz abdecken und wurden meist bei Wellenlängen im Nahen Infrarot betrieben“, erklärt Philipp Sulzer, Erstautor der Studie. „Um aber einen bedeutenden Teil des Fingerabdruck-

bereichs im Mittleren Infrarot abzudecken, mussten wir neu überlegen, welche optischen Elemente und Regelmechanismen für den Aufbau des Resonators verwendet werden können. Außerdem dürfen die ultrakurzen Pulse für die feldaufgelöste Spektroskopie ihre Wellenform während eines Umlaufs durch den Resonator nicht verändern“, ergänzt Maximilian Högner, ebenfalls Erstautor der Studie. Schließlich fanden die Laserphysiker eine Konfiguration, die aus vier goldbeschichteten Spiegeln, feuchtigkeitskontrollierter Luft und einer keilförmigen Diamantplatte zur Ein- und Auskopplung des Lichts im Resonator besteht. Ihr Ansatz ermöglicht eine Steigerung der Energie, die in der molekularen Antwort nach der impulsiven Anregung enthalten ist, um einen Faktor von mehr als 500.

Steigende Chancen, Krankheiten über Atemluft zu detektieren

„Der neue Messaufbau kombiniert unsere bisherige Arbeit an Überhöhungsresonatoren mit unserer Expertise in der feldaufgelösten Spektroskopie. Die Ergebnisse eröffnen Perspektiven für die breitbandige Gaspektroskopie mit Empfindlichkeiten von eins zu einer Billion Teilchen. Gleichzeitig bietet die Technik wegen der vergleichsweise schmalen Absorptionslinien in der Gasphase hohes Potenzial für komplexe Gasgemische wie die menschliche Atemluft, in der manche Bestandteile in sehr hoher, manche jedoch in sehr niedriger Konzentration vorliegen“, erklärt Joachim Pupeza. „Unser neuer Ansatz erhöht die Chancen, künftig Krankheiten über Atemluft verlässlich zu detektieren und damit zum Beispiel neue, nicht-invasive Methoden zur Überwachung von Therapien bereitzustellen.“

Quelle: Max-Planck-Institut für Quantenoptik

Originalveröffentlichung

P. Sulzer, M. Högner, A.-K. Raab, L. Fürst, E. Fill, D. Gerz, C. Hofer, L. Voronina, I. Pupeza, „Cavity-enhanced field-resolved spectroscopy“, *Nature Photonics* 2022.

doi: 10.1038/s41566-022-01057-0

Nanosensor spürt Pestizide auf Obst auf

Die neuen Sensoren nutzen oberflächenverstärkte Raman-Streuung

Forschende des Karolinska-Instituts in Schweden haben einen winzigen Sensor entwickelt, der Pestizide auf Früchten in nur wenigen Minuten aufspüren kann. Die Technik, die in der Fachzeitschrift *Advanced Science* als Proof of Concept beschrieben wird, nutzt mit Flammen besprühte Nanopartikel aus Silber, um das Signal von Chemikalien zu verstärken. Die Forschenden hoffen, dass diese Nanosensoren, die sich noch in einem frühen Stadium befinden, dazu beitragen könnten, Pestizide in Lebensmitteln vor dem Verzehr aufzudecken.

„Aus Berichten geht hervor, dass bis zur Hälfte aller in der EU verkauften Früchte Pestizidrückstände enthalten, die in größeren Mengen mit Gesundheitsproblemen in Verbindung gebracht werden“, sagt Georgios Sotiropoulos, leitender Forscher in der Abteilung für Mikrobiologie, Tumor- und Zellbiologie am Karolinska-Institut und Erstautor der Studie. „Die derzeitigen Techniken zum Nachweis von Pestiziden auf einzelnen Produkten vor dem Verzehr werden in der Praxis jedoch durch die hohen Kosten und die umständliche Herstellung der Sensoren eingeschränkt. Um dies zu überwinden, haben wir kostengünstige und reproduzierbare Nanosensoren entwickelt, die zur Überwachung von Pestizidspuren auf Früchten, zum Beispiel im Supermarkt, verwendet werden können.“

Die neuen Nanosensoren nutzen eine Entdeckung aus den 1970er Jahren, die oberflächenverstärkte Raman-Streuung (SERS), eine leistungsstarke Sensortechnik, die die diagnostischen Signale von Biomolekülen auf Metalloberflächen um mehr als das Millionenfache erhöhen kann. Die Technologie wurde u. a. in der Chemie- und Umweltanalytik eingesetzt sowie zum Nachweis von Biomarkern für Krankheiten. Die hohen Produktionskosten und die begrenzte Reprodu-

zierbarkeit von Charge zu Charge haben jedoch bisher eine breite Anwendung in der Diagnostik der Lebensmittelsicherheit verhindert.

Flammensprühtechnik

■ In der aktuellen Studie schufen die Forschenden einen SERS-Nanosensor, indem sie Flammenspray – eine etablierte und kostengünstige Technik zur Aufbringung von Metallbeschichtungen – einsetzten, um kleine Tröpfchen mit Silbernanopartikeln auf eine Glasoberfläche aufzubringen. „Mit dem Flammenspray lassen sich schnell gleichmäßige SERS-Schichten auf großen Flächen erzeugen, wodurch eines der Haupthindernisse für die Skalierbarkeit beseitigt wird“, sagt Haipeng Li, Postdoktorand in Sotirious Labor und Erstautor der Studie.

Die Forschenden stimmten dann den Abstand zwischen den einzelnen Silbernanopartikeln ab, um ihre Empfindlichkeit zu erhöhen. Um die Fähigkeit der Sensoren zur Erkennung von Substanzen zu testen, trugen sie eine dünne Schicht Tracer-Farbstoff auf die Sensoren auf und nutzten ein Spektrometer, um ihre molekularen Fingerabdrücke aufzudecken. Die Sensoren detektierten die molekularen Signale zuverlässig und gleichmäßig, und ihre Leistung blieb auch bei einem erneuten Test nach 2,5 Monaten erhalten, was laut den Forschenden ihr Potenzial für eine lange Haltbarkeit und die Machbarkeit einer groß angelegten Produktion unterstreicht.

Pestizide auf Äpfeln

■ Um die praktische Anwendbarkeit der Sensoren zu testen, kalibrierten die Forscher sie so, dass sie geringe Konzentrationen von Parathion erkennen, einem giftigen landwirtschaftlichen Insektizid, das in den meisten Ländern verboten oder eingeschränkt ist. Eine kleine Menge Parathion wurde auf einen Teil eines Apfels aufgebracht. Die Rückstände wurden später mit einem Wattestäbchen aufgenommen, das in eine Lösung getaucht wurde, um die Pestizidmoleküle aufzulösen. Die Lösung wurde auf den Sensor getropft, der das Vorhandensein von Pestiziden bestätigte.

„Unsere Sensoren können Pestizidrückstände auf der Oberfläche von Äpfeln in einer kurzen Zeit von fünf Minuten nachweisen, ohne die Früchte zu zerstören“, sagt Haipeng Li. „Sie müssen zwar noch in größeren Studien validiert werden, aber wir bieten einen praktischen Anwendungsnachweis für die Überprüfung der Lebensmittelsicherheit vor dem Verzehr in großem Maßstab.“

Als Nächstes wollen die Forschenden untersuchen, ob die Nanosensoren auch in anderen Bereichen eingesetzt werden können, zum Beispiel bei der Entdeckung von Biomarkern für bestimmte Krankheiten als Point of Care in ressourcenbeschränkten Gebieten.

Quelle: Karolinska-Institut

Originalpublikation

H. Li et al., „SERS Hotspot Engineering by Aerosol Self-Assembly of Plasmonic Ag Nanoaggregates with Tunable Interparticle Distance“, *Advanced Science* 2022. doi: 10.1002/advs.202201133

Medien

ABC in Kürze

Neuigkeiten rund um Analytical and Bioanalytical Chemistry

Neues von ABC in Zahlen

■ Es war wieder einmal so weit: Ende Juni gab Clarivate Analytics den neuen Impact Factor bekannt. Anhand vieler Indikatoren können wir nun die wirklich positive Entwicklung von ABC in den vergangenen Jahren zeigen:

- Impact Factor 2021: 4,478 (2020: 4,142; 2019: 3,637)
- Total Citations 2021: 39 315 (2020: 35 942; 2019: 31 192)
- CiteScore 2021: 7,2 (2020 und 2019: 6,2)
- H5-Index 2020: 61 (2019: 58; 2018: 57)
- Usage/Downloads 2021: 2 675 702 (2020: 1 989 015; 2019: 1 694 427)

Werden Sie Teil der ABC-Erfolgsgeschichte als Autor:in und profitieren Sie von der hohen Sichtbarkeit Ihrer Arbeit in ABC. Wir freuen uns auf Sie und Ihre Einreichung.

Neues aus dem Team der ABC-Herausgeber

■ Mit großem Bedauern haben wir im Juni vom plötzlichen Tod unserer Herausgeberin Maria C. Moreno Bondi erfahren (Abbildung 1, Seite 14; siehe auch Seite 41). Viele von uns kennen Maria als engagierte und exzellente Forscherin, der die analytische Chemie, die Zusammenarbeit mit Kolleginnen und Kollegen und die Förderung des Nachwuchses immer am Herzen lag. Seit 2018 hat sie sich ganz besonders für ABC eingesetzt; auf dem diesjährigen ABC-Herausgebertreffen wurde sie schmerzlich vermisst. Wir hoffen, sie in einer der zukünftigen Ausgaben gebührend wissenschaftlich ehren zu können.

Diesen Sommer ging auch die aktive Herausgeberschaft von Günter Gauglitz zu Ende, einem der Gründungsherausgeber von ABC. Günter Gauglitz hat wie kein anderer ABC geprägt: Sein außergewöhnliches Engagement und lebhaftes Diskussionen waren stets

Immer am Puls der Zeit ...

Die GDCh bei

www.facebook.com/gdch.de
www.twitter.com/gdch_aktuell
www.instagram.com/gdch_aktuell



Abb. 1. Maria C. Moreno Bondi und Günter Gauglitz auf dem ABC-Herausgebertreffen 2019 in Heidelberg (Foto: N. Oberbeckmann-Winter)

wichtiger Bestandteil unserer Entscheidungsprozesse. Als Champion für ABC in der Fachgruppe Analytische Chemie gibt er auch dieses Jahr wieder einen Themenschwerpunkt zur analytica zusammen mit Antje Baeumner in ABC heraus, welcher die neuen Trends in (bio)analytischer Chemie vorstellt. Diese Ausgabe erscheint im September 2023. Seine vielen und so umfangreichen Verdienste um das Journal und für die analytische Chemie im Allgemeinen haben Antje Baeumner und Stephen Wise in einem Editorial zusammengefasst: „In honor of Professor Günter Gauglitz“.¹⁾ Die Zukunft des Herausgeberteams und die inhaltliche Ausrichtung von Zeitschrift und Team waren ein Kernpunkt des diesjährigen Herausgebertreffens, das als Hybrid-Meeting durchgeführt wurde, da Qiuquan Wang und Wei Wang nicht persönlich anreisen konnten.

So lesen Sie ABC online

Alle ABC-Ausgaben und Topical Collections sind online unter: www.springer.com/abc. Der Klick in der rechten Spalte unter „Explore“ auf „Volumes and issues“ führt zur Übersicht über die ABC-Hefte („Volumes“), zu den noch keinem Heft zugeordneten Beiträgen („Online First“) und zu den Themenschwerpunkten („Collections“). Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie greifen über den Mitgliederbereich MyGDCh auf den gesamten Online-Inhalt von ABC zu: www.gdch.de/MyGDCh/Fachgruppen_exclusiv/FG_Analytische_Chemie

Neues aus den Rubriken

Im Oktober gibt es für Rätselliebhaber in der Reihe der Analytical Challenges einen besonderen Beitrag von William B. Jensen: „Maigret’s zinc phosphide challenge“.²⁾ Einreichungsdatum für die Lösung ist der 1. Januar 2023; dann wird auch das nächste Rätsel publiziert.

Erneut lädt die Rubrik „ABCs of Education and Professional Development in Analytical Science“ mit zwei neuen Beiträgen zum Lesen ein:

- M.L. Kovarik, J.K. Robinson, T.J. Wenzel, „A new resource to help instructors incorporate active learning into analytical chemistry courses“³⁾
- E. Largy, B. Alies, G. Condesse et al., „Teaching with simulation tools to introduce the basics of analytical chemistry instrumentation“⁴⁾

Einen Überblick über alle Beiträge der Rubrik erhalten Sie unter http://bit.ly/ABC_Columns.

Themenschwerpunkte im Herbst

„Promising Early-Career (Bio)Analytical Researchers“: Das ist die umfangreiche Collection, die denjenigen Forscherinnen und Forschern in der analytischen Chemie gewidmet ist, die erst auf dem Weg zu einer permanenten Stelle in der Forschung sind. Das dazugehörige Heft wurde im Juli publiziert (Abbildung 2). Der Dank gilt allen Beitragenden sowie den ABC-Herausgeberinnen und -Herausgebern Antje J. Baeumner, Maria C. Moreno Bondi, Sabine Szunerits und Qiuquan Wang.

„Sustainability in (Bio-)Analytical Chemistry“: Auch analytische Chemie kann und sollte Aspekte der Nachhaltigkeit berücksichtigen. Die ABC-Herausgeber:innen unterstützen dies durch eine erste Sammlung an Beiträgen, erschienen im September (Abbildung 3). Als Gastherausgebende fungierten Antje J. Baeumner, Günter Gauglitz, Luigi Mondello, Maria C. Moreno Bondi, Sabine Szunerits, Qiuquan Wang, Stephen A. Wise und Adam T. Woolley.

Im Namen des Herausgeberteams und der ABC-Redaktion wünschen wir Ihnen einen schönen Herbst.

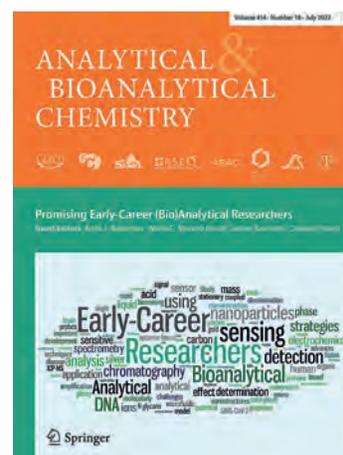


Abb. 2. Cover zum Heft 414/18, „Promising Early-Career (Bio)Analytical Researchers“ mit einer Word Cloud basierend auf den Abstracts des Heftes

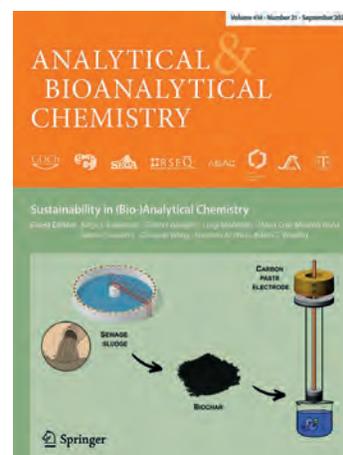


Abb. 3. Cover zum Heft 414/21, „Sustainability in (Bio-)Analytical Chemistry“. Die Abbildung gehört zum Beitrag von Ilaria Palchetti und Team („Electrochemical sensors based on sewage sludge-derived biochar for the analysis of anthocyanins in berry fruits“)⁵⁾

Antje Baeumner
ABC-Herausgeberin
Universität Regensburg
(ORCID iD 0000-0001-7148-3423)
Nicola Oberbeckmann-Winter
Managing Editor ABC, Springer
(ORCID iD 0000-0001-9778-1920)

Literatur

- 1) doi: 10.1007/s00216-022-04200-6
- 2) doi: 10.1007/s00216-022-04195-0
- 3) doi: 10.1007/s00216-022-04077-5
- 4) doi: 10.1007/s00216-022-04268-0
- 5) Anal Bioanal Chem 2022.
doi: 10.1007/s00216-022-04062-y

Das Labor von morgen

Nach vier Jahren Pause fand die *analytica* im Juni 2022 wieder in Präsenz in der Messe München statt. Die Freude, sich persönlich zu begegnen, war überall deutlich zu spüren. Welche Bedeutung die Branche für die Gesundheit der Menschen hat, ist in den letzten Jahren weithin sichtbar geworden.

■ 891 Aussteller aus 39 Ländern und rund 26 000 Besucher aus 114 Ländern und Regionen kamen zu der Leitmesse der Laborbranche. Aufgrund von Reisebeschränkungen waren aus Asien deutlich weniger Teilnehmende als vor vier Jahren ange-reist, insbesondere aus China und Japan; auch Nordamerika war weniger stark vertreten als bei früheren Messen. Dennoch sei das Geschäftsklima exzellent gewesen, versicherte Reinhard Pfeiffer, Geschäftsführer der Messe München. „Digitale Gespräche können ein persönliches Zusammenkommen nicht ersetzen. Schon im Vorfeld war die positive Resonanz deshalb deutlich zu spüren“, freute sich der Messechef beim Pressegespräch zum Auftakt der *analytica*.

Vorträge zur Lebensmittel- und Umweltanalytik, zu Arbeitsschutz und Arbeitssicherheit sowie zur personalisierten Medizin lockten vielen Menschen in die Foren der Messehallen. Als besondere Magnete erwiesen sich die beiden Covid-Expertenrunden, unter anderem mit Jonas Schmidt-Chanasit, Virologe an der Universität Hamburg, und Chemikerin Helga Rübsamen-Schaeff, Vorsitzende des Beirates der AiCuris Antinfective Cures (Abbildung 1).

Digitale Transformation im Labor

■ Die Covid-19-Pandemie hat deutlich gemacht, welche zentrale Rolle die Analytik einnimmt, sowohl beim Nachweis des Erregers als auch bei der Entwicklung von Impfstoffen und Arzneimitteln. Auch die industrielle Qualitätssicherung in den Materialwissenschaften, der Lebensmittelsicherheit und der Abwassertechnologie sowie der große Bereich der klinischen Chemie sind ohne die Innovationen in der Analytik nicht vorstellbar.



Abb. 1. Podiumsdiskussion: aktueller Stand der Covid-Forschung und Ausblick in die Zukunft (Foto: Messe München)

Doch die enormen Anforderungen, vor allem durch die sich rasant ausbreitende Pandemie, führten auch zu einem massiven Druck auf die Labore. Möglichst schnell sollten sie eine schier unendliche Zahl von Proben analysieren und interpretieren – das alles mit konstanter Qualität. Der Druck wird wahrscheinlich weiter zunehmen, und es wird immer deutlicher, dass veraltete Instrumente, schriftliche Dokumentation und nicht miteinander verzahnte Prozessabläufe den Anforderungen nicht gerecht werden.

Eine grundlegende Voraussetzung für das Labor 4.0 lautet: Alle Geräte müssen miteinander sowie mit den mobilen Endgeräten der Nutzer kommunizieren und Daten austauschen können, müssen teils auch mit externen IT-Stellen verbunden sein. „Die gesamte Software und Labortechnik muss vernetzungsfähig sein und alle Geräte eine standardisierte Schnittstelle aufweisen“, sagte Mathis Kuczejda, Vorsitzender der Analytischen, Bio- und Labortechnik im deutschen Industrieverband Spectaris. Hier sei in der Praxis noch einiges an Umsetzungsarbeit zu leisten.

Kleiner, schneller, besser

■ Viele Labore wollen die Digitalisierung vorantreiben, stoßen bei der

Umsetzung jedoch auf erhebliche Hindernisse. „Die Laborbranche ist eine sehr heterogene Branche, bei der Automatisierung und Digitalisierung unterschiedlich stark umgesetzt sind“, berichtete Felix Lenk, Forschungsgruppenleiter SmartLab-Systeme der TU Dresden und CEO von SmartLab Solutions. So geschehe die Probenvorbereitung oft noch manuell, während die Analyse automatisiert verlaufe.

Im Fokus des Labors 4.0 stehen laut Lenk drei Elemente: Miniaturisierung, Automatisierung und Digitalisierung. Miniaturisierung bedeutet kleinere Geräte, Automatisierung mehr Durchsatz, Digitalisierung mehr Qualität. Am Ende sollte auch die Dokumentation komplett automatisiert verlaufen.

Lenk sieht derzeit große Chancen für die Umsetzung des Konzepts, da sich durch vernetzte und einfachere zu bedienende Laborgeräte Arbeitsabläufe schneller und effizienter gestalten. Für Personen, die im Labor arbeiten, werde es jedoch immer wichtiger, nicht nur die Arbeit am Labortisch zu beherrschen, sondern möglichst auch eine Affinität zu den technologischen Prozessen mitzubringen, um flexibel reagieren zu können. →



Abb. 2. Beim Laborsystem iHEX von SmartLab Solutions arbeiten Cobots, also kollaborative Roboter, im analytischen Labor gemeinsam mit dem Menschen. (Foto: SmartLab Solutions)



Abb. 3. Virtual Reality hat auch in die Analytik Einzug erhalten. (Foto: Messe München)

Von der Datenerfassung zur Interpretation

■ Den Weg zur digitalen Transformation beschrieb Lenk als fünfstufigen Prozess. Er beginnt mit Sensoren, die kurzzeitige und häufige Vorgänge erfassen, bis hin zu solchen am oberen Ende des Prozesses, die Daten verarbeiten und interpretieren. Auf dieser fünften Stufe kommen Virtual Reality und eine direkte Zusammenarbeit von Mensch und Roboter ins Spiel.

Besondere Chancen bietet ein flexibles Labor, beispielsweise aus Modulen, die zu immer wieder neuen Arbeitsabläufen zusammengestellt werden, und Geräten, die einfach zu bedienen sind. Lenks Team hat das Laborsystem iHEX entwickelt: Es besteht aus sechseckigen Modulen mit verschiedenen Funktionen, die sich flexibel anordnen lassen und nach dem Plug-and-play-Konzept elektrisch und über Datenverbindungen

zu einem Gesamtsystem verknüpft sind (Abbildung 2).

„Bei der Entwicklung von neuen Analysengeräten kommt es darauf an, sämtliche Elemente so zu konstruieren, dass sowohl ein Mensch als auch ein Roboter damit arbeiten kann“, erläuterte Lenk. Erst kürzlich habe sich beispielsweise bei einer Probenentnahme herausgestellt, dass ein Teil so verwinkelt gebaut war, dass zwar Labormitarbeitende darauf zugreifen konnten, jedoch kein Roboterarm.

Digitalisierung plus Nachhaltigkeit

■ Die Digitalisierung im Labor beschleunigt auch den wissenschaftlichen Fortschritt. Noch aber werden Forschungsergebnisse oft von Hand dokumentiert und Voreinstellungen an Geräten manuell vorgenommen. Der organisatorische und dokumentarische Aufwand ist groß und der Ablauf fehleranfällig. Hier setzen vie-

le Wege an, um den Arbeitsprozess vollständig zu digitalisieren. Bisher sind elektronische Laborbücher allerdings wenig verbreitet.

Das digitale Labor bietet enorme Vorteile, doch es benötigt auch viel Energie. Allein das Speichern von Daten braucht erhebliche Mengen an Strom. Ein Rundgang durch die Messehallen macht deutlich: Das Problem fehlender Nachhaltigkeit ist den Unternehmen durchaus bewusst. Viele suchen nach Wegen, um einerseits Energie zu sparen, und andererseits den CO₂-Fußabdruck in anderen Bereichen zu vermindern, beispielsweise, indem Recyclingpapier verwendet, Reisen eingeschränkt und Flugreisen ganz gemieden werden; viele Besprechungen finden per Videokonferenz statt. Auch Digitalisierung, Miniaturisierung und Automatisierung können die Nachhaltigkeit steigern: So führen miniaturisierte Labore oder mehr Experimente, die auf kleinem Raum vorgenommen werden, zu einem geringeren Energieverbrauch.

Auch bei den neuen Geräten der Flash- und der präparativen Chromatographie legen Unternehmen neben Miniaturisierung und Digitalisierung besonderen Wert auf die Wiedergewinnung von Reagenzien, die Abwasserreinigung sowie auf eine aktive Lösungs- und Abfallüberwachung.

Das Hamburger Unternehmen Eppendorf strebt an, schon bei der Wahl des Standorts von zentralen Speichern klimaschädliche Emissionen einzusparen: So verursache der



Abb. 4. Auch neue Möglichkeiten, den Arbeitsplatz zu organisieren, werden vorgestellt. (Foto: Messe München)

Betrieb eines Servers in der Schweiz CO₂-Emissionen von etwa 20 Gramm pro Kilowattstunde, in Australien seien es 800 Gramm.

Für alle Marktteilnehmer bleibt es jedoch eine enorme Herausforderung, auf dem Weg zur Digitalisierung auch dem Ziel „Nachhaltigkeit“ Rechnung zu tragen.

Engpässe, Lieferprobleme, Personalmangel

■ Wie andere Branchen leidet auch die Labortechnik unter erheblichen Verzögerungen bei Materiallieferungen. „Inzwischen ist nicht nur die globale Versorgungskette betroffen, sondern auch die Basisversorgung vor Ort. Die Auftragslage ist gut, doch bei der Herstellung gibt es deutliche Probleme“, berichtete Spectaris-Vorstandsmitglied Kuchejda.

Bei Corona-Tests seien Rekordumsätze verzeichnet worden, ergänzte Thomas Möllenkamp, stellvertretender Vorsitzender der Fachabteilung Life-Science-Research (LSR) im Verband der Diagnostika-Industrie (VDGH). Die Routinediagnostik stagniere, eine große Nachfrage gebe es jedoch bei der Life-Science-Research-Technologie. So sei auch ein Wettbewerb um qualifizierte Mitarbeitende entstanden. Besonders kleinen und mittleren Unternehmen außerhalb von großen Städten fällt es schwer, gut ausgebildetes Personal zu gewinnen.

Eine Branche im Umbruch

■ Ob im Forschungs- oder Routine-labor: Der digitale Wandel eröffnet zahlreiche Möglichkeiten, stellt die Laborbranche aber auch vor erhebliche Schwierigkeiten. Diese lassen sich nur im Zusammenspiel von Geräteherstellern, Softwareentwicklerinnen, Wissenschaftlern und Laborbetreiberinnen meistern. Um auf diesem Weg voranzukommen, fand zeitgleich mit der analytica 2022 in den Nachbarhallen der Messe München die automatica statt, Leitmesse für intelligente Automation und Robotik, sowie die ceramitec, Treffpunkt der internationalen Keramikindustrie.

Hannelore Gießen
Hannelore.giessen@t-online.de

Sessions auf der Analytica Conference 2022

PAT for Sustainability

Sustainability ist Ziel und Versprechen prozessanalytischer Technologien (PAT). Nachhaltigkeit und Kreislaufwirtschaft sind über die Chemie hinausgewachsen und gesellschaftlich relevante Schlüsselkonzepte geworden. So widmete der AK PAT eine von zwei Sessions der In-Prozess-Analyse im Tablettierungsprozess, dem Inline-Monitoring einer Bioplastikproduktion, dem Online-Monitoring mit Ionenmobilitäts-Massenspektrometrie (IMS-MS) und dem Design und Aufbau zirkulärer Prozesse mit PAT-Unterstützung.

■ Christian Lux (tec5) und Anna Novikova (Fette Compacting) präsentierten ein hochintegriertes System zur Tablettierung mit kontinuierlicher Direktverpressung. Das System basiert auf einer geschlossenen Dosiermisch-Einheit mit Pulver-Transport-System. Nah-Infrarot (NIR)-Sensoren dienen zur In-Prozess-Kontrolle der einzelnen Schritte (Abbildung 1). Die Steuerung des Spektrometers und des zentralen Controllers wurden verbunden; dies erlaubte schnelle Echtzeitmessung aller Tabletten. Auch ermöglichte die durch die Integration einfachere Hard- und Softwarearchitektur eine höhere Zuverlässigkeit, eine einfachere Konfigurierbarkeit und Operabilität bei geringeren Kosten. Alle Tabletten im gesamten Tablettierungsprozess in Echtzeit zu überwachen könnte ein wichtiger Schritt sein für eine Freigabe ohne finale Batch-Analyse – ein wegweisendes Versprechen der PAT-Initiative.

Sebastian L. Riedel (TU Berlin) demonstrierte eine Photonendichtewellen (PDW)-Spektroskopie zum Inline-Prozessmonitoring einer Polyhydroxyalkanoat (PHA)-Produktion (Abbildung 2). Als biodegradierbarer Polyester kann PHA eine wichtige Posi-



Abb. 1. Tablettierungssystem mit integrierten Nah-Infrarot-Sensoren zur Echtzeitanalyse von mehr als 430 000 Tabletten pro Stunde (Foto: FETTE Compacting)

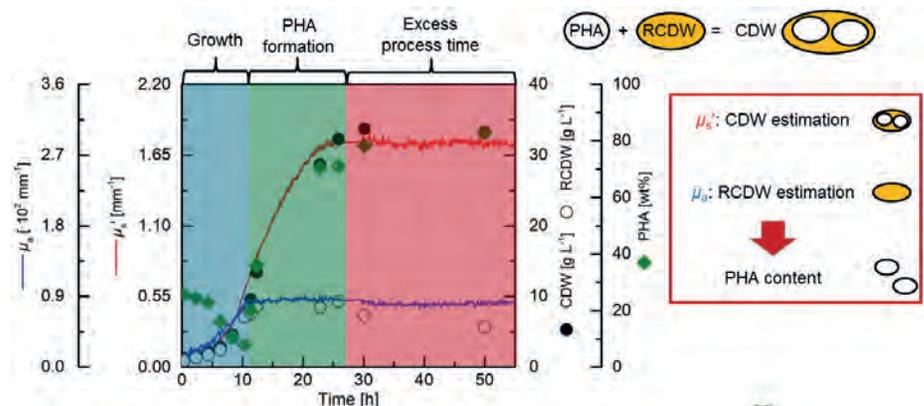


Abb. 2. Photonendichtewellensignale zum Inline-Prozessmonitoring der biotechnologischen Polyhydroxyalkanoat (PHA)-Produktion; Absorptions- und Streusignale zur Verfolgung der PHA-Bildung und des Zellwachstums (links). Zellbasierte Produktion mit Signalinterpretation (rechts). (CDW = Cell Dry Weight, Biotrockenmasse; RCDW = Residual Cell Dry Weight)

tion unter den nachhaltigen biopolymeren Materialien einnehmen. Es gelang, die PHA-Produktion mit *R. eutropha* aus Pflanzenöl, Frittieröl- und tierischen Fettabfällen zu überwachen. Unter Ausnutzung der Absorptions- und Streueigenschaften der PDW-Technologie ließen sich PHA-Bildung und Zellwachstum simultan beobachten. Die Hochzelldichtekultivierungen zeigten Potenzial für ein erfolgreiches Scale-up; Echtzeitmonitoring mit PDW erwies sich als möglich. Mit dem Prozessverständnis ließ sich die Dosierung des Edukts steuern, was eine Prozesskontrolle erlaubte.

Maarten Honing (Universität Maastricht, Niederlande) berichtete über die Atmosphärendruck-Photon-Ionisierung (APPI) für IMS-MS und IMS-MS/MS am Beispiel einer Diels-Alder-Reaktion. Als schnelle Detektionstechnik eignet sie sich für Flow-Chemie, die für grüne und nachhaltige Chemie als Reaktionsführung gegenüber dem Batchverfahren bevorzugt wird. Es wurde gezeigt, welche Vorteile APPI-IMS-MS/MS bei der Online-Strukturaufklärung von Isomeren in Mikroreaktionssystemen hat. Die Automatisierung von Strukturerkennungen und die Unterscheidung von Isomeren gelingen, wenn experimentelle oder computermodellerte Referenzsysteme mit Fragmentierungen und Wirkungsquerschnitten verfügbar sind. Ihre Detektionsgeschwindigkeit und ihre Robustheit zusammen mit einer Verringerung der Driftstrecke bieten Potenzial, um IMS für Online-Prozessmonitoring auch in einer Produktionsumgebung einzusetzen.

Tobias Eifert (Covestro Deutschland) zeigte, wie die PAT dazu beiträgt, zirkuläre Prozesse zu etablieren, in denen aus alternativen Rohstoffen Kunststoffe produziert werden. Deutlich wurde, dass Kunststoffe ihre Bedeutung als Materialien beibehalten, ihre Herkunft und Verarbeitung aber neue Wege gehen werden. In einem Beispiel, in dem Polyole auf Basis alternativer Rohstoffe hergestellt wurden, hat man das Herstellungsverfahren bereits im Labormaßstab mit spektroskopischen Methoden

charakterisiert und verstanden. Als Inline-Monitoringverfahren der Wahl wurde zunächst Mid-Infrarot-Spektroskopie (MIR) favorisiert. Beim Up-Scaling erwies sich der instrumentelle Aufbau jedoch als zu wenig robust und man ging zur NIR-Spektroskopie über. Hier ließ sich – wie im Lehrbuch – das MIR-Modell für die Prozessverfolgung und -kontrolle auf ein NIR-basiertes Modell übertragen. Die frühe Einbeziehung der PAT erleichterte das Prozessdesign für ein neues Verfahren und das erfolgreiche Inline-Prozessmonitoring.

*Autor und Session Chair:
Martin Jäger
Hochschule Niederrhein*

Gas Chromatography: Boring or Is there Something New?

Die Frage aus dem Titel der Session beantwortete Peter Boeker (Universität Bonn) bereits im Eröffnungsvortrag: Er stellte die noch junge Technik der hyperschnellen Flow-Field-Thermal-Gradient-GC vor – es gibt also „something new“. Durch Fokussierung anhand eines inversen Temperaturgradienten entlang der Säule ist es möglich, sonst zeitaufwendige Trennungen auf sehr kurzen Kapillaren von zwei oder vier Metern Länge zu realisieren. So werden unter anderem bereits BTX-Analysen in unter einer Minute, aber auch 92-VOC innerhalb von 3,5 Minuten in Hochdurchsatzlaboren routiniert durchgeführt.

Als nächstes sprach Giorgia Pucaro (Universität Lüttich, Belgien) über die Herausforderungen bei der Isolierung und Charakterisierung von Mineralölkohlenwasserstoffen (mineral oil hydrocarbons, MOH) aus Lebensmittelproben und die Möglichkeiten, die ein LC-GCxGC-TOFMS/FID-System dabei bietet. Purcaro zeigte, dass sich mit der automatisierten Methode gesättigte (MOSH) und aromatische (MOAH) Mineralölkohlenwasserstoffen de-

tailliert charakterisieren lassen – eine deutliche Verbesserung im Vergleich zu herkömmlichen Methoden. Dies ermöglicht es unter anderem, das Ziel der Europäischen Behörde für Lebensmittelsicherheit (EFSA) und der EU in Bezug auf die Charakterisierung von MOAH mit drei bis sieben Ringen zu erfüllen.

Philip Marriott (Monash University, Melbourne, Australien) widmete seinen Vortrag den Interkonversionsprozessen in der zweidimensionalen Gaschromatographie. Dabei handelt es sich um chemische Umwandlungen der Analyten während der chromatographischen Trennung. Abhängig von der Trenntemperatur und dem Säulenmaterial kommt es beispielsweise zu einer Isomerisierung bei Oximen. Solche Vorgänge äußern sich bei einer eindimensionalen gaschromatographischen Trennung in einer Verbreiterung des Signals; mit einer zweiten Trenndimension war es jedoch möglich, eine zeitaufgelöste Verteilung beider Komponenten zu erhalten und somit die Reaktion kinetisch zu charakterisieren.

Den Eberhard-Gerstel-Preis 2022, den der AK Separation Science der Fachgruppe Analytische Chemie für eine besonders herausragende Publikation auf dem Gebiet der Trenntechniken vergibt, erhielt Christoph Gstöttner für sein Paper „Affinity Capillary Electrophoresis-Mass Spectrometry as a Tool to Unravel Proteoform-Specific Antibody-Receptor Interactions“. Durch Zugabe von Rezeptoren zum Elektrolyten und einer massenspektrometrischen Kopplung mit Nano-ESI gelang es ihm, Varianten monoklonaler Antikörper nach ihrer Aktivität zu trennen und zu charakterisieren und so eine Plattform für Struktur-Wirkungs-Beziehungen zu schaffen, die es nicht nur ermöglicht, die Struktur und relative Affinität zu bestimmen, sondern auch die KD-Werte individueller Proteoformen.

Laudatorin war Katja Dettmar-Wilde, die selbst den Gerhard-Hesse-Preis entgegennahm: Er wurde statt auf der entfallenen ANAKON 2021 auf der diesjährigen analytica conference verliehen.



Das Agilent 6560 IM-qTOF-MS (Foto: privat)

Chromatography Coupled to Ion-mobility Mass Spectrometry: Potential and Challenges? (Teil 1)

Das zweite Themengebiet eröffnete Yue Xuan (Thermo Fisher Scientific), die das FAIMS Pro Duo Interface vorstellte. Bei der High Field Asymmetric Waveform Ion Mobility Spectrometry (FAIMS) werden Ionen in einem asymmetrischen Wechselfeld über die Feldabhängigkeit der Ionenmobilität (differentielle Ionenmobilität) getrennt. Das System lässt sich in einem breiten Flussratenbereich betreiben, wodurch es sich mit diversen chromatographischen Methoden koppeln lässt. Yue Xuan demonstrierte auch die praktische Anwendung in verschiedenen analytischen Teilbereichen, zum Beispiel in den Proteomics.

Jakub Ujma (Waters) stellte im folgenden Vortrag das TIM-Spektrometer der Select Series mit zyklischem Analysator vor. Dessen Geometrie ermöglicht Multi-Pass-Messungen zur Sensitivitätssteigerung. Mithilfe zweier Ionenfallen lassen sich Ionenspezies isolieren, speichern und fragmentieren. Die Anwendungsmöglichkeiten von IMS^D demonstrierte Ujma an einem Beispiel: der Sequenzierung von Polypeptiden.

Holger Stalz (Agilent) präsentierte eine softwarebasierte Erhöhung der IM-Auflösung durch die Technik des „High Resolution Demultiplexing“ (HRdm) und stellte auch die neue Technologie „Structures for Lossless

Ion Manipulation“ (SLIM) vor. Bei dieser Methode durchlaufen die zu trennenden Ionen einen kurvigen Pfad, welche Elektrodenmuster auf einer Leiterplatte vorgeben. Dadurch erhöht sich die Driftstrecke und folglich die IM-Auflösung im Vergleich zu linearen Driftröhren stark.

Zuletzt stellte Christoph Krisp (Bruker) das Trapped Ion Mobility Spektrometer (tims) von Bruker vor, welches auch in der Kopplung als timsTOF-SCP zum Einsatz kommt. Dieses Gerät wurde speziell für Single Cell Proteomics entworfen und ist in der Lage, durch den Verdau der Proteine über tausend Proteingruppen in einer einzelnen Zelle zu identifizieren.

Chromatography Coupled to Ion-mobility Mass Spectrometry: Potential and Challenges? (Teil 2)

In der Anwendervortragsreihe sprach David Ruskic (Universität Genf, Schweiz) über die differentielle Mobilitätsspektrometrie (DMS) bei der Untersuchung von komplexen Analytgemischen. Bei dieser Methode wird, wie bei FAIMS, die Feldabhängigkeit der Ionenmobilität zur Ionentrennung genutzt. Mit einer LC-MS-Kopplung zu einem LC-DMS-MS-System ergeben sich durch das orthogonale Messprinzip große Vorteile bei der Untersuchung komplexer Proben. Die aktive Zugabe eines clusterbildenden Modifiers (zum Beispiel Isopropa-

no) ins Driftgas kann die Ionentrennung im DMS weiter verbessern. Um eine stufenlose Variation der Modifikonzentration ohne Veränderung der absoluten Flüsse zu gewährleisten, wurden zwei Modifier vor Zugabe zum DMS-System gemischt, und zwar ein clusternder Modifier und ein nicht-clusternder Modifier. Der Modifier-Effekt variiert mit Veränderung des Mischungsverhältnisses.

David Ropartz (INRAE, Frankreich) stellte seine Arbeiten vor, um isomere Oligosaccharide mit IMS-MS mit zyklischem IM-Analysator zu trennen und zu charakterisieren. Insbesondere der spezielle Aufbau der IMS ließ sich nutzen, um die Trennung im Multi-Pass zu maximieren. Die Spezies wurden selektiv ausgeworfen und fragmentiert, die entstehenden Fragmente wiederum in der IMS aufgetrennt. Mit den Driftzeitunterschieden der Fragmente ließ sich diesen ihre sterische Information zuordnen. Die Charakterisierung der Fragmente über die Driftzeiten und Fragmentmuster ermöglichte es, dem gesamten Molekül einen Fingerprint zuzuordnen. Durch diese Methode trennte und identifizierte Ropartz gezielt isomere Verbindungen.

Stephan Hann (Universität für Bodenkultur Wien, Österreich) adressierte das Problem der Interkompatibilität der verschiedenen Analysortechniken in der Ionenmobilitätsspektrometrie; es ist umso dringender, je mehr sich die IMS als zusätzliche Dimension hoher Orthogonalität in Kopplung mit anderen Trennmethoden durchsetzt. Er betonte die Notwendigkeit rückführbarer Referenzmaterialien, die zentral organisiert werden sollten, vom National Institute of Standards and Technology (NIST) oder von einer analogen Einrichtung. Um Vergleichbarkeit herzustellen, trat er für die Referenzierung der übrigen Verfahren gegen die Drift Tube Ion Mobility Spectrometry (DTIMS) ein, was er am Beispiel von Steroiden demonstrierte. Sein Vorschlag fand im Saal breiten Zuspruch.

Zum Abschluss stellte Catharina Ehrbacher in Vertretung von Uwe Karst (beide von der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster) vor,

wie sich Metall-Protein-Interaktionen mit LC-TIMS-MS charakterisieren lassen. Dafür wurde das am Metall bindende Protein durch Vergleich der direkten LC-ICP-MS- und LC-ESI-MS-Spektren identifiziert. Nach tryptischem Verdau erfolgte dann die Analyse mit LC/TIMS-MS, um das interagierende Peptid und damit die bindende Stelle im Molekül zuzuordnen. Die entstandenen Peptide bildeten in der zweidimensionalen Auftragung von Retentionszeit und Driftzeit ein spezifisches Muster; darin war das bindende Peptid graphisch leicht zu erkennen, da es zu einer punktuellen Driftzeitverschiebung unter Zugabe des Metalls kam. Mit dieser Methode wurde beispielsweise die Wechselwirkung von Quecksilber mit Humanem Serumalbumin und Hämoglobin beschrieben.

Autoren:

Jonas Rösler, Janosch Barthelmes,
Florian Stappert und Oliver J. Schmitz
Angewandte Analytische Chemie
Universität Duisburg-Essen

Session Chair:

Oliver J. Schmitz

PAT for Heterophase Systems

Heterophasensysteme bergen besondere Herausforderungen für die Prozessanalysetechnologie (PAT): Verschmutzungen durch Anhaftungen an den Prozesssonden, hervorgerufen durch die dispergierten Teilchen, Tröpfchen oder Zellen, können die Performance von PAT signifikant stören. Andererseits sind die dispergierten Materialien oft wertgebend und sollen durch PAT in Echtzeit vermessen werden. In dieser Session wurden gezielt neue PAT vorgestellt, um Heterophasensysteme zu charakterisieren.

■ Christian Hill (Brave Analytics, Graz, Österreich) präsentierte eine neue Methode, um Nanopartikel optisch zu charakterisieren: OptoFluidic Force Induction (OF2i) ermöglicht es, Partikel in Echtzeit mit Einzelpartikelgenauigkeit optisch zu zählen. Mit

einem Durchfluss von bis zu 4000 Partikeln pro Minute eignet es sich für Anwendungen mit hohem Durchsatz und für Partikelgrößen von ca. 20 Nanometern bis zu mehreren Mikrometern. OF2i nutzt optische Kräfte, um Partikel-Ensembles zu manipulieren und zu analysieren – ein Ansatz, den 1970 Arthur Ashkin entwickelte und der ihm 2018 den Nobelpreis für Physik einbrachte. Die Nanopartikel werden durch eine Durchflusszelle gepumpt. Ein schwach fokussierter Laserstrahl breitet sich in Flussrichtung durch die Flusszelle aus und übt optische Kräfte auf die Nanopartikel-Ensembles aus. Diese optischen Kräfte verändern die Geschwindigkeit der Partikel und ermöglichen es, Partikelgrößen, Partikelgrößenverteilungen und Konzentrationen per Einzelpartikelanalytik zu bestimmen.

Simon Schiele (TU München, Freising) stellte einen neuen Ansatz vor, um Kristallisationsprozesse durch Inline-Messung der Wachstumsrate zu kontrollieren. Dafür wird ein einzelner Kristall im Prozess vor einem Inline-Prozessmikroskop fixiert. Durch Bildanalysealgorithmen wird das Wachstum einzelner vordefinierter Kristallflächen verfolgt; die Wachstumsrate wird mithilfe eines Kalman-Filters ermittelt. Mit diesem neuartigen Ansatz lässt sich die Kristallwachstumsrate durch Steuerung der Reaktorkühlleistung auf Basis eines einfachen PI-Controllers kontrollieren. Während andere Ansätze zur

Inline-Kristallisationskontrolle umfangreiche Kenntnisse über die Übersättigung im dynamischen Prozess benötigen, welche durch mögliche Verunreinigungen in ihrer Nutzbarkeit limitiert sind, reicht es hier aus, die Sättigung zum Prozessstart zu kennen und realistische Wachstumsraten abzuschätzen.

Stefan Radel (usePAT, Wien, Österreich) berichtete über den Einsatz von Ultraschall, um einerseits die Prozesssonden reinzuhalten und andererseits die disperse Phase besser zu charakterisieren. Hierzu wird im Prozess eine Inline-Ultraschallfalle implementiert, bestehend aus einer akustischen Quelle, die mit der PAT-Sonde zusammen eine Stehwelle aufbaut. Diese Konfiguration erlaubt es, verschiedenste Teilchen (Kristalle, Zellen, Luftblasen, Öltröpfchen u.v.m.) mittels sogenannter Schallstrahlungskräfte an bestimmten Stellen festzuhalten. Die entstehenden Teilchenpakete werden der Prozesssonde gewissermaßen „präsentiert“, ihre Detektion gelingt dann mit signifikant erhöhter Empfindlichkeit. Durch Anpassen der Stehwelle lassen sich die Teilchen für die PAT-Messung gezielt vorlegen oder entfernen. Beispielsweise war es in Kombination mit leistungsstarken Raman-Prozessgeräten möglich, eine Hefefermentation direkt im Bioreaktor zu analysieren. Die Echtzeitcharakterisierung des Prozesses lieferte Informationen zum physiologischen Zustand der Zellen, ohne eine Probe nehmen zu müssen.



Roland Hass, Achim Ecker, Christian Hill und Stefan Radel (von links) auf der Session „PAT for Heterophase Systems“. Simon Schiele hielt seinen Beitrag per Video. (Foto: R. Hass)

Achim Ecker (ZHAW, Wädenswil, Schweiz) berichtete über die Inline-Teilchengrößenmessung mit Photondichtewellen (PDW)-Spektroskopie während der Nassvermahlung. Mahlprozesse werden eingesetzt, um die Teilchengröße und damit die Produkteigenschaften zu beeinflussen; bei Pigmentsuspensionen lassen sich so rheologische und optische Parameter einstellen. Gerade für Inline-Teilchengrößenbestimmung in hochkonzentrierten Systemen bietet die PDW-Spektroskopie einen neuen verdünnungsfreien Zugang zu Prozessmessungen, vor allem im Nanometer- und unteren Mikrometerbereich.

Autor und Session Chair:
Roland Hass
BASF Schwarzheide

Electroanalytical Perspectives

Eine Nachmittagsveranstaltung am ersten Konferenztage war den elektroanalytischen Methoden gewidmet. Der vom Arbeitskreis Elektrochemische Analysenverfahren (ELACH) organisierte Vortragsblock behandelte eine Auswahl von Themen aus wichtigen Forschungsrichtungen der Elektroanalytik und präsentierte die Elektroanalytik als international aktives Forschungsgebiet mit breitem Raum für neue methodische Entwicklungen und Anwendungen.

■ Im Eröffnungsbeitrag „From screen-printing to 3D printing (additive manufacturing)“ veranschaulichte Dale Brownson (Manchester, UK), der für den kurzfristig erkrankten Craig Banks eingesprungen war, dass der 3-D-Druck neue Perspektiven für die Herstellung und Implementierung elektroanalytischer Elektrodensysteme eröffnet. Die Gruppe von Craig Banks hat in den letzten Jahren neue Entwicklungen auf diesem Gebiet realisiert und Visionen für zukünftige Forschungsrichtungen entworfen.



Small Talk nach der Elektroanalytik-Session: Frank-Michael Matysik und Katarzyna Jedlinska (Foto: D. Böhm)

Karl Mayrhofer (Erlangen) gab in „Determination of activity, stability, and selectivity in electrolysis and fuel cell applications – the importance of real time and in-situ analytics“ einen eindrucksvollen Überblick über Herausforderungen in der Elektrokatalyse, die eine bedeutende Rolle für Elektromobilität und bei der Herstellung von grünem Wasserstoff spielt. Im Vortrag wurde deutlich, dass in diesem Forschungsfeld großer Bedarf nach analytischen Online-Verfahren besteht, um elektrochemische Systeme umfassend zu charakterisieren. Instrumentelle Kopplungen von Elektrochemie und Massenspektrometrie mit Echtzeitkorrelation der elektrochemischen und der massenspektrometrischen Informationen wurden als besonders vielversprechend dargestellt, um grundlegende elektrokatalytische Phänomene zu untersuchen.

Miroslav Fojta (Brno, Tschechische Republik) gab mit „Behaviour of nucleic acids at electrodes: effects of sequence, conformation and catalytic activity on nucleobases“ einen Überblick zum Stand und zur weiteren Entwicklung der Bioelektroanalytik. Schwerpunkt lag auf elektrochemischen Untersuchungen an Nucleinsäuren, ein Forschungsgebiet, das mit den bahnbrechenden Arbeiten von Emil Palacek in den 1960er Jahren in Brno begründet wurde und seither ungebrochene Aufmerksamkeit auf sich zieht. Fojta machte deutlich, dass neue Elektrodenmaterialien und

der kombinierte Einsatz analytischer Methoden es ermöglichen, das Verständnis der bioelektrochemischen Eigenschaften von Nucleinsäuren weiter zu vertiefen.

Katarzyna Jedlinska (Krakow, Polen) führte in ihrem Beitrag „The application of electrochemistry in cancer research“ den bioelektrochemischen Kontext weiter und sprach über Anwendungsaspekte der Elektroanalytik in der Krebsdiagnostik. Der eindrucksvoll illustrierte Vortrag machte deutlich, dass die Vielzahl der elektrochemischen Untersuchungsmethoden ein großes Potenzial hat, um elektrochemische Assays für Biomarker oder pharmazeutische Verbindungen in der Krebstherapie zu realisieren. Ziel dieser Forschungen sind einfache Vor-Ort-Analysesysteme.

Autor und Session Chair:
Frank-Michael Matysik
Universität Regensburg

Trends in Analytical & Bioanalytical Chemistry: Make, Measure, and Smart Machines

In dieser Session versammelten sich vier sehr unterschiedliche Expert:innen, die das gemeinsame Ziel eint, den Fortschritt der analytischen Wissenschaften durch neue Werkzeuge zu beschleunigen. Diese fachübergreifende Vision der Instrumentierung von morgen löste regen Zustrom an Zuhörenden sowie eine leidenschaftliche Diskussion aus.

■ Nach einer Einleitung durch Jens Riedel von der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) übernahm Jule Hansen mit „Opening the random forest black box by variable selection and relational analysis“ als erste das Rednerpult. Als kurzfristig eingesprungene Vertretung von Stephan Seifert (beide Universität Hamburg) gab sie zunächst einen – auch für Laien gut verständlichen – Überblick darüber, welche Vorteile das überwachte

Lernen für die Datenkorrelation in chemometrischen Anwendungen hat, bevor sie anhand anschaulicher Beispiele die neue Methode „Surrogate Minimal Depth“ (SMD) vorstellte. Damit lässt sich die Identifikation und Interpretation von kausalen Einflussvariablen in Random-Forest-Algorithmen signifikant vereinfachen. Abschließend demonstrierte sie, wie der daraus resultierende Schritt weg von der Blackbox dabei hilft, gezielt Diskriminatoren für Entscheidungsbäume herauszuarbeiten, die eine relevante Entsprechung in der analogen Welt haben.

Im zweiten Beitrag „Smart Machines, New Materials, Automated Future“ stellte Tomasz Stawski von der BAM aktuelle Arbeiten mit dem „Chemputer“ vor, einem modularen Syntheseroboter, der auf universelle Einzelkomponenten aus dem analogen Laboralltag setzt. Die Vorteile der Automatisierung und die damit verbundene Eliminierung des menschlichen Faktors aus dem Unsicherheitsbudget sind für Referenzmaterialien besonders relevant. Daher zog er als erstes Anwendungsbeispiel die automatisierte Synthese von Referenznanopartikeln aus Silber heran, die sich größenselektiv herstellen lassen. Dass der „Chemputer“ nicht auf partikuläre Systeme beschränkt ist, zeigte er im zweiten Anwendungsfall, in dem das System selbstständig die Prozessparameter einer Grignard-Reaktion optimierte.

Dass Laborautomatisierung nicht bei der computergestützten Steuerung von Lösungsmittelpumpen endet, bewies eindrucksvoll der Vortrag „Automating the analytical laboratory – what’s next?“, Kerstin Thurow vom Center for Life Science Automation der Universität Rostock berichtete über Forschung und Entwicklung von robotischen Systemen für die autonome Materialentwicklung. Basierend auf den Automatisierungsfortschritten in anderen Branchen stellte sie Ansätze und Konzepte für die Robotik (und „Cobotik“) vor und zeigte mit Bildern und Beispielen aus ihren Laboren anschaulich, wie eine Laborinfrastruktur von morgen aussehen kann; zudem stellte sie in Aussicht, welche Forschungsergebnisse und Beschleunigungen sich damit zukünftig erzielen lassen.

Additive Fertigung findet in chemischen Laboren bislang hauptsächlich

im Rapid Prototyping von Komponenten Anwendung, die anschließend von Feinwerkstätten nachgebildet werden. Einen gänzlich anderen Weg schlug Vittorio Saggiomo von der Universität Wageningen in den Niederlanden ein: Im letzten Beitrag der Session, „3D Printer in the Lab, not only a Toy“, zeigte er, dass sich die Komponenten, die in massengefertigten 3-D-Druckern verbaut sind, hervorragend als Translatoren oder Spritzenpumpen zweckentfremden lassen. Mit deren Hilfe gefertigte Komponenten haben inzwischen ausreichende Ortsauflösung und Qualität für den Einsatz in Forschung und Entwicklung. So stellte er ein Digitalkameramikroskop sowie eine komplette Plattform zur Trennung und Sortierung von Mikropartikeln vor, die kostengünstig und maßgeschneidert inhouse und komplett per Mausklick entworfen und gefertigt wurden.

Autoren:

Jens Riedel und Günter Gauglitz

Session Chair:

Ulrich Panne, Günter Gauglitz

und Jens Riedel

Rapid Methods for the Detection of Pathogens and Antibiotic-resistant Bacteria in the Water Cycle

Der Fachausschuss „Pathogene und Antibiotika-resistente Bakterien im Wasserkreislauf“ organisierte erneut als Teildisziplin der Wasserchemischen Gesellschaft eine Vortragsserie auf der analytica conference. Die Beiträge zeigen, wie relevant schnelle bioanalytische Methoden sind, die in so komplexen Matrices wie Verdunstungsanlagenkühlwasser oder Abwasser quantitativ und schnell pathogene Bakterien, Viren und Antibiotikaresistenzgene bestimmen.

■ Der erste Vortragende, Philipp Streich von der TU München, stellte eine neue Methode vor, um über eine Kombination von immunomagnetischer Separati-

on und Durchflusszytometrie *Legionella pneumophila* in Verdunstungskühlanlagen quantitativ zu bestimmen. Diese Methode ist als Alternative zur quantitativen Integritäts-PCR zu sehen. Sie kann kulturunabhängig in zwei Stunden den hygienischen Zustand von Verdunstungskühlanlagen evaluieren und ermöglicht eine schnelle Kontrolle, wie wirksam Maßnahmen zur Verringerung von Legionellenkonzentrationen im Prozesswasser sind.

Streich zeigte des Weiteren, dass die Legionellen nach der Durchflusszytometrie kultivierbar sind und nachfolgend eine Serotypisierung mit einem Sandwich-Mikroarray-Immunoassay auf dem LegioTyper möglich ist. Eine schnelle Legionellenanalytik wird uns mit Sicherheit in nächster Zeit noch vermehrt beschäftigen, wenn aus Energiegründen die Temperatur in Warmwasserspeichern wieder gesenkt werden muss. Bei Verdunstungskühltürmen und anderen bioaerosolbildenden Anlagen ist die kulturunabhängige Analyse von Legionellen besonders bedeutsam, wenn es darum geht, den Biozideinsatz zu minimieren, aber gleichzeitig die Biofilmbildung an den Wärmetauschern zu verhindern.

Christian Wurzbacher von der TU München sprach darüber, wie sich molekularbiologische Biomarker-Nachweissysteme im Abwasser nutzen lassen, um die öffentliche Gesundheit zu überwachen. Prominentes Beispiel ist das Monitoring von Sars-CoV-2-RNA im Abwasser. In einem Projekt des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) wurden robuste Nachweissysteme etabliert, die digitale PCR und entsprechende Kontrollen verwenden. Die Dynamik der amtlichen Infektionsdaten in Bezug auf die Infektionswellen wurde im Abwasser bereits etwa zwei Wochen früher erfasst. Durch automatisierte Datenqualitäts-Workflows und Datennormalisierungsmethoden, die für Gemeinden unterschiedlicher Größe gelten, ließ sich ein konzeptioneller Rahmen für ein nationales Überwachungsprogramm schaffen. Die generierten Daten lassen sich zukünftig direkt an die Behörden übermitteln und in professionelle Public-Health-Dashboards integrieren.

Diese Qualitätskontrollen, Datenmanagementmaßnahmen und Standardisierungsbemühungen werden dazu beitragen, eine abwasserbasierte Überwachung nicht nur für virale Biomarker, sondern auch für andere Parameter zu implementieren, die für eine gesunde städtische Umwelt relevant sind.

Neben der Biomarkerüberwachung ist beim Abwasser auch das Thema Antibiotikaresistenzgene (ARGs) wichtig. Thomas Schwartz vom Karlsruher Institut für Technologie (KIT) berichtete über die Ergebnisse im BMBF-Projekt „Antibiotikaresistenzen im Wasserkreislauf“ (HyReKA). Um den Einfluss des Einzugsgebiets kommunaler Kläranlagen auf die Menge von antibiotikaresistenten Bakterien im Abwasser zu untersuchen, wurden Kläranlagen mit unterschiedlichen Einzugsgebieten und Größen ausgewählt. Mit quantitativer PCR wurden klinisch relevante ARGs und fakultativ pathogene Bakterien kategorisiert. Es wurden dabei sogar ARGs gegen Reserveantibiotika im Kläranlagenablauf nachgewiesen, was ein potenziell hohes Gesundheitsrisiko darstellt. Die Untersuchungen bei den kommunalen Kläranlagen zeigten, dass resistente Bakterien im Ablauf um durchschnittlich zwei bis drei Log-Stufen (99,9 %) reduziert werden, was aber bei Berücksichtigung der täglichen Emission nicht ausreicht. Als Folge davon müssen zum Schutz sensibler Bereiche Gesundheitsvorsorgemaßnahmen bei als belastet eingestuften Kläranlagen getroffen werden. Es werden technische Maßnahmen in Kläranlagen favorisiert, in denen bakterielle Reduktionsprozesse synergistisch mit der Spurenelement-/Mikroplastikreduktion wirken. Dies lässt sich durch Kombinationen aus Membranverfahren und Ozonung und/oder adsorptiven Verfahren erreichen.

Abschließend ging Daniel Dobslaw von der Universität Stuttgart auf die konkrete Umsetzung ein, um ARGs in Kläranlagen zu minimieren: Er berichtete anhand exemplarischer Anlagen über den Betrieb in 23 baden-württembergischen Anlagen zur weitergehenden Abwasserreinigung,

15 der in Betrieb befindlichen Anlagen arbeiten nach dem „Ulmer Verfahren“ mit Pulver-Aktivkohledosierung, vier Anlagen mit granulierten Aktivkohlefiltern nach der Nachklärstufe, drei Anlagen mit Ozonung und eine Anlage mit dem Biomembranverfahren.

*Autor und Session Chair:
Michael Seidel*

Trends in Analytical & Bioanalytical Chemistry: Nanoplastics

Diese Session widmete sich einem aufkommenden anthropogenen partikulären Kontaminanten, der sowohl in der Umwelt- und Lebensmittelwissenschaft als auch in der Humantoxikologie von Bedeutung ist: Nanoplastik. Unter den Begriff fallen Kunststoffpartikel, die kleiner als ein Mikrometer sind.

■ Obwohl Mikroplastik (mit einer Partikelgröße von 1 µm bis 1 mm) bereits vor mehr als zehn Jahren als problematischer partikulärer Schadstoff erkannt wurde, ist Nanoplastik erst seit kurzem in den Fokus der Wissenschaft, Industrie und Öffentlichkeit gerückt. Es wird diskutiert, ob Nanoplastik größere ökotoxikologische Auswirkungen als Mikroplastik haben könnte. Obwohl mehrere Studien Nanoplastik in Körperpflegeprodukten und der Umwelt gefunden haben (im Oberflächenwasser, an der Küste des Nordatlantiks und im Schnee und Boden der Alpen), bleibt das Ausmaß der Kontamination weitgehend unbekannt. Dies unterstreicht die Notwendigkeit, effiziente Methoden zu entwickeln, zu optimieren und zu validieren, die es ermöglichen, Nanoplastik zu detektieren, zu quantifizieren und zu charakterisieren. Vier Expert:innen diskutierten die Herausforderungen und Lösungsstrategien zur Analyse von Nanoplastik mit zahlreichen Zuhörenden und präsentierten die Fortschritte und Entwicklungen in diesem analytischen Feld.

Nach einer Einleitung durch Günter Gauglitz von der Universität

Tübingen übernahm Natalia P. Ivleva von der TU München die Moderation und stellte im ersten Vortrag „Chemical Analysis of Nanoplastics: Challenges, Advanced Methods and Perspectives“ Nanoplastik als einen sehr anspruchsvollen Analyten vor. Nach der Definition von Nanoplastik und möglichen Auswirkungen auf Menschen und Umwelt, fokussierte sie sich auf die Herausforderungen bei der Analyse von Nanoplastik und stellte die neuesten und perspektivreichsten Verfahren vor, um Nanoplastik zu konzentrieren und anzureichern sowie es chemisch zu identifizieren, zu quantifizieren (Masse sowie Partikelzahl, Größe/Größenverteilung) und zu charakterisieren.

In „Mass-based Methods for Micro- and Nanoplastic Analysis: Potential, Complementary Aspects and Challenges“ präsentierte Barbara Scholzböttcher von der Universität Oldenburg die instrumentellen Systeme für die massenbezogene Analyse von Mikro- und Nanoplastik. Sie stellte insbesondere thermische Ansätze gekoppelt mit Gaschromatographie-Massenspektrometrie in den Vordergrund. Dabei zeigte sie, dass diese Ansätze analytisches Potenzial bei der simultanen Mikro- und Nanoplastikidentifizierung und bei der Massenbestimmung von Polymeren in komplexen Matrices besitzen. Sie hob zudem die hohe Sensitivität, breite Zugänglichkeit und Zeiteffizienz thermischer Ansätze hervor.

Das Potenzial kombinierter mikroskopischer und spektroskopischer Methoden zur partikelbezogenen Analyse von Nanoplastik stellte Silke Christiansen vom Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme in ihrem Vortrag „Scale-bridging, Multi-modal and Correlated Microscopies and Spectroscopies to Study Small Scale Plastic Particles in Various Matrices with Statistical Significance“ vor. Wie sie zeigte, lässt sich mit einer Kombination von Raman- und Rasterelektronenmikroskopie kleines Mikroplastik und Nanoplastik sowie deren Auswirkungen auf Zellen und Gewebe detailliert untersuchen.

Neben der Optimierung und Weiterentwicklung der Methoden zur

Mikroplastik-Analyse, um Nanoplastik zu identifizieren und quantifizieren, können die bereits etablierten Ansätze zur Analyse von Nanopartikeln äußerst hilfreich sein. Das illustrierte Florian Meier von der Postnova Analytics in „From Nanoparticles to Nanoplastics – Analytical Lessons Learnt and Remaining Challenges“. Er gab einen Überblick über die Methoden, welche für die Nanopartikelanalyse entwickelt wurden und derzeit auf ihre Anwendbarkeit für die Nanoplastikanalyse untersucht werden. Schwerpunkt lag auf Ansätzen, die diese Techniken mit Methoden aus der Mikroplastikanalyse kombinieren, zum Beispiel Feld-Fluss-Fraktionierung online gekoppelt mit Raman-Mikrospektroskopie. Dabei hob Meier die neuesten Erfolge hervor, aber diskutierte auch verbleibende Herausforderungen, die noch zu bewältigen sind.

*Autor:innen und Session Chair:
Natalia P. Ivleva und Günter Gauglitz*

Sessions zur toxikologischen und forensischen Chemie

Das gemeinsame Symposium der Gesellschaft für Toxikologische und Forensische Chemie (GTFCh) und der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) war in drei Sessions gegliedert: „Neue Aspekte der klinischen und forensischen Toxikologie“, „Richtlinien für Massenspektrometrie-Anwendungen“ und „NPS – immer noch ein Thema in der Forensischen Forschung?“

Neue Aspekte der klinischen und forensischen Toxikologie

■ Sven Baumann (Institut für Rechtsmedizin, Universität Leipzig) gab in seinem Vortrag „Possibilities and limitations of metabolomics research in clinical and forensic toxicology“ eine Einführung dazu, inwiefern metabolische Strategien eine Alternative zu konventionellen Methoden darstellen. Er ging in seinem Vortrag auf die Vor- und Nachteile von metabolischen Ansätzen ein und zeigte Studien zu

Intoxikationen mit Gammahydroxybutyrat oder Neuen Psychoaktiven Substanzen sowie zum Screening von Urinverfälschungen, bei denen sich ein solcher Ansatz als hilfreich erweisen könnte. Grundsätzlich sind metabolische Methoden bei richtiger Anwendung für die klinische und forensische Toxikologie geeignet.

Andrea Steuer (Institut für Rechtsmedizin der Universität Zürich, Schweiz) referierte zu „Progress on Testing for Sample Adulteration“. Da Drogentests in vielen Bereichen lange etabliert sind, haben sich Strategien entwickelt, positive Tests zu vermeiden, zum Beispiel bei Abstinenzkontrollen. Obwohl Methoden wie die Kreatininbestimmung oder integrierte Probenkontrollen bei Immunoassays geeignet sind und routinemäßig eingesetzt werden, können sie dennoch zu falschen Ergebnissen führen. Andrea Steuer gab einen Überblick, welche Parameter derzeit verfügbar sind, um Probenverfälschungen aufzudecken, und stellte neue Ansätze vor, welche sich hauptsächlich auf indirekte Methoden konzentrieren.

In „Cytotoxicity Testing – a Task also in Clinical & Forensic Toxicology?“ sprach Markus R. Meyer (Center for Molecular Signalling der Universität des Saarlandes in Homburg/Saar) über Neue Psychoaktive Substanzen (NPS). Während neue Arzneistoffe im Laufe ihrer Entwicklung auf Zytotoxizität getestet werden, ist dies bei NPS nicht der Fall. Auch sind Wirkmechanismus, Symptome einer Überdosierung und Auswirkungen von chronischem Konsum bei NPS noch Forschungsgegenstand. In seinem Vortrag stellte Meyer Assaymethoden vor und ging insbesondere auf High-Content-Screening-Assays (HCSA) ein, welche Multifluoreszenzbilder von substanzinduzierten Veränderungen erzeugen und damit Aussagen zur Zytotoxizität ermöglichen.

Richtlinien für Massenspektrometrie-Anwendungen

■ Nach der Mittagspause traten Vertreter der GDCh (Martin Wende), der GTFCh (Frank T. Peters) und der International Association of Forensic Toxicologists (TIAFT, Marc A. LeBeau) ans

Rednerpult. Sie rekapitulierten die letzten 13 Symposien zur toxikologischen und forensischen Chemie auf der analytica conference, die allesamt Hans H. Maurer organisiert hatte. Die Vertreter dankten ihm persönlich und im Namen der jeweiligen Gesellschaft für sein Engagement und seinen Beitrag zum Erfolg der analytica conference.

Anschließend sprach Marc A. LeBeau vom FBI-Labor in Quantico, USA, über „Identification in Forensic Toxicology: A Radical New Concept?“ Er stellte ein punktbasiertes System vor, anhand einer kürzlich veröffentlichten US-Norm (ANSI/ASB Std. 113): Das Dokument legt Mindestanforderungen für die Identifizierung von Analyten fest, sodass Laboratorien anhand eines Punktsystems beurteilen können, ob ihr Testschema die Anforderungen erfüllt. Jeder Technik werden auf Grundlage ihrer allgemeinen Spezifität Punktwerte zugewiesen, wodurch sich Analysetechniken vergleichen lassen. Nach Kombination aller angewandten Techniken lässt sich eine Gesamtpunktzahl ermitteln. Erfüllt diese die vorgegebene Mindestpunktzahl, gilt ein Analyt als identifiziert. Marc LeBeau veranschaulichte dieses Konzept mit praktischen Beispielen aus verschiedenen Szenarien der forensischen Toxikologie.

Michael Vogeser (Institut für Laboratoriumsmedizin vom LMU Klinikum München) referierte über „Rules for MS applications in clinical laboratories“. Er verdeutlichte die Vorteile von LC-MS/MS-Methoden im klinischen Kontext und veranschaulichte Risiken, die insbesondere in der Patientenversorgung mit der Verwendung laborentwickelter Tests (LDTs) verbunden sind. Er erläuterte, dass die In-vitro-Diagnostik-Verordnung (IVDR) als gesetzliche EU-Vorschrift vorwiegend für LDTs in Gesundheitseinrichtungen anstatt für medizinische Laboratorien gilt. Einen Ansatz, um sichere Prozesse zu gewährleisten, ist die ISO-Norm 15189, dessen Einhaltung ein weit verbreiteter Qualitätsstandard und in einigen Fällen und Ländern rechtlich verbindlich ist.

Im letzten Beitrag der zweiten Session, „Strategies and Rules for Applying



Co-Organisator:innen und Referent:innen der ersten Session. Von links: Hans Maurer, Andrea Steuer, Dirk Wissenbach, Markus Meyer, Sven Baumann. (Foto: B. Moosmann)



Vertreter der GTFCh, GDCh und TIAFT danken Hans Maurer für sein langjähriges Engagement das Symposium betreffend. Von links: Dirk Wissenbach, Frank Peters, Hans Maurer, Marc LeBeau, Martin Wende. (Foto: B. Moosmann)

HRMS in Environmental Sciences“, berichtete Juliane Hollender (Eawag, Abteilung für Umweltchemie, Dübendorf, Schweiz), dass in den Umweltwissenschaften zunehmend hochauflösende Massenspektrometrie (HRMS) in Kombination mit GC und LC eingesetzt wird. Für Target-Analysen mit Referenzstandards wurden in der EU besondere Anforderungen eingeführt (EC 2002/657/ED und SANTE/12682/2019); für Non-Target-Analysen ist die Definition von Mindestanforderungen Gegenstand aktueller Diskussion. Des Weiteren stellte sie das NORMAN-Netzwerk vor, dem mehr als 80 Organisationen angehören: Es ist bestrebt, die Validierung und Harmonisierung von Überwachungsinstrumenten zu verbessern sowie eine europäische Richtlinie zu erarbeiten. Hollender schlussfolgerte, dass die HRMS-Screening-Methodik eine empfindliche Identifizierung von Schadstoffen ermöglicht und eine retrospektive Risikobewertung unterstützt.

NPS – immer noch ein Thema in der forensischen Forschung?

■ Simon Brandt (School of Pharmacy, John Moores University, Liverpool, Großbritannien) begann seinen Vortrag „NPS from Synthesis and Analytics to Pharmacology“ mit dem repräsentativen Beispiel der (2-Aminopropyl)benzo[b]thiophen-Analoga (APBT). APBT-Isomere wie 5-MAPBT und 6-MAPBT sind Liganden am Monoamin-Transporter, die in ihrer Struktur und

Wirkung dem 3,4-Methylenedioxy-N-methylamphetamin (MDMA) ähneln und am 5-HT_{2A}-Rezeptorsubtyp binden. Brandt wies darauf hin, dass APBT-Isomere trotz ihrer In-vitro-Aktivität interessanterweise keine stimulierenden Effekte haben und bei Mäusen keine motorische Aktivität auslösten. Dies deutet auf psychedelische und entaktogene Wirkungen in Verbindung mit geringem Missbrauchspotenzial hin, welches ein potenzieller Ansatz für die Therapie sein könnte. Bezugnehmend auf ein Zitat von Paul Simon betonte er, dass „One Man’s NPS can be Another Man’s Medicine“ (das NPS des Einen die Medizin des Anderen sein kann), und verwies auf die enge Verbindung zwischen Drogen und Arzneimitteln. Das spiegelt sich auch in der Tatsache wider, dass eine gewisse Zahl von NPS in der Tat von potenziellen Arzneimittelkandidaten abstammt.

Im Vortrag „Advances of Receptor Assays as Tools for Pharmacological Characterization and Analytical Screening of NPS“ von Christophe Stove (Labor für Toxikologie der Universität Ghent, Belgien) ging es um den analytischen Nachweis von NPS. Da die derzeit verfügbaren Tests teilweise Schwachstellen zeigen, sind neue analytische Ansätze erforderlich. Christophe Stove stellte ein alternatives First-Line-Screening-Tool vor, um biologische Matrizes auf synthetische Opioide und SCRA (synthetische Cannabinoid-Rezeptor-Agonisten) zu untersuchen. Er erläuterte das Prinzip

des Bioassays, welches unabhängig von Antikörpern oder Massenspektrometrie ist und stattdessen auf Rezeptoraktivierung basiert. Er veranschaulichte dessen Anwendbarkeit in verschiedenen Einsatzbereichen.

Zum Abschluss der Konferenz sprach Robert Kronstrand (National Board of Forensic Medicine in Linköping, Schweden) über „Current Status of Post-Mortem-Toxicology of NPS“. Da sich NPS mittlerweile zu einem globalen Problem entwickelt haben, werden in Schweden Cluster erfasst, wobei mindestens fünf Todesfälle in zwölf Monaten durch dieselbe Substanz als Cluster gelten. Während NPS aller Wirkstoffklassen lebensbedrohlich sein können, gelten Opioid-Analoga als die tödlichsten. Kronstrand erörterte, dass die toxikologische Post-Mortem-Analyse eine Herausforderung darstellt, da nur wenige pharmazeutische Informationen über In-vivo-Konzentrationen oder Rezeptorbindungseigenschaften vorhanden sind. Hier können Fallberichte zu einem besseren Verständnis beitragen.

Jede Session wurde von der GTFCh mit zwei Credit Points für Teilnehmende akkreditiert, die bereits zertifizierte forensische Toxikologen, forensische Chemikerinnen, klinische Toxikologinnen oder forensisch-klinische Chemiker sind.

Autor:innen:

Linda M. Niendorf und Bjoern Moosmann
Session Chair:
Hans H. Maurer und Dirk K. Wissenbach

Challenges of Non-Target Screening in Water Analysis

Die Session organisierten Christian Zwiener (Uni Tübingen) und Wolfgang Schulz (Fachhochschule Aalen), vom Fachausschuss Non-Target-Screening (NTS) der Wasserchemischen Gesellschaft (GDCh). Im Fokus standen die Anwendung von NTS zur Identifizierung von poly- und perfluorierten Alkylsubstanzen (PFAS), die Vor-Ort-Anwendung mit einem transportablen Analysensystem, Ansätze für die automatisierte, zeitnahe Qualitätssicherung und der Weg in die Standardisierung.

■ Non-Target-Screening (NTS) mit hochauflösender Massenspektrometrie ist ein sehr aktiver Forschungsbereich, der sich in den letzten Jahren in verschiedensten Anwendungsbereichen etabliert hat, um Proben und Prozesse zu charakterisieren, unter anderem in der Umwelt und der Wassertechnologie. Es wurden Messmethoden mit GC-APCI oder LC-ESI und Workflows zur Datenauswertung entwickelt, um neu auftretende und unbekannte Kontaminanten und deren Transformationsprodukte zu untersuchen und zu identifizieren. Große Herausforderungen bestehen noch in der Automatisierung von Messung und Auswertung, der verlässlichen Identifizierung unbekannter Substanzen, der Etablierung validierter Qualitätssicherungs- und Kontrollmaßnahmen und der Langzeitvergleichbarkeit der Daten von verschiedenen Laboren mit unterschiedlichen Geräteplattformen.

Automated near real time HRMS quality assurance

■ Im ersten Vortrag zeigte Tobias Bader vom Zweckverband Landeswasserversorgung in Langenau Ansätze und die Bedeutung von Qualitätssicherungsmaßnahmen für NTS. Auf Basis von Daten zur Massenabweichung, Auflösung und Signalintensität für MS und MS/MS, die in

Messesequenzen bei der automatisierten Rekalibrierung des Massenspektrometers (TOF) regelmäßig anfallen, werden Eingriffsgrenzen festgelegt und die Daten laufend mit einer automatisierten Auswerteroutine bewertet. Bei Überschreiten einer Eingriffsgrenze wird eine Warnmeldung an den Analytiker oder die Analytikerin per E-Mail versendet. Diese:r hat dadurch die Möglichkeit, frühzeitig die Messesequenz zu beenden oder das Problem zu beheben.

Automated real time screening of organic pollutants in the water cycle using the transportable Orbitrap platform 'MS2field'

■ Heinz Singer von der Eawag in Dübendorf, Schweiz, berichtete vom Aufbau eines NTS-Systems mit Probenahme, Festphasenanreicherung, LC-HRMS-Messung und Datenauswertung in einem transportablen Pkw-Anhänger. Das System erlaubt die autonome Messung und Auswertung von Full-Scan- und MS-MS-Daten und ermöglicht es, Analyten geringer Stabilität zu untersuchen sowie dynamische Prozesse während Regenerierereignissen oder Einleitungen.

NTS approaches for PFAS in soil samples

■ Boris Bugsel von der Universität Tübingen verwendete das NTS, um poly- und perfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS) und deren Transformationsprodukte zu identifizieren – am Beispiel von Ackerböden, die mit kontaminierten Papierschlammern belastet waren. Der Kendrick-Massendefekt und eine systematische Retentionszeitverschiebung ermöglichten es, zahlreiche homologe Reihen in Boden- und Papierproben zu identifizieren, und gaben damit Hinweise auf mögliche Kontaminationsquellen.

NTS on its way to international standardization

■ Im abschließenden Vortrag zeigte Michael Petri vom Zweckverband Bodensee-Wasserversorgung in Sipplingen den Weg von NTS in die internationale Standardisierung (ISO-Norm), eine wichtige Voraussetzung zur Anwendung von NTS in Routinelabora-

torien. Wichtige Vorarbeiten dazu liefern die Leitfäden, welche die Wasserchemische Gesellschaft 2019 und das Royal Netherlands Standardization Institut 2021 publiziert haben. Neben der Qualitätssicherung ist sicherlich die Bewertung der Vergleichbarkeit der NTS-Ergebnisse in Verbindung mit dem Reporting eine Herausforderung für den Expert:innenkreis.

Autoren und Session Chair:
Christian Zwiener und Wolfgang Schulz

Trends in Analytical and Bioanalytical Chemistry: Biosensors

Die Session zu den neuesten Trends in der Biosensorforschung machte klar, wie vielfältig die Problemstellungen und Lösungsansätze dieses Forschungszweiges sind. Vorgestellte Lösungsansätze reichten von Point of Care bis zur In-vivo-Bildgebung. Die Sitzung leiteten Günter Gauglitz und Mark-Steven Steiner (in Vertretung von Antje Bäumner).

■ Im ersten Vortrag stellte Nicole Pamme von der Universität Stockholm, Schweden, zwei Plattformtechnologien für den Point-of-Care-Bereich vor. Das IFAST-System (immiscible filtration assisted by surface tension) basiert auf einem mikrofluidischen Kanal, in dem Nukleinsäuren gereinigt, mit LAMP (loop-mediated isothermal amplification) vervielfältigt und anschließend detektiert werden. Mit magnetischen Nanopartikeln werden die Nukleinsäuren direkt im Mikroanalysesystem gereinigt. Die Methode wurde bereits erfolgreich für *E.-coli*-Bakterien, Gruppe-B-Streptokokken und Sars-CoV-2 angewendet. Im zweiten Teil stellte Pamme papierbasierte Mikrofluidik für die Phosphatdetektion in Flusswasser vor: Die Methode ist auch von Laien durchführbar und ermöglicht es so, viele Daten in großen Gebieten ohne Personalaufwand zu erheben. Die Ergebnisse

des Papiertests werden in Form eines Fotos in eine App hochgeladen; die Auswertung soll in Zukunft automatisiert direkt in der App möglich sein.

Mark-Steven Steiner von Micro-coat Biotechnologie in Bernried fokussierte sich in seinem Forschungsvortrag mit Industrieperspektive auf die ubiquitären Lateral-Flow-Assays (LFA). Er betonte, dass die Industrie meist auf standardisierte und bewährte Detektionsmaterialien zurückgreift, während in der Forschung viele unterschiedliche Detektionsmaterialien entwickelt werden. Steiner verglich die industriellen Standards (Goldnanopartikel und Latexbeads) mit Cellulose-Nanobeads und magnetischen Beads und präsentierte Forschung zu fluoreszenzbasierten Liposomen und Europium. Zwar sehe er momentan keinen direkten Anreiz für die Industrie, auf andere Detektionsmaterialien umzusteigen, dennoch böten diese je nach Anwendung Vorteile, die gerade in Anbetracht der steigenden Bedeutung von LFAs zukünftig von Interesse sein könnten. Der Einsatz verschiedener Detektionsmaterialien vereinfache zudem die simultane Detektion verschiedener Analyten.

Im dritten Vortrag sprach Peter Luppä von der TU München über die SPR (surface plasmon resonance) und deren Einsatz, um chronische Entzündungskrankheiten nachzuweisen. Bei Erkrankung ist die Konzentration an Tumor-Nekrose-Faktor im Blut erhöht, und das eingesetzte Medikament besteht aus monoklonalen Antikörpern gegen diesen Faktor. Rund 65 Prozent der Patienten entwickeln aber mit der Zeit Antikörper gegen das Medikament (ADA). Um die Therapie rechtzeitig anzupassen, muss das Auftreten der ADA frühzeitig erkannt werden. Luppä entwickelt einen dualen Sensor, um die Konzentration des Medikaments und den ADA-Level von Patienten zu quantifizieren. Dies ist wichtig, da nur eine schwache Korrelation zwischen der Konzentration des Medikaments im Plasma und dessen Wirksamkeit vorliegt. Zunächst wurde eine Methode entwi-

ckelt, um ADA aus Serum zu konzentrieren; darauf basierend wurde ein dynamischer Korrelationsfaktor zwischen ADA-Level und Therapieeffizienz eingeführt (S_{AT}). Die entwickelte Methode, um patientenspezifische ADAs zu charakterisieren, ermöglicht personalisierte und effektivere Therapieansätze.

Im letzten Vortrag stellte Ambra Giannetti vom Nello Carrara Institute of Applied Physics in Florenz, Italien, molekulare Biosensoren auf Basis Molecular Beacons (MBs) mit Fluoreszenzmessung vor; damit lässt sich RNA in lebenden Zellen detektieren und lokalisieren. Giannetti untersucht dabei die Expression von Survivin, einem Protein, das die Apoptose von Zellen inhibieren kann und in erhöhtem Maße in Krebszellen zu finden ist. Sie bringt die MBs direkt in die Zelllinien mithilfe von Lipofectamin ein, wo sie mit mRNA hybridisieren und so deren Lokalisierung mit Fluoreszenzmikroskopie ermöglichen. Interessanterweise sind die Apoptoseraten behandelter Zellen erhöht, da die mRNA im hybridisierten Zustand mit dem MB nicht mehr translatiert werden kann. Dieses Erkenntnis lässt sich in Zukunft für eine potenzielle Tumortherapie nutzen. Für In-vivo-Einsätze band Giannetti die MBs direkt an Nanopartikel aus Polymethylmethacrylat (PMMA) und brachte diese in Zellen ein. Laut Giannetti macht es dieses System möglich, die gezielte Wirkstoffabgabe mit einer gleichzeitig bildgebenden Kontrolle zu kombinieren.

Autor:innen:

*Alissa Wieberneit, Barbara Grotz
und Florian Blaser*

Session Chair:

*Mark-Steven Steiner
und Günter Gauglitz*

Sensors for water analysis 4.0: analytics meets digitization

Die Session wurde von der Wasserchemischen Gesellschaft organisiert und knüpfte thematisch an ein Kernthema ihres neuen Fachausschusses „Sensoren“ an. Die vier Expert:innen sprachen über die Entwicklung neuer Sensoren bis hin zur intelligenten Vernetzung von Sensoren in Kombination mit den Möglichkeiten der Künstlichen Intelligenz (KI). Solche neuen Ansätze lassen erwarten, in Zukunft zeitliche Veränderungen von Ist-Zuständen auf lokaler, regionaler und übergreifender räumlicher Ebene ergänzend zur etablierten Analytik kontinuierlich zu erfassen. So sollte sich die Endproduktkontrolle hin zur Prozesskontrolle weiterentwickeln lassen.

■ Den Auftakt gestaltete Christiane Schuster vom Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme IKTS in Dresden mit „Plasmonic sensor as on-site data source for the monitoring of environmental pollutants“. Im Vordergrund stand dabei ein neuartiges Sensorkonzept basierend auf der Oberflächenplasmonenresonanz. Die hohen Anforderungen an einen solchen Sensor hinsichtlich Miniaturisierung und Robustheit für den Vor-Ort-Einsatz erreichte eine Weiterentwicklung der Transduktionstechnologie hin zu einem nanoplasmonischen Sensor. Hierdurch ist es nun möglich, Mikroverunreinigungen schnell zu überwachen; eindrucksvoll demonstriert wurde das durch eine Quantifizierung von Diclofenac im Kläranlagenablauf. Zukünftig soll der Sensor für die Prozessüberwachung mit Algorithmen des maschinellen Lernens kombiniert werden und so die Prozesssteuerung und Vorhersage verbessern.

Im Beitrag „Maximizing the availability of smart sensors using the Netilion ecosystem“ stellte André Lemke von der Firma Endress + Hauser

Conducta das Netilion-Ökosystem vor. Dieses System geht über ein herkömmliches Kontroll- und Asset-Health-Management-System hinaus; durch ein Edge-Device (Datenfluss zwischen Netzwerken) zusammen mit intelligenten Sensoren versetzt es Wartungsteams in die Lage, bei unerwarteten Ereignissen selbst nach der Ursache zu suchen und das Problem zu beheben. In Zukunft sollen weitere Dienste bis hin zu KI-basierten Methoden über diese Plattform verfügbar werden.

Franziska Knoche vom Kompetenzzentrum Wasser Berlin berichtete in ihrem Vortrag „Portable and in-situ instruments for rapid quantification of *Escherichia coli* in surface waters – Operation and validation of the Fluidion ALERT Technologies“ über eine Vergleichsstudie zwischen drei schnellen, autonomen und fernsteuerbaren Analysatoren für *Escherichia coli* mit der genormten Labormethode ISO 9308–3. So zeigen die Ergebnisse des ALERT-Systems V2 eine sehr gute Präzision bei niedrigeren Konzentrationen, und bei höheren Konzentrationen sogar eine bessere Präzision als die des Labors. Insgesamt deuten die Ergebnisse darauf hin, dass die vollautomatisierte ALERT-Technologie ein geeignetes Äquivalent zur Referenzlabormethode ist und in Zukunft Entscheidungsfindungen im Umweltbereich unterstützen kann.

Vor dem Hintergrund des Klimawandels und der Eutrophierung von Gewässern nimmt die Problematik, die von Cyanobakterien in Oberflächengewässern ausgeht, weiter zu. Andreas Auernhammer von der TU München adressierte dieses Thema im letzten Vortrag „Cloud-based early warning system for algae monitoring in surface water“. Das Ziel des vorgestellten Projekts im Zentralen Innovationsprogramm Mittelstand (ZIM) ist es, ein Vorhersagemodell für das Algenwachstum und die Toxinbildung zu entwickeln. Hierfür wird das TRITON-Wassersensorsystem (physikalisches Multiparameter-Sensorsystem inkl. UV-VIS-Spektroskopie) mit einem KI-Vorhersagemodell und einem Microarray-basierten Biosensor für Cyanotoxine kombiniert. Als

Cloud-basiertes Frühwarnsystem soll es zukünftig den Behörden ermöglichen, das Risiko von Oberflächengewässern auf täglicher Basis zu bewerten, was für sicheres Trinkwasser und Baden wichtig ist.

*Autor und Session Chair:
Günther Proll*

Aerosol & Health

Die ganztägige Session setzte sich zusammen aus den Schwerpunkten „Innovative Aerosol Measurement Approaches and Concepts“, „Aerosol Emissions, Atmospheric Processes and Health Effects“ und „Biological Effects and Health Impact of Aerosols“. Eine zentrale Frage der Session waren mögliche Veränderungen der toxikologischen Relevanz von Luftschadstoffen durch atmosphärische Prozesse, sowohl durch den Abbau als auch die Bildung von Schadstoffen.

■ Nach kurzer Einführung in das Thema durch Ralf Zimmermann (Uni Rostock / Helmholtz Munich) eröffnete Bryan Hellack vom Umweltbundesamt (UBA) die Vortragsreihe und legte aus der Perspektive der Behörde dar, welche Luftschadstoffe bereits reguliert sind und was noch notwendig ist, um die allgemeine Luftqualität weiter zu verbessern. Markus Kalberer (Uni Basel, Schweiz) und Thomas Gröger (Helmholtz Munich) sprachen über neue Messkonzepte für die zeitaufgelöste Bestimmung reaktiver Sauerstoffspezies und die laserbasierte massenspektrometrische Analyse der chemischen Zusammensetzung einzelner Partikel in Echtzeit.

Thorsten Hohaus (Forschungszentrum Jülich) und Hendryk Czech (Helmholtz Munich / Uni Rostock) präsentierten Arbeiten mit groß angelegten Aerosolkammern von 300 bis 1800 m³, welche die Beiträge verschiedener Aerosolquellen zur Umgebungsluft quantifizieren bzw. die Photochemie der atmosphärischen Alterung von Waldbrandemissionen

nachstellen. Die zweite Seite der Aerosolalterung, die Alterung bei Nacht, stellte Yinon Rudich (Weizmann Institute of Science, Israel) vor: Flüchtige Nebenprodukte aus der Biomasseverbrennung wurden im Labor mit Nitratradikalen umgesetzt, die stark absorbierende Chromophore im sichtbaren UV-Bereich generieren.

Neben Biomasseverbrennung rückte Uwe Etzien (Uni Rostock) auch Emissionen aus Schiffsmotoren in den Fokus. Die Aerosolbildung und chemische Veränderung von Emissionen aus Biomasseverbrennung und Motoren in einem Strömungsreaktor erläuterte Olli Sippula (University of Eastern Finland). Mit immer effizienteren Verbrennungsmotoren und der Elektrifizierung erlangen Partikelemissionen durch den Abrieb von Bremsen oder Reifen immer größere Bedeutung, zeigte Ulf Olofsson (Karolinska Royal Institute of Technology, Schweden) anhand von Studien zu Partikeln in Auto- und Zuggtunneln.

Bedingt durch die interdisziplinäre Natur dieses Forschungsthemas verlagerte sich der physikalisch-chemische Schwerpunkt der Aerosolanalytik und -chemie schließlich zu toxikologischen Methoden und Fragestellungen. Ian Gilmour (US Environmental Protection Agency) stellte einen ganzheitlichen Ansatz vor, die chemische Zusammensetzung und biologischen Effekte von Verbrennungsemissionen diverser Biomassen und synthetischer Materialien zusammenzuführen.

In den folgenden Präsentationen ging es häufig um das Air-Liquid-Interface zur Zellexposition. Barbara Rothen-Ruthishauser (Universität de Fribourg, Schweiz) stellte die Vorteile dieses Systems vor, um Verbrennungsaerosole toxikologisch zu bewerten, verwies aber auch auf dessen Limitierungen. Eine systematische Studie zu den Effekten organischer Bestandteile von Rußpartikeln auf biologische Endpunkte präsentierte Mathilde Delaval (Helmholtz Munich) und verknüpfte diese mit unterschiedlichen Verbrennungsbedingungen in Otto- und Dieselmotoren. Sowohl Biomasseverbrennung als

auch Verbrennungsmotoren erzeugen relevante Konzentrationen polyzyklischer aromatischer Kohlenwasserstoffe (PAK); deren Interaktion hat Johan Ovrevik (Norwegian Institute of Public Health) mit dem Arylkohlenwasserstoffrezeptor (AhR) untersucht.

Trotz erheblicher Fortschritte bei In-vitro-Expositionen ist die In-vivo-Exposition immer noch ein essenzieller Bestandteil bei der toxikologischen Bewertung von Verbrennungsaerosolen. Pasi Jalava (University of Eastern Finland) zeigte biologische Reaktionen von Zellkulturen und Mäusen auf Verbrennungsaerosole und stellte diese Studien hinsichtlich Sensitivität und Aussagekraft gegenüber.

Abgeschlossen wurde die Session mit Berichten dazu, welche methodischen Fortschritten es in der Epidemiologie gibt. Die Risikobewertung einer Erkrankung durch lungengängigen Feinstaub (PM_{2.5}) in Europa stellte Cristina Guerreiro (Norwegian Institute of Public Health) vor, und Otto Hänninen (Finish Institute of Health and Welfare) erläuterte online Burden-of-disease-Methoden.

Autoren und Session Chair:

*Ralf Zimmermann und Hendryk Czech
(Universität Rostock / Helmholtz Munich)*

Sessions des DAAS

Drei Vortragsreihen organisierte der Deutsche Arbeitskreis für Analytische Spektroskopie (DAAS): die „Bunsen-Kirchhoff Award Session“, „New Trends in Atomic and Molecular Spectroscopy Analysis, Teil 1“ bzw. „Teil 2“.

■ Bei der Bunsen-Kirchhoff Award Session wurden dieses Jahr zwei Preisträger geehrt. Der Preis wird zur Würdigung herausragender spektroskopischer Leistungen vor allem jüngerer Wissenschaftler:innen alle zwei Jahre auf der *analytica* verliehen und wird seit 2020 von der Firma Analytik Jena mit einem Preisgeld von

3000 Euro unterstützt. Da die *analytica* im Jahr 2020 pandemiebedingt nicht in Präsenz abgehalten wurde, hielt Natalia P. Ivleva (TU München), Bunsen-Kirchhoff-Preisträgerin 2020, nun in Anwesenheit der Jury, der Vertreter von Analytik Jena sowie zahlreicher Teilnehmender ihren Vortrag „Raman Microspectroscopy for Environmental Analysis“. Sie stellte die neu entwickelte Software TUM-Particle-Typer vor, die es möglich macht, Plastikmikropartikel mit Raman-Mikroskopie zu detektieren, zu identifizieren und zu quantifizieren. Darüber hinaus präsentierte sie eine zerstörungsfreie Raman-Methode, um auf Basis von Stabilisotopen Mikroorganismen zwei- und dreidimensional zu charakterisieren.

Der Bunsen-Kirchhoff-Preis 2022 wurde an Carlos Abad Andrade (BAM, Berlin) verliehen, und zwar für seine exzellenten Entwicklungen in der High-Resolution Continuum Source Atomic Absorption Spectrometry (HR-CS-AAS). Durch ihn gelang ein quantitativer Zugang zu Elementen wie Bor, Chlor, Fluor und Schwefel mit AAS. Inspiriert von der Astrophysik entwickelte er außerdem eine sehr genaue Isotopenanalyse mit CS-HR-GFAAS, welche an die der Multikollektor-induktiv gekoppelten Plasma-Massenspektrometrie (MC-ICP-MS) heranreicht. Damit ergeben sich völlig neue Einsatzmöglichkeiten der AAS für technologisch relevante Anwendungen.

Jacob T. Shelley (Rensselaer Polytechnic Institute, USA) widmete sich dem Thema „Bunseniana: Drawing on the Character and Insights of Bunsen and Kirchhoff to Drive the Future of Analytical Spectroscopy“. Der Begriff Bunseniana entsprang den vielen humorvollen Anekdoten über Bunsen. Zu Beginn des Vortrags gab Shelley Einblicke in die wissenschaftlichen Errungenschaften und die Persönlichkeiten von Bunsen und Kirchhoff. Anschließend präsentierte er spannende Entwicklungen und fundamentale Untersuchungen von plasmabasierten Ionisierungsquellen, gekoppelt an die hochauflösende Molekülmassenspektrometrie. So berichtet er, dass das Einbringen von Gasen in



Natalia P. Ivleva, Bunsen-Kirchhoff-Preisträgerin 2020, bei ihrem Vortrag „Raman Microspectroscopy for Environmental Analysis“ (Foto: Messe München)



Der Bunsen-Kirchhoff-Preis 2022 geht an Carlos Abad Andrade. (Foto: Messe München)

die Plasmaquelle eines Massenspektrometers Einfluss auf die Analytisationierung und die resultierenden Spektren haben kann. Durch Dotierung einer geringen Menge Sauerstoff in ein Heliumplasma ließ sich die Bildung protonierter Wassercluster steigern und die Ionisierungseffizienz für kleine polare Moleküle signifikant verbessern. Ebenso bildeten sich Pyrylium-Ionen, welche bei der Bildung komplexer Moleküle während der Entstehung der Erde eine Rolle gespielt haben könnten.

Martín Resano (Universität Zaragoza, Spanien) zeigte in „Microsampling in elemental bioanalysis: much more than using small volumes“, dass sich Single-Event-ICP-MS zur Analyse von Nanopartikeln, Zellen oder auch



Organisator:innen und Redner:innen der DAAS-Session. Von links: Martín Resano, Natalia P. Ivleva, Carlos Abad Andrade, Jacob T. Shelley, Kerstin Leopold, Carsten Engelhard. (Foto: Messe München)

Mikroplastik eignet. Die Qualität der Ergebnisse kann bei Realproben jedoch unter Matrixeffekten leiden. Resano demonstrierte einen neuartigen Ansatz basierend auf Standardaddition, um dieses Problem zu beheben.

Die erste Session zu „New Trends in Atomic and Molecular Spectroscopy Analysis“ begann mit der Verleihung des Fachgruppenpreises Analytische Chemie 2022 der GDCh. Der mit 2000 Euro dotierte Preis wird normalerweise alle zwei Jahre auf der ANAKON für herausragende und eigenständige Forschung an Analytiker:innen verliehen, die am Beginn ihrer wissenschaftlichen Karriere stehen. Da die ANAKON auch in diesem Jahr abgesagt werden musste, erfolgte die Verleihung auf der analytica conference. Der diesjährige Preisträger ist David Clases von der Karl-Franzens-Universität Graz. Er kehrte letztes Jahr nach vier Jahren Postdoc-Aufenthalt in Australien nach Europa zurück. In seinem Vortrag präsentierte er neue auf ICP-MS basierende Methoden, um Nano- und Mikrostrukturen in Umwelt- und biologischen Proben zu charakterisieren. Mithilfe einer Single-Particle-ICP-MS im sogenannten Bandpass Mode und einer selbst entwickelten Auswertungssoftware verfolgte seine Arbeitsgruppe Größe und Zahl bleibasierter Nanopartikel sowie den ionischen Hintergrund des Flusswassers von der Quelle bis zur Mündung in den Port Phillip bei Melbourne.

Über die Charakterisierung von Gadolinium-basierten Kontrastmitteln sprach der Doktorand Marcel Macke (Westfälische Wilhelms-Universität Münster) in Vertretung für Uwe Karst. Über eine Kopplung von Ionenaustauschchromatographie mit Quadrupol-ICP-MS wurden lineare und zyklische Gadoliniumkomplexe in Trinkwasserproben deutscher Städte detektiert und spezifiziert. Eine automatisierte Inline-Verdünnung eines Standards ermöglichte zudem eine schnelle Quantifizierung der Gesamtmenge an Gadolinium sowie der einzelnen Kontrastmittelspezies.

Über die Detektion von per- und polyfluorierten Alkylsubstanzen (PFAS) mit Atomspektrometrie berichtete Jörg Feldmann (Universität Graz, Österreich). Zunächst verwies er auf die große Zahl von über 4700 PFAS mit stark unterschiedlichen Eigenschaften und die sich daraus ergebenden Herausforderungen für die Analyse unbekannter Proben. Eine Lösung sieht Feldmann in Methoden, die die harte Ionisierung von ICP-MS für die Quantifizierung in Kombination mit der weichen Ionisierung von ESI-MS für die Identifizierung fluoriert Alkylverbindungen und derer Abbauprodukte nutzen.

Anschließend sprach Daniel Pröfrock vom Helmholtz-Zentrum Hereon über die Charakterisierung von Mikroplastik mit ICP-MS/MS und FTIR mit einem Quantenkaskadenlaser. Dabei befasste er sich nicht nur mit der De-



David Clases (links) erhält den Fachgruppenpreis Analytische Chemie 2022. Den Preis überreichte Martin Vogel. (Foto: C. Engelhard)

tektion und Quantifizierung, sondern entwickelte auch eine Methode zur Probennahme von Mikroplastik basierend auf Zentrifugation mit kontinuierlichem Durchfluss. Diese Art der Probennahme vereinfacht die Analyse großer Probenmengen im Vergleich zur klassischen Filtration und minimiert auch systematische Fehler, die bei der Probennahme zur Mikroplastikanalyse in Gewässern auftreten können. Des Weiteren befasste er sich in seiner Forschung mit der Sorption von Metallionen an Mikroplastik und der Entwicklung hierfür geeigneter Referenzmaterialien.

Der zweite Teil der DAAS-Session zu „New Trends in Atomic and Molecular Spectroscopy Analysis“ startete mit einem Vortrag von Jörg Bettmer (Universität Oviedo, Spanien). Er berichtete von ICP-MS unterstützter Charakterisierung von biogenen Nanomaterialien, die biologisch mithilfe von Organismen wie Hefebakterien oder Pilzen entstehen. Diese Nanopartikel untersuchte er mit ICP-MS im Einzelzell- oder Einzelpartikelmodus. Der dabei direkt zugängliche Größenbereich lag zwischen 50 und 250 Nanometer. Um kleinere Nanopartikel zu untersuchen, entpuppte sich die Kopplung von ICP-MS mit Flüssigchromatographie als geeignet.

Simone Bräuer (Universität Graz, Österreich) blieb in ihrem Vortrag den Pilzen treu: Sie berichtete über die Untersuchung von Elementspe-

zies in unterschiedlichen Pilzarten über die Kopplung von ICP-MS und HPLC. Dabei fand sie beispielsweise, dass in Hirschtrüffeln eine Arsenspezies vorkommt, die normalerweise nur in mariner Umgebung gefunden wird. In Kronenbecherlingen war die Arsenkonzentration verglichen mit anderen Pilzen enorm erhöht. Fliegenpilze hingegen zeigten eine starke Akkumulation von Vanadium, deren Hintergrund bislang nicht erklärt ist. Mit Laserablation-ICP-MS untersuchte sie die räumliche Verteilung von Quecksilber und Selen in Steinpilzen.

Im Vortrag von Carla Vogt (TU Bergakademie Freiberg) ging es um die Weiterentwicklung der 3-D-Mikro-Röntgenfluoreszenzanalyse (μ XRF) strukturierter und inhomogener Feststoffproben. Carla Vogt stellte ein modifiziertes Gerät vor, welches zukünftig auch einen quantitativen Zugang in der 3-D-Analyse erlauben soll. Sie zeigte, wie Proben mit 3-D- μ XRF analysiert wurden, zum Beispiel Einschlüsse in Diamanten, die Verteilung von Rutil in Rauchglas oder minerale Phasen in einem Schwamm skelett. Der große Vorteil dieser Methode ist die Möglichkeit der zerstörungsfreien Analyse.

Den letzten Vortrag hielt Michael Schmitt (Friedrich-Schiller-Universität Jena). Er berichtete von der Untersuchung polymerintegrierter Moleküle mit der Raman-Spektroskopie. Besonders interessant waren dabei die molekularen Mechanismen, die hinter der Selbstheilung von Polymeren stecken: Er zeigte mit kohärenter Anti-Stokes-Raman-Streuung (CARS), dass der Massentransport schneller stattfindet als die für das Heilen benötigte Reaktion. In einer weiteren Studie wurden polymerintegrierte Photokatalysatoren und -sensibilisatoren auf ihre Bindung an das Polymer hin analysiert.

Im Anschluss fand die Mitgliederversammlung des DAAS statt. Vorstandsvorsitzender Martin Wende (BASF) berichtete über die Aktivitäten des DAAS im vergangenen Jahr und wies auf geplante Veranstaltungen hin: So findet nach pandemiebedingter Pause u.a. wieder der Laborleiter:innen-Stammtisch statt. Auch

können Hochschullehrende nun wieder Analytik-Masterstudierende für das eintägige Mentoringprogramm in der Industrie vorschlagen. Im Herbst wird der Vorstand des DAAS neu gewählt und freut sich auf die Bewerbung von Kandidat:innen.

*Autor:innen (für den DAAS-Vorstand):
Andreas Gruber, Dominik Blaimer
und Riccarda Müller
Universität Ulm
Session Chair:
Carsten Engelhard und Kerstin Leopold*

Analysing Cultural Heritage: Challenges, Approaches & Methods

Auf einer Tagung, die sich vornehmlich an chemisch-industriellen oder chemiewissenschaftlichen Anwendungsfeldern orientierte, war die in der Mittagszeit stattfindende Session, organisiert von der Fachgruppe Archäometrie der GDCh, ein Exot. Allerdings: In einer Zeit, in der Chemie gesellschaftlich oft fast ausschließlich negativ konnotiert wird, ist gerade der Grenzbereich zwischen Geistes- und Naturwissenschaften, wie sie die Archäometrie zum Thema hat, sehr wichtig, um die Chemie auch für solche Menschen interessant zu machen, die am liebsten nicht-existierende „Kartoffeln ohne Chemie“ kaufen würden.

■ Vier Vorträge spannten den Bogen der Archäometrie mit Fragestellungen aus der Denkmalpflege, den Restaurierungswissenschaften bis hin zur Archäologie. Johannes Tintner-Olifiers von der Universität für Bodenkultur in Wien eröffnete die Vortragsreihe mit „FTIR spectroscopy as a tool in archaeometry – potential and challenges“. Er erläuterte die Infrarot- und Nahinfrarotspektroskopie zur Datierung von organischen historischen Werkstoffen wie Holz, Stroh, Papier und Pergament. Mit statistischen Modellen wie Random Forest

wurden die zeitabhängigen Veränderungen der Infrarotspektren in Folge von molekularen Zersetzungen – wie dem Abbau von Acetylgruppen in Hemicellulosen des Holzes – genutzt, um mit gut datierbaren Stützobjekten eine Zeitkalibration für die Objektgruppen zu erreichen. Sehr interessant war dabei die Datierung von Holzkohlen in ihren jeweiligen Regionen als wichtiges Indiz anthropogenen Handelns.

Anika Retznann von der BAM in Berlin berichtete über ein Themenfeld, das nicht nur in der Archäometrie von großer Bedeutung ist: das chemische Imaging. In „The potential of chemical imaging techniques for the investigation of historic artefacts“ hob sie das revolutionäre Potenzial eines chemischen orts aufgelösten Imagings/ Mappings hervor, das – im Gegensatz zu klassischen Bulk-Analysenverfahren – gerade in den Inhomogenitäten historischer Artefakte die wirklich wichtigen Informationsquellen für Fragen der Archäometrie sieht. Dabei gab sie einen schönen Überblick über destruktive und nicht-destruktive Methoden wie die jeweils orts aufgelöst scannende Macro-X-Ray-Fluoreszenz, die Raman-Spektroskopie, die Infrarot-Reflektographie und die hyperspektrale Bildgebung. Hauptfokus lag auf der minimal-invasiven Laserablation – Multikollektor – induktiv gekoppelten Plasmamassenspektrometrie. Hier gelingt es mit einer Ortsauflösung von bis zu zwei Mikrometern selbst Spurenelemente im Nanogramm-Bereich in Feststoffen zu analysieren. Die Isotopenanalyse ermöglicht so hochinnovative Aussagen über Zuordnungen, Authentizitäten oder Produktionsprozesse historischer Objekte wie Artefakte (Gemälde, Metalle, Keramik, Papier oder Holz) und anthropologische Relikte (Knochen, Zähne oder Haare).

Annemarie Kramell (Institut für Chemie der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg) hatte historische Textilien im Fokus und sprach über diese hochempfindlichen historischen Objekte im Vortrag „Minimally invasive strategies to analyze historical clothes and accessories“. Speziell die Farbstoffe sowie die Fasern sind bei

dieser Objektgruppe interessante Analyten. Es kamen beispielsweise die Mikroskopie, Chromatographie, Spektroskopie und speziell die Massenspektrometrie zum Einsatz, um teils komplexes organisches und anorganisches Material und dessen Produktionstechniken zu erkennen. Mit Techniken wie der LMJ-SSP- (Liquid Microjunction Surface Sampling Probe) oder MALDITOF-MS wurden gefärbte Fasern auf ihre Farbstoffe untersucht. Dabei demonstrierte Kramell speziell die Problematik der eingeschränkten Informationsdichte nicht-invasiver Methoden gegenüber der erhöhten chemischen Informationsdichte (minimal-)invasiver Methoden.

Eine sehr spezielle, aber praxisrelevante hochinteressante Fragestellung bearbeitete Thomas Schmid von der BAM in Berlin. Die für die Restaurierung so wichtige Aufklärung eines Herstellungsprozesses von Baumaterialien thematisierte er in „Raman microspectroscopy elucidates early medieval art technology: High-fired gypsum mortar and Egyptian blue from the church St. Peter above Gratsch (South Tyrol, Northern Italy)“. Mit der orts aufgelöst scannenden Raman-Mikrospektroskopie sowie anderen spektroskopischen Techniken wurde der Mörtel einer frühmittelalterlichen Kirche (5. bis 6. Jahrhundert) auf seinen Herstellungsprozess hin untersucht. So ließ sich anhand der Analyse der Mikrostruktur der Temperaturverlauf des Brennprozesses wie auch wahrscheinliche Rohstoffquellen des Mörtels nachvollziehen. Eine besondere Entdeckung war, dass in diesem frühen Bauwerk Ägyptisch Blau als Pigment verwendet wurde.

An die Vorträge schlossen sich jeweils zahlreiche Diskussionsbeiträge an; alle Diskussionsrunden mussten, trotz perfekten Zeitmanagements der Vortragenden, vor ihrem Ende abgebrochen werden – ein Zeichen für das große Interesse des Auditoriums.

*Autor und Session Chair:
Jürgen Schram
Stellvertretender Vorsitzender
der FG Archäometrie der GDCh
Fachbereich Chemie
Hochschule Niederrhein*

Ion-Mobility Spectrometry for Biomarker

■ Als erster Referent der Session berichtete Stefan Zimmermann, Professor am Institut für Grundlagen der Elektro- und Messtechnik der Leibniz-Universität Hannover, über „Neueste Entwicklungen in der Ionenmobilitätsspektrometrie (IMS)-Instrumentierung“. Er sprach über die grundlegenden Konstruktionsstrategien, die bei der Entwicklung von Hochleistungs-Driftröhren-IMS zu beachten sind, um eine hohe Trennleistung und niedrige Nachweisgrenzen zu erzielen. Dazu gehören eine auf die Driftlänge abgestimmte Driftspannung, eine rauscharme Verstärkung mit geeigneter Bandbreite und ein für die unterschiedlichen Ionisierungsarten geeignetes Ionen-Gate. Basierend darauf können selbst miniaturisierte IMS mit unterschiedlichen Driftröhrenkonstruktionen, etwa aus PEEK mit kurzen Driftlängen von 40 Millimeter noch Auflösungen > 65 erreichen, was besonders für die Vor-Ort-Analytik interessant ist (Abbildung 1). Darüber hinaus stellte er duale IMS mit fokussierter Ionenführung in Kombination mit schneller Gaschromatographie (GC-IMS) vor, um komplexe Gemische zu analysieren. Neue Driftröhren mit integrierter Stoßaktivierung (CID) und FAIMS (Field Asymmetric Ion Mobility Spectrometer) ermöglichen es zudem, Substanzen besser zu identifizieren. Solche IMS mit Elektrospray-Ionisation zu koppeln eröffnet zukünftig neben der Gasspurenanalyse

auch ein weites Feld (bio)analytischer Anwendungen in der Flüssigphase.

Über die Auswertung der mit GC-IMS erhaltenen dreidimensionalen Datensätze, die gerade bei hochkomplexen analytischen Aufgaben anfallen, wie bei der Qualitätskontrolle oder Authentifizierung von Lebensmitteln, sprach Philipp Weller von der Hochschule Mannheim und Leiter des CHARISMA Centers: „Nicht-gezielte Volatilomik und maschinelles Lernen – wie Sie das Beste aus Ihren GC-IMS-Daten herausholen“. Gerade die mit der empfindlichen GC-IMS erhaltenen Datensätze sind optimal für Non-Target-Ansätze. Hier gibt es in der Regel keine charakteristischen Markerverbindungen, sondern viele Verbindungen in unterschiedlichen Verhältnissen, die die gewünschte Information tragen. Dies erfordert eine intelligente und leistungsstarke Signalvorverarbeitung der Rohdaten sowie maßgeschneiderte chemometrische Werk-



Abb. 2. QR-Code zur GC-IMS-Toolbox von Philip Weller, Hochschule Mannheim

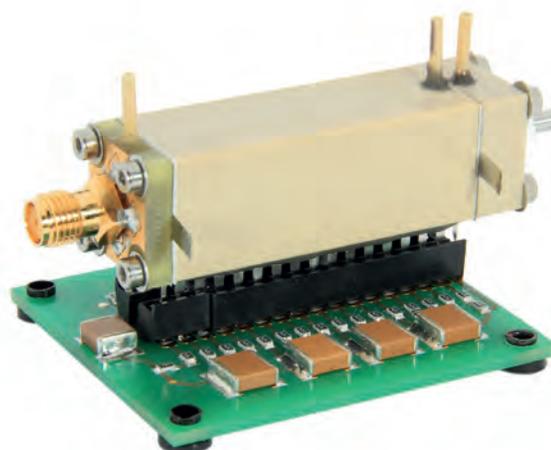


Abb. 1. Miniaturisiertes Ionenmobilitätsspektrometer mit einer Driftröhre aus PEEK und einer Driftlänge von 40 Millimeter (Foto: S. Zimmermann)

zeuge, um robuste maschinelle oder Deep-Learning-Modelle für die Vorhersage von Klasseigenschaften oder quantitativen Informationen zu erstellen, zum Beispiel mit PLS-DA oder PLS-R. Die von Wellers Arbeitskreis entwickelte Toolbox auf Python-Basis steht IMS-Nutzern als Freeware zur Verfügung (Abbildung 2). Damit stellt das GC-IMS als leistungsstarke Benchtop-Profilierungstechnik eine äußerst wettbewerbsfähige und inzwischen immer häufiger verwendete Alternative dar zu komplexen Verfahren wie der NMR oder hochauflösender Massenspektrometrie.

Veronika Ruzsanyi vom Institut für Atemgasanalyse der Universität Innsbruck, Österreich, referierte über die „Analyse flüchtiger Stoffe in der Atemluft mittels GC-IMS“. Der menschliche Körper emittiert über die Atmung, aber auch über den Schweiß und die Haut, ständig hunderte flüchtige organische Verbindungen (VOCs) und stellt damit eine kontinuierliche Quelle für Biomarker dar. Darüber lassen sich Veränderungen in biologischen Abläufen überwachen, die zum Beispiel auf hormonelle Veränderungen oder Organ dysfunktionen zurückzuführen sind. Vorteil der GC-IMS-Technologie sind kurze Analysenzeiten und extrem niedrige Nachweisgrenzen (Sub-Nanogramm pro Liter). Die zusätzliche Robustheit und Tragbarkeit machen es möglich, die Systeme auch als Diagnoseinstrument in Point-of-Care-Zentren einzusetzen. Beispielhaft stellte Ruzsanyi medizinische Anwendungen vor: die Überwachung der Ausatemluft beatmeter Patienten, um nosokomiale Lungeninfektionen frühzeitig zu erkennen; die Messung des Acetongehalts in der Atemluft zur Überwachung einer ketogenen Diät; Veränderungen der Atemluft und Emissionen der Haut von Frauen während ihres Menstruationszyklus; Auswascheigenschaften von Inhalationsanästhetika nach einer Operation. Abschließend erörterte sie Anwendungen in der inneren Sicherheit, um in Lastwagen und Containern versteckte Personen anhand der Emission biologischer VOCs aufzufinden.

Die Sicht eines Anwenders im klinischen Umfeld präsentierte abschließend Thorsten Perl, Anästhesist am Universitätsklinikum Göttingen. Gerade in der Akutmedizin, also einem dynamischen Umfeld mit häufigen Veränderungen in der Krankheitsentwicklung und anstehenden Therapieentscheidungen, braucht es schnelle und präzise Analysesysteme. Point-of-Care-Tests liefern Informationen an dem Punkt, an dem die Fragen auftauchen, und bieten daher, wie schon von Veronika Ruzsanyi dargestellt, einen idealen Einsatzraum für die GC-IMS-Technologie. Zunächst sprach Thorsten Perl über die Atemgasanalyse und Quantifizierung des Sedativums Propofols, die bereits kommerziell verfügbar sind. Exemplarisch diskutierte er hierfür die Herausforderungen bei der Atemgasentnahme und der Quantifizierung. Als weitere medizinische Anwendung zeigte er die schnelle Identifizierung der Erreger von Infektionskrankheiten: Da der Stoffwechsel der Erreger mit der Bildung volatiler Substanzen einhergeht, ließen sich mit GC-IMS humanpathogene Mikroben, Bakterien und Hefen nachweisen, die auf festen oder flüssigen Nährböden kultiviert wurden. Hier wurde ein Verfahren mit Autosamplern zur vollautomatischen Beprobung entwickelt, um Blutkulturflaschen direkt zu analysieren. Am wünschenswertesten ist nach wie vor eine bettseitige Atemgasanalyse, um die Erreger von Lungeninfektionen nachzuweisen. Ermutigende Ergebnisse aus Tierversuchen mit definierten Lungeninfektionen zeigen das Potenzial der IMS-Analyse in diesem Zusammenhang.

*Autorin und Session Chair:
Stefanie Sielemann
Hochschule Hamm-Lippstadt*

Tagungen

Nordic Conference on Plasma Spectrochemistry

12.-15. Juni 2022 in Loen, Norwegen

Die Nordic Conference on Plasma Spectrochemistry feierte in diesem Jahr im norwegischen Loen ihr zehnjähriges Bestehen. Vom 12. bis 15. Juni trafen sich etwa 150 internationale Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler im Hotel Alexandra, um sich über neueste Entwicklungen, Anwendungen und Herausforderungen in der analytischen Plasmaspektrochemie auszutauschen. Yngvar Thomassen (National Institute of Occupational Health, Oslo und Norwegian University of Life Science, Ås) und sein Team verwirklichte eine inspirierende Veranstaltung an diesem einzigartigen Ort.

Das Hauptprogramm umfasste 55 Vorträge in 6 Sessions:

- Progress in plasma spectrochemistry
- Bio-imaging and speciation
- Applications of plasma spectrochemistry
- Single particle and single cell analysis by plasma spectrochemistry
- New analytical capabilities
- Applications of plasma spectrochemistry

Nach einer Begrüßung durch den Chairman startete Gary M. Hieftje (Indiana University, USA) das Programm mit einer wissenschaftlich-

Anmerkung des Herausgebers:

Die Reisestipendien der Fachgruppe Analytische Chemie, die es Studierenden der Analytischen Chemie erleichtern sollen, Tagungen im In- und Ausland zu besuchen, finanzieren sich aus den Einnahmen aus *Analytical & Bioanalytical Chemistry (ABC)*. Fördern Sie also mit der Einreichung Ihrer Paper bei ABC den wissenschaftlichen Nachwuchs.



Für alle Konferenzteilnehmenden ein atemberaubender Anblick: der Briksdal-Gletscher (Foto: C. Engelhard)

philosophischen Vorlesung zur Frage „And now what?“ Inhalt waren der Stand der Atom- und Molekülspektrometrie und wie sich die gegenwärtigen Herausforderungen überwinden lassen. Neben den Vorträgen im Hauptkonferenzsaal gab es im benachbarten kleineren Saal eine Posterausstellung mit 35 Posterbeiträgen. Drei Teilnehmende wurden für ihre Beiträge von einer wissenschaftlichen Jury mit Posterpreisen ausgezeichnet:

- Stephen L. Dorn (Westfälische Wilhelms-Universität Münster)
- Andrea Mara (Universität Sassari, Italien)
- Yonghoon Lee (Mokpo National University, Südkorea)

Im Rahmen der Konferenz wurde Douglas Baxter für seine kontinuierlichen, herausragenden Forschungsbeiträge zur Plasmaspektrochemie mit



Die Posterpreisträger der 10. Nordic Conference on Plasma Spectrochemistry (Foto: Y. Thomassen)

dem 6. Nordic Plasma Torch Award ausgezeichnet. Die Auswahl des Preisträgers erfolgte durch das Organisationsteam und den Vorsitzenden der Nordic Plasma Conference.

Ein besonderes Highlight des wissenschaftlichen Programms waren die 17 kostenlosen Fortbildungskurse, angeboten von 18 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern. Promovierende und Geräteanwender:innen wurden zu Themen wie Probenvorbereitung, instrumentelle Grundlagen und Anwendungen in der Plasmaspektrochemie geschult. Der Kurs von Gary M. Hieftje „Make your own lecture count!“ handelte nicht nur von Wissenschaft an sich, sondern lieferte auch Anregungen und Erfahrungen hinsichtlich der Vorbereitung von Vorlesungen, Seminaren oder Vorstellungsgesprächen. Dass Gary

Hieftje dabei auch persönliche Erlebnisse teilte, führte besonders den jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern vor Augen, dass selbst erfahrene Professoren durch etwas Lampenfieber noch zu Bestleistungen angespornt werden.

Abgerundet wurde die Konferenz durch eine Geräteausstellung, in der die Sponsoren ihre Produkte und Dienstleistungen vorstellten.

Neben dem hervorragenden wissenschaftlichen Programm hatte das Organisationsteam auch ein vielseitiges Rahmenprogramm vorbereitet. Der „Ice Breaker“ am Tag vor der Konferenz wurde sehr wörtlich genommen und im beheizten Außenpool des Hotels veranstaltet. Während der Poster-session am zweiten Tag gab es ein „Bring-Your-Own“-Weintasting. Für viele Teilnehmenden waren die Höhepunkte des Norwegenaufenthalts mit Sicherheit die Fährfahrt durch den Geiranger-Fjord mit vorherigem Zwischenstopp am Gipfel des Dalsnibba (1746 Meter) sowie die Exkursion zum Briksdal-Gletscher mit anschließendem Konferenzdinner. Die Aussicht auf eine kostenlose Konferenzteilnahme im nächsten Jahr (oder einfach Spaß an der Herausforderung) bewegte einige Konferenzteilnehmende sogar dazu, eine Runde im eiskalten Gletschersee zu schwimmen, um sich danach mit einem Schluck Aquavit aufzuwärmen. Diesen durften auch alle anderen genießen, die sich nicht in die eisige Kälte stürzen wollten.

Da der bisherige Zeitraum meiner Promotionszeit von den Einschränkungen der Covid-Pandemie geprägt war, war die Nordic Plasma Conference als erste Präsenzveranstaltung ein überragendes Erlebnis. Abendliche Diskussionen bei einem Glas Wein oder Gespräche im Spa-Bereich des Hotels haben neben der wissenschaftlichen Weiterbildung nicht nur zum Netzwerken beigetragen, sondern auch zu Freundschaften verholfen und unvergessliche Erinnerungen geschaffen. Ein großer Dank gilt der Fachgruppe Analytische Chemie der GDCh für die Förderung meiner Konferenzreise.

Maximilian Heide
AK Carsten Engelhard
Universität Siegen

Impressum

Herausgeber:
Vorstand der Fachgruppe
Analytische Chemie in der
Gesellschaft Deutscher Chemiker
PO-Box 900440,
60444 Frankfurt/Main
c.kniep@gdch.de,
Telefon: 069 7917– 499
www.gdch.de/analytischechemie

Redaktion:
Brigitte Osterath, Am Kalkofen 2,
53347 Alfter
mitteilungsblatt@gmx.net

Grafik: Jürgen Bugler
Druck:
Seltersdruck & Verlag Lehn GmbH &
Co. KG, Selters

Bezugspreis im Mitgliedsbeitrag
enthalten

Erscheinungsweise: 4 x jährlich
ISSN 0939–0065

Redaktionsschluss Heft 04/2022:

02.11.2022

Beiträge bitte an die Redaktion

International Mass Spectrometry Conference

28.08 - 02.09.2022, Maastricht, Niederlande

■ „Endlich wieder eine richtige Tagung – mit Kolleg:innen vor Ort und direkten Gesprächen.“ Solche oder ähnliche Aussagen hörte man immer wieder während der 24. International Mass Spectrometry Conference (IMSC). Organisiert hat die Tagung die Niederländische MS Gesellschaft (Nederlandse Vereniging voor Massaspektrometrie, NVMS), deren umfangreiches Team von Ron Heeren (Universität Maastricht), Albert Heck (Universität Utrecht) und Manfred Wuhrer (Universität Leiden) angeführt wurde.

Seit der letzten IMSC in Florenz 2018 waren vier anstelle von zwei Jahren vergangen, und eigentlich hätte dazwischen auch noch die 23. IMSC 2020 in Rio de Janeiro sein sollen. Diese wurde einige Male verschoben, wird nun schließlich im Dezember 2022 reduziert als Iberoamerican Mass Spectrometry Conference veranstaltet und bleibt formal in der Zählung des Ausrichters eingebunden, der International Mass Spectrometry Foundation (IMSF), Dachorganisation der nationalen MS-Gesellschaften.

Bei aller Freude der Teilnehmenden über die 24. IMSC war jedoch die Besucherzahl um rund ein Fünftel geringer als bei früheren Tagungen. Neben Reisebeschränkungen und zögerlichen Anmeldungen aufgrund der Corona-Pandemie dürften auch Auswirkungen des Kriegs in der Ukraine eine Rolle gespielt haben. Das zeigte sich am Ende der IMSC, als die Organisatoren die Teilnehmendenstatistik präsentierten. Insgesamt hatten sich fast 1400 Personen angemeldet, von denen knapp 1300 am Ende ins niederländische Maastricht gereist waren, um 315 Vorträge zu halten und 743 Poster zu präsentieren. Außerdem fanden samstags und sonntags vor der Tagung etliche Short Courses statt, an denen 137 Personen teilnahmen. Auch war die Konferenz deutlich europäischer dominiert als die



Marktplatz mit dem Rathaus von Maastricht, Gastgeberstadt der 24. International Mass Spectrometry Conference (alle Fotos: Jürgen H. Gross)

vorangegangenen Tagungen dieser Reihe: 16 Nationen waren vertreten; es kamen jeweils annähernd ein Viertel der Teilnehmenden aus den Niederlanden und Deutschland, gefolgt von Finnland, Frankreich, Belgien und Italien mit je an die zehn Prozent.

Tagungsauftakt

■ Im Namen des Organisationskomitees eröffnete Ron Heeren die Tagung im Maastrichter Konferenzzentrum am Rande des Universitätscampus. Mit einem rhythmischen Auftakt durch die lokale Sambatrommlertruppe „Segura!“ ließ das Organisationsteam keine Zweifel daran, dass es sich eine sehr lebhaftere Tagung wünschte. Wissenschaftlich begann die 24. IMSC mit zwei Plenarvorträgen: Paola Picotti (ETH Zürich) sprach über „Proteomes in 3D“, und Bernd Bodenmiller (Universität Zürich) stellte seine Forschung zum MS-Imaging von Geweben mit subzellulärer Auflösung vor, die es unter anderem ermöglicht, die zeitliche und räumliche Ausbreitung von Tumoren zu verfolgen. Danach gab es einen

Empfang mit Getränken in der Firmenausstellungshalle.

Short Courses

■ Im Vorfeld der IMSC fanden samstags und sonntags kostenpflichtige Short Courses statt. Die Themen waren Ion Mobility Spectrometry (Valerie Gabelica, Tim Causon), Advanced MS Data Analysis (Pratik Jagtap, Tim Griffin), Imaging Mass Spectrometry (Martina Marchetti-Deschman, Eva Cuypers), Tandem Mass Spectrometry (Vicki Wsocki, Ljiljana Pasa-Tolic), Cross-linking Mass Spectrometry (Juri Rappsilber, Pascal Albanese), Lipidomics (Steve Blanksby, Michal Holcapek), Biopharma and Native MS (Sarah Cianferani, Valentina D'Atri), Glycomics (Guinevere Lageveen-Kammeijer, Noortje de Haan), Clinical Proteomics (Sander Piersma & Irene Bijnsdorp) und Computational Proteomics (David Tab, Quentin Gai Gianetto).

Tagungsprogramm

■ Neben Plenarvorträgen, eingereichten Beiträgen und Preisverleihungen gab es Postersessions, Firmenausstellungen und abendliche Workshops. Die Postersession war in zwei Gruppen eingeteilt, die jeweils die Hälfte der Tagungsdauer abdeckten. Da die Poster größtenteils in der Halle mit den Firmenständen untergebracht waren, profitierten diese in gleichem Maße voneinander. Wer mochte, konnte zusätzlich Lunch-Seminare besuchen, um über Mittag Informationen über neueste Geräte und Techniken zu sammeln. Das vollständige Tagungsprogramm ist nach wie vor auf der Tagungswebseite einsehbar.

Neben den beiden Auftaktvorträgen gab es nur noch zwei weitere Plenarvorträge, während die übrigen Plenarveranstaltungen im großen Auditorium den Preisverleihungen vorbehalten waren. Den Vortrag am Montagmorgen präsentierte



Stephen Blanksby von der australischen Queensland University erkundet das Lipidom bis in die letzte Fettsäure-Doppelbindung.



Den wissenschaftlichen Abschluss der Tagung gestaltete Pieter Levelt vom National Center for Atmospheric Research. Sie sprach über Atmosphärenforschung mit Satellitendaten.

Stephen Blanksby (Queensland University, Australien) zu „Getting our fats straight: an international adventure in isomer-resolved lipidomics“. Er zeigte die enorme Komplexität des Lipidoms, zu dem inzwischen rund 47 500 Verbindungen gezählt werden, und führte kurz in die Ozon-induzierte Fragmentierung ein, mit der sich Doppelbindungspositionen in Fettsäuren sicherer bestimmen lassen. Der andere Plenarvortrag schloss die Tagung am Freitagnachmittag: Pieter Levelt (National Center for Atmospheric Research, Boulder, USA) sprach über die Atmosphärenforschung mit Satellitendaten. Ohne Massenspektrometrie, dafür mit optischer Spektroskopie, rastern moderne Satelliten, die ihr Team mitentwickelt hat, die Erde einmal täglich vollständig mit einer Auflösung von rund zehn Quadratkilometern pro Pixel ab und liefern detaillierte zeitaufgelöste Daten zu Emissionen rund um den Globus.

Thomson Medals

Die Thomson Medal ist zur Ehre von Sir J. J. Thomson benannt, dessen Forschung gemeinhin als Initialzündung der Massenspektrometrie gilt. Die IMSF vergibt die Thomson Medal seit 1985 anlässlich der IMSC, und zwar je eine Medaille pro Jahr. Daher wurden dieses Jahr gleich vier Thomson Medals vergeben. Die Verleihungen führten John Langley (Universität Southampton, UK) als Präsi-

dent der IMSF zusammen mit Catherine Costello (Universität Boston, USA) als Jury-Vorsitzende durch.

Die Thomson Medals für 2020 gingen an Alison Ashcroft (Universität Leeds, UK) für ihre massenspektrometrischen Arbeiten zur Faltung und Funktion von Proteinen und den Untersuchungen dazu, welche Auswirkungen diese auf Krankheiten haben, sowie an Ron Heeren (Universität Maastricht, NL); er wurde für seine Beiträge zum MS-Imaging und seine interdisziplinäre Einbindung in unterschiedliche Forschungsfelder geehrt.

Die Thomson Medals für das Jahr 2022 gingen an Vicki Hopper Wysocki (Ohio State University, USA) für die Entwicklung und biomedizinische Anwendung oberflächeninduzierter Stoßaktivierung sowie an Lidia N. Gall (St. Petersburg Russian Academy of Sciences); letztere wurde geehrt für die Entwicklung des ERIAD-Verfahrens, das der Elektrospray-Ionisation (ESI) sehr nahekommt und sich vor allem zur Elementanalytik einsetzen lässt. Unter den vier Thomson Medals war die an Lidia Gall an ihrem 88. Geburtstag sicher die aufsehenerregendste: Es war eine sehr späte Anerkennung von Arbeiten, die bereits vor der bahnbrechenden Publikation von ESI durch die Gruppe von John Fenn stattgefunden hatten; andererseits wurde hier eine russische Forscherin geehrt, was in Zeiten des Angriffs

auf die Ukraine einerseits positiv als Brücke der Wissenschaft über die Politik hinaus angesehen werden konnte, aber vielleicht auch als politisch zumindest unklug.

Curt Brunnée Awards

Der Curt Brunnée Award ehrt herausragende Beiträge zur instrumentellen Entwicklung in der Massenspektrometrie. Er wird an Preisträger:innen vergeben, die das 45. Lebensjahr noch nicht überschritten haben. Mit dem Curt Brunnée Award 2020 ausgezeichnet wurde Livia S. Eberlin (Baylor College of Medicine, USA) für die Entwicklung des MasSpec Pen, einer Sonde, die Chirurgen in Echtzeit Information zum gerade operierten Gewebe liefert. Den Curt Brunnée Award 2022 erhielt Erin Baker (Universität North Carolina, USA) für ihre Beiträge zur Anwendung von Ionenmobilitäts-MS in der Umweltanalytik und der medizinischen Forschung.

Jochen Franzen Award

Erstmals vergeben wurde der Jochen Franzen Award, der an den Gründer von Franzen Analysetechnik erinnert. Das Unternehmen ist inzwischen als Bruker Daltonics weltbekannt. Shane R. Ellis (Universität Wollongong, Australien) ist der erste Preisträger des Jochen Franzen Awards. Er erhielt die Auszeichnung für seine Arbeiten zum MS-Imaging von Lipiden.



Die Thomson Medals 2020 überreichten der Präsident der IMSF, John Langley (links) und die Jury-Vorsitzende Cathy Costello (rechts) an Allison Ashcroft (Mitte links) und Ron Heeren.



Verleihungen der Curt Brunnée Awards und des Jochen Franzen Awards. Von links: John Langley (Präsident der IMSF), Rosy Lee (Thermo Fisher Scientific), die Preisträger:innen Livia S. Eberlin, Shane R. Ellis und Erin Baker sowie Jürgen Srega (Bruker Daltonics).

Innovation Lab Talks

■ Ein für MS-Tagungen ungewöhnliches Format waren die Innovation Lab Talks, ein zusätzliches Angebot an die unterstützenden Firmen, ihre Produkte zu präsentieren. Auf einem Laufsteg stellten die Produktmanager innerhalb von zehn Minuten ihre neuesten Entwicklungen vor. Das konnte man einerseits als erfrischend innovativ empfinden, andererseits aber auch als etwas marktschreierisch – der Geräuschpegel der nebenan stattfindenden Postersession trug zudem nicht unbedingt positiv zum „Cat-Walk-Erlebnis“ bei. Die präsentierenden Firmen schienen das Format trotzdem gerne und gut aufzunehmen.

Nachwuchsförderung

■ Reisekostenbeihilfen gab es in Gestalt der Nico Nibbering Travel Awards, welche die IMSF an 46 studentische Tagungsteilnehmende vergab, die dazu auf die Bühne gebeten wurden. Auch die Deutsche Gesellschaft für Massenspektrometrie (DGMS, www.dgms.eu) unterstützte die aktive Teilnahme mit einem wissenschaftlichen Beitrag und vergab für die Fahrt nach Maastricht 28 Reisekostenbeihilfen in Höhe von jeweils 500 Euro an Studierende.

Konferenzdinner und Maastricht

■ Maastricht hat, obwohl es gerade hinter der Landesgrenze liegt und zur niederländischen Provinz Limburg gehört, recht deutlich das, was

wir in Deutschland als Charme holländischer Städte empfinden. Kurzum: Die Atmosphäre ist sehr angenehm. Das Konferenzdinner fand daher auch in innerstädtischer Lage an der Bassinkade statt. Rund um den früheren kleinen Stadthafen mit Ausfahrt zur Maas liegen dort in ehemaligen Lager- und Werkstattgewölben zahlreiche Lokale. Mit einem Gutschein-Set ausgerüstet konnte man jedes der in die Veranstaltung eingebundenen Lokale für einen festgelegten Gang des Dinners aufsuchen und sich dann zum Essen frei im Areal platzieren.

Zukünftige IMSCs in Australien und Frankreich

■ Die 25. IMSC wird vom 14. bis 17. August 2024 in Melbourne stattfinden. Zu dieser Tagung, die im zeitigen australischen Frühjahr und damit bei angenehmen Temperaturen stattfinden soll, luden Gavin Reid (Universität Melbourne) und Tara Pukala (Universität Adelaide) die Teilnehmenden zum Abschluss ein. Die übernächste und damit 26. IMSC wird vom 22. bis 28. August 2026 im Herzen Europas stattfinden und damit für uns wieder einfacher zu besuchen sein.



Jean-Baptiste Vincendet von AB Sciex präsentiert die Neuheiten seines Unternehmens beim Innovation Talk.

Jürgen H. Gross
Universität Heidelberg

www.imsc2022.com

Ankündigung

HPLC 2023 in Düsseldorf

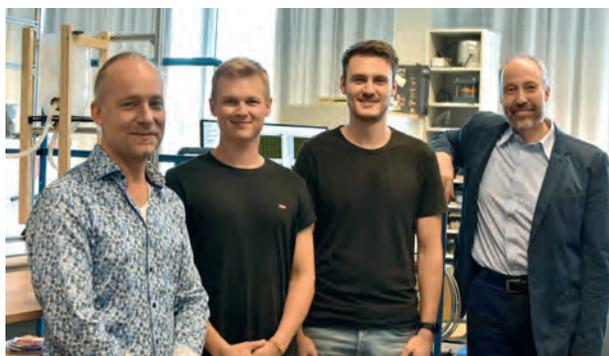
■ Die HPLC-Symposiumsreihe ist als die weltweit führende Jahreskonferenz im Bereich der Trenntechniken bekannt und insbesondere in Europa mit mehr als 1200 Teilnehmenden sowie einer großen Ausstellung von neuen Geräten, Materialien und anderen innovativen analytischen Produkten sehr erfolgreich. Das Programm der HPLC deckt alle Aspekte der Trennwissenschaften in flüssigen Phasen und überkritischen Fluiden ab, inklusive fortschrittliche Detektionstechnologien, insbesondere massenspektrometrische Detektion und Kopplungstechniken. Grundlagen und Theorie, neue Trennmaterialien, Säulenttechnologien und Innovationen im Bereich der Geräte stehen im Fokus der Tagung. Darüber hinaus werden Anwendungen aus verschiedenen Bereichen der (bio-)pharmazeutischen, chemischen und lebensmittelchemischen Industrie sowie der Umweltanalytik, klinischen Analytik, Bioanalytik – inklusive Qualitätssicherungsaspekte – behandelt. Das Symposium bietet Workshops und Tutorials, Plenarvorträge und Keynote-Präsentationen von international führenden Wissenschaftler:innen.

2023 wird das HPLC-Symposium zum vierten Mal – nach Baden-Baden (1983), Hamburg (1993) und Dresden (2009) – in Deutschland abgehalten. Düsseldorf als ein Hotspot der Moderne und rheinischen Tradition im Zentrum einer der am dichtesten besiedelten Regionen Deutschlands wurde als Host-City ausgewählt. Die Veranstaltung wird von der GDCh und dem AK Separation Science ausgerichtet. Die Organisatoren, Michael Lämmerhofer (Universität Tübingen) und Oliver J. Schmitz (Universität Duisburg-Essen), freuen sich auf eine rege Teilnahme.

www.hplc2023-duesseldorf.com

Preise & Stipendien**Mikroplastikerfassung in Wasser**

Absolventen der Uni Bayreuth erhalten EXIST-Gründerstipendium



Christian Laforsch, Valentin Meiler, Jens Pfeiffer und Gerhard Fischerauer (von links) (Foto: Universität Bayreuth)

■ Jens Pfeiffer und Valentin Meiler werden mit dem EXIST-Gründerstipendium des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klimaschutz und des Europäischen Sozialfonds (ESF) gefördert. Die Fördersumme für „MYTRA – Messung von Mikroplastik“ beträgt 105 000 Euro.

Das Gründerteam, bisher bestehend aus Jens Pfeiffer und Valentin Meiler, wird in den nächsten zwölf Monaten das selbst entwickelte Messverfahren für Mikroplastikartikel verfeinern und es zur industriellen Anwendbarkeit weiterentwickeln. Entstanden ist die Gründungsidee im Zuge der Masterarbeiten an der Universität Bayreuth. „Das Verfahren auf Grundlage der Impedanzspektroskopie ermöglicht es, Größe, Anzahl, Kunststoffsorte und eventuell auch Form von Partikeln in Wasser zu bestimmen, während die Probe durch das Messgerät läuft“, erklärt Meiler. Bei der Impedanzspektroskopie wird der Wechselstromwiderstand im Wasser bei verschiedenen Frequenzen gemessen. Befinden sich im Wasser Partikel, so verändert sich der Messwert in Abhängigkeit von der Partikelgröße, -zahl und -sorte.

Das Messsystem von Jens Pfeiffer und Valentin Meiler leitet Wasser durch eine Messzelle. Aus der Masterarbeit von Jens Pfeiffer ging hervor, dass eine Messung im Durchfluss funktioniert. Nun geht es darum, das Messsystem für verschiedene Anwendungen zu optimieren. „Es gibt bereits

viele Methoden, um Mikroplastik zu messen“, sagt Jens Pfeiffer. „Aber wir haben bei der Arbeit an den Masterarbeiten auch gelernt, dass diese Methoden viele Probleme mit sich bringen. So müssen beispielsweise bisher die Proben oft händisch sortiert und mit extrem teuren Geräten analysiert werden. Wir wollen daher mit unserer Methode ein Messgerät entwickeln, das kosteneffektiver, um ein Vielfaches schneller und durch Automatisierung auch breitflächig anwendbar ist.“

„Aktuell werden bei der Analyse der Mikroplastikbelastung der Umwelt meist nur Stichproben genommen. Zudem ist die Probenvorbereitung für die nachfolgende chemische Identifikation der Partikel noch sehr zeitaufwendig“, erklärt Christian Laforsch, Sprecher des Sonderforschungsbereichs SFB 1357 Mikroplastik an der Uni Bayreuth, Lehrstuhlinhaber Tierökologie I und Co-Mentor der beiden Gründer. „Durch die neue Methode könnten die Partikel direkt an der Beprobungsstelle vor Ort kontinuierlich analysiert werden.“

Die Gründungsidee fußt auf den Masterarbeiten von Jens Pfeiffer und Valentin Meiler. Sie haben beide am Lehrstuhl Mess- und Regeltechnik bei Gerhard Fischerauer und seinem Doktoranden Luca Bifano ihre Abschlussarbeiten geschrieben. Das EXIST-Gründerstipendium für MYTRA ist am 1. August gestartet.

Quelle: Universität Bayreuth

Neuer Brandmelder siegt bei Ideenwettbewerb

Alarm schon, bevor es brennt

■ INNOspaceMasters ist ein jährlicher Ideenwettbewerb, bei dem neue Ideen für Raumfahrt- und Erdanwendungen vorgestellt werden. Ein Team des Zentrums für angewandte Raumfahrttechnologie und Mikrogravitation (ZARM) und des Instituts für Werkstofftechnik (IWT) der Universität Bremen hat in Zusammenarbeit mit dem Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Tübingen dabei die Challenge des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) gewonnen – mit einem Rauchmelder, der Brandquellen bereits vor Ausbruch des Brandes „erschnüffeln“ kann. Beim INNOspace-Masters-Wettbewerb werden von verschiedenen Organisationen und Firmen insgesamt fünf Challenges ausgeschrieben.

Das Bremer Team, bestehend aus Christian Eigenbrod und Florian Meyer vom ZARM, Lutz Mädler von der Universität Bremen und Nicolae Bársan von der Universität Tübingen wurde bei der Preisverleihung in Berlin ausgezeichnet. Verbunden mit

dem Sieg ist auch eine finanzielle Förderung des Projekts.

Es geht dabei um die Entwicklung von Brandmeldesensorik, die einen Brandherd „erschnüffeln“ soll, schon bevor es zu dessen Entzündung kommt. „Jeder kennt den eigentümlichen Geruch von überhitzter Elektrik oder Elektronik. Ganz ähnlich emittiert jeder Stoff, wenn er überhitzt ist, gasförmige Stoffe, die durch neuartige halbleitende Metalloxidschichten detektiert werden können“, erklärt Christian Eigenbrod. Was die Halbleiter dabei detektieren, was kritisch und was unkritisch ist, müssen sie über Machine-Learning-Routinen beigebracht bekommen. Die Schichten ändern ihren Widerstand nicht nur aufgrund spezieller Luft-Inhaltsstoffe, sondern auch aufgrund der allgemein veränderten Atmosphärenzusammensetzung. Dabei spielen nicht nur zusätzlich emittierte Stoffe eine Rolle, sondern auch das, was weniger vorhanden ist. Nach entsprechendem Training gibt es kaum einen gasförmigen Stoff, der sich so nicht detektieren lässt.

Einen konkreten technischen Aufbau gibt es noch nicht. Sensoren dieser Art werden von der Firma Sensirion – einer Ausgründung der ETH Zürich – vertrieben und finden unter anderem in Geräten zur Überwachung der Raumluftqualität Anwendung. Dabei geht es beispielsweise um CO₂, CO oder Formaldehyd, welches aus Möbeln ausgasen kann. Aber auch eigene Sensoren können am IWT hergestellt und speziell auf die Anforderungen zur Branddetektion angepasst werden.

Durch den Erfolg beim INNOspaceMasters wird die Umsetzung der Idee nun in einem Entwicklungsprojekt untersucht. Dazu werden Förderungen bis zu 400 000 Euro bereitgestellt. Nach einer erfolgreichen ersten Projektphase könnte ein erster Prototyp des Systems entwickelt werden, der beispielsweise auf der ISS getestet werden könnte.

Quelle: Universität Bremen

Keine halben Sachen.

Die Welt ist voll von Halbwissen. Besonders im sensiblen Umfeld der Chemie ist dies jedoch fehl am Platz. Deshalb arbeiten wir seit 1947 mit Leidenschaft und Liebe zum Detail daran, dass evaluierte Daten und Fakten rund um das Themenfeld Chemie zur Verfügung stehen. Immer. Und ohne Ausnahme. So wurde „Der RÖMPP“ Synonym für inzwischen über 65 000 Stichwörter und über 240 000 Querverweise, auf die man sich verlassen kann. Das sollten Sie sich am besten selbst anschauen.

Sonderpreis
für GDCh-Mitglieder **139,- €**
für stud. Mitglieder **69,- €** www.gdch.de

GDCh



Nur 100% sind 100%.
www.roempp.com

 **Thieme**

Knauer-Wissenschaftspreis für Markus Matz

Der Berliner Hersteller von Hightech-Labormessinstrumenten KNAUER Wissenschaftliche Geräte vergibt den Herbert Knauer Science Award 2022 an Markus Matz, einen 28-jährigen Doktoranwärter, der am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) am Institut der Chemischen Technologie und Polymerchemie (ITCP) arbeitet. Sein Projekt beschäftigt sich mit der kernmagnetischen Resonanz (NMR) als Detektionsmethode für die Flüssigkeitschromatografie, die sehr detaillierte Informationen über die getrennten Moleküle verrät. Seine Innovation verbessert die Auflösung des verwendeten Benchtop-NMR-Geräts deutlich und ist ein Schritt in die Richtung, die NMR-Detektion für Standardlabore greifbarer zu machen.

Mit dem Herbert Knauer Science Award fördert Knauer innovative Lösungen auf dem Gebiet der Flüssigkeitschromatografie. Der Gewinnerbeitrag erhält neben einem Pokal einen Gutschein für wissenschaftliche Geräte von Knauer im Wert von zwanzigtausend Euro.

Quelle: KNAUER

Ausschreibung

Fachgruppenpreis Analytische Chemie

Preis für junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in der analytischen Chemie

Die Fachgruppe Analytische Chemie der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) verleiht in der Regel alle zwei Jahre im Rahmen der ANAKON den Fachgruppenpreis Analytische Chemie, um den wissenschaftlichen Nachwuchs zu würdigen, zu fördern und zu motivieren. Ausgezeichnet werden herausragende und selbstständige wissenschaftliche Leistungen engagierter und begabter Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler im Bereich analytische

Chemie – nachgewiesen durch Veröffentlichungen in analytischen Zeitschriften, Beiträgen auf analytischen Konferenzen und Auszeichnungen.

Die Auszeichnung ist verbunden mit einer Verleihungsurkunde, einem Preisgeld in Höhe von 2000 Euro und einer Einladung zur nächsten ANAKON, die nach pandemiebedingten Verschiebungen für den Zeitraum 11. bis 14. April 2023 in Wien geplant ist. Im Anschluss an die feierliche Verleihung erhält die Preisträgerin oder der Preisträger die Gelegenheit, die prämierten Forschungsarbeiten in Form eines Kurzvortrags vorzustellen. Über die Preisvergabe entscheidet der Fachgruppenvorstand.

Kriterien für die Auswahl sind herausragende wissenschaftliche Leistungen in der analytischen Chemie während der Promotion und in weiterführender Forschung (Postdoc-Tätigkeit in Hochschule, Forschungseinrichtung oder Industrie) und ein zügiger Studienabschluss. Positiv

bewertet werden zudem Wechsel des Forschungsthemas und des Arbeitsumfelds (z.B. Auslandsaufenthalt). Vorschlagsberechtigt sind alle Mitglieder der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie. Auch Eigennominierungen sind möglich. Alle Vorschläge enthalten die folgenden Unterlagen:

- Würdigung/Begründung (maximal 2 Seiten)
- Kurzer Lebenslauf
- Kopien des Master- und Promotionszeugnisses (inkl. Noten)
- Publikationsliste (Publikationen/Patente)
- Liste etwaiger Auszeichnungen, Preise und Drittmittelwerbungen

Einreichungsfrist: **31. Oktober 2022**

Bitte reichen Sie Ihren Vorschlag ausschließlich über das neue Online-Formular ein.

<https://www.gdch.de/netzwerk-strukturen/fachstrukturen/analytische-chemie/preise-ehrungen/fachgruppenpreis/online-einreichung.html>

Personalia

Geburtstage

Wir gratulieren unseren Mitgliedern, die im vierten Quartal 2022 einen runden Geburtstag feiern und wünschen alles Gute:

Zum 60. Geburtstag

Günter Trettenhahn, Wien, Österreich
Christian Zwiener, Tübingen
Jürgen Ebert, Wädenswil, Schweiz
Andreas Mattulat, Berlin
Frank Eberhardt, Bremen
Peter Lemannzick, Bochum
Gabriela Bach, Muttenz, Schweiz
Joachim Kuß, Rostock

Zum 65. Geburtstag

Petra Zink, Güstrow
Joachim Lutz, Basel, Schweiz
Michael Weis, Schmalkalden
Norbert Konradt, Düsseldorf
Claus Weisemann, Alameda, USA
Werner Lenhart, Herdecke
Klaus Günther, Jülich
Hartmut Kutzke, Oslo, Norwegen
Hans-Dieter Projahn, Reinheim
Jutta Pauli, Berlin

Zum 70. Geburtstag

Jürgen Peters, Mainz
Hans Gaier, Felde
Horst Moses, Duisburg
Jürgen Knöller, Neuss

Zum 75. Geburtstag

Helmuth Morgenthaler, Ludwigshafen
Walter Fürst, München

Zum 80. Geburtstag

Horst Böhme, Berlin
George M. Sheldrick, Göttingen

Zum 85. Geburtstag

Peter G. Laubereau, Wiesbaden

Aus datenschutzrechtlichen Gründen weisen wir Sie darauf hin, dass Sie sich beim GDCh-Mitgliederservice unter ms@gdch.de melden können, wenn Sie nicht wünschen, dass Ihr Name im Rahmen der Geburtstagsliste veröffentlicht wird.

Zum Tode von Maria C. Moreno Bondi (1964 – 2022)

■ Im Jahr 1989 fand ich auf meinem Schreibtisch einen Brief mit schöner Briefmarke und – wie damals bei Überseebriefen üblich – einem blauen Luftpostaufkleber. Ich war neugierig, wer mir wohl schreiben würde, denn ich hatte keine Kontakte zur absendenden Organisation, dem Oak Ridge National Laboratory in Tennessee. Es stellte sich heraus, dass eine Studentin aus Madrid, die gerade in den USA war, sich im Rahmen ihrer Doktorarbeit für unsere Arbeiten mit optischen Biosensoren interessierte. Angesichts ihrer Qualifikation war es kein Problem, sie für vier Monate in unserem Labor zu beschäftigen. Wir stellten ein Arbeitsprogramm zusammen, das sie mit großem Fleiß und viel Ideenreichtum durchzog. In Erinnerung ist mir zudem geblieben, dass Maria von der Enge in unserem Labor, aber auch von unserer internen Kommunikationsfreude und den geselligen gemeinsamen Abenden in Kneipen überrascht war.

Ihre Forschung resultierte im ersten enzymatischen Glucosesensor auf der Grundlage von lumineszierenden sauerstofflöslichen Metall-Liganden-Komplexen, der in ähnlicher Form auch heute noch industriell hergestellt wird. Maria promovierte im Jahr darauf in Madrid, heiratete ihren Mann Guillermo (Willy) Orellana, bekam eine Stelle an der Complutense-Universität und wurde Mutter einer reizenden Tochter. Sie machte bald Karriere und war zuletzt Chair des Departments Analytical Chemistry.

Neben der Lehre in analytischer Chemie, für die sie ein besonderes Talent hatte und die ihr ein wichtiges Anliegen war, widmete sie sich mehreren Forschungsthemen. Waren es anfänglich faseroptische Sensoren, wendete sie sich zunehmend mehr praktischen Anwendungen zu: von neuen Methoden der klinischen Analyse bis zur Untersuchung von Lebensmitteln (z. B. der Bestimmung von Mykotoxinen und Antibiotika) und von Umweltpro-



Maria C. Moreno Bondi

ben. Dazu setzte sie in späteren Jahren oft molekulare Imprints ein, zuletzt auch Nanomaterialien in Kombination mit immunologischen Detektionsverfahren. Sie war begehrte Partnerin in EU-Projekten und erfolgreiche Einwerberin von Drittmitteln auf spanischer und europäischer Ebene.

Neben ihren Hauptaufgaben in Lehre und Forschung fand sie auch Zeit für eine Tätigkeit als Präsidentin der spanischen Society of Applied Spectroscopy und – zusammen mit ihrem Mann – in der „Chemical Optosensors and Applied Photochemistry Group“. Angesichts ihres wachsenden Bekanntheitsgrades war es kein Wunder, dass sie bald in verschiedenen internationalen Gremien und Komitees sichtbar wurde. Mit ihrem Mann wurde ihr die Organisation der 7. Konferenz über optische Sensoren, Eurotrode 2006, anvertraut. Ihr Talent für die Lehre bewies sie besonders eindrucksvoll bei der Organisation der 7. Sommerschule (ASCOS; Advanced Study Course on Optical Sensors): Mit einem gelungenen Programm bot sie den Studierenden einen durch Experten und Expertinnen vermittelten Zugang zur optischen chemischen und biochemischen Sensorik und gleichzeitig einen wunderbaren Aufenthalt in Madrid. Wer Maria persönlich kannte, weiß, dass sie eine hochmotivierte

akademische Lehrerin war, die gelegentlich streng sein konnte, dies aber immer im besten Sinne für die ihr Anvertrauten.

Maria war viele Jahre lang eine der großen Stützen des Journals *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. Dort widmete sie sich besonders den Aspekten der Sensorik, der Lebensmittelanalytik und der Anwendung neuer Materialien einschließlich molekularer Imprints. Ihre Forschung war hoch interdisziplinär und reichte von der analytischen Biochemie bis zu den Materialwissenschaften und der analytischen Fluoreszenzspektroskopie. Zuletzt publizierte sie (mit anderen) auch Beiträge über gesellschaftsrelevante Themen, etwa über die Förderung weiblicher Wissenschaftlerinnen, über Nachhaltigkeitsaspekte der analytischen Chemie und darüber, wie Nachwuchswissenschaftler:innen am Anfang ihrer Karriere ihre beruflichen Chancen verbessern können.

Vor einigen Jahren erkrankte sie ernstlich, war aber schon lange wieder auf dem Weg der Besserung. Mit den schweren Folgen einer Coronavirusinfektion hatte niemand gerechnet. Sie hinterlässt ihren Mann, ihre Tochter und eine große Gruppe von Freunden auf der ganzen Welt. Wir werden sie, ihren Einsatz in der analytischen Szene und ihre liebenswerte Art sehr vermissen.

Otto Wolfbeis

GDCh-Fortbildungen

Detaillierte Informationen finden Sie auf <https://gdch.academy>

Zögern Sie nicht, uns bei Fragen zu kontaktieren: academy@gdch.de, Tel.: 069 7917-364

27. – 28. Oktober 2022, online

Intensivkurs Marketing für Chemiker, Kurs einzeln oder als Fachprogramm Geprüfter Wirtschaftskemiker GDCh (m/w/d) buchbar (Kurs 962/22)

Leitung: Prof. Dr. Stefanie Bröring

2. November – 6. Dezember 2022, online

Einführung in die Betriebswirtschaftslehre für Chemiker (m/w/d), Optionaler Vorbereitungskurs zum Geprüften Wirtschaftskemiker GDCh 2023 (m/w/d) (Kurs 900/22)

Leitung: Prof. Dr. Uwe Kehrel

7. – 8. November 2022, Frankfurt am Main und online

Organisation, Personal- und Projektmanagement, Kurs einzeln oder als Fachprogramm Geprüfter Wirtschaftskemiker GDCh (m/w/d) buchbar (Kurs 880/22)

Leitung: Prof. Dr. Uwe Kehrel

10. – 11. November 2022, online

Störungs- und Notfallmanagement: Business Continuity Management (BCM) vor dem Hintergrund von Altlasten und Schadensanierung, Kurs einzeln oder als Fachprogramm Geprüfter Notfallmanager GDCh (m/w/d) buchbar (Kurs 912/22)

Leitung: Dr. Bernd Herber

21. – 22. November 2022, Frankfurt am Main

GMP-Intensivtraining: Hintergründe und Essentials der GMP (Gute Herstellungspraxis) auf deutscher, europäischer und amerikanischer Ebene – mit Praxisteil, Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP GDCh (m/w/d) (Kurs 535/22)

Leitung: Dipl.-Ing. Jürgen Ortlepp

23. November 2022, Frankfurt am Main und online

Methodenvalidierungen in der analytischen Chemie unter Berücksichtigung verschiedener QS-Systeme, Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP GDCh (m/w/d) (Kurs 533/22)

Leitung: Dr.-Ing. Barbara Pohl

24. – 25. November 2022, Frankfurt am Main

Qualitätsmanagement im analytischen Labor, Richtlinienkonformität und Kompetenzerhalt: technische Grundlagen qualitätsgerechter Laborarbeit (gemeinsam veranstaltet mit EUROLAB-Deutschland) (Kurs 517/22)

Leitung: Dr. Michael Koch

29. – 30. November 2022, Frankfurt am Main

Störungs- und Notfallmanagement: Umweltschutz, Kurs einzeln oder als Fachprogramm Geprüfter Notfallmanager GDCh (m/w/d) buchbar (Kurs 913/22)

Leitung: Dr. Bernd Herber

<p>LEBENSWERKE IN DER CHEMIE NEU</p> 	 <p>REAKTIONEN: „Um es gleich vorweg zu nehmen – dieses Buch ist ein Pageturner“ M. Schnell, Angew. Chem. l-i-c.org/reviews</p>	 <p>AWARD: Die Buchreihe wurde von der Stiftung Buchkunst ausgezeichnet. l-i-c.org/awards</p>	 <p>BIOCHEMIE: <u>Dieter Oesterhelt/Mathias Grote:</u> Leben mit Licht und Farbe: Ein biochemisches Gespräch <u>Stephen B. H. Kent:</u> Inventing Synthetic Methods to Discover How Enzymes Work</p>	 <p>FACHGRUPPE GESCHICHTE DER CHEMIE</p> <p>twitter.com/livesinchem</p> <p>HIER BESTELLEN: l-i-c.org/order L-I-C.ORG</p>
--	---	--	--	---

EINTRITT FREI



22. Frankfurter Jobbörse

für Naturwissenschaftler:innen

WORKSHOPTAG Mittwoch, 2. November 2022
MESSETAG Donnerstag, 3. November 2022

Mittwoch Workshoptag
Ideal vorbereitet! Kostenlose
Bewerbungsmappenchecks,
Workshops und Trainings.

Donnerstag Messetag
Sprich am Messestand mit
Personalverantwortlichen &
Young Professionals über
Praktika, Abschlussarbeit,
Trainee oder Direkteinstieg.

Goethe-Universität Frankfurt, Campus Riedberg

jeweils von 09:30 bis 16:30 Uhr

- Abbott • agap2 • ALTANA AG
- Procter & Gamble • Evonik • Bachem AG
- Preyer GmbH • Sanofi-Aventis Deutschland GmbH
- Blue Mind Consulting • Boehringer Ingelheim
- BioSpring GmbH • EUROAPI Germany GmbH
- InfectoPharm Arzneimittel und Consilium GmbH
- Umicore AG & Co. KG • VBIO e.V. • GDCh e.V.

kostenlose Bewerbungsfotos am Messetag

PROGRAMM UND WEITERE INFORMATIONEN UNTER www.jobboerse-fm.de



Unterstützt durch:





GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Fachgruppe Analytische Chemie

Die Stimme der analytischen Chemie



Die GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie hat 2400 Mitglieder und ist seit ihrer Gründung im Jahr 1951 die Vertretung der analytischen Chemie in Deutschland. Sie vernetzt Hochschulen, Ausbildungseinrichtungen, Behörden, Industrie, Gerätehersteller und selbstständige Laboratorien sowie Medien. Sie gibt der

analytischen Chemie in Wissenschaft, Wirtschaft, Politik und Öffentlichkeit eine starke Stimme und fördert die Ausbildung in analytischer Chemie. Intensive sachbezogene Arbeit wird in den neun Arbeitskreisen und im Industrieforum Analytik geleistet.

AUSTAUSCH & INFORMATION

- **Mitteilungsblatt.** Die vier Ausgaben pro Jahr werden in gedruckter Form an alle Mitglieder versandt; die elektronische Form ist über die Webseite zugänglich. Ein Sonderheft pro Jahr behandelt gesellschaftlich relevante Themen wie Analytik um Corona (2020) und Umweltanalytik (2021).
- **LinkedIn-Gruppe.** Analytik-News, Veranstaltungsankündigungen und vieles mehr.
- **Analytical & Bioanalytical Chemistry (ABC).** Besondere Unterstützung und Einsatz für den Erfolg der Zeitschrift, an dem die Fachgruppe finanziell beteiligt ist. Mitglieder haben kostenlosen Zugang zur Online-Version.

PREISE & EHRUNGEN

- **Studienpreise** (jahrgangsbeste BSc- und MSc-Arbeiten)
- **Fachgruppenpreis** (wissenschaftlicher Nachwuchs)
- **Fresenius Lectureship** (renommierte Hochschullehrer:innen)
- **Clemens-Winkler-Medaille** (Lebenswerk)
- **Fresenius-Preis** (GDCh-Preis; besondere Verdienste um die analytische Chemie; die Fachgruppe ist in der Auswahlkommission vertreten)
- **Preise der Arbeitskreise**

STIPENDIENPROGRAMM & MEHR

- **Allgemeine Tagungsstipendien**
- **Publikationsstipendium ABC**
- **Spezialstipendien**
- **Exkursionen**

GDCh-Geschäftsstelle

Dr. Carina S. Kniep

Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V.

Varrentrapstraße 40-42

60486 Frankfurt am Main

Telefon: +49 (0)69 7917-499

E-Mail: c.kniep@gdch.de



TAGUNGEN & VERANSTALTUNGEN

- **ANAKON.** Die zentrale wissenschaftliche Tagung der Fachgruppe, ausgerichtet alle zwei Jahre gemeinsam mit den österreichischen und schweizerischen Partnergesellschaften.
- **analytica conference.** Mitorganisation der in geraden Jahren im Rahmen der Messe analytica stattfindenden Fachkonferenz.
- **Junganalytiker:innen-Treffen.** Jährliche Vernetzungstreffen.
- **Frühjahrsschule Industrielle Analytische Chemie.** Blockveranstaltung für MSc-Studierende, veranstaltet durch das Industrieforum Analytik gemeinsam mit Hochschulen.
- **Doktorandenseminare.** In der Regel vier Seminare pro Jahr, ausgerichtet durch die Arbeitskreise
 - DAAS
 - Elektrochemische Analysenmethoden
 - Prozessanalytik, Chemometrik & Qualitätssicherung, Chemo- & Biosensoren
 - Separation Science

KOOPERATIONEN

- Benachbarte GDCh-Fachgruppen
- Nationale chemische Gesellschaften in Europa
- Division of Analytical Chemistry (DAC) der European Chemical Society (EuChemS)

MITGLIEDSCHAFT

- Die Mitgliedschaft in der Fachgruppe setzt eine gültige GDCh-Mitgliedschaft voraus.
- Der Jahresbeitrag für die Mitgliedschaft in der Fachgruppe beträgt für GDCh-Mitglieder 15 Euro. **Die Mitgliedschaft für Studierende (bis Abschluss der Promotion) ist kostenlos!**
- Alle Fachgruppen-Mitglieder sind herzlich eingeladen zur Mitarbeit in den Arbeitskreisen. **Die Mitgliedschaft ist kostenlos.**
- Informationen zur Mitgliedschaft und Online-Formulare: www.gdch.de/mitgliedschaft

VORSTAND DER FACHGRUPPE

Prof. Dr. Carolin Huhn (Vorsitz), Eberhard Karls Universität Tübingen

Dr. Michael Arlt (stellv. Vorsitz), Merck KGaA, Darmstadt

Dr. Martin Wende (stellv. Vorsitz), BASF SE, Ludwigshafen

Dr. Jens Fangmeyer, Currenta GmbH & Co. OHG, Leverkusen

Prof. Dr. Uwe Karst, Westfälische Wilhelms-Universität Münster

Dr. Björn Meermann, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berlin

Prof. Dr. Tom van de Goor, Agilent Technologies, Waldbronn/Philipps-Universität Marburg

Dr. Maria Viehoff, Merck KGaA, Darmstadt

www.gdch.de/analytischechemie