



AG Stabilisotopenanalytik Jahresbericht 2016

Obfrau: Dr. Antje Schellenberg, Oberschleißheim

Die Arbeitsgruppe Stabilisotopenanalytik hatte 2016 einen Mitgliederstand von 14 aktiven und 18 korrespondierenden Mitgliedern. Im Berichtsjahr 2016 und den Sitzungen der Arbeitsgruppe, die gemäß eines gemeinsamen Beschlusses von 2014 zwei Mal im Jahr am 3.5.16 und am 30.11.16 stattfanden, wurden folgende Schwerpunktthemen diskutiert und bearbeitet:

Neuwahlen Obfrau, Stellvertreter, Schriftführer. Im November 2016 fanden die im regulären Turnus anstehenden Wahlen der AG-Leitung statt, bei der der bisherige Obmann, Prof. Dr. Philipp Weller durch seinen anstehenden Wechsel als Obmann der neuen AG Chemometrie und multivariate Datenauswertung sein Amt an die Nachfolgerin übergab.

Es wurde einstimmig als neue AG-Leitung für den Zeitraum 2017–2019 gewählt: Obfrau: Frau Dr. Antje Schellenberg, LGL; Stellvertreter: Herr Dr. Wolfgang Armbruster, Universität Hohenheim; Schriftführer: Herr Dr. Johannes Kiefl, Symrise AG

Weiterführung regelmäßiger „kleiner“ Proficiency Tests: Die im Jahr 2012 begonnenen „Kleinen Proficiency Tests“ (KPTs) waren auch 2016 ein wichtiges Thema der Diskussionen innerhalb der AG. Die KPTs sollen langfristig zur Verbesserung der Vergleichbarkeit der Isotopenmessungen dienen. Sie werden kostenfrei durchgeführt und die Mitwirkung ist jederzeit freiwillig; derzeit beteiligen sich 10 Labore an den KPTs. Den teilnehmenden Laboren wurden in fünf Runden jeweils drei bis fünf unterschiedliche Proben zur Analyse verschickt. Seit 2014 werden regelmäßig die δ -Werte eines Ca-seins bestimmt, das als zukünftiger Arbeitsstandard für die Multielement-Isotopenanalyse dienen und ein bisher verwendetes Casein (Roßmann-Casein) ersetzen soll.

Status Aufbau einer gemeinsamen Methodensammlung für zukünftige Empfehlungen: Die 2015 beschlossene Durchführung einer AG-internen LVU an Vollmilch wurde von insgesamt 7 Teilnehmern durchgeführt und in der zweiten Jahreshälfte 2016 abgeschlossen. Es zeigten sich zum Teil signifikant abweichende Ergebnisse für bestimmte Elemente und Fraktionen, was unter anderem auf unterschiedliche Probenvorbereitungsarten zurückgeführt wurde. Dies zeigte sehr deutlich, wie wichtig die Erarbeitung gemeinsamer Standards ist, daher wurde eine Fortführung des Milch-Projekts beschlossen.

Eine weiterführende LVU, mit dem Ziel eine gemeinsame und einheitliche Methode für die Gewinnung der Proteinfraction aus Milch zu etablieren, wird für 2017 geplant.

Weiterhin wurde beschlossen, eine vergleichbare LVU für die $\delta^{13}\text{C}$ -Werte von Vanillin in komplexen Matrices durchzuführen, hierbei aber in Zusammenarbeit mit der AG Aromen. Kooperation mit AG Aromastoffe für LVU Vanillin: In Zusammenarbeit mit der AG Aromastoffe ist für 2017 geplant, eine LVU zur Bestimmung der $\delta^{13}\text{C}$ -Werte von Aromakomponenten in gemahlene Vanilleschoten durchzuführen. Anlass hierfür war unter anderem auch die Problematik der Bewertung der Aromakomponente Piperonal. Die Aufarbeitungsmethode soll hierbei freigestellt werden. Grundsätzlich hat sich bei anderen LVUs zwar gezeigt, dass die Aufarbeitungsmethode erhebliche Einflüsse auf die Isotopenwerte haben kann (siehe LVU Milch), allerdings konnte 2009/2010 in einer LVU von Vanillin in Milch und Speiseeis gezeigt werden, dass die Ergebnisse trotz unterschiedlicher Aufarbeitungen sehr gut vergleichbar waren. Dies ist insbesondere deswegen von Interesse, weil die interessierten Labore keine

einheitliche Laborausstattung aufweisen, was wohl im Regelfall auch der Realität bei Ringversuchen mit größeren Kohorten entspricht.

Food Fraud, Herkunfts- und Authentizitätsanalytik als wichtige Themen 2016: Die Nachfrage nach authentischen Lebensmitteln aus definierter Herkunft ist nach wie vor groß mit stark steigender Tendenz. Ein Indikator hierfür ist auch die Nachfrage nach neuen, differenzierteren Analysetechniken, die diese Fragen beantworten können. Dies zeigte sich auch sehr deutlich an der großen Teilnehmerzahl der Regionaltagung Südwest 2016. Im Rahmen der Tagung des Regionalverbands Südwest der Lebensmittelchemischen Gesellschaft fand im März 2016 am CVUA Freiburg ein Workshop „Herkunft und Echtheit“ statt. Neben zahlreichen neuen Ansätzen war auch das Thema Stabilisotopenanalytik mit mehreren Beiträgen vertreten. Die sehr große Resonanz am Workshop bestätigte die hohe Relevanz und Aktualität des Themas.

Auf dem Lebensmittelchemikertag in Freising waren Verfahren zur Authentifizierung von Lebensmitteln ebenfalls ein wichtiges Thema, auch hier waren mehrere Beiträge zur Anwendung von Isotopenverfahren vertreten.

Es wurde darüber hinaus diskutiert, dass gemäß der Legaldefinition für „Risiko“ allein der Gesundheitsschutz ausschlaggebend für die risikoorientierte Probenauswahl im Rahmen der Lebensmittelüberwachung ist. Demnach ist die risikoorientierte Probenplanung für die Aufdeckung von Food Fraud nicht anwendbar. Die Gelegenheit auch Proben, für die ein hohes Potential zum Betrug besteht, risikoorientiert zu beproben, sollte geschaffen werden. Zu diesem Thema erfolgte ein Beitrag in der ZLR 2016, Heft 6.

Chemometrische Verfahren in der Isotopenanalytik und Vorstellung von geeigneten Softwarepaketen auf Opensource-Basis: Chemometrische Verfahren gewinnen zunehmend an Stellenwert in der Analytik und helfen, aus komplexen Datensätzen wichtige Informationen zu extrahieren. In der Isotopenanalyse werden grundsätzlich bereits einfachere, multivariate Techniken eingesetzt, jedoch mangelt es in der Breite an einer einheitlichen Herangehensweise. Hierbei könnten kostenlose Opensource-Pakete helfen, auf deren Basis standardisierte Verfahren zur Auswertung und Bewertung definiert werden können, die dann von der Community herangezogen werden könnten.

Hierzu wurden zwei Pakete auf Basis der Software R besprochen, die für die Fragestellungen in der Isotopenanalytik ausreichend Funktionalität bieten. In weiteren Schritten soll die Evaluierung eines oder beider Softwaretools erfolgen im Hinblick auf Flexibilität, Anwenderfreundlichkeit, Standardisierbarkeit und auch der Aspekt einer notwendigen Validierbarkeit sollte hier überprüft werden.

Um zukünftig von Weiterentwicklungen zu profitieren ist eine Zusammenarbeit mit der neu entstehenden AG Chemometrie und multivariate Datenauswertung angedacht.