



GDCh

Gesellschaft
Deutscher Chemiker

Fachgruppe
Analytische Chemie

Neue Impfstoffe mit BioCopy

Analytica zum 1. Mal virtuell

Nachruf Klaus Unger

Mitteilungsblatt
4/2020





GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER



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

Vorsitz 2017-2020
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 2017-2020
Prof. Dr. Iris Oppel
Aachen
iris.oppel@ac.rwth-aachen.de

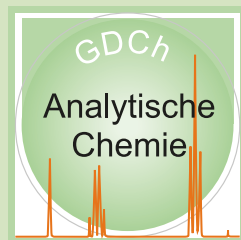
**Arbeitskreis
Chemometrik &
Qualitätssicherung**

Vorsitz 2020-2023
noch nicht konstituiert

**Arbeitskreis
Chemo- & Biosensoren**

Vorsitz 2017-2020
Dr. Michael Steinwand
Owingen
msteinwand@innovendia.de

**Fachgruppe
Analytische Chemie**



Vorstand 2020-2023

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

Stellvertretender Vorsitz
Dr. Michael Artl
Darmstadt

Dr. Martin Wende
Ludwigshafen

Beisitz
Jens Fangmeyer
Münster

Dr. Heike Gleisner
Jena

Prof. Dr. Uwe Karst
Münster

Dr. Maria Viehoff
Darmstadt

Prof. Dr. Carla Vogt
Freiburg

**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 2017-2020
Prof. Dr. Christoph Herwig
Wien
ak-prozessanalytik@gdch.de

**Arbeitskreis
Separation Science**

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

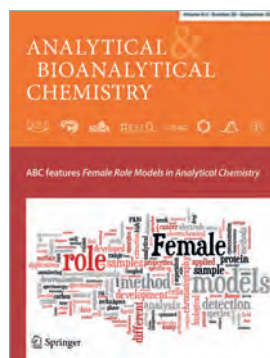
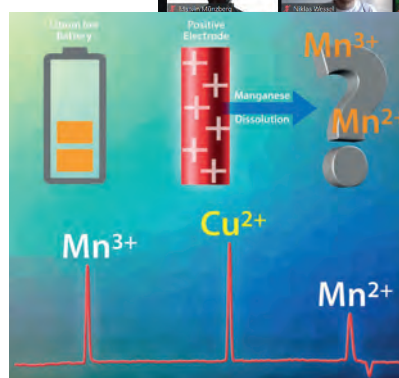
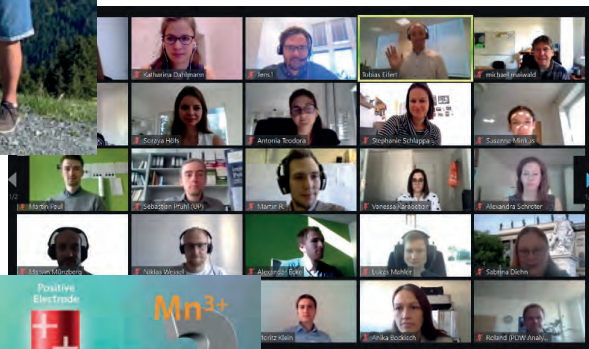
Industrieforum Analytik

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

Mitglieder

Inhalt 4/2020

Editorial	4
Aus den Arbeitskreisen	5
Analytik in Deutschland	
Impfstoffentwicklung mit BioCopy	6
Chemie Aktuell	
Statistik der Chemiestudiengänge	9
Chirale Analyse mit Fluor	10
Neue Messmethoden für 50 Chemikalien	11
Analyse von Lithium-Ionen-Batterien	11
Smarter Rührstab	12
Medien	
ABC in Kürze	13
Jahrgangsbeste 2019 und 2020	14
analytica virtual 2020	
Abschlussbericht	20
Session: Non-Target-Screening	21
Session: Bioanalytics II	23
Session: Analytical Toxicology	24
Session: Pushing the Limits of Separations	26
Tagungen und Fortbildungen	
Programmieren und Laborroboter bauen	27
CE-Forum	29
Interdisziplinäres Doktorandenseminar	30
Preise & Stipendien	
ABC-Publikationsstipendium	31
Sofja-Kovalevskaja-Preis	32
Ausschreibungen	33
Personalia	
Zum Tode von Klaus K. Unger	34
80. Geburtstag von Klaus G. Heumann	35
70. Geburtstag von Renate Kiessling	37
Geburtstage	38
GDCh-Fortbildungen	39
Impressum	34



Editorial

Liebe Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie,

was für ein Jahr! Corona verschiebt unseren Alltag ins Virtuelle. Mit den aktuell steigenden Fallzahlen wird dies immer notwendiger, um unseren sozialen Ansprüchen gerecht zu werden.

Für uns Fachgruppenmitglieder fallen zusätzlich noch die zuverlässigen Foren zum Austausch und Netzwerken weg – so wie kürzlich die analytica Messe und conference in München. Zum Glück wurde eine gute Alternative gefunden: Virtuelle wissenschaftliche Vorträge, sogar mit Wiederholterminen, und eine virtuelle Plattform zum Austausch mit Ausstellern brachten einen Teil der Atmosphäre an unsere Schreibtische. Trotzdem fehlte doch das persönliche, nicht geplante Gespräch, die Plattform, die zu unerwarteten Kooperationen führt, kritische Fragen, die Forschung vorantreiben können!

Schauen wir auf das Corona-Jahr 2020 aus der Sicht von Junganalytikern zurück.

Bis Mitte März konnten die üblichen Veranstaltungen wie das Doktorandenseminar in Hohenroda im 10. Jahr stattfinden. Auch die vom IndustrieForum organisierte Frühjahrschule Industrielle Analytische Chemie wurde unmittelbar vor dem ersten Lockdown in Aalen erfolgreich durchgeführt, und nur wenige Referenten stiegen auf einen virtuellen Vortrag über gängige Kommunikationsplattformen um. Wie in den letzten Jahren war es Masterstudenten mit dem Schwerpunkt analytische Chemie so möglich, sich einen umfassenden Überblick über die Bandbreite analytischer Methoden zu verschaffen, wie sie in der Industrie angewendet werden – und das aus erster Hand. Über zwei Wochen berichteten Referenten aus der chemisch-pharmazeutischen und aus der Branche der Gerätehersteller über Methodik, Prozessanalytik, Qualitätssicherung und -management sowie über unterneh-



Maria Viehoff



Jens Fangmeyer

merisches Handeln, soziale Kompetenzen und erfolgreiches Bewerben bei Industriefirmen. 31 Teilnehmer von insgesamt 10 Universitäten und Hochschulen fanden sich zusammen – ein Grundstein für einen stetigen Austausch auch im zukünftigen wissenschaftlichen Bereich.

Doch schon bald mussten schnelle Alternativen her. Wie in der letzten Ausgabe des Mitteilungsblatts zu lesen war, wurden Vorlesungen, ja sogar Praktika virtuell bewältigt. Eine Konferenz nach der anderen wurde abgesagt oder verschoben, Promotionsverteidigungen ohne Feier durchgeführt, Dienstreisen untersagt. Auch das Junganalytikertreffen zur analytica konnte nicht stattfinden.

Für Absolventinnen und Absolventen fehlte in diesem Jahr jeglicher Kontakt zu möglichen Arbeitgebern. Keine Vorträge vor einem wissenschaftlichen Publikum, keine Gespräche nach Vorträgen über die eigene Forschung und dadurch das Kennenlernen von Unternehmen oder Forschungseinrichtungen, die einen für die Zukunft interessieren würden.

Junge Berufstätige konnten sich zwar auf den Austausch mit den Kollegen innerhalb des eigenen Unternehmens oder der eigenen Forschungseinrichtungen verlassen, allerdings war man auf diese Ebene beschränkt. Vortragsreihen ermöglichen Wissensaneignung, eine virtuelle Veranstaltung lässt aber selten eine wirkliche Diskussion zu.

Und dennoch: Die Akzeptanz virtueller Veranstaltungen und die Um-

setzung durch kreative Köpfe erschufen auch in diesem Jahr Highlights. Im September beispielsweise veranstalteten die Arbeitskreise Prozessanalytik, Chemo- und Biosensoren und Chemometrik sehr erfolgreich ihr Interdisziplinäres Doktorandenseminar mit mehr als 30 virtuellen Teilnehmenden (siehe Seite 30) und veröffentlichten die besten Bilder sogar bei YouTube. Nach einer so gelungenen Veranstaltung wird klar: Es lohnt sich, die Initiative zu ergreifen. Und auch in Zukunft können wir damit rechnen, dass uns die eine oder andere Veranstaltung vielleicht doch auch virtuell überzeugt.

Einen Teil dazu beitragen möchten wir durch den neuen LinkedIn-Account der FG Analytische Chemie: <https://www.linkedin.com/company/fachgruppe-analytische-chemie-der-gdch>. Hier sollen nicht nur Veranstaltungen angekündigt und resümiert werden, sondern auch analytische Inhalte geteilt und kommentiert werden. Wir freuen uns über Ihren Input mit Themenvorschlägen und über Ihren Beitrag als Follower.

Einigen Berufseinsteigern haben wir kürzlich die Möglichkeit gegeben, ihr Netzwerk zu erweitern, indem sie in einem persönlichen Gespräch mit jungen Berufstätigen Fragen zum Berufseinstieg, zum Arbeitgeber und zu Erfahrungen anderer stellen konnten. Eine Wiederholung ist nicht ausgeschlossen. Und auch ein virtuelles Mentoring ist in Planung.

Also: Behalten Sie Ihre Mails im Auge und helfen Sie mit, unser Netzwerk lebendig zu halten!

Einen schönen Jahresausklang wünschen

Maria Viehoff und Jens Fangmeyer

Neues vom Industrieforum Analytische Chemie

■ Das Industrieforum ist kein Arbeitskreis der Fachgruppe im herkömmlichen Sinn: Seine Rolle ist eher die einer Austauschplattform oder manchmal auch die eines Sparringspartners für neue Ideen und Konzepte des Vorstands und der Arbeitskreise der Fachgruppe. Seine zentrale Aufgabe ist es, die Verbindung der Fachgruppe zu den Analytiker-Communities in den chemisch-pharmazeutischen Unternehmen, bei den Geräteherstellern und der Analytikdienstleistungsindustrie herzustellen und übergreifende Themen gemeinsam zu diskutieren.

Aus der engen Zusammenarbeit mit dem Vorstand der Fachgruppe sind in den letzten 15 Jahren eine Reihe von Veranstaltungen und Aktivitäten erwachsen, die teilweise Modellcharakter für die Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses haben und um die uns andere Fachgruppen der GDCh und berufsständische Organisationen im In- und Ausland anerkennend beneiden.

Eines der wichtigsten gemeinsamen Projekte der Fachgruppe zur Nachwuchsförderung ist die zweiwöchige Frühjahrsschule Industrielle Analytische Chemie: Ein Ziel ist es, ausgewählten Studierenden während ihres Master-Programms Themen aus dem beruflichen Aufgabenspektrum eines Analytikers in der Industrie nahezubringen, die in der regulären akademischen Ausbildung oft zu kurz kommen. Die Auswahl der Teilnehmenden erfolgt ausschließlich auf Vorschlag und Empfehlung der betreuenden Hochschullehrenden.

Die Vortrags- und Seminarthemen umfassen Beispiele aus den industriellen Anwendungen der analytischen Chemie wie Polymeranalytik, Qualitätsmanagement, Produktsicherheit, Bioanalytik, Oberflächenanalytik und Elektronenmikroskopie, physikochemische Charakterisierung, Prozessanalytik und hochauflösende

anorganische Elementanalytik im industriellen Kontext. Darüber hinaus gibt es Seminare zum Einstieg in die Arbeitswelt und zur Automatisierung und Vernetzung im Labor. Seit 2020 wird das Referententeam aus der chemisch-pharmazeutischen Industrie ergänzt durch einen Gerätehersteller. In der Regel ergänzen zwei Exkursionen zu Chemie- oder Pharmaunternehmen und Geräteherstellern das intensive Seminarprogramm, mit ausgedehnten Führungen und Gesprächen mit Analytikern im Berufsleben. Am letzten Tag der Frühjahrsschule findet im Regelfall eine Abschlussklausur statt. Erfolgreichen Absolventen eröffnet sich damit die Chance auf ein bezahltes, mehrwöchiges Praktikum in einem der Unternehmen des Industrieforums. Zeitpunkt und Dauer der wissenschaftlichen Praktika wird individuell zwischen Studierenden und Unternehmen vereinbart; im Regelfall dauern sie zwischen drei Wochen und drei Monaten. Diese Forschungspraktika und der damit verbundene tiefere Einblick in die Aufgabenvielfalt eines Analytikers im industriellen Umfeld ermöglichen den Studierenden eine bessere Entscheidung über ihren zukünftigen Berufsweg.

Finanziell getragen wird die Frühjahrsschule durch die FG Analytische Chemie sowie durch direktes Sponsoring und finanzielle Unterstützung (Übernahme aller Referenten- und Praktikumskosten) der beteiligten Industrieunternehmen.

Im Jahr 2020 feierten wir mit der 10. Veranstaltung auch ein kleines Jubiläum. Nach Ulm, Münster, Berlin, Mainz, Regensburg, Tübingen, Duisburg-Essen, Leipzig und Krefeld fand die Frühjahrsschule in ihrem üblichen Format vom 2. bis 13. März an der Hochschule Aalen statt, noch kurz vor den bundesweiten Beschränkungen der Versammlungsmöglichkeiten bedingt durch die globale

Covid-19-Pandemie und den daraus resultierenden epidemiologischen Schutzmaßnahmen.

Die Jubiläumsfrühjahrsschule organisierten Eva-Maria Frühauf (Dow), Michael Arlt (Merck) und Christian Neusüß (HS Aalen) mit großem persönlichem Engagement. Zusätzliches finanzielles Sponsoring erfolgte durch die Firmen BASF, Dow, Merck und Wacker.

Insgesamt 31 Studierende von zehn deutschen Universitäten und Hochschulen trafen sich zu einer Veranstaltung, die durch die beginnenden Corona-Einschränkungen in Deutschland das Organisationsteam vor besondere Herausforderungen stellte. Kurzfristige Umwandlungen von Präsenzveranstaltungen in virtuelle Formate und die Absage von Exkursionen hielten das Organisationskomitee auf den Zehenspitzen. Professionalität und Kreativität des Teams um Professor Neusüß ließen jedoch auch die Jubiläumsfrühjahrsschule zu einem Erfolg werden. Die Abschlussklausur am Freitag der zweiten Woche bestanden alle Studierenden und erreichten damit die Qualifikation für eines der Industriepraktika.

Allerdings entschieden die Industriepartner im Mai gemeinsam, im Jahr 2020 aufgrund der unwägbaren Covid-19-Situation keine Praktika anzubieten. Sie boten allen Teilnehmenden an, die Industriepraktika im Jahr 2021 nachzuholen, sofern es mit der Studienplanung vereinbar ist. Damit haben die Auswirkungen der Covid-19-Pandemie auch die Frühjahrsschule Industrielle Analytische Chemie erreicht.

Nichtsdestotrotz hat das Industrieforum entschieden, auch 2021 eine Frühjahrsschule zu organisieren. Voraussichtlich wird es eine Veranstaltung mit vielen virtuellen Elementen werden; die Planungen dazu sind noch im Gang. Alle Unternehmen haben bereits bei ihrem letzten virtuel-

len Treffen am 3. November 2020 ihre Bereitschaft ausgedrückt, den erfolgreichen Absolventen der Frühjahrschule 2021 einen Praktikumsplatz anzubieten, falls es die dann relevanten Pandemieschutzmaßnahmen erlauben. Das Industrieforum ist der einhelligen Meinung, dass man ein so erfolgreiches Programm der Nachwuchsförderung nicht leichtfertig aussetzen sollte und alle Studienjahrgänge die Chance auf dieses Erlebnis haben sollten.

Mit diesem Silberstreif am Pandemiehorizont wünscht das Industrieforum Analytische Chemie allen Mitgliedern der Fachgruppe, gesund durch diese herausfordernden Zeiten zu kommen.

Joachim Richert, BASF
Sprecher des Industrieforums
Analytische Chemie

Register
for free
newsletters!


www.ChemistryViews.org
News & Information for Scientists


GESELLSCHAFT
DEUTSCHER CHEMIKER


European Chemical
Societies Publishing

Analytik in Deutschland

BioCopy: Biomolekülkopierer für eine schnelle Impfstoffentwicklung und Diagnostik

Vaccine identification – The solution is in our blood

■ Herbst 2020: Die Infektionsspots und Lockdowns der zweiten Corona-Welle sprießen wie Pilze aus dem Boden. Erneut rollt die Pandemie über Europa, das überrascht wie aus einem Sommernachtstraum erwacht. Viele fragen sich: Welche Maßnahmen sind noch sinnvoll? Oder kommen sie eventuell alle schon zu spät? Bis auf die verbesserten Testkapazitäten erscheint das Krisenmanagement weiterhin fehlbar und unser Alltag erneut fremdbestimmt.

Neben immensen organisatorischen Unsicherheiten bleiben viele wissenschaftliche Fragen zur Pandemie ungeklärt, darunter epidemiologische Fragen: Warum gibt es in manchen Regionen niedrigere Todeszahlen und wie verhalten sich diese bei zunehmender Infektionsdynamik? Hat sich das Virus abgeschwächt? Wie wirkt sich die Überlagerung mit der anstehenden Grippewelle aus? Und aufgrund der kürzlich erstmalig auftretenden Fälle von Re-Infektionen: Wie lange bin ich nach einer Infektion wirklich geschützt?

Letzter Punkt leitet zu einem potenziellen zukünftigen Impfstoff über: Was für Konsequenzen können die Re-Infektionen und der genetische Drift (Mutationen) des Virus auf die Wirksamkeit eines „dauerhaften“ Impfstoffs haben?

Im Covid-19-Dschungel

■ Insgesamt entwickelt sich das Feld der Forschung rund um Covid-19 weltweit rasend schnell. Momentan ist aber unklar, welche Immunantworten für einen dauerhaften Impfschutz gebraucht werden und inwieweit welcher Antikörper gegen welches Molekül von Corona schützt oder gar eine Infektion verschlimmert. Im Dschungel der komplexen Immunantwort gegen Covid-19 (Kreuzaktivitäten, neutralisierende

versus nicht-neutralisierende Antikörper, Nebenwirkungen und Länge des Immunschutzes auch bei genetischem Drift des Virus, der mit einem Verlust der Immunität gegenüber dem Virus einhergeht), ist zudem völlig offen, ob eher B- oder T-Zellen eine langanhaltende Immunität ermöglichen.

Was zunächst eher wissenschaftlich klingen mag, besitzt allerdings enorme ökonomische Sprengkraft, denn Impfstoffhersteller laufen potenziell Gefahr, unzureichend oder gar komplett falsch aufgestellt zu sein. Es wird klar, dass wir sehr wahrscheinlich auch in Zukunft weiterhin viele Informationen brauchen, um die Pandemie zu bekämpfen, sowohl auf Seiten der Impfstoffentwicklung als auch der Diagnostik.

BioCopy, ein junges Start-up aus Freiburg, entwickelt eine proprietäre Technologieplattform zur Marktreife, um zukünftig in der Impfstoffentwicklung möglichst breit aufgestellt zu sein. Die Plattform wird dann nicht nur wie bisher überall üblich die sogenannte B-Zell-Antwort, sondern auch die T-Zell-Antwort analysieren – und das auch noch auf einzelne Proteine und Peptide heruntergebrochen. Somit wird sie als Analytik viel umfassender in der Beantwortung einer Immunität oder einer Immunantwort sein als herkömmliche Systeme.

Protein-Pixel

■ Basis der Innovation ist ein Biomolekülkopierer, der vom Grundgedanken her dem Prinzip des Fotokopierens ähnelt – nur dass die Pixel statt aus Farbe aus DNA oder Protein bestehen.

Bei der Impfstoffentwicklung wird die DNA eines Erregers kopiert. Jeder Pixel bildet ein anderes Erregerprotein ab. Ausgangspunkt für das Auffinden eines neuen Impfstoffvorläu-

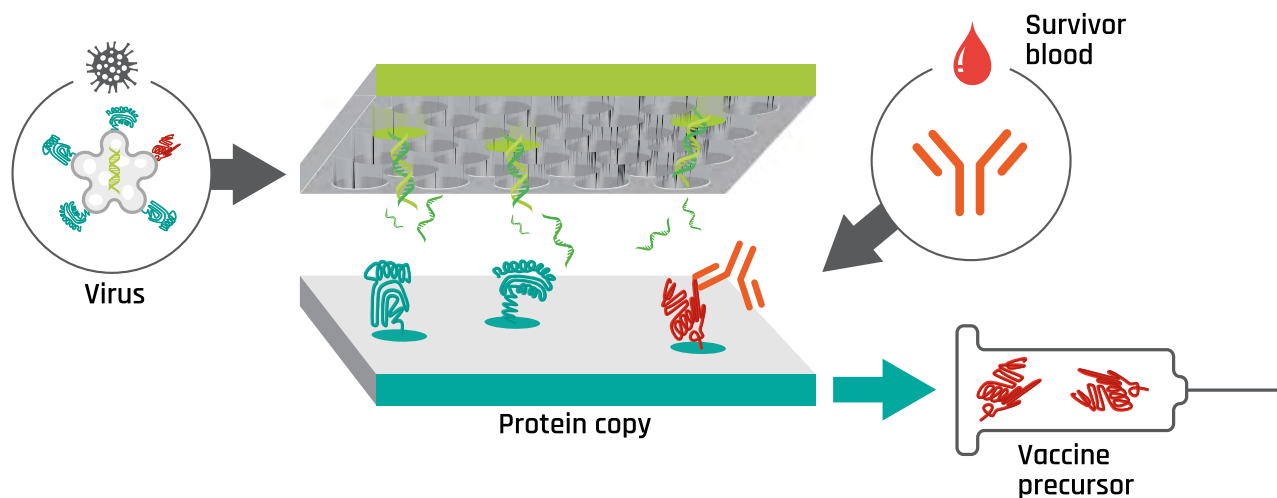


Abb. 1. Workflow bei BioCopy zur Impfstoff-Findung innerhalb von zwei Tagen (eigene Darstellung, Graphik: BioCopy)

fers gegen den Erreger ist immer das Blut eines Menschen, der die Krankheit überlebt hat. Dieses Blut enthält Antikörper von B-Zellen, aber auch T-Zellen, die vor der Krankheit schützen. Protein-Pixel, die mit Blut eine Interaktion zeigen, sind per se wichtig für die erfolgreiche Immunabwehr. Alle reagierenden Protein-Pixel zusammengenommen stellen die Grundlage für den neuen Impfstoff dar. Mutiert oder verändert sich ein Erreger, dann soll es zukünftig schon innerhalb von zwei Tagen möglich sein, diese Veränderungen in der Immunantwort zu identifizieren. Mit diesem zusätzlichen und vertiefenden Wissen lassen sich neue Impfstoffe identifizieren und bestehende biosynthetische Impfstoffe (Peptide / RNA / DNA / Impfvektoren) schnell anpassen und im großen Maßstab zellbasiert oder rekombinant produzieren. Damit kann man sozusagen in Echtzeit auf Veränderungen des Virus reagieren und ist damit mit dem Impfstoff stets auf dem neusten Stand wie die Evolution des Virus.

Eine Frage des Schutzes

Der Kopierer von BioCopy ist auch für viele weitere Anwendungen einsetzbar, etwa in der Diagnostik. Aktueller Anlass sind die Besonderheiten einer Infektion mit Sars-CoV-2. Einerseits hat die Krankheit eine lange Latenzzeit zwischen Ansteckung und Symptomen, in der man höchstwahrscheinlich schon sehr ansteckend ist.

Andererseits verläuft bei vielen die Krankheit nahezu unmerklich. Es hat sich zudem gezeigt, dass die Antikörperantwort teils sehr schwach ausfällt und zudem schnell wieder abfallen kann. Prominentestes Beispiel ist der „Deutsche Patient 0“, bei dem mit klassischen serologischen Tests nach Medienangaben anscheinend keinerlei Antikörper mehr nachweisbar sind. Aber auch die publizierten Reinfektionen sind ein klares Indiz, dass die Immunität wohl nicht von Dauer ist. Daher ist es dringend notwendig nicht wie bisher die Menge an Antikörpern nach einer überstandenen Infektion zu ermitteln, sondern spezifischer vor allem den Nachweis einer Protektivität gegen die Krankheit zu adressieren, also den aktiven Immunschutz einer Testperson. Sowohl Arzt als auch Patient wollen wissen: Ist man nach einer Infektion geschützt?

Für die serologische Detektion von Antikörpern als Reaktion auf überstandene Infektionskrankheiten und bei der Überprüfung des Antikörpertiters nach einer Impfung stehen verschiedene Methoden zur Verfügung. Am häufigsten wird der Antikörpertiter mit der ELISA-Methode (Enzyme Linked Immunosorbent Assay) untersucht, bei dem ein oder mehrere Antigene des Pathogens (zum Beispiel Proteine aus der Virushülle) als Fänger an einer Oberfläche verwendet werden. Etablierte Firmen wie Roche und Euroimmune brachten schon im

späten Frühjahr 2020 erste ELISA-Tests für überstandene Covid-19-Infektionen auf den Markt. Diese dienen aber generell eher der Feststellung, wie viele Antikörper gegen die Krankheit vorliegen, den sogenannten Titer, und können teilweise nach Art des Antikörpers unterscheiden (IgM/IgA für die kürzliche Infektion und IgG für eine länger zurückliegende Infektion). Eine Aussage über eine Protektivität der nachgewiesenen Antikörper, also ob diese den Virus wirklich inhibieren, lässt sich daraus nicht direkt ableiten. Man nimmt allgemein an „viel hilft viel“, dass also hohe Titer besseren Schutz bieten, aber sie sind kein hundertprozentiger Garant, dass man nicht nochmals erkranken kann.

Um über den immunitären Schutz einer Person detaillierter aufklären zu können, also um zu wissen, ob der Antikörpertiter auch protektive Eigenschaften aufweist, muss ein anderer Ansatz gewählt werden. Die anerkannte und übliche Referenzmethode ist ein sogenannter Protektions- oder Neutralisierungstest. Hierzu wird das Virus mit der Serumprobe vermischt, und der Nachweis der Protektivität erfolgt in einer Zellkultur. Man weist damit nach, dass das Virus weniger oder gar nicht mehr in die Zellen eindringen kann, nachdem er den Antikörpern aus dem Blutserum ausgesetzt war. Diese Zellkulturtests sind sehr zuverlässig, jedoch zeit- und kostenintensiv und

benötigen eine umfangreiche Expertise. Weiterhin benötigt man für den Neutralisationsassay aktive Viren – eine potenzielle, aber konstant vorhandene Infektionsquelle, die man lieber umgeht. Daher sind Neutralisationsassays von der Routineanwendung weit entfernt, werden nur von Speziallabors durchgeführt und sind

für eine Routinediagnostik am Point-of-Need völlig ungeeignet. Jedoch wäre genau die Beantwortung dieser Frage, nämlich „bin ich nach einer überstandenen Erkrankung bzw. nach einer erfolgten Impfung wirklich geschützt“ das ideale Werkzeug, um die Pandemie langfristig erfolgreich zu bekämpfen.

Immunität messen

■ Um einen Protektivitätstest ohne aktiven Virus durchzuführen, ist es wichtig, die essenziellen Proteinbestandteile (Epitope) des Virus auf einer Oberfläche abzubilden. Aktuell erzeugt BioCopy dafür ein Protein-Array, das mehr als 30 Varianten von Covid-19-Proteinen inklusive diverser Mutationen plus 20 Kontrollen darstellt. Für den Nachweis der Protektivität wird auf diesem Array untersucht, wie viele Antikörper eine Testperson hat, aber auch ob und wie stark sie eine Interaktion zwischen Virusprotein und dem ACE2-Rezeptor – der Andockstelle, über die Covid-19-Viren in die menschlichen Zellen eindringen – unterbinden.

Ob eine Person genügend protektive Antikörper besitzt, ist insbesondere dann interessant, wenn man nicht weiß, ob man erkrankt war, ob die Erkrankung oder eine entsprechende Impfung schon zu lange zurück liegt, ob eine Impfung überhaupt angeschlagen hat und ob die Antikörperantwort schon abgeklungen ist. Dies gilt auch für andere Erkrankungen, aber da bisher eine individualisierte, jährliche Analyse des Impfstatus weitaus teurer ist als nach einer Durchschnittszeit nachzuimpfen, wird anhand eines Durchschnitts festgelegt, beispielsweise die Tetanus-Impfung alle zehn Jahre aufzufrischen. Dies ist eine sehr rationale Entscheidung, da es aufgrund der bisherigen Analysekapazität (mehr als eine Million Tests pro Woche und Krankheit!) und aufgrund der Kosten unsinnig wäre, anders zu handeln. Aber man nimmt in Kauf, dass ein geringer Prozentsatz der Bevölkerung ungenügend geschützt ist, und andere auch nach zwanzig Jahren eigentlich noch keine Auffrischungsimpfung benötigen. Sars-CoV-2 ist ein Sonderfall, da Antikörpertiter nach überstandener Infektion teils nicht nachweisbar sind oder Re-Infektionen auftreten. Hier scheint es also möglich, dass bereits nach einigen Monaten anstatt von Jahren oder Jahrzehnten die Antikörper-vermittelte Immunität bei einzelnen Individuen abgeklungen ist.

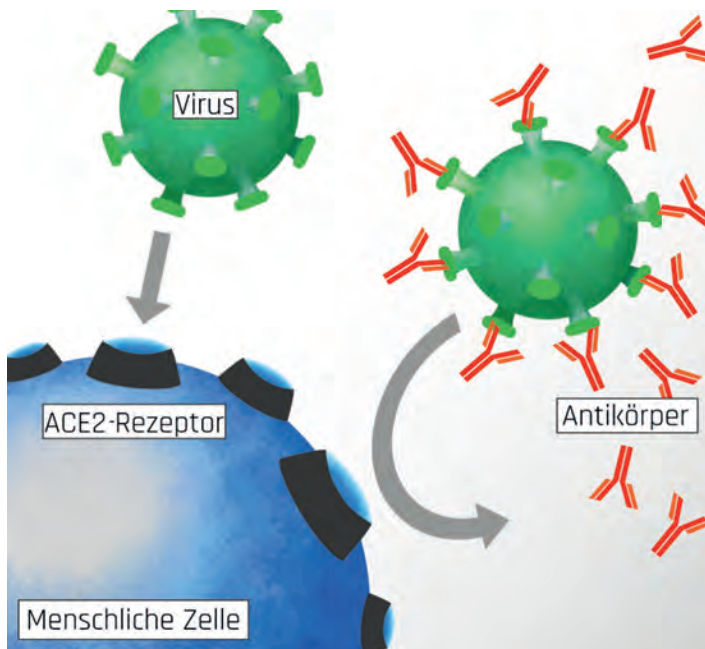


Abb. 2. Liegen schützende Antikörper (rot) vor, dann blockieren sie die Bindestellen des Sars-CoV-2-Virus (grün) und unterbinden ein Andocken an die menschlichen Zellen (blau). Das verhindert letztendlich eine Infektion. (Graphik: BioCopy)



Abb. 3. Günter Roth, CEO von BioCopy, führt eine Kalibrierung an einem der Schnelltestprototypen durch. Mit einem Gewicht von 3 kg und der Größe einer Kaffeemaschine ist das Gerät auf jedem Tisch einsetzbar. Bisherige Anwendungen sind die Vermessung von biomolekularen Wechselwirkungen in der Immunoassay-Entwicklung für Diagnostik und Therapie. (Foto: P. Meyer)

Statistik der Chemiestudiengänge 2019

Erstmals seit 2010 begannen weniger als 10 000 Personen ein Chemiestudium.

■ Im Jahr 2019 verzeichnete die Gesamtzahl der Studienanfängerinnen und -anfänger in den Chemiestudiengängen den zweithöchsten prozentualen Rückgang seit 1994. 9422 Personen begannen ein Chemiestudium, dies waren 10 % weniger als im Vorjahr (10 499). Insgesamt haben 3905 Studierende einen Chemiestudiengang abgeschlossen (2018: 4065). Die Zahl der Promotionen ist mit 2181 ebenfalls etwas zurückgegangen (2018: 2240), bleibt dennoch auf einem hohen Niveau. Rund 88 % der Masterabsolventen an Universitäten begannen eine Promotion. Dieser Wert ist wie schon im Vorjahr geringer als im langjährigen Mittel (90 %) und scheint sich auf einem niedrigeren Niveau eingependelt zu haben.

In den einzelnen Studiengängen ergaben sich folgende Ergebnisse:

- Im Bereich Chemie/Wirtschaftschemie meldeten die Hochschulen 5746 Studienanfänger und -anfängerinnen (2018: 6433). 2605 Studierende (2018: 2501) schlossen ihr Bachelorstudium erfolgreich ab, 2348 erhielten ihren Masterabschluss (2018: 2331). Die Studiendauer betrug im Median 6,7 Semester für einen Bachelorabschluss (2018: 6,4) und 4,8 Semester für einen Masterabschluss (2018: 4,5). Damit erreichen die Studiendauern bis zum Master den zweithöchsten Wert seit 2003. Im Jahr 2019 haben 1921 Personen in Chemie/Wirtschaftschemie promoviert (2018: 1925). Die Promotionsdauer lag im Median bei 8,3 Semestern (2018: 8,3).
- In Biochemie und Life Sciences begannen 1702 Personen ihr Studium (2018: 1729). Die Zahl der Bache-

Zusätzlich zu einer Überprüfung des genauen immunologischen Status über ein gewähltes Panel relevanter und bekannter Virusepitope ist von Interesse, mit welcher Bindungsstärke (Affinität) die vom Immunsystem des Patienten gebildeten Antikörper die Virusepitope erkennen. Bisherige Tests stellen nur fest, ob Antikörper vorhanden sind, und nicht, wie gut diese Antikörper binden. Im Falle von Tetanus und Masern schützen bereits wenige, sehr gut bindende Antikörper teils lebenslang. Um eine solche neue serologische Diagnostik aufzubauen, erhielt BioCopy kürzlich einen sechsstelligen Förderbetrag, um ein Schnelldiagnostikgerät für die Covid-19-Analyse zu entwickeln. BioCopy wurde aus unter 120 Einreichungen als eines von drei Projekten vom Land Baden-Württemberg für eine Förderung ausgewählt.¹⁾

Ziel der zugrundeliegenden Beschreibung des Landes Baden-Württemberg und seiner Agentur BIOPRO ist es, innovativen Technologien zum Durchbruch zu verhelfen, die bei der Bekämpfung der Pandemie besonders großen Nutzen versprechen. Das Besondere der BioCopy-Lösung: Der immunologische Test erfolgt markierungsfrei, das heißt direkt, ohne Umwege über weitere Farbmarker (sekundäre Antikörper), die den Nachweis künstlich verstärken. Es wird eine sehr detaillierte Diagnostik einer Infektion mit Sars-CoV-2 und des Impfstatus ermöglichen und analysieren, ob neutralisierende Antikörper vorhanden sind. Im nächsten Jahr lassen sich damit folgende wichtige Fragen beantworten: Bin ich gegen Covid-19 geschützt und wenn ja, gegen welche Varianten und wie gut? Wie gut ist mein Impfstatus? Dies wird auch im Zusammenhang mit erwarteten Impfungen von besonderem Nutzen sein. Das Gerät selbst ist so groß wie eine Kaffeemaschine und erlaubt das Vermessen von mehreren Datenpunkten parallel innerhalb einer halben Stunde.

Laufende BioCopy-Projekte

■ Beispielhaft haben das Helmholtz-Zentrum für Infektionsforschung (HZI) und YUMAB im Mai 2020

Informationen über virusneutralisierende Antikörper veröffentlicht.²⁾ Diese Antikörper hat BioCopy vor Pfingsten erhalten, innerhalb weniger Tage analysiert und die Bindeeigenschaften dieser Antikörper innerhalb einer Woche charakterisiert. Aus diesen Daten lässt sich ableiten, warum und wie sehr die jeweiligen Antikörper vor einer Infektion schützen. Neben einer gemeinsamen Publikation fließen die Ergebnisse unter anderem in die Entwicklung eines Anti-Covid-19-Therapeutikums mit ein, an der die Firma Corat Therapeutics nun arbeitet.

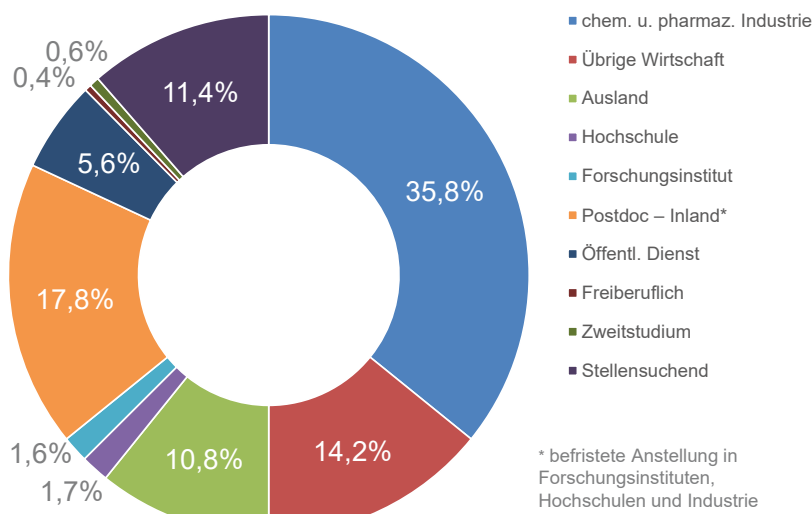
In nahezu identischer Weise vermisst BioCopy im Projekt BISKUIT Blutseren und passt die Technologie so an, dass sie als Schnelldiagnostik anwendbar wird. Im Gegensatz zum bisherigen Single-Parameter-Test wird ein ebenso schneller Multi-Parameter-Test ein differenzierteres Analysebild liefern, welches die Zahl, Bindestärke, aber auch Protektivität der Antikörper der Testperson für alle aktuell bekannten Virusmutanten erfasst. Erweiterungen auf zukünftige Mutationen, Marker für Krankheitsverlauf oder Kreuzreaktivität sind jederzeit möglich.

Es sind genau diese Informationen – neben dem Impfstoff selbst –, die wir zur Charakterisierung von Testpersonen nach den Impfungen bzw. nach Infektionen benötigen sowie für die Zuteilung von Impfstoffen oder einer gezielten Nachimpfung, um die Sars-CoV-2-Pandemie, aber auch zukünftige Pandemien einzudämmen.

*Günther Proll, Niko Bausch, Günter Roth
BioCopy GmbH, Emmendingen
www.biocopy.de*

Literatur

- 1) <https://tinyurl.com/yyw9lepz>
- 2) <https://tinyurl.com/yytzf9yf>



Erster Berufsschritt der promovierten Chemieabsolventen 2019 (ohne Studiengänge Biochemie, Lebensmittelchemie, Lehramt Chemie)

lorabschlüsse sank im Vergleich zum Höchststand im Vorjahr auf 942 (2018: 981). Hingegen erreichte die Zahl der Masterabsolventen einen neuen Höchststand von 834 (2018: 809). 195 Promotionen wurden für das Jahr 2019 gemeldet (2018: 229). Die Studiendauer stieg leicht an, der Median betrug hier 6,5 Semester für Bachelorabschlüsse (2018: 6,4) und 4,7 für Masterabschlüsse (2018: 4,5). Für Promotionen allerdings sank die Studierendauer und betrug im Median 8,5 Semester (2018: 8,7).

- Auch in der Lebensmittelchemie sank die Zahl der Studienanfänger, von 480 im Vorjahr auf 405. Insgesamt 164 Studierende bestanden das 1. Staatsexamen oder die Diplomprüfung (2018: 225) sowie 165 Personen das 2. Staatsexamen (2018: 177). Zusätzlich meldeten die Universitäten 169 Bachelor- und 115 Masterabschlüsse (2018: 120 bzw. 122). Damit übersteigt die Summe der Bachelor-/Masterabschlüsse zum wiederholten Mal in Folge die Anzahl der anderen Abschlüsse in der Lebensmittelchemie (Diplom/Staatsexamen). Die Zahl der Promotionen sank jedoch auf 65 (2018: 86).
- An einer Hochschule für Angewandte Wissenschaften (HAW) be-

gannen im vergangenen Jahr 1569 Personen einen Chemiestudiengang (2018: 1839). Die HAW meldeten 743 Bachelor- und 421 Masterabschlüsse (2018: 888 bzw. 510). Damit sank die Zahl der Absolventen in den Chemiestudiengängen an HAW. Nahezu alle Bachelorabsolventen an Universitäten schlossen ein Masterstudium an, an HAW waren es 72 % der Bachelorabsolventen. Rund 88 % der Masterabsolventen an Universitäten und 9 % der Masterabsolventen an HAW begannen eine Promotion.

Von 51 % der promovierten Absolventen in Chemie ist der erste Schritt ins Berufsleben bekannt. Nach Daten der Hochschulen traten etwa 36 % der Absolventen eine Stelle in der chemischen und pharmazeutischen Industrie an (2018: 36 %), 18 % nahmen eine befristete Stelle im Inland an (inkl. Postdoc) (2018: 19 %). 14 % waren nach dem Abschluss in der übrigen Wirtschaft tätig (2018: 13 %) und 11 % nahmen nach dem Abschluss eine Stelle im Ausland an (2018: 12 %). Rund 6 % der Absolventen hatten eine Stelle im öffentlichen Dienst inne (2018: 6 %). Wie auch bereits im Vorjahr galten 11 % als stellensuchend.

Quelle: GDCh

Chiral-chromatographische Analyse mit Fluor

■ Forscher des Shanghaier Instituts für Organische Chemie der Chinesischen Akademie der Wissenschaften haben kürzlich eine neue Plattform für die schnelle chirale Analyse entwickelt, die eine chromatogrammähnliche Ausgabe ohne die Notwendigkeit einer Trennung ermöglicht. Die Studie wurde in *Cell Reports Physical Science* veröffentlicht.

Chromatographische Methoden lösen chirale Moleküle durch leicht interpretierbare Chromatogramm-Peaks auf, erfordern jedoch eine zeitaufwändige Trennung. Chiroptical-Response-Systeme ermöglichen die chirale In-situ-Analyse, werden aber oft von Problemen mit Probeninterferenzen geplagt.

In dieser Studie entwickelten die Forscher eine Reihe von ^{19}F -markierten chiralen Aluminiumkomplexen, die sich reversibel an verschiedene Lewis-basischen Analyten binden. Der Einschluss chiraler Analyten in die eingeschlossene Bindungstasche erzeugte chromatogrammähnliche ^{19}F -NMR-Signale, die eine schnelle und eindeutige chirale Analyse ermöglichen.

Die Methode ist operationell einfach und löst effektiv eine Vielzahl von chiralen Molekülen auf, einschließlich Alkohole, Ether, Amide, Carbamate, Oxazolidinone, Sulfoxide und Sulfoximine. Die Studie zeigt, dass die gleichzeitige Analyse von drei verschiedenen Klassen chiraler Verbindungen ohne Trennung erreicht werden kann.

Den Forschern zufolge kann die neue Methode auch zur Bestimmung der Enantiomerenreinheit von rohen Reaktionsprodukten und zur Zuordnung absoluter Konfigurationen verwendet werden. In Verbindung mit einem NMR-Spektrometer mit automatischer Probenahme können mehr als 1000 chirale Analysen an einem Tag durchgeführt werden. „Eine solche Methode hat das Potenzial, mehrere Analyten und bestehende Interferenzen gleichzeitig zu identifizieren.“

zieren, was schließlich zu einer chiralen Echtzeitanalyse in komplexen, biologisch relevanten Systemen führen kann“, sagte Yanchuan Zhao, Autor der Studie.

Quelle: Chinese Academy of Sciences

Originalveröffentlichung:

Yipeng Li et al, “Separation-free Enantiodifferentiation with Chromatogram-like Output”, *Cell Reports Physical Science* 2020.

DOI: 10.1016/j.xcrp.2020.100100

Neue Messmethoden für 50 Chemikalien

■ Im Human-Biomonitoring-Projekt ist die Auswahl von 50 Stoffen abgeschlossen worden, für die erstmals Messmethoden entwickelt werden. Diese Stoffe können über Lebensmittel, Trinkwasser, Kosmetika oder Gebrauchsgegenstände vom menschlichen Organismus aufgenommen werden. Sie wurden danach ausgewählt, dass sie die Allgemeinbevölkerung belasten könnten oder bedenkliche toxikologische Eigenschaften besitzen. Seit 2010 arbeiten das Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU) und der Verband der Chemischen Industrie (VCI) gemeinsam daran, diese Stoffe verlässlich messen zu können. Für 26 dieser Stoffe wurden bereits neue Messmethoden entwickelt. Bis 2025 werden weitere folgen. Die neuen Analyseverfahren werden anschließend vom Umweltbundesamt (UBA) genutzt, um die Belastung der Bevölkerung mit den jeweiligen Stoffen zu messen. Auf Basis der Ergebnisse entwickelt das UBA bei Bedarf Empfehlungen für die Verbesserung des Schutzes der Bevölkerung vor unerwünschten Chemikalienbelastungen.

Im Rahmen des Human-Biomonitorings nehmen BMU und VCI Stoffe in den Fokus, für die es bisher keine geeignete Messmethode gibt. Die Auswahl beruht auf Empfehlungen eines hochrangigen Expertenkreises aus Forschung, Industrie und ein-

schlägigen Fachbehörden. Auswahlkriterien sind, ob die Bevölkerung diesen Stoffen vermehrt ausgesetzt sein könnte oder ob die Stoffe toxikologisch oder gesundheitlich bedenkliche Eigenschaften besitzen. Unter den ausgewählten Stoffen sind zum Beispiel Weichmacher für Kunststoffe wie DINCH und DPHP oder das Flammschutzmittel HBCDD. Auch häufig verwendete Kosmetikinhaltstoffe wie Geraniol, Lysmeral und Climbazol, Schädlingsbekämpfungsmittel wie Fipronil und Konservierungsmittel wie CIT/MIT und Bronopol wurden ausgesucht.

Abschließend ausgewählt haben BMU und VCI jetzt die letzten drei Stoffe, die noch fehlten, um die Zielgröße von 50 Stoffen zu erreichen:

- 2,4,7,9-Tetramethyl-5-decin-4,7-diol (TMDD), ein Schaumhemmer für Farben und Druckertinten sowie in Materialien mit Lebensmittelkontakt
- Benzisothiazolinon (BIT), ein Biozidwirkstoff der vorwiegend zur technischen Konservierung eingesetzt wird
- N-Butylbenzolsulfonamid (NBBS), ein Weichmacher für Polyamidteile.

Während die Stoffauswahl für das Human-Biomonitoring-Projekt damit abgeschlossen ist, läuft die Entwicklung der Messmethoden im Auftrag des VCI noch fünf Jahre weiter. Die Methoden sollen sehr empfindlich und dafür geeignet sein, die im Allgemeinen niedrige Hintergrundbelastung bei Menschen zu bestimmen, die beruflich nicht mit den gemessenen Stoffen in Berührung kommen. Alle Analysemethoden werden nach ihrer Fertigstellung und Validierung in anerkannten, internationalen Fachzeitschriften mit Begutachtungsverfahren veröffentlicht, damit ihre hohe Qualität extern bestätigt wird, sie weltweit verfügbar und nutzbar sind.

Quelle: BMU/ VCI

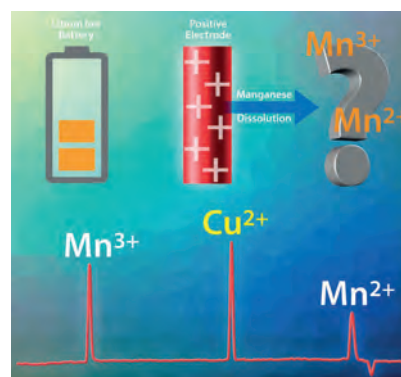
Neue Analysemethoden für langlebigere Lithium-Ionen-Batterien

Wissenschaftsteam ermöglicht detaillierte Untersuchung der Übergangsmetallauflösung

■ Wie kann die Lithium-Ionen-Batterie (LIB) weiter verbessert werden? Wissenschaftler vom Münster Electrochemical Energy Technology (MEET) der Universität Münster entwickelten dafür neue Verfahren für die Kapillarelektrophorese. Diese ermöglichen erstmals eine detaillierte Analyse der Übergangsmetallauflösung in Lithium-Ionen-Batterien. Die Forschungsergebnisse wie auch die neu entwickelten Methoden sind in drei Publikationen des Fachmagazins *Electrophoresis* erschienen.

Die Auflösung von Übergangsmetallen im Elektrolyten führt zu Kapazitätsverlusten und verkürzt so die Lebensdauer der LIB. Bisher gab es keine geeignete Methode, um die Oxidationsstufen mehrerer gelöster Übergangsmetalle aus Kathodenmaterialien oder Stromsammlern der LIB – zum Beispiel Kupfer oder Mangan – gleichzeitig bestimmen zu können. Hinzu kommt, dass deren Analyse ein noch junges Forschungsgebiet ist.

„Bis dato wurde häufig nur der Gesamtgehalt an gelösten Übergangsmet-



Die Untersuchung gelöster Manganpezies (Mn^{2+} und Mn^{3+}) in Lithium-Ionen-Batterien mit der neu entwickelten Methode für die Kapillarelektrophorese hilft, die Auflösungsmechanismen manganhaltiger Kathoden besser zu verstehen. (Graphik: Wiley-VCH)

tallen im Elektrolyten untersucht. Dadurch gingen wichtige Informationen verloren, zum Beispiel darüber, in welcher Oxidationsstufe die Übergangsmetalle überhaupt auftreten und welchen Einfluss ein einzelnes von ihnen auf die Performanz der Zelle haben kann“, erklärt MEET-Wissenschaftler Lenard Hanf. Diese Erkenntnisse seien aber fundamental, um langlebigere LIBs entwickeln zu können. Denn sie bilden die Grundlage, um der Übergangsmetallauflösung mit passgenauen Additiven oder Ionenfängern entgegenwirken zu können und so die LIB weiter zu optimieren.

Aus diesem Grund haben die MEET-Forscher neue Methoden für die Kapillarelektrophorese entwickelt. Sie ermöglichen es nun, die Oxidationsstufen mehrerer gelöster Übergangsmetalle gleichzeitig zu bestimmen. Eine der größten Herausforderungen war es dabei, die Methodiken so zu entwickeln, dass die zu untersuchenden Proben bei Entnahme und Analyse nicht verändert werden. Denn dadurch würden wichtige Informationen verloren gehen. „Wir haben die teils instabilen und hochsensiblen Metalle mit geeigneten Komplexbildnern stabilisiert“, erklärt Hanf. Anschließend hat das MEET-Wissenschaftsteam die Auflösung verschiedener Kathodenmaterialien und kupferbasierter Stromsammler im Batterieelektrolyten unter Anwendung der neuen Methodiken detailliert analysiert.

Quelle: Universität Münster

Originalveröffentlichungen

- 1) L. Hanf et al., “ Mn^{2+} or Mn^{3+} ? Investigating transition metal dissolution of manganese species in lithium ion battery electrolytes by capillary electrophoresis”, *Electrophoresis* 2020. DOI: 10.1002/elps.201900443
- 2) L. Hanf et al., “Investigating the oxidation state of Fe from LiFePO₄-based lithium ion battery cathodes via capillary electrophoresis”, *Electrophoresis* 2020. DOI: 10.1002/elps.202000097
- 3) L. Hanf et al., “Accessing copper oxidation states of dissolved negative electrode current collectors in lithium ion batteries”, *Electrophoresis* 2020. DOI: 10.1002/elps.202000155

Digitalisierte Chemie mit einem smarten Rührstab

Magnetührstab mit einem integrierten Prozessüberwachungssystem



Der Smart Stirrer kann Daten über die Farbe, Viskosität und andere Eigenschaften der Lösung, die er rührt, übertragen. (Foto: D. Isakov)

■ Miniaturisierte Computersysteme und drahtlose Technologie bieten Wissenschaftlern neue Möglichkeiten, Reaktionen zu verfolgen, ohne größere, schwerfällige Geräte zu benötigen. In einer Proof-of-Concept-Studie in *ACS Sensors* beschreiben Forscher ein kostengünstiges neues Gerät, das wie ein herkömmlicher Magnetührstab funktioniert, aber automatisch Informationen über die Farbe, Viskosität und eine Vielzahl anderer Eigenschaften einer Lösung messen und an ein Smartphone oder einen Computer übertragen kann.

Die automatische, ferngesteuerte Datenerfassung kann chemische Prozesse zuverlässiger, weniger arbeitsintensiv und sicherer machen. Diese Technologie hat begonnen, in Chemielabors Einzug zu halten, aber Möglichkeiten für Wissenschaftler, die ihre Reaktionen aus der Ferne mischen und mehrere Parameter überwachen wollen, während diese Reaktionen ablaufen, sind nach wie vor recht selten, begrenzt und teuer. Nikolay Cherkasov, Dmitry Isakov und Kollegen wollten ein Gerät entwickeln, das in der Lage ist, mit Hilfe frei verfügbarer Open-Source-Software und leicht erhältlicher, kostengünstiger Komponenten zahlreiche Parameter gleichzeitig zu erfassen.

Das Team stellte zwei Versionen des Smart Stirrers auf der Grundlage verschiedener integrierter Schaltkrei-

se her, eine mit einem Mikrocontroller und die andere mit einem All-in-One-System auf einem Chip. Um den Smart Stirrer für verschiedene Anwendungen anzupassen, verwendete das Team ein modulares Design, bei dem Sensoren nach Bedarf hinzugefügt werden können. In Experimenten bestätigten sie, dass sie Farbe, elektrische Leitfähigkeit und – bei sorgfältiger Kalibrierung – auch die Viskosität erfassen können. Zusätzliche kostengünstige, kommerziell erhältliche Sensoren sowie kundenspezifische Sensoren könnten verwendet werden, um das Gerät für viele neue Anwendungen anzupassen, sagen die Forscher. Sie stellen eine Einschränkung fest: den engen Temperaturbereich, innerhalb dessen der Smart Stirrer funktionieren kann – eine Einschränkung, die, wie sie sagen, den meisten digitalen Elektronikgeräten inhärent ist. Letztendlich sagen sie voraus, dass dieser Ansatz eine Plattform für die Digitalisierung der Chemie in Forschungslabors und der industriellen Fertigung bieten könnte.

Quelle: American Chemical Society

Originalveröffentlichung

N. Cherkasov et al., “Monitoring Chemistry In Situ with a Smart Stirrer: A Magnetic Stirrer Bar with an Integrated Process Monitoring System”, *ACS Sens.* 2020.

DOI: 10.1021/acssensors.0c00720

ABC in Kürze

Neuigkeiten rund um Analytical and Bioanalytical Chemistry

Neues von ABC

■ Ende Juni gab Clarivate Analytics den Impact Factor für das Jahr 2019 bekannt. Die gute Nachricht: ABC hat mit 3,637 einen deutlich gesteigerten Impact Factor im Vergleich zum Vorjahr und liegt im Ranking der Kategorie „Chemistry, Analytical“ auf Platz 18 von insgesamt 86 Journals. Auch die Zahl der Gesamtzitate zu ABC-Artikeln ist um 4 % auf 31 191 gestiegen, der Immediacy Index liegt 2019 bei 0,782. Im CiteScore Ranking belegt ABC mit 6,2 Platz 23 in der Kategorie „Analytical Chemistry“.

Neues von Springer Nature und ResearchGate

■ Springer Nature und ResearchGate sind in Gesprächen über eine langfristige Partnerschaft, die es zum Ziel hat, den Zugriff auf wissenschaftliche Artikel und Inhalte weiter zu vereinfachen. Die Erfahrungen aus den zwei Phasen des bisherigen Pilotprojekts wurden in einem jetzt veröffentlichten White Paper ausgewertet. Eine zentrale Erkenntnis aus den Pilotphasen ist das positive Feedback: 90 % der Autoren und Autorinnen äußerten sich positiv oder sehr positiv über die Zusammenarbeit von ResearchGate und Springer Nature.

Im Rahmen der Zusammenarbeit sollen die Verlagsversionen von Artikeln (die „version of record“, VoR) direkt über ResearchGate bereitgestellt werden. Berechtigte Nutzer können dann Springer-VoR-Artikel der letzten fünf Jahre und Nature-Research-VoR-Artikel der vergangenen drei Jahre auf ResearchGate lesen und downloaden. Täglich werden neue Artikel unmittelbar mit Veröffentlichung hinzugefügt. Alle Nutzer erhalten über ResearchGate Zugriff auf einen erweiterten Abstract, der Metadaten, eine Zusammenfassung, Zahlen- und Bildmaterial sowie die komplette erste Seite umfasst. Durch die Kombination der umfangrei-

chen wissenschaftlichen Verlagsexpertise von Springer Nature und der von Millionen von Wissenschaftlern und Wissenschaftlerinnen genutzten Online-Plattform von ResearchGate wollen die beiden Unternehmen ihr Angebot für die Wissenschaftswelt weiter verbessern und vereinfachen.

Diese Zusammenarbeit wird auch allen ABC-Autoren zu Gute kommen, u.a. durch die verbesserte Auffindbarkeit ihrer Artikel und deren stärkere Nutzung. Ein Grund mehr, in ABC zu publizieren!

Neues von den ABC-Herausgebern

■ Single-molecule detection – darauf liegt der Fokus des ABC-Spotlights von Günter Gauglitz. Der ABC-Herausgeber fasst neueste Entwicklungen zusammen und verweist auf herausragende Publikationen in ABC zu Methoden und Anwendungen: „ABC Spotlight on single-molecule detection“.¹⁾

Die ABC-Herausgeberinnen Antje J. Baeumner, Hua Cui, Maria Cruz Moreno Bondi und Sabine Szunerits steuerten zur erfolgreichen Topical Collection „Female Role Models in Analytical Chemistry“ (Abbildung 2) folgendes inspirierendes Editorial bei: „Female role models in analytical chemistry: then, now, and in the future“.²⁾

Neues aus den Rubriken

■ Aus der erfolgreichen Rubrik „ABCs of Education and Professional Development in Analytical Science“ gibt es Neues zu berichten: Im Juli hat der langjährige Rubrik-Herausgeber John Fetzer den Staffeln an Jill Robinson (Abbildung 1) von der Indiana University in Bloomington, USA, übergeben. Wir danken John herzlich für die gute Zusammenarbeit und heißen Jill auch im Namen von Martin Vogel und Tom Wenzel im Team willkommen.

Als neuen Beitrag laden wir Sie zum Lesen des Artikels von Rebeca Miranda-Castro und Noemi de-los-



Abb. 1. Jill Robinson, Indiana University (Foto: privat)

Santos-Álvarez ein, der Teil der Topical Collection „Female Role Models in Analytical Chemistry“ ist: „Engaging in analytical chemistry in review classes: contests based on TV shows as fun evaluable checkpoints“.³⁾

Im Oktober gibt es wieder ein neues Rätsel aus der Reihe der Analytical Challenges: das Phosphine NMR challenge.⁴⁾ Einreichungsdatum für die Lösung zu diesem Rätsel von Andryj M. Borys ist der 1. Januar 2021.

Alle aktuellen und früheren Beiträge der Rubrik einschließlich der Lösungen sind unseren Lesern frei zugänglich. →



Abb. 2. Cover der Topical Collection „Female Role Models in Analytical Chemistry“, dem Highlight 2020; die Abbildung ist eine Word Cloud aus den Abstracts aller Artikel.

Ausblick auf Themenschwerpunkte im Jahr 2021

■ Das neue Jahr beginnt wie immer mit ausgewählten Trends und Critical Reviews im ersten Januarheft. Lesen Sie u.a. Neues zur Sars-CoV-2-Diagnostik. Die erste Topical Collection „2D Nanomaterials for Electroanalysis“ folgt im Februar; ein herzlicher Dank geht an unsere Herausgeberin Sabine Szunerits für ihr Engagement. Im März informieren Tiffany Porta Siegel (NL) und Shane Ellis (AU) im Themenheft „Mass Spectrometry Imaging 2.0“ über neueste Entwicklungen. Die *analytica conference* fand virtuell im Oktober statt, viele Vorträge wurden mit großer Resonanz online verfolgt. Leider kann eine virtuelle Veranstaltung nicht die Diskussionen während der Kaffeepause ersetzen. Daher laden die deutschen *ABC*-Herausgeber Antje Baeumner und Günter Gauglitz alle Teilnehmer der (virtuellen) *analytica conference* ein, ihre Forschungsergebnisse bei *ABC* einzureichen. Verleihen Sie Ihren Beiträgen Sichtbarkeit in der Collection „Recent Trends in (Bio)Analytical Chemistry“ und kontaktieren Sie bei Interesse unsere Herausgeber (antje.baeumner@ur.de, abc.gg@ipc.uni-tuebingen.de).

Auf der *ABC*-Homepage finden Sie seit kurzem einen Überblick zu kommenden Themenschwerpunkten: bit.ly/ABC_upcoming oder auf unserer Seite unter „Journal Updates“.

Alle *ABC*-Ausgaben und Topical Collections finden Sie online über unsere Homepage www.springer.com/abc. Alle Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie greifen über den Mitgliederbereich MyGDCh auf den gesamten Online-Inhalt von *ABC* zu.

Herzliche Grüße aus der *ABC*-Redaktion und bleiben Sie weiterhin gesund,

Nicola Oberbeckmann-Winter
Managing Editor *ABC*, Springer
(ORCID iD 0000-0001-9778-1920)

Direktlinks zu den Artikeln

- 1) <https://doi.org/10.1007/s00216-020-02838-8>
- 2) <https://doi.org/10.1007/s00216-020-02763-w>
- 3) <https://link.springer.com/article/10.1007/s00216-020-02495-x>
- 4) <https://link.springer.com/article/10.1007/s00216-020-02880-6>

Jahrgangsbeste 2019 und 2020

Kim Greis

HU Berlin
Master

■ Liebe Mitglieder der FG Analytische Chemie,

es freut mich sehr, dass mir der Absolutenpreis der Fachgruppe Analytische Chemie verliehen wurde. Zunächst möchte ich Professor Dietrich Volmer von der Humboldt-Universität zu Berlin danken, der mich für diesen Preis nominiert hat.

Mein Name ist Kim Greis, und ich wurde in Luxemburg geboren, wo ich auch meine schulische Ausbildung genoss. Ein besonderer Dank geht an meine ehemalige Chemielehrerin Tonia Reiles, die mein Interesse für die Chemie geweckt und mich dazu motiviert hat, Chemie zu studieren.

Nach bestandenen Abitur entschied ich mich dazu, das Studium an der Humboldt-Universität zu beginnen. Schnell merkte ich, dass mich vor allem die physikalische und analytische Chemie begeistern. Durch eine Stelle als studentische Hilfskraft im Arbeitskreis von Klaus Rademann lernte ich bereits ab dem dritten Semester den universitären Forschungsbetrieb kennen. Infolgedessen schrieb ich auch meine Bachelorarbeit in eben diesem Arbeitskreis. Dabei war ich an der Entwicklung eines Schwermetallsensors auf Cellulosebasis beteiligt. Anschließend entschied ich mich dazu, den Master ebenfalls an der Humboldt-Universität zu absolvieren, wo ich alle Module der analytischen Chemie belegte. Insbesondere ist mir die Vorlesung „Methoden der modernen Analytik“ von Professor Volmer in Erinnerung geblieben.

Geprägt durch die Grundvorlesung im Bachelor und die Module im Master, begann ich, ein Interesse für massenspektrometriebasierte Forschung zu entwickeln. Während eines viermonatigen Auslandsaufenthalts an der University of Melbourne, finan-

ziert durch den DAAD, forschte ich an Ionen-Molekül-Reaktionen von Phenanthrolin-gebundenen Metallkomplexen in der Arbeitsgruppe von Richard O’Hair. Hier kam ich das erste Mal in Kontakt mit quantenchemischen Rechnungen, die gebraucht werden, um die experimentellen Daten zu stützen.

Das Forschungspraktikum in Australien bereitete mir so viel Freude, dass ich für meine Masterarbeit ein Thema suchte, bei dem ich Theorie und Experiment gut miteinander verbinden konnte. Ein derartiges Projekt fand ich in der Arbeitsgruppe von Kevin Pagel (Freie Universität Berlin und Fritz-Haber-Institut). In dem Projekt untersuchte ich Glykosylkationen, Intermediate in der organischen Zuckersynthese, mit Gasphasen-Infrarotspektroskopie.

Diese Ionen lassen sich in Lösung nicht beobachten, weswegen wir auf die Umgebung eines Massenspektrometers, frei von Nukleophilen, angewiesen sind. Die Ionen lassen sich anschließend massenselektiert und in einer Hexapol-Ionenfalle akkumulieren. Suprafluide Heliumtröpfchen werden durch die Ionenfalle geleitet, um die Ionen einzufangen und zu einer Detektionsregion zu führen, wo sie sich mit dem Freie-Elektronen-Laser des Fritz-Haber-Instituts untersuchen lassen. Durch Infrarotpulse werden die Ionen aus den Tröpfchen entfernt und detektiert, wobei das Ionensignal, aufgetragen als Funktion der Laserwellenzahl, einem Infrarotspektrum entspricht. Die Heliumtröpfchen kühlen das Ion ständig auf 0,4 K, sodass keine thermische Verbreiterung der Infrarotbanden auftritt. Durch die erhaltenen Infrarotspektren lassen sich mit Hilfe quantenchemischer Berechnungen Rückschlüsse auf die Struktur der Ionen ziehen. So wiesen wir Fernpartizipation von Acetylschutzgruppen nach, was die Stereoselektivität von manchen Bausteinen in der Zuckersynthese erklärt.

Da das Thema so vielversprechend ist und mir viel Spaß macht, habe ich



mich dazu entschlossen, im Rahmen meiner Promotion in der Arbeitsgruppe von Professor Pagel weiter daran zu forschen. An dieser Stelle möchte ich mich bei dem luxemburgischen Fonds National de la Recherche für die Finanzierung meines Promotionsprojektes bedanken. Weiterer Dank gilt meinen Arbeitskollegen, die mich bei den nächtlichen Messzeiten mit Gemüsepizza, Schokokeksen und anderen Leckereien unterstützen.

Mit freundlichen Grüßen
Kim Greis
greiskim@fhi-berlin.mpg.de

Sven Hampel

Technische Universität Clausthal
Master

■ Liebe Mitglieder der FG Analytische Chemie,

zunächst möchte ich die Gelegenheit nutzen, um mich bei



Ihnen, der Fachgruppe Analytische Chemie der GDCh, für diese Auszeichnung zu bedanken. Besonders Professorin Ursula E. A. Fittschen möchte ich für den Vorschlag zu diesem Preis danken.

Mein Name ist Sven Hampel und ich studiere seit 2014 Chemie an der Technischen Universität Clausthal. Nach Bachelor und Master arbeite ich aktuell an meiner Dissertation im Bereich der Analytik. Der Weg zur analytischen Chemie führte mich nach dem Abitur mit naturwissenschaftlichem Schwerpunkt zuerst zum Unternehmen Dr. Paul Lohmann in Emmerthal, wo ich eine Ausbildung zum Chemikanten absolvierte. Vor allem der analytische Prozess in der In-Prozess-Kontrolle begeisterte mich. Die Vielfalt und Möglichkeiten der einzelnen analytischen Methoden führten mich zu dem Entschluss, dieses Wissen weiter zu vertiefen.

Daraufhin entschloss ich mich zum Bachelorstudium Chemie an der Technischen Universität Clausthal zum Wintersemester 2014/15. Dieses beendete ich mit der Bachelorarbeit

„Aromatische Phosphonsäureester als kovalent gebundene Flammenschutzmittel für Holz“ im Arbeitskreis von Dieter E. Kaufmann am Institut für Organische Chemie. Neben der klassischen Synthese nahmen Chromatographie und Strukturaufklärung einen Großteil der Arbeit ein. Am meisten aber hat mich die Nachverfolgung von Reaktionsmechanismen mit ESI- und EI-MS-Spektrometrie sowie Kernresonanzspektroskopie begeistert. Dabei war es wieder das Kennenlernen und Anwenden neuer Methoden, die mich bestärkten, mich der analytischen Chemie zu widmen.

Für den anschließenden Master in Chemie mit Studienrichtung der angewandten Chemie kam mir die seit 2017 neubesetzte Professur für Materialanalytik und Funktionale Festkörper sehr gelegen. Dabei lernte ich nicht nur mit „Synthesen und Mechanismen“ die Strukturaufklärung mit fortgeschrittenen Kernresonanzexperimenten weiter kennen, sondern mit der „Material- und Mikroanalytik“ auch Röntgenmethoden. Zum Erlernen und Anwenden von analytischen Methoden und Prozessen gehört auch, dieses Wissen in Tutorien- und Praktikumsbetreuung an die nächste Generation von Studenten weiterzugeben.

Seit Januar 2019 gehöre ich der Arbeitsgruppe „Materialanalytik und Funktionale Festkörper“ von Ursula E. A. Fittschen am Institut für Anorganische und Analytische Chemie an. Dort absolvierte ich nicht nur die Vertiefungsarbeiten, sondern bin als wissenschaftliche Hilfskraft auch aktiv an der Lehre beteiligt. Den Master schloss ich mit der Masterarbeit zur „Charakterisierung von ‚drop-on-demand‘-Picolitertropfen für den Einsatz in der Totalreflexionsröntgenfluoreszenzanalyse“ ab. Dazu wurde eine Druckeinheit in Kombination mit mehreren Lineartischen aufgebaut, die es erlaubt, einzelne Picolitertropfen zu Mustern zu drucken. Neben der Eignung für die Röntgenfluoreszenz untersuchte ich diese auch mit einer weiteren Methode, der Schwingquarzmikrowaage.

Seit November 2019 führe ich dieses Thema im Rahmen meiner Dissertation fort. Dazu gehören die Verbes-

serung des Aufbaus und die Ausweitung auf weitere Themengebiete. Aus mehreren Einzelementlösungen druckte ich Muster, die zur Verbesserung von „coded aperture optics“ in der Röntgenfluoreszenzbildgebung genutzt wurden. In Zusammenarbeit mit Diethelm Johannsmann vom Institut für Physikalische Chemie wurde der Tropfenauflauf zeit aufgelöst mit der Schwingquarzmikrowaage untersucht. Als zweiten Themenblock entwickle ich Methoden, um Elementspezies in ionomeren Membranen zu untersuchen. In Zusammenarbeit mit meinem Kollegen Christian Lutz ergab sich mir so die Möglichkeit zu (aktuell) zwei Synchrotronaufenthalten, die nochmal gänzlich neue Erfahrungen waren.

Aus meinen Arbeiten gingen bisher zwei Veröffentlichungen hervor, in denen ich als Koautor beteiligt bin. In beiden Arbeiten spielt das Drucken von Picolitertropfen eine entscheidende Rolle. Eine weitere Veröffentlichung, über die Arbeiten am Synchrotron, ist in der Begutachtung.

Mit freundlichen Grüßen
Sven Hampel

Carla Kirschbaum

FU Berlin
Master

■ Liebe Mitglieder der FG Analytische Chemie,

ich bedanke mich herzlich für den Absolventenpreis 2019,



den ich zu großen Teilen Professor Kevin Pagel, der gesamten Arbeitsgruppe und den hervorragenden Arbeits- und Lernbedingungen am Fritz-Haber-Institut und der Freien Universität Berlin zu verdanken habe. An dieser Stelle möchte ich mich kurz vorstellen und meinen bisherigen Weg beschreiben.

Mein Chemiestudium begann ich direkt nach dem Abitur im Wintersemester 2014 an der FU Berlin. Der analytischen Chemie begegnete ich im Bachelorstudium jedoch zunächst nur

im Zusammenhang mit Laborpraktika und einem Berufspraktikum in der Lebensmittelanalytik. Erst mit dem Beginn meiner Bachelorarbeit in der Arbeitsgruppe von Professor Pagel begann ich mich eingehender mit chemischer Analytik, insbesondere Massenspektrometrie, zu beschäftigen.

In meiner Bachelorarbeit untersuchte ich Phospholipide aus Tumorzellen mit Ionenmobilitätsmassenspektrometrie an einem kommerziellen Gerät. Diese Arbeit legte den Grundstein für mein Interesse an der Lipidanalytik bei biologischen Fragestellungen, die sich danach wie ein roter Faden durch mein Studium zog.

Nach der Bachelorarbeit zog ich für das erste Masterjahr nach Paris, um an der École Normale Supérieure zu studieren. Im ersten Semester besuchte ich unter anderem die analytische Vorlesung „Inorganic Spectroscopies“ und im zweiten Semester absolvierte ich zwei Forschungspraktika. Letzteres fand in Kooperation mit der Massenspektrometrieplattform der Sorbonne Universität statt. Dort untersuchte ich Wechselwirkungen zwischen zellpenetrierenden Peptiden und Membranlipiden mit photochemischen Cross-linking-Reaktionen und anschließender Analyse mit MALDI-MS. Somit erweiterte ich mein Methodenspektrum für die Lipidanalytik und lernte kurz darauf in einem weiteren Forschungspraktikum am Fritz-Haber-Institut eine völlig neue Methode kennen: ultrakalte Infrarotspektroskopie in suprafluiden Heliumtröpfchen. Mit dieser Massenspektrometrie-basierten Methode zeigten wir erstmals, dass isomere Glykolipide eindeutig anhand spektroskopischer Fingerabdrücke identifizierbar sind.

Später zeigte sich in meiner Masterarbeit unerwartet, dass sich auch Doppelbindungsisomere in Sphingolipiden mit dieser hochauflösenden Spektroskopie unterscheiden lassen. Meine Masterarbeit wurde im März 2020 mit dem Wolfgang-Paul-Studienpreis der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie ausgezeichnet, wo ich seitdem im Sprecherteam der Young Scientists bin.

Seit Oktober 2019 führe ich die Forschungsarbeiten aus meiner Masterar-

beit im Rahmen meiner Promotion fort. Neben Glyko- und Sphingolipiden untersuche ich nun auch andere Lipidklassen wie Fettsäuren und Glycerolipide, die andere Arten von Isomeren aufweisen können. Ziel der Arbeit ist es, die Möglichkeiten der IR-Spektroskopie zur Unterscheidung verschiedener Arten von Isomeren auszutesten und diese letztendlich an biologisch relevanten Beispielen zu erproben. Die Unterscheidung von alpha- und beta-gebundenen Zuckern in Glykolipiden hat beispielsweise einen entscheidenden Einfluss auf die Regulation von Immunantworten. Zurzeit arbeite ich deshalb daran, Glykolipide aus biologischen Proben zu isolieren, mit IR-Spektroskopie zu untersuchen und anhand meiner Referenzspektren festzustellen, welches Isomer oder welche Isomere in welchem Verhältnis vorliegen. Mit der Weiterentwicklung der Kalt-Ionen-IR-Spektroskopie hin zu benutzerfreundlicheren und in Zukunft möglicherweise kommerziell erhältlichen Geräten kann diese Technik einen entscheidenden Beitrag leisten, um bisher schwer unterscheidbare Isomere zu bestimmen.

Solange die Aufnahme von IR-Spektren allerdings arbeits- und zeitaufwendig ist, gibt es immer noch meine lieben Mitdokoranden sowie die obligatorische Gemüsepizza und Schokokekse, die nächtliche Messungen sehr gut erträglich machen.

Carla Kirschbaum

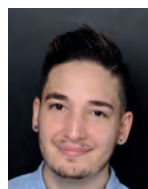
Çagdas Ozan Koçkar

*WH Recklinghausen
Bachelor*

■ Liebe Mitglieder der FG Analytische Chemie,

mein Name ist Çagdas Ozan Koçkar und ich war im Jahr 2018

Bachelorabsolvent des Studiengangs für Chemie an der Westfälischen Hochschule. Rückblickend möchte ich mich bei der GDCh, insbesondere bei der Fachgruppe für Analytische Chemie, für die Auszeichnung zum



Jahrgangsbesten im Fach Analytische Chemie bedanken. Einen besonderen Dank möchte ich gegenüber Professorin Sibylle Planitz aussprechen, die mich für diese Auszeichnung nominierte, meine Praxisphase wie auch Bachelorarbeit betreute und wichtige Impulse gab. Außerdem gilt mein Dank der Zweitprüferin meiner Abschlussarbeit, Professorin Franziska Traeger, die stets ein offenes Ohr für die Studierenden hatte.

Thema der besagten Abschlussarbeit, welche konsekutiv zur Praxisphase in einem Labor für Umweltanalytik entstand, war die Entwicklung einer GC-MS-Methode zur Gehaltsbestimmung von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen in Bodenproben und Baustoffen. Die Herausforderung lag hier insbesondere darin, die zur Ko-Elution neigenden Isomere wie Anthracen und Phenanthren zu trennen. In Vorversuchen erwies sich die Auflösung dieser Substanzen jedoch antiproportional zur Signalintensität höhersiedender Analyten. Hierbei sind Einstellungen des Ofenprogramms der GC sowie Temperatureinstellungen im Kaltaufgabesystem als wesentliche Einflussfaktoren identifiziert worden. Diese variierte ich methodisch-systematisch, um ein mögliches Optimum zwischen Auflösung und Signalintensität zu ermitteln.

Analog zu dieser Abschlussarbeit habe ich lange nach dem Optimum in meinem Leben gesucht, ehe ich den Weg zur Chemie eingeschlagen habe. Meine Stärken sah ich zunächst in der Informatik, so dass ich nach meinem Schulabschluss ein Hochschulstudium in diesem Bereich aufnahm. Schnell wurde mir im Laufe dieser Zeit klar, dass ich mich mit den Berufsbildern der Informatik nicht vollständig identifizieren konnte. Auf der Suche nach Orientierung probierte ich mich einige Semester in einem wirtschaftswissenschaftlichen Fach aus und war als Werksstudent in der Sachbuchhaltung eines großen Konzerns in meiner zweiten Heimatstadt Ingolstadt tätig, in welcher ich als gebürtiger Istanbuler mit elf Jahren strandete. Zum damaligen Zeitpunkt entwickelte ich jedoch immer mehr den Drang, mich fernab meiner zweiten Heimat einem

anderen Fachgebiet zu widmen.

Eingeschränkt durch meine Fachhochschulreife, welche ich als Nichtmuttersprachler in dem barrierebehafteten Schulsystem Bayerns erworben hatte, schrieb ich mich für ein Chemiestudium an der Westfälischen Hochschule ein. Diese Entscheidung war augenscheinlich nicht vernunftgeleitet, da ich nie beachtliche schulische Leistungen in dieser Naturwissenschaft erzielt hatte und meine Schulzeit nunmehr einige Jahre zurückerlag, sodass abzusehen war, dass ich mich insbesondere im Grundlagengstudium schwertun würde. Viele schwierige Phasen konnte ich durch Ausdauer, Lernbereitschaft, insbesondere aber durch mein Interesse an dem Fach und durch die Unterstützung vieler wohlwollender Menschen wie meinen Eltern bewältigen. Heute bin ich froh, den Mut aufgebracht zu haben, diesen Weg gegangen zu sein, denn ich fühle mich näher denn je an meinem persönlichen Optimum. Ich befinde mich aktuell in einem Studium für Chemie und Informatik für das Lehramt an Gesamtschulen und Gymnasien an der Universität Duisburg-Essen und arbeite als Vertretungslehrer. Ich wünsche allen Studierenden ein erfolgreiches Jahr und genügend Kraft und Ehrgeiz für die Zukunft.

Çagdas Ozan Koçkar

Valentina Merkus

*Universität Duisburg-Essen
Master*

■ Liebe Mitglieder der FG Analytische Chemie,

ich bedanke mich für den Absolventenpreis der Fachgruppe. Mein besonderer Dank gilt Professor Torsten Schmidt, der mich für diesen Preis vorgeschlagen hat.

Mein Interesse an einer chemischen Ausbildung wurde während meiner Schulzeit durch ein Praktikum im Wasserlabor einer kommunalen Kläranlage geweckt. Aufgrund der Interdisziplinarität und dem global wichti-



gen Thema der Wassernutzung und -versorgung entschied ich mich nach dem Abitur für den Studiengang Water Science an der Universität Duisburg-Essen. Während im Bachelorstudium mein Fokus eher auf mikrobiologischen Themen lag, wendete ich mich im Masterstudium chemisch-analytischen Fragestellungen zu. Meiner Hauptinteresse, der Trinkwasseraufbereitung und Abwasserbehandlung, blieb ich dabei jedoch treu.

Die Bachelorarbeit mit dem Thema, wie Antibiotikaresistenzen bei Bakterien im Aktivschlamm von Kläranlagen durch subinhibitorische Antibiotikakonzentrationen im Abwasser entstehen, verfasste ich an der Technischen Universität Wien im Forschungsbereich Wassergütwirtschaft.

Im Rahmen meiner Masterarbeit in der instrumentellen analytischen Chemie an der Universität Duisburg-Essen untersuchte ich mit LC-HRMS die Bildung von Transformationsprodukten bei der Ozonung von Mikroschadstoffen in Abhängigkeit von der Wassermatrix. Dieses Thema verfolge ich während meiner Promotion unter Torsten Schmidt weiter. Das Ziel der Arbeit ist es, Vorhersagen für die Ozonung von Mikroschadstoffen zu ermöglichen, indem man die Oxidation ihrer Grundstrukturen versteht. Hierfür untersuche ich beispielhaft für Guanin und einige seiner pharmazeutisch eingesetzten Derivate die Transformationsprodukte unter Einfluss der Wassermatrix.

Besonders spannend an der analytischen Chemie finde ich die Vielfältigkeit der Aufgabenstellungen, die durch ihre Hilfe untersucht und beantwortet werden können. Neben der rein methodischen Seite gibt es enorm viele Überschneidungen mit anderen Disziplinen, in denen die Analytik entscheidende Informationen zur Aufklärung eines Sachverhalts liefern kann. Seit meinem Masterstudium beschäftige ich mich vor allem mit der faszinierenden hochauflösenden Massenspektrometrie, durch die sich geringste Konzentrationen von Substanzen in einer Probe nachweisen lassen. Diese Methodik wird vielseitig eingesetzt. Auch in der Wasseranalytik, der ich mich ver-

schrieben habe, kann sie verschiedenste Spurenstoffe identifizieren.

Meine berufliche Zukunft sehe ich in der analytischen Chemie mit Blick auf die gesellschaftlich wichtigen Themen Wasser und Umwelt. Dabei möchte ich mein Wissen, das ich während Studium und Promotion gewonnen habe, zielführend einsetzen.

Valentina Merkus

Kathrin Müller

*Hochschule Fresenius
Master*

■ Liebe Mitglieder der FG Analytische Chemie,

zuerst möchte ich mich sehr herzlich bei der Fachgruppe Analytische Chemie der GDCh für die erhaltene Auszeichnung bedanken. Ich freue mich sehr und fühle mich geehrt, dass ich nach Auszeichnung meiner Bachelorarbeit den Preis nun auch für meine Masterarbeit erhalten habe. Mein besonderer Dank gilt Professor Thomas Knepper, der mich für diesen Preis erneut vorgeschlagen hat.

Mein Name ist Kathrin Müller und ich habe mich schon in meiner Schulzeit sehr für die Naturwissenschaften interessiert, insbesondere für die Chemie und Biologie. Nach meinem Abitur studierte ich angewandte Chemie an der Hochschule Fresenius. Im Studium begeisterte mich hauptsächlich die analytische Chemie und insbesondere die Umweltanalytik, sodass ich meine Bachelorarbeit in diesem Gebiet schrieb und mich mit der Analyse von Flammenschutzmitteln in Wasserproben beschäftigte. Nach erfolgreichem Abschluss meines Bachelorstudiums entschied ich mich, weiter an der Hochschule Fresenius zu studieren, und schrieb mich in den Master „Bioanalytical Chemistry and Pharmaceutical Analysis“ ein. Auch in meiner Masterarbeit wollte ich mich erneut der Analytik in Zusammenhang mit Umweltproben widmen.

Ich erhielt die Chance, meine Abschlussarbeit am Institute for Analyti-



cal Research der Hochschule Fresenius zu schreiben, und widmete mich darin der Untersuchung von Matrixeffekten. Es hatte sich gezeigt, dass Matrixeffekte bei der Analyse von polaren, organischen Wasserschadstoffen mit HILIC-ESI-MS sehr stark und sehr unterschiedlich sein können. Da Matrixeffekte eine korrekte Quantifizierung stark behindern, war mein Ziel ein besseres Verständnis dieser auftretenden Matrixeffekte und möglicherweise deren Ursache zu identifizieren.

Dazu wählte ich zunächst 26 polare Modellanalyten aus und nutzte die sogenannte „Post-Column-Infusion“. Dabei injizierte ich die Modellanalyten kontinuierlich nach der HILIC-Säule, während gleichzeitig unterschiedlich aufgearbeitete wässrige Proben chromatographisch getrennt und gemessen wurden. Während jeder Messung wurde die Intensität der Modellanalyten aufgezeichnet, und ich konnte so erkennen, zu welcher Retentionszeit eine Probenkomponente eluiert, die eine Signal-erhöhung bzw. -verringerung auslöste. Die Auswertung dieses Experiments zeigte, dass sowohl strukturspezifische als auch unspezifische Matrixeffekte auftraten. Die unspezifischen Matrixeffekte ließen sich vor allem durch eine erhöhte Gesamtionenanzahl erklären, welche zu einer Konkurrenz während des Ionisierungsprozesses führte und zu einer Suppression aller Analytsignale. Die strukturspezifischen Matrixeffekte hingegen entstanden durch das gleichzeitige Auftreten von entgegengesetzten Matrixeffekten. Manche Analytsignale wurden erhöht, andere supprimiert, wobei auch strukturell sehr ähnliche Analyten entgegengesetzte Matrixeffekte zeigten. Nach weiteren Tests führte ich diese Matrixeffekte schlussendlich auf anorganische Ionen wie Nitrat, Chlorid, Magnesium und Calcium zurück. Die Ergebnisse meiner Masterarbeit wurden zwischenzeitlich als Paper „Matrix effects in the analysis of polar organic water contaminants with HILIC-ESI-MS“ im *Journal Analytical and Bioanalytical Chemistry* veröffentlicht, worauf ich sehr stolz bin.

Nach Abschluss meines Masterstudiums arbeitete ich zunächst als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institute for Analytical Research. Im Juli 2020 begann ich meine Doktorarbeit dank der Förderung durch das Stipendienprogramm der Deutschen Bundesstiftung Umwelt. Auch in meiner Promotion bleibe ich der Umweltanalytik treu: Ich werde mich mit der Entwicklung neuer Analyse- und Quantifizierungsmethoden von Reifenabriebspartikeln in Umweltproben beschäftigen. Damit möchte ich einen Beitrag dazu zu leisten, die Wissenslücke über deren Verteilung und Auswirkungen in der Umwelt zu schließen.

Kathrin Müller

Marc Schuwerack

*Hochschule Fresenius
Bachelor*

■ Liebe Mitglieder der FG Analytische Chemie,

ich möchte die Gelegenheit nutzen und mich an dieser Stelle für die erhaltene Auszeichnung bedanken und meine Person und das Thema meiner Abschlussarbeit kurz vorstellen.

Ich bin 29 Jahre alt und arbeite seit Abschluss meiner Ausbildung im Jahr 2010 als Chemielaborant bei Boehringer Ingelheim Pharma. Seit 2014 beschäftige ich mich mit der Entwicklung und dem Lifecycle analytischer Methoden, vor allem mit der Entwicklung und Optimierung von HPLC-Methoden und kapillarelektrophoretischen Enantiomerentrennungen mit chiralen Selektoren. Seit neuestem betreue ich in unserem Bereich zusätzlich die massenspektrometrische Analytik (LC-HRMS).

Um für kommende berufliche und wissenschaftliche Herausforderungen gewappnet zu sein und um meine Neugier in der analytischen Chemie zu befriedigen, entschied ich mich Ende 2016 zu einer Weiterbildung in Form des berufs begleitenden Studiengangs der Industriechemie an der



Hochschule Fresenius. Im Zuge meiner Bachelorarbeit befasste ich mich mit der „Entwicklung von hochempfindlichen HPLC-Kombinationsmethoden, mit High-Dynamic-Range-UV-Detektion, zur simultanen Bestimmung der Reinheit und des Gehalts von Active Pharmaceutical Ingredients („Single-run assay and impurity testing“).

HPLC-Methoden mit UV-Detektion sind das Arbeitspferd der pharmazeutischen Analytik. Fester Bestandteil der Kontrollstrategie sind dabei sehr häufig mindestens zwei voneinander unabhängige chromatographische Methoden, welche zur Bestimmung des Gehalts („Assay“) und der Reinheit („Purity“) eingesetzt werden. Ziel meiner Abschlussarbeit war es, ein Verfahren zur simultanen Bestimmung der beiden Prüfpunkte zu entwickeln, wobei auf ein neuartiges Diodenarray-UV-Cluster zurückgegriffen werden sollte, das eine kurze und eine lange Max-Light-Flusszelle miteinander kombiniert. Ein Algorithmus ermöglicht eine gewichtete Kombination der beiden UV-Signale und erzeugt so ein Datenpaket („Channel“), welches den Informationsgehalt beider Zellen in sich vereint.

Auf Basis eines sich in der Entwicklung befindlichen Wirkstoffkandidaten evaluierte ich das Potenzial der Technologie zur Erweiterung des dynamisch bzw. linearen Arbeitsbereiches konventioneller HPLC-UV-Methoden. Zu Beginn wurde eine bestehende chromatographische Reinheitsmethode nach Miniaturisierung mit einer statistischen Versuchsplanung in einem sogenannten Design-of-Experiments (DoE)-Ansatz optimiert. Diese Optimierung sollte eine möglichst effiziente und schnelle Methode erhalten, mit akzeptabler Selektivität für alle 15 bekannten Verunreinigungen.

Die Neuentwicklung prüfte ich anschließend hinsichtlich möglicher Anforderungen im Routinealltag und evaluierte dabei die Robustheit, Routinetauglichkeit und Transferierbarkeit der Methode auf verschiedenste Geräteklassen und -typen. Hierbei achtete ich speziell darauf, dass die Methode auf LC-Systeme mit Diodenarray-UV-Cluster übertragbar war.

Ich überprüfte, inwieweit der lineare Arbeitsbereich konventioneller HPLC-UV-Methoden aufgeweitet werden kann und wie es sich simultan mit der Empfindlichkeit bis in den Spurenbereich hinein verhält. Besondere Aufmerksamkeit widmete ich den in internationalen Guidelines verankerten Validierungsparametern Linearität, Richtigkeit und Präzision sowie der Auswahl eines Kalibriermodells mit einer umfangreichen statistisch-mathematischen Auswertung.

Mit meiner Abschlussarbeit entwickelte ich durch innovative State-of-the-art-Techniken in Hinsicht auf HPLC-Modellierungssoftware und Diodenarray-UV-Clustern eine schnelle und leistungsfähige HPLC-UV-Kombinationsmethode mit Einpunktkalibrierung, welche es ermöglicht, simultan die Reinheit und den Gehalt eines Active Pharmaceutical Ingredients zu analysieren. Diese Art der HPLC-Kombinationsanalytik, gepaart mit einer schnellen und wenig stör anfälligen Methode, ermöglicht geringe Durchlaufzeiten und eine höchst kosteneffiziente Routineanalytik.

Die Neuentwicklung ist zeitgleich empfindlich genug, um selbst den Anforderungen der „Guideline on the Limits of Genotoxic Impurities (ICH M7)“ hinsichtlich potenziell genotoxischer Verunreinigungen im Bereich weniger ppm in Bezug auf die Tagesdosis eines Wirkstoffs zu genügen.

*Vielen Dank für die Auszeichnung
und freundliche Grüße,
Marc Schuwerack*

Julius Schwieger

Universität Leipzig
Bachelor

■ Liebe Mitglieder der FG Analytische Chemie,

an erster Stelle möchte ich mich bei Professor Belder bedanken, der mich nicht nur erfolgreich für diesen Preis vorschlug, sondern mir auch die Möglichkeit bot, im



Rahmen meiner Bachelorarbeit ein ungeheuer spannendes Feld der Chemie kennenzulernen und mich dafür zu begeistern.

Die Faszination für die Chemie entstand bereits in meiner Schulzeit und führte mich unmittelbar nach Abschluss meines Abiturs im Jahr 2016 an die Universität Leipzig, wo ich drei Jahre später meine wissenschaftliche Abschlussarbeit über die Charakterisierung der Ionenmobilitätsspektroskopie und die Kopplung mit der Chip-Elektrochromatographie anfertigte. Derart vernarrt in die Thematik schloss ich der regulären Forschungszeit eine Anstellung als studentische Hilfskraft an, um noch tiefere Einblicke in die Analytik und deren Techniken zu erlangen. Neben dem intrinsischen Interesse an der Thematik war es mir stets außerordentlich wichtig, zielorientierte Forschung betreiben zu können, deren zukünftiger Nutzen und breite Anwendung klar ersichtlich waren. Die Ionenmobilitätsspektroskopie war von Anfang bestechend einfach in ihren grundlegenden Prinzipien, dafür aber umso komplexer im Detail und reich an Spielraum für Veränderungen und Modifikationen. Die Durchführung der ersten Kopplung mit der Chip-elektrochromatographie war eine großartige Erfahrung für mich – insbesondere in Hinsicht auf die Möglichkeit, ein handliches 2-D-Analyseinstrument für die Feldforschung zu konstruieren.

Überhaupt war es eine spannende Herausforderung, Analysemethoden aufeinander abzustimmen und zu verbessern. Weiterführende Untersuchungen und eine Kopplung am Massenspektrometer komplettierten schließlich eine umfangreiche Bachelorarbeit, die mir einen weiten Überblick über die Methoden der Analytik verschaffte.

Trotz vieler positiver Erfahrungen in Leipzig habe ich den Wechsel in den Masterstudiengang genutzt, um nun die Universität Heidelberg kennenzulernen und mich damit ganz neuen Herausforderungen zu stellen. Durch Corona bin ich in meiner Forschungstätigkeit zurzeit leider deutlich ausgebremst. Jedoch habe ich

nun alle Präsenzveranstaltungen vor Ort abgeschlossen und plane, meine noch offenen Forschungspraktika anderswo zu absolvieren, um weitere Städte und Länder kennenzulernen. Auch wenn der Masterstudiengang Chemie in Heidelberg keinen außerordentlichen Schwerpunkt auf die Analytik setzt, so freue ich mich auf weitere Praktika und die kommende Masterarbeit in diesem Bereich.

Julius Schwieger

Hannes Westphal

Universität Leipzig
Master

■ Liebe Mitglieder der FG Analytische Chemie,

ich möchte diese Gelegenheit nutzen, um mich herzlich für die Verleihung des Absolventenpreises 2019 an der Universität Leipzig zu bedanken. Insbesondere bedanke ich mich bei Professor Detlev Belder, der mich für diesen Preis vorgeschlagen hat, und möchte mich Ihnen an dieser Stelle kurz vorstellen.

Nach abgeschlossenem Abitur begann ich zunächst ein Ingenieursstudium an der TU in Hamburg-Harburg, wechselte jedoch zeitnah in den Bachelorstudiengang Chemie an der Universität Leipzig.

Während des Bachelorstudiums entwickelte ich zunächst ein großes Interesse an der Biochemie und Analytik, sodass ich schlussendlich auch meine Bachelorarbeit in der Bioanalytik anfertigte. Im Masterstudium legte ich meinen Fokus stärker auf die allgemeine Analytik und absolvierte ein Praktikum in der Forschungsgruppe von Professor Belder zur Elektrochromatographie in mikrofluidischen Systemen. Anschließend arbeitete ich als wissenschaftliche Hilfskraft an weiteren Projekten der Arbeitsgruppe zur Miniaturisierung der Analytik und entwickelte so eine große Begeisterung für den Fachbereich.

Im Rahmen eines spannenden Erasmussemesters in Uppsala in



Schweden vertiefte ich mein Wissen zur Trenntechnik und Massenspektrometrie weiter. Es bot sich mir zusätzlich die Möglichkeit eines Praktikums in der Arbeitsgruppe von Klas Hjort, welche sich ebenfalls mit der Mikrosystemtechnik befasst. Während meiner dortigen Zeit entwickelte ich eine chipbasierte absorptions-spektroskopische Detektoreinheit und sammelte Erfahrung in einem großflächigen ISO-2-Reinraum. Besonders spannend war dabei für mich, den unterschiedlichen Blickwinkel von Chemieingenieuren aus dem Fachbereich kennenzulernen.

Meine Masterarbeit verfasste ich dann wieder in Deutschland und entwickelte ein System zur Kombination von chipbasierten Durchflussreaktoren und einer integrierten chromatographischen Trenneinheit sowie der Möglichkeit zur massenspektroskopischen Kopplung. Ich untersuchte dabei mit im μ -Durchflussreaktor immobilisierten Organokatalysatoren stereoselektive Synthesen und analysierte diese mit chiraler Chromatographie und Massenspektrometrie.

Aufgrund des interessanten Forschungsumfelds und der angenehmen Arbeitsatmosphäre entschied ich mich nach meiner Abschlussarbeit, in Leipzig zu bleiben und begann eine Promotion in der Arbeitsgruppe von Professor Belder. Dabei versuche ich, weitere nachhaltige Synthese- und Analysestrategien für mikrofluidische Systeme zu entwickeln und gleichzeitig durch Automatisierung den Durchsatz sowie die Anwenderfreundlichkeit zu erleichtern. Insbesondere aufgrund des verringerten Ressourcenverbrauchs durch die Miniaturisierung der Reaktorführung bieten sich so Vorteile zur Ökonomie, Ökologie und Sicherheit.

Besonders interessant an meinem Projekt finde ich, dass sich mir aufgrund der vielfältigen Anwendungen solcher chipbasierten Systeme viele Möglichkeiten zur interdisziplinären Zusammenarbeit mit Arbeitsgruppen aus anderen Fachbereichen ergeben. So kann ich stets Sichtweisen aus anderen Bereichen kennenlernen und ständig dazulernen.

Hannes Westphal

analytica 2020

Sehr gute Ergebnisse im digitalen Format

19. bis 23. Oktober, online

■ Insgesamt 21 641 Teilnehmer (Unique Users) aus 152 Nationen nahmen an der erstmals rein virtuell durchgeführten Weltleitmesse für Labortechnik, Analytik und Biotechnologie teil. 268 Aussteller aus 24 Ländern präsentierten mehr als 700 Produkthighlights. Es gab insgesamt mehr als 33 000 Teilnahmen an den 200 Aussteller-Webinaren sowie an den 119 wissenschaftlichen Vorträgen der analytica conference. Topthema war das Labor der Zukunft und die digitale Transformation.

„Viele Kunden in allen Bereichen unseres Messegeschäfts äußern, dass insbesondere die Neukundengewinnung über virtuelle Plattformen nur bedingt möglich ist“, sagt Reinhard Pfeiffer, stellvertretender Vorsitzender der Geschäftsführung bei der Messe München. „Dennoch betonten viele analytica-Kunden jetzt, dass es richtig und wichtig war, die analytica virtual in Zeiten von Corona durchzuführen. Das Ergebnis festigt die Stellung der analytica als Weltleitmesse. Bei der kommenden Präsenzmesse im Juni 2022 werden wir die jetzt gesammelten Erkenntnisse nutzen und unser Angebot digital erweitern.“

Die Messe München veranstaltete die analytica virtual 2020 gemeinsam mit Luminos.

Hoher Auslandsanteil

■ Die 24-Stunden-Erreichbarkeit der digitalen Plattform für einen einfacheren globalen Zugang zahlte sich aus: Die analytica 2020 verzeichnet den höchsten internationalen Anteil in ihrer Geschichte. 50 Prozent der insgesamt 21 641 Teilnehmer (Unique Users) kamen aus dem Ausland. Top-Nutzerländer waren nach Deutschland (in dieser Reihenfolge): Schweiz, USA, Großbritannien, Österreich und Indien. Die Auswertung zeigte in den Morgenstunden mitteleuropäischer Zeit einen starken Teil-

nehmerzuspruch aus Asien, in den Abend- und Nachtstunden strömten viele Amerikaner auf die Plattform. Durchschnittlich waren an jedem der fünf Veranstaltungstage mehr als 5000 Teilnehmer auf der virtuellen analytica aktiv – in der Spitze sogar über 7000.

Für bestmögliche Orientierung teilten sich die Stände der 268 internationalen Aussteller in sechs virtuelle Messehallen auf. Diese widmeten sich den Bereichen Premieren, Analytik & Messtechnik, Labortechnik, Biotech & Bioanalytik, Diagnostik & Medizin sowie Start-ups. Die technisch bedingte Begrenzung auf maximal vier präsentierte Produkte pro Stand stellte sicher, dass nur absolute Highlights und Innovationen gezeigt wurden. Per Text-, Audio- oder Video-Chat konnten Besucher direkt mit den Ausstellern in Kontakt treten.

Stark gebuchtes Vortragsprogramm

■ Aus dem umfangreichen Vortragsprogramm wurden vor allem Themen rund um digitale Transformation, Laborautomation und Datenmanagement nachgefragt. Mehr als 24 000 Teilnahmen gab es für die 200 Ausstellervorträge.

Die analytica conference konnte ihr Top-Niveau halten. Sie vermeldet mit 2126 Besuchern gleichbleibende Werte im Vergleich zur Rekordveranstaltung 2018. Für die 119 Vorträge registrierten die Systeme mehr als 9300 Teilnahmen. Alle Vorträge wurden während der fünf Veranstaltungstage mehrmals wiederholt.

Positive Stimmen von Ausstellern

■ Aussagen von Ausstellern unterstreichen den Erfolg der analytica 2020: „Wir bei Merck haben festgestellt, dass die Premieren-Halle unseren Innovationen eine hohe Sichtbarkeit verlieh. Wir begrüßen die Webinare zum Austausch von Wissen und



Mehr als 21 600 Teilnehmer informierten sich auf der analytica virtual.

(Foto: Messe München)

Kompetenzen, die sehr gut besucht sind und internationale Reichweite haben. Wir freuen uns aber definitiv auch, auf der analytica 2022 wieder zusammenzukommen und praktische Demonstrationen in den Live Labs zu geben“, sagt Véronique Batifort, Head of European Conferences and Exhibition Research & Applied bei Merck Life Science.

Ruben Lonneville, Global Marketing Manager, Customer Engagement bei Thermo Fisher Scientific, bestätigt: „Die analytica virtual war eine gute Gelegenheit, mit unseren Kunden in Kontakt zu treten. Die Möglichkeit zur virtuellen Präsentation neuer Produktinnovationen und Beantwortung von Kundenfragen in Echtzeit war ein wertvoller Bestand-

teil der digitalen Messe. Die analytica wird auch in Zukunft eine wichtige Plattform für uns sein, um mit unseren geschätzten Wissenschaftlern in Kontakt zu treten und mit ihnen zusammenzuarbeiten. Auch wenn wir alle hoffen, dass eine Rückkehr zur physischen Veranstaltung im Jahr 2022 möglich sein wird, glauben wir fest daran, dass sich die Zukunft der analytica zu einem kombinierten Live- und Digital-Erlebnis entwickeln sollte.“

Die nächste analytica findet von 21. bis 24 Juni 2022 als Präsenzmesse auf dem Gelände der Messe München statt. Einmalig wird die Veranstaltung zeitgleich mit der automatica, Leitmesse für intelligente Automation und Robotik, und der ceramitec, dem internationalen Treffpunkt der Keramikindustrie, durchgeführt. Digitale Angebote werden die Messe weiterhin ergänzen.

Quelle: Messe München

analytica conference – Sessions

Non-Target-Screening für ein zukünftiges Wassermonitoring

Der Fachausschuss Non-Target-Screening der Wasserchemischen Gesellschaft wurde 2009 gegründet und beschäftigt sich seither mit Themen wie der Erarbeitung von Strategien für das Non-Target-Screening, Untersuchungen zur Vergleichbarkeit von Ergebnissen auf Grundlage verschiedener Analysegeräte und Qualitätssicherungsaspekten. Bei der diesjährigen virtuellen analytica conference präsentierten Vortragende in vier Vorträgen die Fortschritte anhand von Praxisbeispielen, die Möglichkeiten und Grenzen bei der Identifizierung von Unbekannten sowie die Entwicklungen neuer Strategien, um die Datenauswertung im Hinblick auf eine notwendige Standardisierung zu unterstützen.

■ Der Eintrag von organischen Mikroverunreinigen in Gewässer stellt die Analytik zur Überwachung der Gewässerqualität vor eine große Herausforderung. Mit Flüssigkeitsschromatographie gekoppelt mit hochauflösender Massenspektrometrie (LC-HRMS) lassen sich Screening-Ansätze durchführen, sodass sich Wasserproben umfassender als mit der Target-Analytik allein charakterisieren lassen. Das Non-Target-Screening (NTS) beruht darauf, dass

durch chromatographische Auftrennung einer Wasserprobe mit unbekanntem Inhaltsstoffen und deren massenspektrometrische Detektion mit geeigneter Software zunächst sogenannte Features erkannt werden. Ein Feature zeichnet sich durch eine Kombination des Masse-zu-Ladungsverhältnisses, der Retentionszeit und Intensität aus. Besonders wichtig, um falsch positive Befunde zu verringern und gleichzeitig falsch negative Befunde zu vermeiden, sind die Aus-

wahl der Kriterien zur Peakerkennung, beispielsweise Peakbreite, Signal zu Rauschen und Streuung der Signalintensität bei Mehrfachmessung. Somit lassen sich neben bekannten organischen Substanzen auch unbekannte, bisher nicht beachtete Substanzen untersuchen. Ein weiterer Vorteil ist, dass sich Substanzen auch retrospektiv analysieren lassen. Im Falle einer neu identifizierten Substanz kann die retrospektive Auswertung anhand bereits vorliegender

HRMS-Daten wertvolle Informationen liefern.

Eine wichtige Voraussetzung ist die Vergleichbarkeit der Analyseergebnisse unabhängig vom Labor und dem verwendeten LC-HRMS-System. Basierend auf dieser Anforderung hat der Fachausschuss Non-Target-Screening der Wasserchemischen Gesellschaft einen Leitfaden erstellt, der die praktischen Erfahrungen des Non-Target-Screenings mit LC-ESI-HRMS zusammenfasst.¹⁾ Diesen stellte Wolfgang Schulz vom Zweckverband Landeswasserversorgung in Langenau im Vortrag vor. Der Leitfaden soll dem Anwender bei der Methodenentwicklung und Interpretation der Ergebnisse helfen.

Der Aufbau des Leitfadens basiert auf der allgemeinen Struktur eines Analysenverfahrens, und er beschreibt vor allem Anforderungen an die Messtechnik, Interpretation der Daten sowie Qualitätssicherungsmaßnahmen. Die Verwendung unterschiedlicher HRMS-Geräte verschiedener Hersteller mit unterschiedlichen Ionenquellendesigns (Elektrospray-Ionisation, ESI) und verschiedenen Softwarelösungen wirft in erster Linie die Frage nach der grundlegenden Vergleichbarkeit der NTS-Ergebnisse auf. Deshalb entwarfen Mitglieder des Fachausschusses zwei Vergleichsstudien. Dabei wurden u.a. Unterschiede in der Nachweisgrenze und der Messgenauigkeit der verwendeten HRMS-Systeme untersucht und die Konzentrationsabhängigkeit ermittelt, um dotierte Substanzen in einer realen Matrix zu identifizieren. Aus dem Vergleich der Methoden und Workflows ergaben sich die Gemeinsamkeiten und Probleme bei der Datenerfassung und Datenanalyse.

Frederic Béen vom KWR Water Research Institute in Nieuwegein, NL, präsentierte am Beispiel des Monitorings der Maas, welche als Trinkwasserressource für etwa 6 Millionen Menschen dient, das Non-Target-Screening als Erweiterung des Target-Monitorings. Da der Detektionsbereich der Substanzen von der angewendeten Chromatographie abhängig ist, spielten neben der Chromatogra-

phie mit Umkehrphasen zur Erfassung semi-polarer Stoffe auch chromatographische Trennungen für polare Stoffe mit HILIC oder Mixed-Mode-Chromatographie eine wichtige Rolle, um eine möglichst große Palette an polaritätsunterschiedlichen Substanzen nachzuweisen. Béen zeigte in seinem Vortrag auch, dass es möglich ist, die Konzentration ohne Referenzstandard abzuschätzen. Als Fazit wies er auf die Vorteile des kombinierten Ansatzes aus Target-Suspect- und Non-Target-Analytik für das Monitoring hin. In dieses sollten auch Bioassays einbezogen werden, um besonders in der Non-Target-Analytik unbekannt Substanzen zu priorisieren.

Vanessa Hinnenkamp vom IWW Zentrum Wasser in Mülheim an der Ruhr stellte in ihrem Vortrag Möglichkeiten und Grenzen bei Identifizierungsversuchen am Beispiel von zwei unbekannt Substanzen vor. Bei der Non-Target-Untersuchung eines Trinkwasseraufbereitungsprozesses, bei dem Trinkwasser aus einer Talsperre gewonnen wird, ließ sich im Roh- und Trinkwasser durch Priorisierung nach Datenaufbereitung ein Feature als Metoprololsäure/Atenololsäure identifizieren, ein Abbauprodukt aus den beiden \square -Blockern Metoprolol und Atenolol. Das geschah durch Datenbankrecherche mit der FOR-IDENT-Datenbank. Ein anderes Beispiel aus der Praxis zeigte, dass ein Treffer mit einer Datenbank für das Fungizid Banalaxyl in einer Rheinprobe sich beim Abgleich mit der Referenzsubstanz nicht bestätigte. Auch durch Einbezug aufwendigerer Untersuchungen zur Strukturaufklärung, u.a. mit $^1\text{H-NMR}$ -Experimenten, ließen sich keine möglichen Molekülstrukturen vorschlagen. Dennoch gewann man auch ohne Identifizierung wichtige Informationen zu diesem Feature und machte das Einzugsgebiet auffindig. Darüber hinaus ließ sich ermitteln, dass das Feature auch im Uferfiltrat detektiert wird, wodurch eine potenzielle Gefährdung des Trinkwassers besteht. Insgesamt zeigte sich, dass die Erweiterung von Spektrendatenbanken besonders wert-

voll ist und das auch der Austausch zwischen Laboren ein wichtiger Bestandteil ist – das setzt allerdings eine gute Vergleichbarkeit des Non-Target-Screenings voraus.

Nikolaos S. Thomaidis von der Universität Athen, GR, präsentierte Non-Target-Screening unterstützende Software und chemometrische Modelle. Unter anderem berichtete er über die Entwicklung von Structure-Retention-Relationship (QSRR)-Ansätzen, um die Retentionszeit neuer Verbindungen vorherzusagen, und über Retentionszeit-Indices (RTI), die dazu beitragen, die Retentionszeiten von LC-Systemen zu harmonisieren. Um die ökotoxikologischen Auswirkungen von organischen Substanzen zu bewerten, wurde ein Risikobewertungsalgorithmus entwickelt, um die akute wachstumshemmende Toxizität neu identifizierter Verbindungen gegenüber drei Wasserorganismen (*Daphnia magna*, *Pimephales promelas* und *Selenastrum capricornutum*) vorherzusagen. Darüber hinaus berichtete Thomaidis über die Aktivitäten des NORMAN-Netzwerks. Mit der NORMAN SusDat-Datenbank, die frei verfügbar ist, kann der Anwender darauf basierende umfassende Suspect-Screening-Untersuchungen durchführen.²⁾

Vanessa Hinnenkamp,
IWW Zentrum Wasser,
Mülheim an der Ruhr
und

Wolfgang Schulz,
Zweckverband Landeswasserversorgung,
Langenau

Referenzen

1) W. Schulz, T. Lucke et al., *Non-Target Screening in der Wasseranalytik – Leitfaden zur Anwendung der LC-ESI-HRMS für Screening-Untersuchungen*, 2019.

Download unter:

www.wasserchemische-gesellschaft.de

2) NORMAN SusDat-Datenbank

Download unter: <https://www.norman-network.com/?q=suspect-list-exchange>

Bioanalytics II

■ Nachdem die *analytica 2020* als Präsenzveranstaltung abgesagt werden musste, war es den Vortragenden möglich, ihre Vorträge virtuell einzureichen. In der Vortragsreihe „ABC: Bioanalytics II – Analytics enabling the concept of Anywhere Care“ nahmen bis auf einen Vortragenden alle Teilnehmer diese Möglichkeit wahr. Es kam sogar noch ein Vortrag zum Einsatz von Sensoren in der Prozessanalytik hinzu. Dadurch stellte diese Vortragsreihe die Möglichkeiten von Sensoren in den Bereichen Point-of-Care (POCT), Point-of-Need und in der Prozessanalytik, d.h. allgemein im täglichen Leben (Anywhere) dar. Insbesondere ergänzen heute Biosensoren die klassischen Bereiche der Analytik, sei es bei Schnelltests, in der kontinuierlichen Überwachung von Prozessen oder nicht zuletzt als Ergänzung zur Analytik in den Zentrallaboren der Kliniken, in Ambulanzfahrzeugen, in der Notaufnahme, in Arztpraxen und bei der Nachsorge von Patienten zuhause.

Eine typische Anwendung stellte Elisabeth Hall (University of Cambridge, UK) in „Point of Care Diagnostics in Low Income Countries: the Challenge of Affordability“ vor. Gerade in ärmeren Ländern sind Infektionskrankheiten eine Hauptursache für die hohe Sterberate. Da die klassische Analytik in diesen Ländern entweder nicht vorhanden oder zu teuer ist, fehlen die Werkzeuge, um Infektionen zu identifizieren und damit antibiotisch richtig zu behandeln. Es wurde daher ein Gene-to-Diagnostics-Ansatz vorgestellt, bei dem ein multifunktionales Fusionsenzym als Reagenz in der Point-of-Care-Diagnostik durch gemeinsame Genexpression hergestellt und eingesetzt wird. Die Leistungsfähigkeit wurde anhand des Nachweises von Sarcosin in Urin gezeigt.¹⁾

Bei POCT sind Immunreaktionen die übliche Grundlage des Verfahrens. Aus diesem Grunde gibt es sehr viele Ansätze, die optimierten Erkennungsstrukturen herzustellen. Der Vortrag von Maria Moreno-Bondi (Complutense University of Madrid, ES) „Mycotoxin mimotopes: exploring alternative

immunosensing approaches“ diskutierte den Einsatz von Mimotopen: Sie sind als Peptide zu verstehen, die Epitope nachahmen. Eine Phagen-Peptid-Bibliothek wurde benutzt, um spezifische Klone für verschiedene Mykotoxine zu identifizieren. Es wurde ein Assay entwickelt, bei dem das Limit of Detection (LOD) für Fumonisin B₁ (FB₁) bei 1,1–0,3 ng/mL⁻¹ lag. FB₁ gehört zu einer Gruppe von chemisch sehr ähnlichen Mykotoxinen und kommt vor allem in Mais, Weizen und anderen Cerealien vor, stellt also in der Landwirtschaft ein bedeutendes Fraßgift dar. Als Detektionsmethode für das Assay diente die Oberflächenplasmonenresonanz (SPR).²⁾

Teststreifen werden schon lange für eine schnelle und einfache Untersuchung von Analyten mit minimalem gerätetechnischem Aufwand eingesetzt. Meist werden optische Methoden wie Reflexion oder Lumineszenz verwendet. Diesen Ansatz in der Nahrungsmittel- und Wasseranalyse präsentierte der Vortrag von Axel Dürkop (Universität Regensburg) „Optical sensing with dipsticks in food and water analysis“. Der Einbau von Nah-Infrarot-Farbstoffen in Zelluloseacetatnanofasern ermöglicht eine Sensorschicht mit drei verschiedenen Auslesemöglichkeiten: Biogene Amine lassen sich in Nahrungsmitteln entweder über Farbstoffwechsel, über die Veränderung der Reflexion oder über die Fluoreszenz quantifizieren. Dabei sind die gewählten Teststreifen selektiv für primäre Amine, und ihre Leistungsfähigkeit zeigte sich in Realproben. Ähnliche Möglichkeiten bietet die Immobilisierung von Cuprizonen in ein Polyurethanpolymer zum Nachweis von Kupferionen. Dies ist von Interesse für den Nachweis von Grenzkonzentrationen von Kupfer, die laut WHO oder EU für Trinkwasser noch zulässig sind.³⁾

Der Vortrag von Rodrigo Rocha de Oliveira (Universität de Barcelona, ES) „Data fusion strategies to combine process sensor and NIR-based multivariate model outputs for Multivariate Statistical Process Control“ stellte die

Möglichkeiten dar, mehrere Sensoren zu kombinieren und somit in Prozessanalysetechnik (PAT) unter Einsatz von Chemometrie in der Industrie während eines Prozesses wichtige Informationen schnell zu erhalten. Die multivariate statistische Prozesskontrolle (MSPC) lässt sich zur Endpunktbestimmung einsetzen, sei es bei einem Produktionsprozess für Polyester oder in der pharmazeutischen Industrie. Die Bedeutung solcher Modellierungen anhand von Sensordaten und der dadurch möglichen Prozesssteuerung zeigt sich auch bei den Destillationsprozessen in der Kraftstoffherstellung. Die vorgeschlagenen Strategien lassen sich generell für verschiedene analytische und bioanalytische Prozesse einsetzen, bei denen mehrere Sensoren Informationen für eine Modellierung liefern.⁴⁾

Diese Vorträge zeigten die Breite der Anwendungsmöglichkeiten von Sensoren, deren Nutzung von Arrays und somit die Möglichkeit des Einsatzes von modellbehafteten und modellfreien Auswerteverfahren für die verschiedensten Anwendungen. Die virtuelle Konferenz ermöglichte immerhin das Verfolgen dieser Vorträge, die bei einer Präsenzveranstaltung sicherlich zu guten Diskussionen geführt hätten. Sie zeigten einen interessanten Bereich der Analytik, wie er auch – durch die Zitate belegt – in neueren Ausgaben des Journals *Analytical and Bioanalytical Chemistry* dargestellt wird. Einige der bei der *analytica* conference virtuell gehaltenen Vorträge werden sicher auch in der zur *analytica* geplanten Topical Collection zu finden sein.

Günter Gauglitz
Michael Maiwald

Literatur

- 1) C.J. Henderson, E. Pumford, D.J. Seevaratnam, R. Daly, E.A.H. Hall, *Biomaterials* 2019, 193, 58.
- 2) M.C. Moreno-Bondi et al., *Anal. Bioanal. Chem.* 2019, 411, 6801..
- 3) A. Duerkop et al., *Anal. Bioanal. Chem.* 2018, 410, 1111.
- 4) R. R. de Oliveira, C. Avila, R. Bourne et al., *Anal. Bioanal. Chem.* 2020, 412, 2151.

Emerging Topics in Analytical Toxicology, Forensics, and Doping Control

Virtual Joint Symposium with GTFCh and GDCh

■ Professor Hans H. Maurer has been regularly invited by the German Chemical Society to organize one of the analytica conference symposia on behalf of the Society of Toxicological and Forensic Chemistry (Gesellschaft für Toxikologische und Forensische Chemie, GTFCh). The GDCh/GTFCh joint symposium was planned for Tuesday, 20 October, but was replayed three days later to allow even more interested attendees to participate as all presentations needed to be pre-recorded. The audience required to register for the virtual trade fair for free and to book the selected presentations of the analytica conference program afterwards. Ten presentations were included in the symposium, which was divided into three sessions leading to a whole day of exciting science.

The first session was dedicated to “Isotope Ratio Mass Spectrometry (IRMS) in Analytical Toxicology”. The first talk was entitled “Role of IRMS in Live Sciences with Focus on Forensic Sciences” and given by Andreas Rossmann (isolab, Schweitenkirchen). Rossmann gave an introduction and examples for the application of IRMS in our daily life such as authenticity control of foodstuff, but also underlined the potential of IRMS analyses of different human tissues for forensic investigations. In this context, he presented a case of an unknown, dead female found in Austria in the 1990s. Due to the results of the stable isotope analysis, the origin of the female was predicted to be from the Northern Caribbean and the woman could be identified as missing person from the Dominican Republic only two weeks later.

The second talk dealing with the “Profiling of New Psychoactive Substances by IRMS” was given by Michael Pütz from the Federal Criminal Police Office Wiesbaden. Pütz described the significance of drug profiling for the comparative characterization of the physical and chemical

properties of illicit drugs helping police authorities to establish links between samples of different seizures, to obtain information on trafficking routes, and to gather background information on the origin of samples. Drug profiling was described to be especially important for the new psychoactive substances (NPS) acting as synthetic cannabinoid receptor agonists (SCRA). In a large field study, the prevalent and hazardous SRCA MDMB-CHMICA was assessed via a flash-chromatography/UHPLC-MSⁿ impurity profiling workflow combined with IRMS analysis in numerous pure samples and Spice products of various brands from test purchases and police seizures. The stable isotope ratios and impurity signatures for the herbal blends led to the conclusion that most samples contained MDMB-CHMICA from one source but individual synthesis batches.

The final talk of the first session, entitled “Power of IRMS in Doping Control”, was given by Corinne Buisson (French Anti-Doping Laboratory, Châtenay-Malabry, France). Buisson stated that anabolic androgenic steroids remain the most reported substances in doping controls and that the presence of exogenous steroids can be easily achieved by conventional mass spectrometry methods. However, the determination whether endogenous steroids such as testosterone have been misused or not is more challenging. IRMS can proof the exogenous administration of endogenous steroids by establishing the isotopic signature of a target compound and is therefore routinely applied by anti-doping laboratories to investigate suspicious steroid profiles determined from each athlete. Most cases are analysed due to suspected testosterone misuse, but analytical procedures for other substances such as 19-norandrosterone or boldenone have also been developed and even more applications of IRMS in doping control are in the pipeline.

The second session of the symposium focused on “Omics and MALDI Applications in Analytical Toxicology and Antidoping”. The first talk was given by Markus R. Meyer from the Department of Experimental & Clinical Toxicology of the Saarland University in Homburg. His talk gave an excellent survey of the “Current Role of Omics in Analytical Toxicology”. While the application of OMICS or OMICS-like techniques is gaining more and more interest, most studies in clinical and forensic toxicology were dedicated to understanding the acute or chronic effects of drug intake, drug addiction, and/or finding markers to verify their (chronic) consumption. Nevertheless, only few studies are available to date performed with rather small sample sizes and poor comparability due to use of different species, experimental conditions, and other factors. Therefore, Professor Meyer concluded that more studies are needed to elucidate the benefit of OMICS or OMICS-like techniques in clinical and forensic toxicology particularly in contrast to already established techniques.

The following presentation was given by Luca Narduzzi (Laboratory for the Study of Residues and Contaminants in Food, Nantes, France). He focused on the „Role of Metabolomics in the Antidoping Toolbox” and described the gap between the detectability of doping substances right after administration and their effect represented by modifications of the athletes’ metabolism and illicit advantage over fair competitors as one of the main limitations in anti-doping. The signature of prohibited substances, such as the substance itself and its metabolites (referred to as markers-of-exposure), disappears from athletes’ bio-fluids within hours or few days, while their effects on the metabolism (so-called markers-of-effect) remain longer (sometimes over weeks). Anti-doping strategies are now moving towards the detection of

markers-of-effect using metabolomics technologies, but current limitations must be considered.

The next talk was entitled „Fingerprint Development Methods for Touch Chemistry of Drugs and Explosives Using MALDI-TOF MS” and was given by Marc A. LeBeau from the laboratory of the Federal Bureau of Investigation in Quantico, USA. As chemical analysis of latent fingerprints, otherwise known as “touch chemistry”, may be able to provide leads or other forensically-relevant information in criminal investigations, the potential for touch chemistry using matrix-assisted laser desorption ionization/time-of-flight mass spectrometry (MALDI/TOF MS) to obtain molecular spatial distribution of target drugs and explosives across fingerprint residues was evaluated. Drug (procaine and pseudoephedrine) and explosive (TNT and RDX) powders and residues were successfully identified in fingerprints under laboratory conditions using conventional fingerprint development methods and MALDI matrix and these results suggested that continued development of touch chemistry applications could prove useful for intelligence and investigations.

The last talk of the second session was given by Eva Cuypers (Multimodal Molecular Imaging Institute of the University of Maastricht, The Netherlands) and dealt with “Mass Spectrometry Imaging in Forensic Research and Practice”. The interest in molecular mass spectrometric imaging (MSI) has grown over the past few years in the field of forensic sciences because it allows the conservation of sample spatial resolution. The techniques are label-free and rely on the desorption of molecules present on the surface of a solid flat sample. The newest generation of MSI techniques provide several opportunities on alternative forensic matrices such as hair and bone, but specific sample preparation as well as advantages and drawbacks of different techniques must be considered.

The final session of the symposium was entitled “Protein Analysis and Alternative Tools for Drug Metabolism Studies and Sampling in Bio-

analysis” and was opened by the talk of Roland Staack from the Roche Innovation Center Munich. Staack asked the question “Bioanalysis of therapeutic proteins – What is the „correct“ result and what is the right technology?”. Bioanalysis of therapeutic proteins is challenged by the potential presence of binding partners such as soluble targets, shredded receptors, or the presence of anti-drug antibodies. As a result, the drug could be present in a sample in a complexed and thus neutralized form and dependent on the required information, a bioanalytical strategy clearly discriminating between the different drug forms might be required. The presentation also covered the bioanalytical challenges of correct free/active and total drug quantification as well as concepts to identify potential method limitations for appropriate method development and validation.

My own presentation followed dealing with “Alternative Tools for Metabolism Studies of Drugs of Abuse”. The continuously increasing number of NPS available on the drugs of abuse market poses a challenge for clinical and forensic toxicologists as the inclusion of metabolites in mass spectral libraries is crucial, especially for urine screening purposes. Authentic human samples may represent the gold standard for identification of metabolites but are often not available and clinical studies cannot be performed due to ethical concerns. However, numerous alternative in vitro and in vivo models are available, such as human liver cell preparations, intact human liver cells, zebrafish larvae, rodents, or pigs, with individual advantages and disadvantages.

The final talk was given by Olof Beck from the Department of Clinical Neuroscience of the Karolinska Institute in Stockholm, Sweden. He talked about “Novel Strategies for Microsampling – Dried Matrix Spots and Exhaled Breath”. The development of bioanalytical technologies has resulted in the possibility of using alternative sampling procedures to venous blood and urine for toxicologi-

cal investigations. While the use of DBS for bioanalytical investigations is well established, the challenge has been to develop a solution for the need of the specimen with a known and exact volume of the dried blood and the production of dried plasma spots by filtering the blood as alternative to DBS. Exhaled breath carries aerosol particles from the lung that are formed from the airway lining fluid during the normal breathing maneuver. Exhaled breath has been demonstrated to be useful for detection intake of large number of misused and therapeutic drugs and an improved device for collecting exhaled aerosol particles has been developed. The easiness of collecting this specimen may provide a possibility of sampling at roadside or studying drug use in the society in the future.

Even if this year’s GDCh/GTFCh joint symposium was a special one due to the virtual nature and the lack of interaction between speakers and audience, the exciting and diversified agenda inspired and united scientists from clinical and forensic toxicology.

*Lea Wagmann,
Center for Molecular Signaling (PZMS),
Saarland University, Homburg
lea.wagmann@uks.eu*



**Immer
einen Schritt
voraus ...**

Die GDCh bei   

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

Pushing the Limits of Separation: Still Much to Discover

Session Chair: Martin Vogel, Heiko Hayen

■ Die virtuelle Reise durch Methoden und Anwendungen der modernen Flüssigchromatographie stieß mit durchschnittlich 135 Teilnehmenden auf sehr gute Resonanz. Die Session umfasste aktuelle Entwicklungen und anspruchsvolle Anwendungen aus vielfältigen Gebieten (Bio-, Pharma- und Umweltanalytik) sowie den Trend der hochauflösenden Massenspektrometrie als Detektionsmethode. Trotz der Entwicklung hin zu sensitiver und selektiver Detektion verkommt die Flüssigchromatographie keinesfalls zu einer simplen Probenzufuhrtechnik, was die vier Sprecher eindrucksvoll unter Beweis stellten. Stetig wachsende Anforderungen an Effizienz und Selektivität sowie an den Informationsgehalt der Trennung sind Impulsgeber für permanente Weiterentwicklungen.

Die Session eröffnete Stefan Lamotte (BASF, Ludwigshafen) mit „Selectivity vs. Plate Count: From long columns and orthogonal selectivity – Where are the limits?“ Zur Sicherstellung der Produktqualität steigen in der chemischen Industrie die Anforderungen an die HPLC nicht nur im Hinblick auf die Peakkapazität, sondern auch auf Selektivität und Schnelligkeit. Als weiteren wichtigen Aspekt stellte Lamotte die Automatisierbarkeit der Methoden vor, die Industrie-4.0-kompatibel sein sollten. Basierend auf der Wahl stationärer Phasen mit sich ergänzenden Selektivitäten, d.h. orthogonalen Trenneigenschaften, präsentierte er generische ein- und mehrdimensionale HPLC-Methoden, die in puncto Auflösungsvermögen und Selektivität bestechen.

Im anschließenden Vortrag stand ebenfalls die Selektivität der Trennung im Fokus. Diese ist essenziell bei der Analyse von Minoranteilen in komplexen Proben, etwa Lipidextrakten. Lipide unterscheiden sich in ihrer Polarität, sodass sowohl vollständig lipophile als auch amphiphile Vertreter auftreten. In „Reversed Phase vs. Hydrophilic Interaction Liquid Chromatography. Or even together?“ zeigte Heiko Hayen (Universität Münster),

wie sich diese amphiphilen Eigenschaften am Beispiel der Phospholipide und der Cardiolipine ausnutzen lassen. Durch die Hydrophile Interaktionsflüssigchromatographie (HILIC) als erste Dimension in einem zweidimensionalen heart-cut-Ansatz, lassen sich selektiv die Cardiolipine von weiteren, störenden Lipidklassen (z.B. Triacylglycerole oder Phosphatidylcholine) abtrennen und nach Transfer auf die zweite Dimension mit Umkehrphasen-HPLC und Kopplung mit der hochauflösenden Tandem-MS weiter differenzieren.

Die Ionenchromatographie als leistungsfähige Methode zur Analyse von sowohl Anionen als auch Kationen von kleinem und großem Molekulargewicht präsentierte Joachim Weiss (Thermo Fisher Scientific) in „Current Trends in Ion Chromatography“. Eine verbesserte Auflösung durch kleinere Partikel als stationäre Phase ist nur ein Aspekt der Weiterentwicklung der Ionenchromatographie in den letzten Jahren. Vielmehr wurden durch die elektrolytische Eluentengenerierung Kapillar-Ionenchromatographie-Systeme mit Flussraten von wenigen $\mu\text{L}/\text{min}$ realisiert. Die Online-Suppression eröffnet zudem einzigartige MS-Kopplungsmöglichkeiten. Beispiel hierfür ist die Kopplung mit der Electrospray-MS zur Ultraspurenanalytik von polaren Pestiziden wie Glyphosat oder zur Bestimmung von Halogenessigsäuren als Nebenprodukte der Wasserdesinfektion. Vielseitig ist auch die Kombination mit der induktiv-gekoppelten Plasma-MS (ICP-MS), die ergänzt durch die Electrospray-MS wertvolle Werkzeuge in der Speziation darstellen. Ein weiterer Trend ist die Verwendung von mixed-mode-Phasen, die es sogar ermöglichen, Anionen und Kationen in einer Messung zu bestimmen.

Höhepunkt der Session war die Auszeichnung von Michael Lämmerhofer (Universität Tübingen) mit der J.F.K. Huber Name Award Lecture. Den renommierten Preis der Österreichischen Gesellschaft für Analytische Chemie (ASAC) verlieh ihm der Präsi-



Michael Lämmerhofer, ausgezeichnet mit der J.F.K. Huber Name Award Lecture (Foto: I. Lämmerhofer-Hochhold)

dent der ASAC, Rudolf Krska von der Universität für Bodenkultur Wien in einer Video-Laudatio. Lämmerhofer erhält die Auszeichnung für seine herausragenden Beiträge zu den Grundlagen der HPLC einschließlich der Entwicklung stationärer Phasen, mixed-mode-Phasen, monolithischer Säulen und funktionalisierter Nanomaterialien. Damit reiht Lämmerhofer sich in die Liste führender Trenntechniker ein, die die Auszeichnung seit 2014 erhielten (Attila Felinger auf der ISC 2014 in Salzburg, Gert Desmet auf der HPLC 2017 in Prag und Fabrice Gritti auf der HPLC 2019 in Mailand). In seinem Vortrag „Chiral separations in the 21st century“ stellte Michael Lämmerhofer die Entwicklung und Charakterisierung von maßgeschneiderten stationären Phasen zur Enantiomertrennung vor. Durch oberflächenporöse oder vollporöse Partikel (mit Durchmessern von $< 2 \mu\text{m}$) und chirale chemische Selektoren werden nicht nur effiziente Enantiomertrennungen möglich – diese Phasen lassen sich auch in mehrdimensionalen Trennungen einsetzen. Beispielsweise zeigte er eine umfassende Trennung von Aminosäureenantiomeren mit einer Kombination aus zwei komplementären chiralen Phasen. Ausblickend ging Lämmerhofer auf enantioselektive Matrixeffekte bei der Electrospray-MS zur Quantifizierung von Aminosäuren ein, die den Untertitel der Session nochmals verdeutlichten: Still Much to Discover.

Heiko Hayen
Westfälische Wilhelms-Universität
Münster

Automatisierung und Visualisierung von Laborprozessen und Daten

Programmieren und Laborroboter bauen lernen – ein Online-Seminar für Studierende der Chemie, von April bis August 2020 erstmalig angeboten an der TU München

Industrie als Vorbild

Während in der chemischen Industrie Automatisierung weit entwickelt ist, sind in Forschungslaboren automatisierte Lösungen noch immer selten. Forschungsexperimente sind häufig einzigartig: Sie müssen exakt auf die jeweilige Forschungsfrage zugeschnitten werden. Um flexibel zu sein, ist es daher häufig einfacher, das Experiment manuell durchzuführen. Das geht jedoch zu Lasten von Effizienz und Genauigkeit. Zwar verfügen viele Forschungslabore über vollautomatisierte Messgeräte auf dem neuesten Stand der Technik, jedoch sind von der Probenvorbereitung bis zur Datenanalyse häufig viele repetitive manuelle Schritte notwendig, für deren Automatisierung den meisten Studierenden der Chemie die Kenntnis fehlt.

Daher war es unser Ziel, Chemikern mit einfachen Methoden zu zeigen, wie sie ihr Experiment vollständig automatisieren können, um wertvolle Zeit für die Interpretation der Ergebnisse und die Entwicklung neuer Ideen zu verwenden. Der experimentelle Fortschritt lässt sich so potenziell enorm beschleunigen und gleichzeitig die Reproduzierbarkeit von Experimenten und der Datenauswertung steigern. Weiterhin soll die Flexibilität durch maßgeschneiderte Automatisierung erhalten bleiben.

In unserem von dem Fonds der Chemischen Industrie geförderten Kurs „Automatisierung und Visualisierung von Laborprozessen und Daten“ lernten Studierende die Grundlagen der Programmierung in Python, Statistik und Robotik, um an Chemometrieprojekten und LEGO-Robotikprojekten zu arbeiten.

Digitales Konzept für Online-Lehre

Wir verwendeten die Online-Plattform Moodle und nutzten eine Kombination aus asynchronem Lernen über Video-Tutorials, interaktive Jupyter-Notebooks (eine Entwicklungsumgebung für Python) und regelmäßige Online-Sprechstunden, um sicherzustellen, dass alle Materialien verstanden und die Bedürfnisse der Studierenden erfüllt wurden.

Während der ersten acht Wochen unseres Kurses lernten die Studierenden zu programmieren und nutzten ihre neugewonnenen Fähigkeiten, um ihr eigenes Chemometrieprojekt mit Hilfe ihrer Betreuer zu realisieren. Der anschließende Bau des Roboters war schwierig zu orga-

nisieren, da die Studierenden darum baten, in Gruppen zu arbeiten, sich aber aufgrund der Covid-19-Einschränkungen nicht treffen konnten. Dennoch erfüllten wir diesen Wunsch, indem wir den Bau sowohl physischer als auch virtueller Versionen der Roboter unter Verwendung der Lego-EV3-Bausätze bzw. des Lego Digital Designers ermöglichten.

Alle Lektionen wurden interaktiv gestaltet und die besten Ideen der Studenten in unserer „Gallery of Awesome“ ausgestellt.

Programmieren lernen

Um die Studierenden mit der Programmierung in Python vertraut zu

```
#####TO DO: Find suited parameters, Check methods, Visualize results
fig = plt.figure(figsize=(15,5))
ax = fig.add_subplot(111)
ax.plot(Particle_377['wavenumber'], Particle_377['norm_intensity'], 'black', 'o',
        label='Original Normed Spectrum')
ax.plot(Particle_377['wavenumber'], Particle_377['lm_corrected'] + 0.5, 'blue', 'o',
        label='Local Medians + offset 0.5')
ax.plot(Particle_377['wavenumber'], Particle_377['als_corrected']*(100/
        Particle_377['norm_intensity'].max()) + 0.7,
        'green', label='Asymmetric Least Squares + offset 0.7')
ax.plot(Particle_377['wavenumber'], Particle_377['pd_corrected'] + 1.0, 'red',
        label='Peak Detection Baseline Correction + offset 1.0')
ax.set_xlabel('wavenumber / cm$^{-1}$')
ax.set_ylabel('normed intensity / a.u.')
ax.set_title('Particle 377')
plt.legend()
plt.show()
```

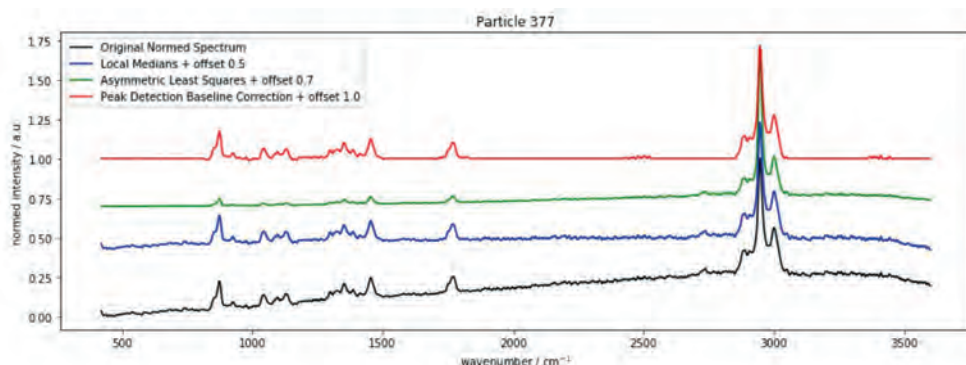


Abb. 1. Basislinienkorrektur, bearbeitet von Leandra Schuetz und Kevin Maier. oben: Code und unten: Output der verschiedenen durch die Studierenden zu implementierenden Algorithmen. (alle Abbildungen: E. von der Esch)

machen und den Umgang mit Daten und deren Visualisierung zu erlernen, wurden interaktive Python-Skripte zur Verfügung gestellt, die von den Studierenden mit Hilfe eines Videotutorials und Literaturangaben vervollständigt wurden. Nach dem Ausfüllen erhielten die Studenten Feedback zu ihrem Code von den Betreuern.

Anschließend lernten sie, ihr Wissen anzuwenden, um ihre eigenen Algorithmen zu erstellen. Die einfachste Art zu lernen, wie man einen Algorithmus schreibt, ist es, bereits vertraute Beispiele zu implementieren. Daher wurden die gebräuchlichsten statistischen Tests wiederholt, und die Studierenden implementierten ihre eigene Version des jeweiligen statistischen Tests in Python.

Die Ergebnisse konnten die Studierenden mit der in SciPy verfügbaren Bibliotheksfunktion vergleichen, um so eine sofortige Rückmeldung über die Korrektheit des Codes zu erhalten.

An aktuellen Forschungsthemen lernen

Um die Studierenden auf ein noch höheres Abstraktionsniveau zu bringen und sie vollständig in die Lage zu versetzen, wissenschaftliche Daten zu interpretieren, wählten sie ihr ganz eigenes Chemometrie-Gruppenprojekt, das sie recherchieren, verwalten, implementieren und auf chemische Daten anwenden mussten. Dabei waren alle Hilfsmittel erlaubt und auch der Austausch zwischen Gruppen und zu den Betreuenden wurde gefördert.

Die Studierenden wählten zwischen den folgenden Chemometrie-Projekten, die sich auf aktuelle Forschungsfragen beziehen:

- Theorie der Probenahme
- Basislinien-Korrekturen
- Nichtparametrische statistische Tests
- Regressionsmethoden
- HQI-Methoden und Normalisierung
- Hauptkomponentenanalyse und Skalierung
- Klassifikationsmethoden
- Clusteranalyse

- Bildanalyse
 - Struktur-Summe-Formel-Rätsel
- Die Ergebnisse stellten die Studierende als Videopräsentationen vor. Abbildung 1 (Seite 27) zeigt das Resümee des Basislinien-Projekts.

Laborroboter aus Lego

Das Kriterium für einen erfolgreichen Roboterbau war die Abgabe eines funktionierenden Roboters, der mindestens einen Motor und einen Sensor verwendet, um eine Laboraufgabe zu erledigen. Wir verwendeten

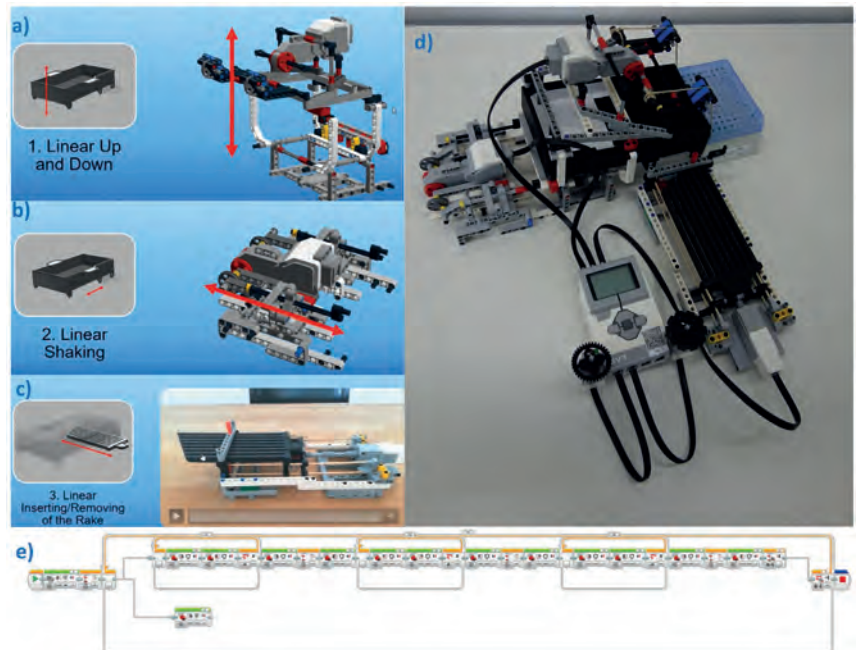


Abb. 2. Pipettenspitzen-Sortierroboter erstellt von Nico Chrisam und Julian Weng. Zum Sortieren der Pipettenspitzen werden drei Bewegungen benötigt: a) Schütteln in der Y-Ebene, b) Schütteln in der X-Ebene und c) Platzierung der Pipettenspitzen durch die Einfuhr eines Kamms. Die Kombination der Module e) und der Programmcode ergeben den Roboter d).

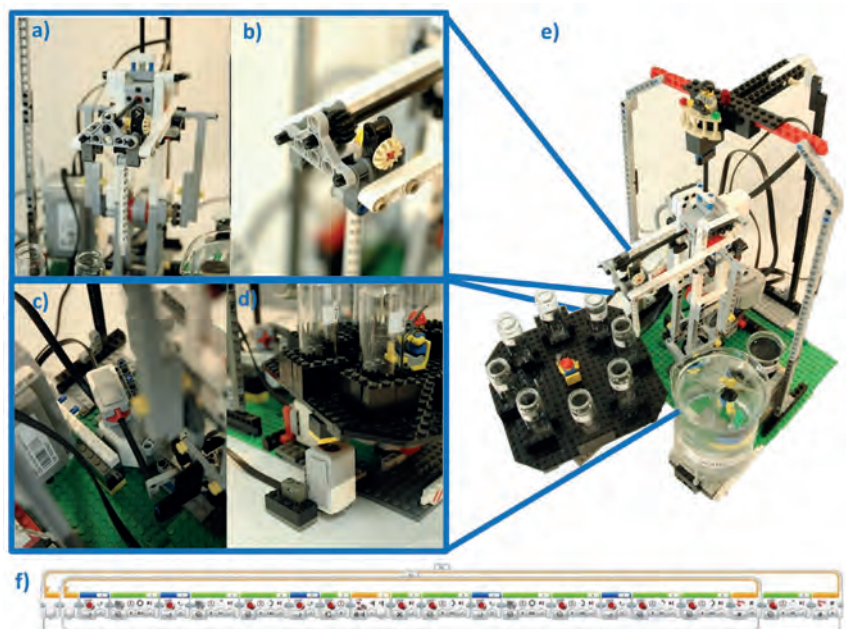


Abb. 3. Pipettierroboter erstellt von Flora Siegele und Sofia Beliakova. Die Elemente a) bis d) zeigen Detailansichten. a) und b): Pumpmechanismus für die Spritze. c) und d): Berührungssensor und Farbsensor zur Kalibrierung der der Position der Behältnisse. Programm f) steuert den Roboter e).

Lego als Plattform, da es eine einfache und flexible Automatisierung ohne Vorkenntnisse erlaubt. Schon zu Beginn des Kurses baten wir die Studierenden, sich zu überlegen, was für einen Roboter sie am dringendsten in ihrem Labor brauchen. Basierend auf ihren Ideen schufen wir Tutorials und Bauanleitungen für einzelne Elemente der Roboter, welche die Studierenden für ihren Gerätebau verwenden konnten, und machten sie somit zu Co-Gestaltern in unserem Seminar. Während der Bauphase blieben die Studierenden mit allen anderen Gruppen über zweiwöchentliche freiwillige „Update Calls“ in Kontakt, bei denen jede Gruppe ihre Fortschritte allen Teilnehmern per Videoanruf präsentierte. Zudem hatten alle Gruppen die Möglichkeit, sich Spezialteile mittels 3-D-Druck herstellen zu lassen. Dazu erhielten sie Hilfe vom TUMLab.¹⁾ Insgesamt entstanden neun einzigartige Laborroboter (vier davon siehe Abbildungen 2–4).

Fazit

Das Feedback unserer Studierenden zeigt, dass der Aufbau unserer Lehrveranstaltung gut gelungen ist und dass sie es als wichtig erachten,

Programmieren und Datenverarbeitung in den Chemiestudienplan aufzunehmen. Der Roboterbau sei eine wertvolle Erfahrung, um zu sehen, „dass man etwas zusammenbasteln kann, das am Ende tatsächlich eine nützliche Funktion hat“. Daher möchten wir unser Seminar auch gerne an weiteren Universitäten anbieten.

Elisabeth von der Esch

*Elisabeth von der Esch ist Promotionsstudentin am Lehrstuhl für Analytische Chemie und Wasserchemie der TU München. Sie gestaltete im Rahmen der Sonderförderung „Einsatz moderner Software-Werkzeuge und digitaler Methoden in der Chemieausbildung an Hochschulen“ des Fonds der Chemischen Industrie die hier vorgestellte Lehrveranstaltung unter der Aufsicht von Martin Elsner und Natalia P. Ivleva und mit der Unterstützung von Alexander Kohles, Beatriz von der Esch, Miriam Voß (TUMLab) und Mike Kramler (TUMLab).
elisabeth.esch@tum.de*

Literatur

- 1) TUMLab im Deutschen Museum: www.edu.tum.de/tumlab/startseite/
- 2) Weitere Informationen: <https://www.wt3.ch.tum.de/hydrochemistry/raman-sem/projects/automation/>

CE-Forum

9. Oktober 2020, online

Aufgrund der besonderen Umstände wurde das CE-Forum, das ursprünglich in Berlin stattfinden sollte, erstmals als Online-Meeting durchgeführt. Gastgeber war der Fachbereich 1.1 – Anorganische Spurenanalytik der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM, Berlin), vertreten durch Björn Meermann und Sebastian Faßbender und unterstützt von Gerard Rozing (Rozing.com Consulting, Karlsruhe) vom Arbeitskreis Separation Science der FG Analytische Chemie.

Die Zahl der Teilnehmer war mit denen der letzten Jahre vergleichbar: Zwischen 31 und 34 Teilnehmer waren zu jedem Zeitpunkt der Veranstaltung eingewählt, während der es auch möglich war, sich nach dem Verlassen wieder neu zuzuschalten. Da das CE-Forum 2020 online ausgerichtet wurde, war die Herkunft der Teilnehmer deutlich breiter gefächert als sonst: Neben Teilnehmern von deutschen Gruppen aus Aalen, Braunschweig, Jena, Karlsruhe, München, Münster, Regensburg und Tübingen waren auch internationale Gäste aus Prag, Barcelona, der Schweiz, Ägypten und sogar Sydney dabei.

Sechs Doktoranden hielten Vorträge aus den Bereichen Umweltanalytik, Technologie und Life Sciences. Das wissenschaftliche Programm rundete ein Keynote-Vortrag von Fernando Benavente von der Universität Barcelona ab: Er stellte – als Experte dieser Technik – die Inline- und Online-Kopplung von SPE mit CE vor. Diese Technik bietet einen Aufkonzentrationsfaktor von bis zu 100 und kann dabei helfen, die begrenzte Empfindlichkeit der CE mit einem relativ einfachen Aufbau zu überwinden. Die Methodenoptimierung, insbesondere für die Kombination mit CE-MS, ist allerdings bisher noch eine Herausforderung. Zukünftig ist die Implementierung von zusätzlichen elektromigrativen Aufkonzentrationsmethoden angedacht, um die Empfindlichkeit der CE(-MS) weiter zu steigern.

Am Ende waren alle Teilnehmer dazu aufgerufen, für den besten Dok-

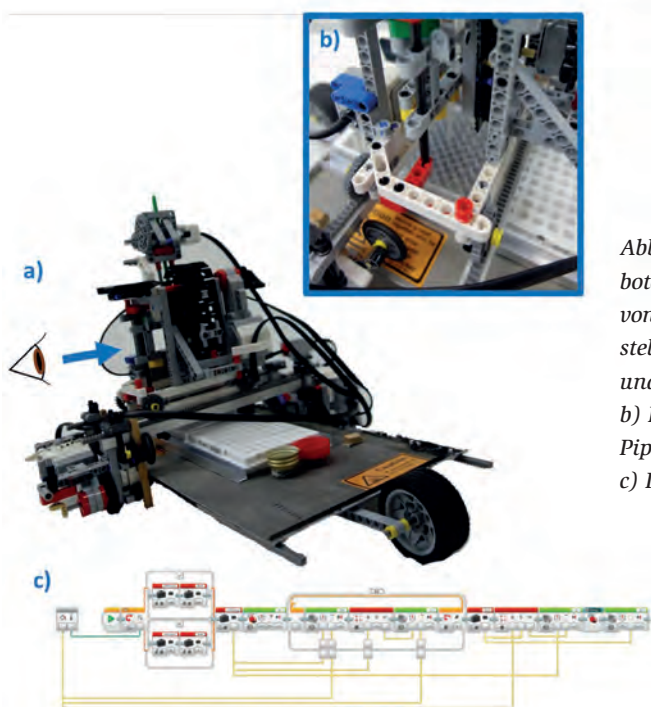


Abb. 4. a) Pipettierroboter zur Befüllung von 96-Wellplatten, erstellt von Julia Klüpfel und Joachim Ottinger. b) Detailansicht des Pipettiermechanismus. c) Programmcode.

torandenvortrag abzustimmen, der mit einem Buchgutschein von Springer prämiert wurde, gesponsert von der Fachzeitschrift *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. Den Preis gewann Alexander Stolz von der Hochschule Aalen, der 40 Prozent der Stimmen erhielt. In seinem Vortrag ging es um die Charakterisierung von glykierten und carbamylerten Hämoglobinspezies mit CE-MS/MS unter Verwendung von mehrfach beschichteten Kapillaren.

Die abschließende Feedback-Runde ergab, dass der Zeitplan dank eines reibungslosen Ablaufs eingehalten werden konnte und es trotz der ungewöhnlichen Situation und der digitalen Ausrichtung spannende Vorträge gab, gefolgt von regem wissenschaftlichem Austausch. Alle Teilnehmer waren dankbar, dass das CE-Forum auch in diesem Jahr stattfinden konnte und der jährliche Rhythmus fortgeführt wurde.

Sebastian Faßbender
BAM, Berlin

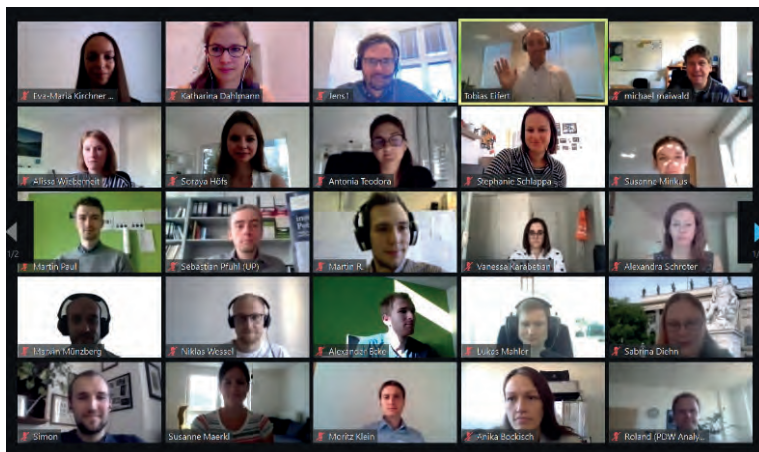
Mehr Infos: <https://2020.ce-forum.org>

Interdisziplinäres Doktorandenseminar

21. und 22. September 2020, online

■ Dieses Jahr fand das 14. Interdisziplinäre Doktorandenseminar mit dem Leitthema „Online-Analytik im Wandel“ zum ersten Mal online statt. Die Veranstaltung organisierte der Arbeitskreis Prozessanalytik in Zusammenarbeit mit den Arbeitskreisen Chemo- und Biosensoren, Chemometrik und Qualitätsmanagement sowie Elektrochemische Analysemethoden. 36 Teilnehmer aus ganz Deutschland, darunter größtenteils Doktoranden, wählten sich in die Veranstaltung ein, um sich über Ergebnisse und Trends in der Prozessanalytik auszutauschen.

Nach einer digitalen Vorstellungsrunde hielt zum Auftakt des Seminars Moritz Klein, beschäftigt bei Endress & Hauser Conducta, den Gastvortrag „Mein Weg von der Spektroskopie in



Teilnehmer des 14. Interdisziplinären Doktorandenseminars

die optische Prozessanalytik – Berufseinstieg mit Erfahrungen im Start-up und bei weltweiten Anbieter“. Er berichtete über seinen Berufseinstieg in einem kleinen Start-up und stellte es seiner jetzigen Anstellung in einem großen Unternehmen gegenüber. Im Anschluss fanden die ersten drei Doktorandenvorträge statt, auf die ein kurzer Poster-Pitch und die Postersession folgten. Nachdem die fünf Poster vorgestellt waren, gab es vier weitere Doktorandenvorträge. Zum Ende des ersten Tages fasste Jens Claasen von Bayer den Inhalt der Vorträge zu den diversen PAT-Anwendungen nochmals zusammen.

Den zweiten Tag eröffneten zwei Gastvorträge aus der Industrie. Sebastian Dederer von tec5 stellte in „PAT in der Industrie“ die abwechslungsreiche Arbeit eines Prozessanalytikers bei der Bearbeitung eines kundenspezifischen Problems vor. Anschließend präsentierte Oliver Lischtschenko von Ocean Insight die Anwendung von PAT auf der Internationalen Raumstation ISS. Nach den beiden Vorträgen fand ein kurzer Sponsoren-Pitch von Bayer, Hamilton Bonaduz, tec5 und Ocean Insight statt. Der Input der Industrievorträge und Pitches wurde dann genutzt, um in einer Dialogsession in Kleingruppen über PAT-Themen mit den Experten aus der Industrie in Austausch zu treten. Anschließend gab es die letzten vier Doktorandenvorträge, und das Voting für die besten Beiträge wurden eröffnet. Bevor es zur Preisverleihung kam, wurde die Veranstaltung mit zwei weiteren Gastvorträgen

abgerundet: Albert Tulke (Bayer) berichtete über die Anforderungen und Anwendungen über PAT in seinem Arbeitsumfeld, und Anika Bockisch stellte das Netzwerk der Bio-PAT e.V. vor und gab einen Einblick in die bioproduktionsnahe Arbeit der Mitglieder.

Abschließend verkündeten Tobias Eifert und Jens Claasen die drei besten Beiträge. Drei Doktoranden teilten sich den dritten Platz: Sebastian Pfuhl (Universität Potsdam) mit „Using inline PDW spectroscopy to monitor the synthesis of amorphous titania nanoparticles“, Martin Rößler (RWTH Aachen) mit „In situ Monitoring in Photocatalysis – A New Challenge for PAT?“ und Alissa Wieberneit (Universität Regensburg) mit „Electrospun cationic nanofibers for nucleic acid extraction in paper-based analytical devices“. Soraya Höfs (Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung) gewann mit „An ELISA-inspired electrochemical detection system for the quantification of ochratoxin A“ den zweiten Platz. Der Preis für den besten Vortrag ging an Björn Gutschmann (Technische Universität Berlin), für seinen Vortrag „Photon Density Wave spectroscopy for monitoring PHA bioplastic production processes“.

Ein besonderer Dank geht an Vanessa Karabetian, Jens Claasen, Martin Rößler, Eva-Maria Kirchner, Katharina Dahlmann und Tobias Eifert für die exzellente Organisation der Veranstaltung.

Björn Gutschmann,
Technische Universität Berlin
Katharina Dahlmann,
Leibniz Universität Hannover

Preise & Stipendien

ABC-Publikationsstipendium

Die Fachgruppe Analytische Chemie ermöglichte Sabrina Geißlitz im März und April 2019 einen zweimonatigen Forschungsaufenthalt durch die Verleihung eines ABC-Publikationsstipendiums. Im Folgenden berichtet sie über ihre Erfahrungen und Erlebnisse an der Wageningen University & Research (WUR) in den Niederlanden.

■ Kurz vor Abschluss der praktischen Arbeiten im Rahmen meiner Promotion sah ich in einem Forschungsaufenthalt im Ausland eine gute Möglichkeit, mich persönlich und fachlich weiterzuentwickeln. Daher war ich sehr glücklich, als Twan America, Leiter der Arbeitsgruppe „Applied Metabolic Systems“ an der Wageningen University & Research (WUR), mich einlud, zwei Monate lang seine Gruppe, Kollegen und Kolleginnen sowie sein Fachgebiet näher kennenzulernen. Seine Gruppe ist hervorragend mit unterschiedlichsten Massenspektrometriesystemen (LC-MS/MS) ausgestattet, sodass eine Vielzahl von Fragestellungen bearbeitet werden können.

Der Fokus der Arbeitsgruppe liegt auf der Analyse von Getreideproteinen, die Weizenunverträglichkeiten auslösen, beispielsweise Zöliakie, Weizenallergie und Weizensensitivität. Dies passte perfekt zu meinem Promotionsthema, in dem ich Proteine der alten Weizenarten Einkorn, Emmer und Dinkel und deren Einfluss auf Backqualität und Weizensensitivität untersuchte. Während des zweimonatigen Aufenthalts standen jedoch die positiven Eigenschaften des Weizens – die Möglichkeit, ein leckeres Brot zu backen – im Vordergrund. Zusammen analysierten wir Glutenproteine (hochmolekulare Gluteninuntereinheiten, High-molecular-weight glutenin subunits, HMW-GS) des modernen Weizens im Vergleich zu Dinkel, Emmer und Einkorn. Die alten Weizenarten haben eine deutlich schlechtere Backqualität, was sich in niedrigerem Brotvolumen, ungleichmäßiger Kruste und Krumenstruktur sowie durch weiche, klebrige und schwierig zu verarbeitende Teige äußert. Die Ursachen hierfür sind auf



Campus der Wageningen University & Research (alle Fotos: S. Geißlitz)



Utrechter Dom

molekularer Ebene noch nicht vollständig aufgeklärt.

Mit den gemeinsamen Arbeiten fanden wir ein weiteres Puzzlestück, um den Grund für die schlechtere Backqualität der alten Weizenarten aufzuklären. Wir zeigten, dass die Aminosäuresequenz bestimmter HMW-GS in Weizen leicht anders ist als die in Emmer und Dinkel. Mit dem Vorgehen, das wir zusammen etablierten, lassen sich in Zukunft noch weitere Unterschiede in der Sequenz der HMW-GS in Weizen, Dinkel, Em-



ABC-Publikationsstipendiatin Sabrina Geißlitz

mer und Einkorn identifizieren. Dieses detaillierte Vorgehen wurde erstmals in diesem Ausmaß für verschiedene Weizenarten beschrieben.

Das Publikationsstipendium in Höhe von 2500 Euro (500 Euro pro Monat plus 1500 Euro nach erfolgreicher Publikation) ermöglichte es mir, diesen Forschungsaufenthalt durchzuführen, da es die Kosten für An- und Abreise und die zusätzlichen Lebenshaltungskosten deckte. Besonders gefreut hat es mich, dass auch die Auszahlung des publikationsgebundenen

Zuschusses tatsächlich geklappt hat. Hierfür musste bereits sechs Monate nach Beendigung des Aufenthalts ein Manuskript zum Thema eingereicht und ohne große Änderungen akzeptiert werden.

Persönlich und fachlich hat mich der Forschungsaufenthalt sehr geprägt und weiterentwickelt. Neben den wissenschaftlichen Erfolgen habe ich einige Wörter Niederländisch gelernt und mein gesprochenes Englisch verbessert. Ich habe viele nette Menschen aus allen Teilen der Welt kennengelernt und dadurch mein Netzwerk erweitert. Außerdem habe ich an den Wochenenden viele schöne Städte und Orte in den Niederlanden besucht und so einen sehr guten Eindruck von Land und Leuten gewonnen. Unter anderem besuchte ich die großen und wichtigen Städte Amsterdam, Rotterdam und Den Haag. Besonders gut hat mir Utrecht gefallen, mit seinen vielen kleinen mittelalterlichen Gässchen und der traurigen Geschichte des Doms, der seit einem schweren Sturm im Jahr 1674 nur noch zur Hälfte steht.

Ich möchte mich herzlich bei der Fachgruppe Analytische Chemie für das Publikationsstipendium bedanken und empfehle jedem Promotionsstudierenden, einen Auslands- oder Forschungsaufenthalt an einer anderen Universität durchzuführen – und sich unbedingt für das ABC-Publikationsstipendium zu bewerben.

Sabrina Geißlitz, Karlsruhe

Originalpublikation

S. Geißlitz, A.H.P. America, K.A. Scherf, „Mass spectrometry of in-gel digests reveals differences in amino acid sequences of high-molecular-weight glutenin subunits in spelt and emmer compared to common wheat“, *Anal. Bioanal. Chem.* 2020, 412, 1277.
doi:10.1007/s00216-019-02341-9

Weitere Informationen zum ABC-Publikationsstipendium:

<https://www.gdch.de/netzwerk-strukturen/fachstrukturen/analytische-chemie/stipendienprogramm.html>

Sofja-Kovalevskaja-Preis zur Entwicklung tragbarer, preisgünstiger Spektroskopiegeräte

Die vielfältigen Arbeiten der Mainzer Physikerinnen und Physiker auf dem Gebiet der Kernspinresonanz werden um eine Facette mit starkem Anwendungsbezug erweitert: Danila Barskiy wechselte im Oktober 2020 an die Johannes-Gutenberg-Universität Mainz und wird hier eine Arbeitsgruppe aufbauen, um den Einsatz der Kernspinresonanzspektroskopie in der Chemie, Biologie und Medizin weiterzuentwickeln. Dazu sollen Ansätze erforscht werden, die keine Magnetfelder erfordern. Barskiy erhält dafür einen Sofja-Kovalevskaja-Preis der Alexander-von-Humboldt-Stiftung in Höhe von 1,6 Millionen Euro. „Wir freuen uns sehr über die Auszeichnung für Danila Barskiy und auf seine Forschungsarbeiten, die frische und bislang wenig untersuchte Aspekte umfassen, aber eine hervorragende Ergänzung zu unseren Forschungen in Mainz darstellen“, so Dmitry Budker, Gastgeber von Danila Barskiy am Institut für Physik der Johannes-Gutenberg-Universität und am Helmholtz-Institut Mainz.

Die Kernspinresonanzspektroskopie ist eine Standardmethode der Analytik, um die Struktur und Dynamik von Materialien und lebenden Objekten zu ermitteln. Mit ihrer Schwestertechnologie, der Kernspintomographie, wird die Methode in der organischen Chemie, der Biochemie und der Medizin eingesetzt, wobei sich Flüssigkeiten besonders gut für die Untersuchung eignen. Allerdings stößt die NMR-Spektroskopie an Grenzen: Wegen der schwachen Wechselwirkung von Atomkernen mit dem angelegten Magnetfeld sind die NMR-Signale extrem niedrig. Zur Detektion sind daher starke Magnetfelder erforderlich. Dies schließt unter anderem die Entwicklung tragbarer Point-of-Care-Geräte aus.

Ziel sind kompakte und tragbare NMR-Geräte

Der Sofja-Kovalevskaja-Preisträger Danila Barskiy erforscht seit rund zehn Jahren Möglichkeiten zur Ver-



Danila Barskiy (Foto: privat)

besserung der NMR-Spektroskopie, zuletzt an der University of California, Berkeley, von wo er nach Mainz wechselt. Dabei verfolgt er verschiedene Ansätze mit dem Ziel, kompakte und tragbare NMR-Geräte zu entwickeln, die schließlich so klein wie ein Chip werden und zudem für den breiteren Markt erschwinglich sein sollen. „Die meisten NMR-Systeme sind trotz Verbesserungen noch immer nicht kompakt, weil sie Feldstärken von mehreren Tesla brauchen, um die chemischen Signaturen in einem NMR-Spektrum zu unterscheiden“, erläutert Barskiy das Problem.

Die neue Gruppe, für die Barskiy Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter aus unterschiedlichen Disziplinen versammeln will, soll einen miniaturisierten, tragbaren NMR-Sensor entwickeln. Dieser Sensor arbeitet nach dem Prinzip der Null- bis Ultraniedrigfeld-Magnetresonanz, kurz ZULF-NMR, mit Hilfe von optisch gepumpten Magnetometern, kommt also ohne starke Magnetfelder aus. Zusätzlich zur Anwendung in der chemischen und biomedizinischen Forschung könnte die Entwicklung solcher Sensoren beispielsweise helfen, Stoffwechselstörungen in einem frühen Stadium zu erkennen.

Als Leiter einer Arbeitsgruppe in Mainz will Barskiy außerdem Zusatzgeräte für NMR-Spektrometer entwickeln, sogenannte Universal-Hyperpolarisatoren. Hyperpolarisation verbessert die Ausrichtung der Kernspins in einer Materialprobe und verstärkt dadurch die NMR-Signale. Der Wissenschaftler erwartet, dass die Uni-

versal-Hyperpolarisatoren für NMR-Tischgeräte in etwa die Größe einer Kaffeemaschine haben werden. Dies schafft die Voraussetzungen für hochempfindliche Analysen von Kraftstoffen, Bioflüssigkeiten wie Blut oder Urin und Nahrungsmittelextrakten und wird nach den Worten von Barskiy „die NMR-Spektroskopie für breitere Märkte demokratisieren und den technologischen Fortschritt in Entwicklungsländern beschleunigen“.

Die Sofja-Kovalevskaja-Preise 2020 wurden von der Alexander-von-Humboldt-Stiftung an acht internationale Forschertalente im Alter von 29 bis 36 Jahren vergeben. Es handelt sich

um einen der höchstdotierten Wissenschaftspreise Deutschlands, mit dem die Nachwuchswissenschaftlerinnen und -wissenschaftler in einer frühen Phase ihrer Karriere Risikokapital für innovative Projekte erhalten. Sie forschen bis zu fünf Jahre lang an deutschen Universitäten und Forschungseinrichtungen und bauen eigene Arbeitsgruppen an ihren Gastinstituten auf. Der Preis wird vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) finanziert.

Quelle:

Johannes-Gutenberg-Universität Mainz

Ausschreibung

Hildegard-Hamm-Brücher-Preis für Chancengleichheit wird 2021 erstmals verliehen

Die GDCh schreibt zum ersten Mal den Hildegard-Hamm-Brücher-Preis für Chancengleichheit aus. Mit dem neuen Preis, der mit 7500 Euro dotiert ist, setzt die GDCh ein sichtbares Zeichen und würdigt vorbildhafte Leistungen zur Schaffung von mehr Chancengleichheit in der Chemie. Ausgezeichnet werden Einzelpersonen, Teams oder Organisationen, die sich mit innovativen Projekten für Chancengleichheit einsetzen oder eingesetzt haben. Ziel ist es, Best-Practice-Beispiele und Rollenvorbilder für chancengerechtes Handeln sichtbar zu machen und zur Nachahmung anzuregen.

Hildegard Hamm-Brücher (1921 – 2016) war Chemikerin und wurde 1945 bei Nobelpreisträger Professor Heinrich Wieland in München promoviert. Nach Kriegsende wurde sie Wissenschaftsredakteurin bei der *Neuen Zeitung*. Dort traf sie mit Theodor Heuss, ihrem politischen Mentor, und vielen anderen demokratisch Gesinnten zusammen. Hildegard Hamm-Brücher galt als „Grande Dame“ der deutschen Nachkriegspolitik. Sie stand nicht nur für Freiheit und Demokratie, sondern auch für ein konsequent wertebasiertes Handeln.

Unermüdlich kämpfte sie gegen Missstände an. Sie setzte sich u.a. für ein besseres Bildungssystem ein und ermutigte Frauen, sich mehr zu engagieren. Im Jahr 1994 wurde sie als erste Frau für die Bundespräsidentenwahl nominiert. Neben ihren öffentlichen Ämtern zeigte sie großes gesellschaftliches Engagement und erhielt zahlreiche Ehrungen.

Preiswürdige Projekte sollten sich auf die im GDCh-Leitbild für Chancengleichheit in der Chemie definierten Dimensionen beziehen. Projektfelder könnten unter anderem sein: die Aufklärung von und Maßnahmen gegen Diskriminierung, die Förderung einer Kultur der Vielfalt oder die Beseitigung von Hindernissen, um Minderheiten Zugang zu Ausbildung und eine Karriere in der Chemie zu ermöglichen.

Der Preis wird im Rahmen des Wissenschaftsforum Chemie 2021 erstmals verliehen. Nominierungen sind bis Ende Februar möglich.

Quelle: GDCh

Weitere Informationen zum Preis und zur Nominierung: www.gdch.de/hhb-preis

DARS
KARRIERE
PORTAL

für Chemie und Life Sciences

Unser Netzwerk unterstützt Sie bei der Rekrutierung

- ▶ spezifischer Online-Stellenmarkt
- ▶ Stellenmarkt der Nachrichten aus der Chemie, wichtigste deutschsprachige Fachzeitschrift der Chemie
- ▶ Bewerberdatenbank
- ▶ Jobbörsen & Vortragsveranstaltungen



Von Chemikern für Chemiker! www.gdch.de/karriere

Die Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V. (GDCh) ist die größte wissenschaftliche Gesellschaft Kontinentaleuropas. 145 Jahre Erfahrung und die weltweite Vernetzung zu Industrie und Wissenschaft machen uns zum Global Player mit Tradition. Wir sind überall dort aktiv, wo sich Menschen mit Chemie beschäftigen.

GDCh

GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Personalia

Zum Tode von Professor Klaus K. Unger

(1936–2020)

■ Geboren am 16. Juni 1936 in Zwickau/Sachsen studierte Klaus Unger von 1956 bis 1963 Chemie an der Technischen Hochschule Darmstadt (TUD) und wurde 1965 bei Hans Wolfgang Kolschütter zum Dr. Ing. promoviert. 1969 habilitierte er sich ebenfalls an der TUD und war dort von 1971 bis 1976 als Dozent und Professor der Chemie tätig. Von 1977 bis zu seiner Emeritierung 2001 war er Professor im Fachbereich Chemie und Pharmazie (Institut für Anorganische Chemie und Analytische Chemie) der Johannes-Gutenberg-Universität Mainz. Danach leitete er noch acht Jahre eine Forschungsgruppe zu Bioseparation und Proteomics bei Merck in Darmstadt.

Seine breit gefächerten Forschungsarbeiten über poröse Materialien begannen bereits in seiner Promotion. Sie umfassten deren Synthese, Charakterisierung und Funktionalisierung sowie ihren Einsatz als Adsorbentien, stationäre Phasen in der Chromatographie und Katalysatoren. Stand zunächst das Kieselgel im Mittelpunkt („Mr. Silica“), erweiterte sich die Palette der untersuchten Materialien in der Folgezeit auf Metalloxide, Kohlenstoff und Zeolithe bis zu monolithischen Materialien.



Klaus K. Unger (Foto: privat)

Die Herstellung und Anwendung von druckstabilen kleinen Partikeln sowie die Synthese von chemisch gebundenen Kieselgelphasen in den 1970er Jahren waren wesentliche Meilensteine in der Entwicklung der HPLC. Seine Arbeiten zur Anwendung der HPLC im analytischen und präparativen Maßstab sowie zur Trennung von Biopolymeren haben ebenso wichtige Impulse gesetzt wie seine HPLC-Fortbildungskurse und die von ihm organisierten Tagungen und Veranstaltungen.

Klaus Unger hat 130 Doktoranden betreut; über 430 Publikationen, 55 Patente und 30 Monographien tragen seinen Namen. Besonders seinen Doktoranden blieb Professor Unger, der von ihnen liebevoll „der Meister“

genannt wurde, über lange Jahre freundschaftlich verbunden. Zahlreichen Doktoranden und Nachwuchswissenschaftlern lehrte er nicht nur die Wissenschaft, sondern teilte mit ihnen in seiner einzigartigen Weise auch scharfsinnige Lebensweisheiten. Er pflegte umfangreiche Kooperationen mit Fachkollegen in der ganzen Welt, dies führte auch zu einigen Gastprofessuren (in Boston, Singapur, Melbourne, Lund, Utrecht, Gdansk).

Neben der Mitarbeit in Editorial Boards von mehreren internationalen Fachzeitschriften engagierte sich Klaus Unger auch in Gremien, zum Beispiel im Vorstand des Arbeitskreises Separation Science (vormals Chromatographie) in der Fachgruppe Analytische Chemie, im Dechema-Ausschuss Zeolithe, in der Dechema-Fachsektion „Deutsche Zeolith-Vereinigung“ (erster Vorsitzender) sowie in IUPAC-Gremien. Für seine wissenschaftlichen Arbeiten wurde er mit einer Reihe von Auszeichnungen gewürdigt, etwa mit der Pregl-Medaille der Österreichischen Gesellschaft für Analytische Chemie, dem A.J.P. Martin Award der Chromatographic Society (London), dem American Chemical Society Award in Chromatography, der Clemens-Winkler-Medaille der Fachgruppe Analytische Chemie, der Waksmundski-Medaille der Polnischen Chemischen Gesellschaft sowie mit Ehrendoktoraten der Universitäten Kaunas (Litauen) und Joannina (Griechenland).

Am 7. Oktober 2020 endete das erfüllte Leben von Klaus Unger nach kurzer Krankheit plötzlich. Mit ihm verliert der Arbeitskreis Separation Science einen väterlichen Freund und Mentor und die internationale chromatographic community einen allseits geschätzten Wissenschaftler, Hochschullehrer, Kollegen und Menschen.

Werner Engewald, Taucha
Stefan Lamotte, Ludwigshafen

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 01/2021:
29.01.2021**

Beiträge bitte an die Redaktion

Zum 80. Geburtstag von Klaus G. Heumann

■ Im September 2020 feierte Professor Dr.-Ing. Klaus Gustav Heumann seinen 80. Geburtstag – allerdings nicht in dem Rahmen, den er sich vorgestellt hatte: Seine geplante, dem Anlass entsprechende Feier mit seiner Familie, Freunden und ehemaligen Kollegen musste er schweren Herzens absagen. Wegen der noch andauernden Corona-Situation wäre dies nur unter weitreichenden Beschränkungen möglich gewesen, sodass er befürchtete, seinen Gästen keine unbeschwerte und ausgelassene Stimmung und Geselligkeit bieten zu können. Halbe Sachen zu machen, ist und war nie sein Ding. Mit diesem Lebensmotto bleibt er sich treu – was niemanden, der Klaus Heumann näher kennengelernt hat, verwundern dürfte.

Als ausgebildeter Ingenieur promovierte Klaus Heumann im Jahr 1969 unter der Anleitung von Karl Heinz Lieser, damals Lehrstuhlinhaber für Radio- und Kernchemie an der TH Darmstadt. 1974 wurde er habilitiert. Im selben Jahr folgte er dem Ruf an die Universität Regensburg, bis er schließlich 1996 an die Universität Mainz wechselte.

Im Laufe seiner über 30-jährigen akademischen Schaffenszeit ging Professor Heumann zahlreichen Tätigkeiten nach, die ihm national und international eine enorme Anerkennung zukommen ließen. Ohne jeglichen Anspruch auf Vollständigkeit seien hier genannt:

- Vorsitzender der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie (DGMS, 1977 – 1979)
- Initiator des „Symposiums Massenspektrometrische Verfahren der Elementspurenanalyse“ (1987)
- Vorsitzender der „IUPAC Commission on Atomic Weights and Isotopic Abundances“ (1992 – 1995)
- Gründungs- und Mitherausgeber der Zeitschrift *Analytical and Bioanalytical Chemistry* (2002 – 2016)
- Initiator und erster Sprecher des DFG-Graduiertenkollegs 826: „Spurenanalytik von Elementspezies: Methodenentwicklungen und Anwendungen“ (2002 – 2011)

- Mitglied und stellvertretender Sprecher des DFG-Fachkollegiums 304: „Analytik, Methodenentwicklung“ (2004 – 2007).

Seine Vorstellungen, Ideen und Erfahrung stellte er innerhalb der Fachgruppe Analytische Chemie als Vorsitzender des Arbeitskreises für Mikro- und Spurenanalyse der Elemente und Elementspezies (A.M.S.El.) (1986 – 1987) zur Verfügung sowie als Fachgruppenbeisitzer (1987 – 1989) und Gast im Fachgruppenvorstand (1993 – 1996). Nicht nur aufgrund dieser Verdienste verlieh die Fachgruppe Analytische Chemie ihm im Jahr 2005 die Clemens-Winkler-Medaille.

Seine höchste Priorität war für ihn immer, mit persönlichem Einsatz und voller Überzeugung Fortschritte in seinem Aufgabenbereich zu erzielen und neue Anreize für künftige und stets nachhaltige Aktivitäten zu setzen. So schätzten die Fachgruppe und die analytische Chemie im Allgemeinen sich glücklich, einen Antreiber wie Professor Heumann in ihren Reihen zu wissen.

Die Forschungsaktivitäten von ihm und seiner Arbeitsgruppe an den Universitäten von Regensburg und Mainz waren geprägt von analytischen Arbeiten, die den wissenschaftlichen Kenntnisstand maßgeblich vorangebracht haben. Forschung, nur um der Forschung Willen, war nicht seine Motivation. Vielmehr versuchte er, jegliche analytische Methodenentwicklung in den Kontext zur Lösung von konkreten Problemen in der Umweltforschung, den Materialwissenschaften oder den Biowissenschaften zu stellen. In der Regensburger Zeit lag daher der Schwerpunkt auf vielen erfolgreichen Entwicklungen und Anwendungen der negativen Thermoionisations-Massenspektrometrie (TIMS) in Verbindung mit der Isotopenverdünnungsanalyse zur richtigen und präzisen Bestimmung von Elementen (und Elementspezies) sowie von Isotopenverhältnissen, u.a. in geochronologischen Fragestellungen.



Klaus G. Heumann mit seiner Frau Martina Unger-Heumann im September 2020 (Foto: K. G. Heumann)

Highlights waren die präzise Bestimmung der Os-Isotopenverhältnisse und der weltweite Einsatz der in Regensburg entwickelten Methode als Re-Os-Chronometer in der Altersbestimmung von Meteoriten. Hinzu kamen neben der TIMS noch zu Regensburger Zeiten und danach an der Mainzer Johannes-Gutenberg-Universität bahnbrechende Arbeiten zur speziesspezifischen und -unspezifischen Isotopenverdünnungsanalyse mit Kopplungstechniken und der induktiv gekoppelten Plasma-Massenspektrometrie (ICP-MS), um Elementspezies zu detektieren und zu quantifizieren. Wichtige Beiträge erlaubten Einblicke in die Umwandlung, den Transfer und Transport von Elementspezies in der südlichen Hemisphäre.

Seine wissenschaftlichen Arbeiten wurden mehrfach ausgezeichnet, u.a. mit dem Océ-van-der-Grinten-Preis für Umweltanalytik und dem European Award for Plasma Spectro-

chemistry. Darüber hinaus erhielten zahlreiche seiner ehemaligen Mitarbeiter Auszeichnungen wie Bunsen-Kirchhoff-Preise der GDCh oder Wolfgang-Paul-Studienpreise der DGMS, was ihn sicherlich nicht weniger stolz machte. Um seine wissenschaftlichen Leistungen weiter zu würdigen, sei eine Aussage von Karl Cammann sinngemäß zitiert, einem von ihm sehr geschätzten Kollegen und u.a. Doktorvater der beiden Autoren: „Klaus Heumann hat einen relativ kleinen Arbeitskreis, aber der macht wenigstens richtige Analytik.“

Im Laufe seiner Universitätslaufbahn gab Professor Heumann einer ganzen Heerschar von Nachwuchsanalytikern sein Grundverständnis der analytischen Wissenschaften weiter. Mit seiner unnachahmlichen stets vertrauensvollen und grundehrlichen Art war er im wahrsten Sinne des Wortes Doktor-„Vater“ von etwa 60 Promovenden und Promovendinnen. Von denen sind viele noch immer in Bereichen der analytischen Chemie tätig und pflegen darüber hinaus eine enge Freundschaft mit ihm.

Auch nach seiner Pensionierung im Jahr 2005 blieb er der analytischen Chemie mit zahlreichen Aktivitäten erhalten und teilte seinen großen Erfahrungsschatz mit vielen jungen Wissenschaftlern. Mit dem Ausscheiden aus dem Herausgebergremium von *Analytical and Bioanalytical Chemistry* im Jahr 2016 hat Professor Heumann seine letzte offizielle Aufgabe abgeschlossen. Aber auch heute noch gibt er wohlwollend seinen persönlichen Rat, wenn er darum gebeten wird. Das Mehr an Freizeit im Alter bedeutet für ihn nicht Untätigkeit: Vielmehr hat er jetzt endlich die Zeit, um mit seiner Frau Martina ausgiebig zu reisen, mit Freunden Radtouren zu unternehmen oder als stolzer Großvater Zeit mit seiner Familie zu verbringen. Auch wenn die Pandemie derzeit gewisse Aktivitäten einschränkt, hat er schon Pläne für die hoffentlich bald folgende Post-Coronazeit geschmiedet: beispielsweise

die jährlichen Weinprobetage mit ehemaligen internationalen Kollegen, besser bekannt als die „Spectroscopists for ever“-Gruppe.

Wir gratulieren Klaus Heumann nachträglich ganz herzlich zu seinem Geburtstag und wünschen ihm alles Gute, beste Gesundheit und weiterhin die Energie, den Freuden des Lebens noch viele Jahre nachgehen zu können. Insbesondere hoffen wir auf ein baldiges Wiedersehen, um uns an seiner Gelassenheit und an seinem – manchmal herzhaft-bissigen – Humor zu erfreuen.

Jörg Bettmer, Oviedo
Wolfgang Buscher, Münster

■ Professor Klaus G. Heumann kann zu seinem 80. Geburtstag im September 2020 auf zahlreiche Erfolge als Forscher, als Vertreter in wissenschaftlichen Gremien, bei seiner Arbeit in der Fachgruppe Analytische Chemie und nicht zuletzt bei seiner Tätigkeit als Mitherausgeber der Zeitschrift *Analytical and Bioanalytical Chemistry (ABC)* zurückblicken. Er beeinflusste die analytische Chemie in Methode und Anwendung, beispielsweise durch die Entwicklung der Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma für eine Anzahl von Metallen und Nichtmetallen unter Nutzung der Isotopenverdünnungsanalyse. Diese frühen Forschungsergebnisse und seine Bekanntheit auf dem Gebiet der Element- und Speziationsanalytik führten dazu, dass er weltweit bei Tagungen zur Massenspektrometrie häufig eingeladen wurde. Schon 1971 findet man seine erste Publikation zur Isotopenverdünnungsanalyse in der damaligen *Fresenius Zeitschrift für Analytische Chemie*, über die er mit dieser Zeitschrift in Kontakt kam und dann Mitglied des Editorial Board of *Fresenius Journal of Analytical Chemistry* wurde. So war es nicht verwunderlich, dass er die Nachfolgezeitschrift *Analytical and Bioanalytical Chemistry* als einer der deutschen Herausgeber diese Zeitschrift von Beginn an führend begleitete. Ihm ist

es auch zu verdanken, dass *ABC* in Konkurrenz zu vielen internationalen Zeitschriften stetig gewachsen ist und inzwischen als eine der führenden Zeitschriften der analytischen Chemie weltweit von vielen Forschern gelesen wird und international ihre Position behauptet. Er war einer, der weit über sein Gebiet hinaus Kollegen zur Publikation in der Zeitschrift begeistern konnte, immer ideenreich Herausgebertreffen beflügelte und mit seinem ruhigen, überlegten und kompetenten Auftreten Diskussionen zielgerichtet führte. Offen für Argumente anderer konnte er aber auch seine Meinung einbringen. Anerkannt als Person und speziell international anerkannt bei den Kollegen war er auch nach seiner Emeritierung im Jahr 2005 noch viele Jahre für die Zeitschrift tätig und bewirkte, dass ihr Ruf in der Massenspektrometrie beständig wuchs. Ihm haben Zeitschrift und Redaktion außerordentlich viel zu verdanken.

Klaus Heumann war einer der treibenden Kräfte dabei, dass die Zeitschrift im deutschsprachigen Raum an Ansehen gewann, und er sorgte dafür, dass die Fachgruppe sie unterstützte. Er blieb immer unter den Mitherausgebern anerkannt. So wuchs mein Kontakt zu diesem Repräsentanten der analytischen Chemie in Deutschland. In Dir, lieber Klaus, habe ich einen Freund, einen fachlichen Gesprächspartner und einen hervorragenden und engagierten Mitstreiter für die positive zukünftige Entwicklung der Zeitschrift *Analytical and Bioanalytical Chemistry* sowie der Fachgruppe Analytische Chemie gefunden. Und daher wünsche ich Dir im Namen vieler Analytiker, insbesondere natürlich auch persönlich, vor allem Gesundheit, aber auch Zufriedenheit über das Erreichte und besonders zukünftige Freude im privaten Bereich.

Günter Gauglitz, Tübingen

Zum 70. Geburtstag von Renate Kiessling

■ Vor nun mehr als sieben Jahren, im Dezember 2012, wurde Dr. Renate Kiessling in der Geschäftsstelle der GDCh in den Ruhestand verabschiedet. Bei dieser Gelegenheit wurde ihr Wirken für die GDCh und für die Fachgruppen gewürdigt. Auch um die Fachgruppe Analytische Chemie hat sie sich besondere Verdienste erworben, mit viel Einsatz und Engagement für die analytische Chemie.

Ihr Lebensweg: Studium in Moskau, Chefredakteurin des Mitteilungsblattes der Chemischen Gesellschaft der DDR (CG), Geschäftsführerin dieser CG und dann große Verdienste während der Zusammenführung mit der GDCh. Diesen Lebensweg hat Renate Kiessling 2012 detailliert in einer Wochenschau des Arbeitskreis Chancengleichheit in der Chemie dargestellt. Ihr Einsatz seit 2002 für das GDCh-Programm „Historische Stätten der Chemie“ zeigt darüber hinaus ihr Interesse an der Geschichte der Chemie, insbesondere in der ehemaligen DDR. Entsprechend hat sie dann auch sowohl bei der Vortragstagung der Fachgruppe Geschichte der Chemie in Heidelberg (2013) in einem Teil 1 die Gründungsgeschichte der Chemischen Gesellschaft der DDR und dann beim Wissenschaftsforum in Berlin 2017 in einem Teil 2 die weitere Geschichte dieser Gesellschaft dargestellt. Ihr Einsatz für die Chemie, sei es in der DDR noch vor der Wende und anschließend in der GDCh, zunächst auf verschiedenen Positionen, aber schließlich bei der Betreuung der Fachgruppen, ist schon mehrfach hervorgehoben worden. So bleibt es mir nur, Sie, Frau Kiessling, mit einigen persönlichen Erlebnissen zu würdigen und dies mit meinem Dank für die jahrelange hervorragende Zusammenarbeit zu verbinden.

Schon früh kam ich über die analytica-Konferenz in Kontakt mit Renate Kiessling (es muss noch vor dem Jahr 2000 gewesen sein), damals noch in den Räumen oberhalb der Messehallen – beengt und sicherlich nicht besonders bequem im Eingangsbereich einer der Seminarräume. Freundlich,



Renate Kiessling (links unten sitzend) im Kreise ihrer Fachgruppe vor dem Ruckenkreuz oberhalb von Blaubeuren (Foto: G. Gauglitz)

aber bestimmt hat sie alle unvorhergesehenen Ereignisse und Wünsche der Besucher auch unter widrigen Bedingungen souverän gehandhabt. Sie kümmerte sich um Studierende, junge Mitarbeiter, Habilitanden und arriivierte Professoren genauso wie um die vielen aus der Industrie mit Verständnis für deren Fragen, aber bedachte auch nicht nur mit Stirnrundeln diejenigen, die schwätzend und Türe aufreißend einen laufenden Vortrag störten. Viele Jahre waren dann die Wege für die Vortragsbesucher zwar kürzer, aber dafür Renate Kiesslings Bedingungen sicherlich nicht wesentlich besser im Durchgang zu den Messekonferenzsälen. Trotzdem harnte sie den ganzen Tag an ihrem Stand, um mit gewohnter Perfektion und Charme allen Hilfesuchenden zu begegnen. So half sie, die analytica-Konferenz auch in diesen Räumen zu etablieren.

Die Zahl unserer Treffen auf der analytica oder auch bei der Anakon lassen sich kaum mehr zählen. Auch die Anakon war ein typisches Beispiel für ihr organisatorisches Talent – das zeigte sich an der perfekten Vorbereitung von Tagungen und an der freundlichen, hilfsbereiten und effizienten Betreuung aller – von den

Vortragenden und Organisatoren bis hin zu den Studenten. So konnten beispielsweise die Organisatoren einer Anakon immer sicher sein, dass nichts schief ging. Zwar ergab sich nie die Gelegenheit einer Zusammenarbeit bei der Organisation einer Anakon-Konferenz, aber ich konnte als Vorstand mehrfach ihre Expertise nicht nur bei der Organisation der Anakon genießen, sondern auch bei der Organisation der Vorstandssitzungen der Fachgruppe Analytische Chemie.

Es war sicher eine Umstellung für sie, aus Frankfurt am Main nach Blaubeuren zu fahren, zuerst zu den Vorstandssitzungen der Fachgruppe und dann zu den Tagungen der Fachgruppenvorsitzenden. Hoffentlich wurden die Unbilden der Nachtsitzungen durch die Wanderungen und Höhlenbesuche einigermaßen kompensiert. Zumindest hat sie – wie auch auf den Bildern zu sehen ist – immer eine gute Miene gemacht.

Angeordnete Wanderungen zum Gipfelkreuz, durch das Tal oder zu der Höhle bis hin zum Kloster oder zum Blautopf konnten Renate Kiessling nicht erschüttern. Sie streute bald an alle Neuen den Hinweis aus: „Da musst du ordentliches Schuh-



Renate Kiessling (links vorne außen stehend) mit der Fachgruppe der Neuzeit.
Oben: So fing die Analytik im Lohndetal an (Höhle „Hohle Fels“ bei Schelklingen)
(Foto: G. Gauglitz)

werk mitnehmen“. Bei einer Vorstandssitzung lernte sie auch Tübingen und Bebenhausen kennen, leider vereitelte das Wetter eine Stocherkahnfahrt.

Ihr 70. Geburtstag soll für mich Anlass sein, Ihnen, Frau Kiessling, noch einmal für Ihre Unterstützung, für die vielen Telefonate und Aktivitäten, sei es für die Fachgruppe oder in

Zusammenhang mit den Fachgruppenvorsitzenden, und auch für die zahlreichen privaten Kontakte herzlich zu danken. Die Zusammenarbeit war immer hervorragend, Ihre Ratschläge, die Sie mir aufgrund Ihrer Erfahrung geben konnten, lösten häufig die immer wieder auftauchenden Probleme. Und wie ich höre, helfen Sie noch immer ab und an in der Fachgruppe. Ich bedanke mich für die gemeinsame Zeit und sage: Danke, dass ich Sie kennenlernen und mit Ihnen zusammenarbeiten durfte.

Ich wünsche Ihnen, aber auch Ihren Kindern, Ihrem Mann und Enkeln, alles Gute und hoffe, dass wir uns nach der Corona-Zeit vielleicht einmal wieder bei einer Anakon oder bei einer anderen Gelegenheit treffen.

Günter Gauglitz

Personalia

Geburtstage

Wir gratulieren unseren Mitgliedern, die im vierten Quartal 2020 oder ersten Quartal 2021 einen runden Geburtstag feiern und wünschen alles Gute:

Zum 60. Geburtstag

Andreas Meyer-Trümpener, Langenfeld
Thomas Gremm, Bürstadt
Carla Vogt, Freiberg
Roger Pawlak, Nienburg
Esther Geitner, Neuhaus
Tunga Salthammer, Braunschweig
Werner Holzstein, Köln
Jürgen Zapp, Lemgo
Klaus-Michael Mangold, Rimbach
Birgit von Oepen, Hamburg
Helga Nürnberger, Seelingstädt
Christa Große-Rhode, Beelen
Martin Koerner, Essen
Georg Kneer, Waldbronn
Monika Bach, Stuttgart
Wilfried Rockensüß, Homberg
Arnold Neumann, Wiesbaden
Christoph Heinekamp, Karlsfeld
Claude-P. Aebischer, Kaiseraugst, Schweiz
Detlef Hirschfelder, Magdeburg
Titus Vogel, Chemnitz
Michael G. Weller, Berlin
Jan Sunderkötter, Berlin
Boris Gödicke, Krefeld

Zum 65. Geburtstag

Wilfried Frank, Friedrichshafen
Jörg-Christian Fröhling, Riesweiler
Andreas Wundrack, Bad Dürrenberg
Hans-Jürgen Schwarz, Hannover
William Kwarteng-Achempong, Wenden
Klaus Schmadel, Otterbach
Reinhard Lies, Basel, Schweiz
Peter Schneider, Hildesheim
Thomas Krauß, Berlin
Hans-Joachim Heinrich, Berlin
Ulrich Köhler, Hamburg
Dieter Gladtko, Essen
Wolfgang Schäfer, Ludwigshafen
Wolfgang Wuthe, Marl
Harald Below, Greifswald
Angelika Becker, Mülheim
Stefan Brüggerhoff, Bochum
Günther Wahl, Kassel
Georg Wanior, Hanau
Richard Thede, Greifswald
Christine Bartzsch, Jena
Thomas-Helmut Schepher, Hannover

Zum 70. Geburtstag

Manfred Nowak, Staffelstein
Ingrid Bergmann, Magdeburg
Gundel Riebe, Berlin
Frank Tegtmeier, Würzburg
Gerhard Rimkus, Bremen
Burckhard Kaussmann, Sievershagen

Zum 75. Geburtstag

Hermann Bauer, Nürnberg
Walter Jäger, Tübingen

Zum 80. Geburtstag

Walter Huber, München
Günter Knapp, Graz, Österreich
Peter Jugelt, Radebeul

Zum 85. Geburtstag

Heinrich Kern, Hünenberg-See
Olga Großmann, Haselbachtal
Ernst-Ludwig Richter, Freudental
Friedrich Ludwig Goldmann, Eichendorf
Horst Lohde, Radolfzell

Zum 90. Geburtstag

Erwin Riedel, Berlin
Rolf Masthoff, Blankenfelde
Peter Günter Dietrich, Berlin

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.

GDCh-Fortbildungen

Buchungsinformation: Buchen Sie auch weiterhin GDCh-Fortbildungskurse: **Wir garantieren Ihnen die Durchführung** (lokal oder digital) **oder einen Alternativtermin.** Aktuelle und ausführliche Informationen finden Sie auf www.gdch.de/fortbildung.

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

19. Januar 2021, Frankfurt am Main oder online
Hybrid: Die Qualitätssysteme GMP (Gute Herstellungspraxis) und GLP (Gute Laborpraxis) im Überblick – Ein Leitfaden der Guten Praxis, Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP (GDCh) (Kurs 510/21)

Leitung: Dr.-Ing. Barbara Pohl

8. Februar 2021, Frankfurt am Main oder online
Hybrid: Methodenvalidierungen in der analytischen Chemie unter Berücksichtigung verschiedener QS-Systeme, Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP (GDCh) (Kurs 523/21)

Leitung: Dr.-Ing. Barbara Pohl

1. – 2. März 2021, Frankfurt am Main oder online
Hybrid: Grundlagen der Auditierung, Audits im Zeichen von Pandemie und Corona shut down – Virtuelle Audits (Kurs 528/21)

Leitung: Dr.-Ing. Barbara Pohl

8. – 10. März 2021, online
GLP-Intensivtraining mit QS-Übungsaufgaben: Methodenvalidierung und Gerätequalifizierung unter GLP (Gute Laborpraxis) – mit Praxisteil, Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP (GDCh) (Kurs 526/21)

Leitung: Prof. Dr. Jürgen Pomp

9. März 2021
Wechselwirkungschromatographie und gekoppelte chromatographische/spektrometrische Methoden in der Polymeranalytik, Grundlagen und Anwendungen (Kurs 397/21)

Leitung: Dr. Wolfgang Radke

10. – 11. März 2021, online
Prüfmittelüberwachung und messtechnische Rückführung, Ein Muss für jedes Laboratorium (Kurs 543/21)

Leitung: Dr. Stephan Walch

15. – 16. März 2021, online
Controlling, Kursmodul zum Geprüften Wirtschaftskemiker (GDCh) (Kurs 884/21)

Leitung: Prof. Dr. Uwe Kehrel

15. – 16. März 2021
Notfall- und Krisenmanagement bei Bränden, Explosionen, Stoffaustritten und Todesfällen, Aus der Praxis – für die Praxis (Kurs 936/21)

Leitung: Dr. Bernd Herber

17. März 2021, online

Patente in der Praxis: Chancen und Risiken sowie Tipps und Tricks, Effiziente Zusammenarbeit mit Patentanwälten (Kurs 968/21)

Leitung: Dr. Gerhard Auer

18. - 19. März 2021, online

Gesetzlich geregelte Umweltanalytik – was ist wirklich wichtig? (Kurs 512/21)

Leitung: Eleonora von Abercron

18. – 19. März 2021, online

GMP-Intensivtraining: Hintergründe und Essentials der GMP (Gute Herstellungspraxis) auf deutscher, europäischer und amerikanischer Ebene – mit Praxisteil, Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP (GDCh) (Kurs 525/21)

Leitung: Dipl.-Ing. Jürgen Ortlepp

19. – 23. April 2021

NMR-Spektrenauswertung, Grundlagenkurs (Kurs 505/21)

Leitung: Prof. Dr. Reinhard Meusinger

22. April 2021

Die Blockchain-Technologie in der Chemieindustrie: Einführung und Anwendungsfälle, Handlungshilfe zum Einsatz von Blockchain für Führungskräfte in der Chemiebranche (Kurs 874/21)

Leitung: Felix Green

23. April – 21. Mai 2021, online

E-Learning: Einführung in die Betriebswirtschaftslehre für Chemiker, Optionaler Vorbereitungskurs zum Geprüften Wirtschaftskemiker (GDCh) 2022 (Kurs 901/21)

Leitung: Prof. Dr. Uwe Kehrel

26. April – 31. Mai 2021, online

E-Learning: Chemie 4.0: Was kommt konkret auf mich zu? (Kurs 978/21)

Leitung: Dr.-Ing. Wolfram Keller

26. – 27. April 2021, online

Big Data – Grundlagen, Methoden und praktische Umsetzung (Kurs 642/21)

Leitung: Prof. Dr. Uwe Kehrel

Fortbildung



Ihre Vorteile im Überblick:

- ✓ Erfahrene Referenten aus der Praxis
- ✓ Neueste Trends und aktuelle Methoden
- ✓ Erfahrungsaustausch auf hohem fachlichen Niveau
- ✓ Limitierte Teilnehmerzahlen
- ✓ Maßgeschneiderte Inhouse-Kurse, vor Ort oder digital



Mit E-Learning Kursen

Nutzen Sie das umfangreiche GDCh E-Learning Angebot und informieren Sie sich unter: www.gdch.de/elearning

Online informieren und anmelden:
www.gdch.de/fortbildung

Jetzt anmelden



fb@gdch.de · T: +49 69 7917-364

