



GDCh

Gesellschaft
Deutscher Chemiker

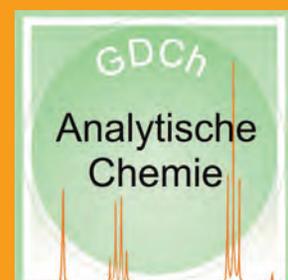
Fachgruppe
Analytische Chemie

Analytik bei AbbVie

Agilent: Ein Rückblick

ANAKON 2023

Mitteilungsblatt
2/2023





GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER



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

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

**Arbeitskreis
Archäometrie**

Vorsitz 2023-2026
Dr. Anika Retzmann
Berlin
anika.retzmann@bam.de

**Arbeitskreis
Chemische Kristallographie**

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

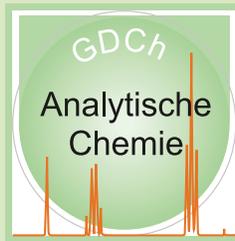
**Arbeitskreis
Chemometrik &
Qualitätssicherung**

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

**Arbeitskreis
Chemo- & Biosensoren**

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

**Fachgruppe
Analytische Chemie**



Vorstand 2020-2023

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

Stellvertretender Vorsitz
Dr. Michael Arlt
Darmstadt

Dr. Martin Wende
Ludwigshafen

Beisitz
Dr. Jens Fangmeyer
Leverkusen

Prof. Dr. Uwe Karst
Münster

Dr. Björn Meermann
Berlin

Prof. Dr. Tom van de Goor
Waldbronn/Marburg

Dr. Maria Viehoff
Darmstadt

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

Vorsitz 2023-2026
Prof. Dr. Carsten Engelhard
Siegen
engelhard@chemie.uni-siegen.de

**Arbeitskreis
Elektrochemische
Analysenmethoden (ELACH)**

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

**Arbeitskreis
Prozessanalytik (PAT)**

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

**Arbeitskreis
Separation Science**

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

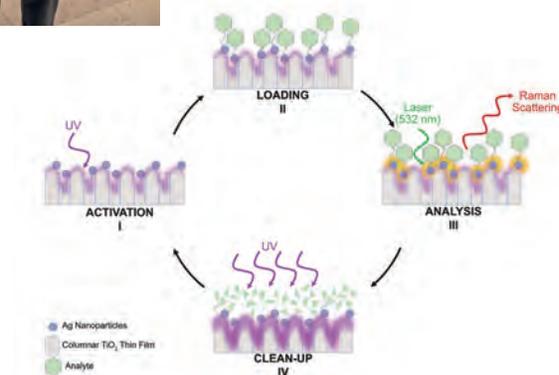
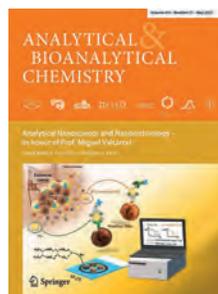
Industrieforum Analytik

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

Mitglieder

Inhalt 2/2023

Editorial	4
Analytik in Deutschland	
Analytik bei AbbVie Deutschland	5
Agilent: Marktführer für HPLC und Elektrophorese	9
Aus den Arbeitskreisen	12
Chemie Aktuell	
Geringste Schadstoffspuren nachweisen	13
Auswertelgorithmen unter der Lupe	14
Neues Fenster in die chemische Welt	15
Waters erwirbt Wyatt Technology	16
Rekordumsatz für Branche	16
Medien	
ABC in Kürze	17
Sessions auf der ANAKON 2023	
Miniaturization	18
Biosensing	19
Separation Science I	19
Chemometrics	20
Foodomics	20
Separation Science II	21
Tagungen	
Archäometrie & Denkmalpflege	22
Ankündigungen	23
Neu: Karriere	
Der analytische Nachwuchs fragt	24
Preise & Stipendien	
Fachgruppenpreis Analytische Chemie	26
Fresenius-Preis	26
DAAS-Preis	27
Lieselotte-Templeton-Preis	27
Personalia	
Geburtstage	28
Zum Tode von Michael Przybylski	29
GDCh-Fortbildungen	30
Impressum	28



Editorial

Liebe Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie,

willkommen zurück! Nach vier langen Jahren Pause fand vom 11. bis 14. April endlich wieder die ANAKON statt, und das Organisationsteam mit Martina Marchetti-Deschmann, Erwin Rosenberg und Victor Weiss von der TU Wien haben das Tagungsgefühl der Vor-Corona-Zeit hervorragend wiederbelebt. Mit etwa 700 Teilnehmenden verzeichnete diese ANAKON eine Rekordbeteiligung insgesamt. Absolutes Highlight der Veranstaltung war es, endlich wieder die gesamte analytische Community an vier Tagen in einer ausgesprochen positiven Atmosphäre zu treffen.

Ein großer Vorteil war natürlich, dass Wien als Austragungsort darüber hinaus extrem viel zu bieten hat und mit seinen vielen historischen Gebäuden ein einzigartiges Flair für eine derartige Veranstaltung liefert. Entscheidend für den großen Erfolg der ANAKON 2023 war aber das außergewöhnliche Engagement des Organisationsteams, das es verstanden hat, diese Möglichkeiten perfekt zu nutzen und die positive Stimmung aus der Stadt in die Veranstaltung hineinzubringen. Daher nochmal ein großes Dankeschön an Martina, Erwin und Victor!

Alle, die die ANAKON besucht haben, werden zustimmen, dass es absolut wohltuend ist, sich wieder mit Kolleginnen und Kollegen aller Fachgebiete persönlich auszutauschen, anstatt vorm Bildschirm in Zoom- oder Teams-Sitzungen Diskussionen zu führen. Aber ist es nun an der Zeit, die vergangenen Jahre rasch abzuhaken und so weiterzumachen wie zuvor? Diese Frage lässt sich unserer Ansicht nach nicht so eindeutig beantworten.

Bei aller berechtigten Frustration über die Herausforderungen der letzten Jahre gilt es auch, die positiven Aspekte zu identifizieren und konstruktiv zu nutzen. Eine Analyse der letzten Jahre zeigt schließlich, dass Krisen Kreativität auslösen können: Moderne Lehrformate sind entstanden, die zwar aus der Not geboren sind, aber in Teilen auch nach der Rückkehr zur Präsenzlehre noch von großem Wert sind. Dies betrifft beispielsweise Videofilme, die Studierenden die modernen Analysengeräte wesentlich anschaulicher erklären können als eine Powerpoint-Folie. Vermisst irgendjemand die Präsenzform einer Vorstandssitzung einer wissenschaftlichen Vereinigung, bei der man mehrfach im Jahr drei Stunden pro Weg in Verkehrsmitteln verbrachte, um dann mit Personen, die man sehr gut kennt, zwei Stunden lang ein Gespräch zu führen? Wir jedenfalls nicht. Hier zeigt der Aufstieg der Videokonferenzsysteme seine positiven Aspekte.

Trotzdem freuen wir uns sehr auf den weiteren Verlauf des ersten regulären Tagungsjahres seit langer



Carolin Huhn



Uwe Karst

Zeit. Dies gilt besonders für das nächste große Highlight, das schon bald ganz in unserer Nähe stattfindet: Michael Lämmerhofer von der Uni Tübingen und Oliver Schmitz von der Uni Duisburg-Essen als Tagungsleiter ist es gelungen, die HPLC 2023, die voraussichtlich mit einer deutlich vierstelligen Teilnehmerzahl stattfinden wird, vom 18. bis 22. Juni nach Düsseldorf zu holen. Die hohen Anmeldezahlen für Beiträge und Teilnehmende sowie die zahlreichen Sponsoren und Ausstellerfirmen sind äußerst vielversprechend. Berücksichtigt man dann noch die vielen exzellenten eingeladenen Rednerinnen und Redner sowie das attraktive Rahmenprogramm, dann sollte sich auch eine Anmeldung in letzter Minute noch lohnen. Wir wünschen allen Beteiligten eine spannende HPLC 2023.

Auch in organisatorischen Fragen werden wir versuchen, in die regulären Abläufe zurückzukehren, ohne erfolgreiche Innovationen der letzten Jahre wieder herunterzufahren. Daher werden wir in den nächsten Jahren ein Nebeneinander von Veranstaltungsformaten sehen: So wird beispielsweise die von den jüngeren Vorstandsmitgliedern Maria Viehoff und Jens Fangmeyer initiierte Vortragsreihe zum Thema Berufseinstieg im sehr gut angenommenen Online-Format dauerhaft fortgesetzt. Die regionalen Stammtische für Laborleiterinnen und Laborleiter finden nun wieder in Präsenz statt. Wir freuen uns, wenn diese Initiativen zusammen mit den wieder auflebenden Tagungen der Fachgruppe dazu beitragen, den wissenschaftlichen Austausch in der analytischen Chemie weiter zu stärken.

Carolin Huhn (Tübingen) und Uwe Karst (Münster)

Analytik bei AbbVie Deutschland

Der Biotech-Pharma-Standort des Unternehmens AbbVie in Ludwigshafen deckt die Wertschöpfungskette von der Forschung über die Entwicklung bis hin zur Produktion ab. In allen dreien finden sich auf ihre Gebiete fokussierte und miteinander vernetzte Analytikabteilungen mit vielfältigen und spannenden Aufgaben.



Blattrührerapparatur („Apparatur 2“), hiermit untersucht man die Wirkstofffreisetzung.
(Alle Fotos: M. Börner / AbbVie)



NMR-Spektrometer in der Forschung

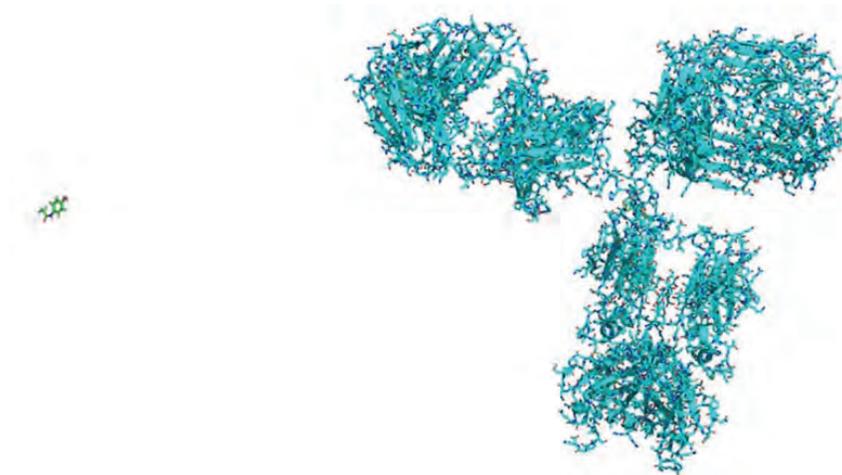
■ In der Forschung bei AbbVie geht es darum, neue Wirkstoffmoleküle zu finden; hier stehen Hochdurchsatzanalytik und Analysemethoden, die wenig Probenmaterial benötigen, im Vordergrund. Forschungsschwerpunkt am Standort Ludwigshafen sind kleine Moleküle zur Therapie neurodegenerativer Erkrankungen. Die Entwicklung testet potenzielle Wirkstoffe dann in klinischen Studien und entwickelt geeignete Darreichungsformen. Da schon hier Patientensicherheit gewährleistet sein muss, hat ein Großteil der Analytik den Anforderungen der Good Manufacturing Practice (GMP) zu genügen, mit strengen Richtlinien zur Qualitätssicherung; dafür werden maßgeschneiderte Analysemethoden entwickelt und validiert. Vor der Marktzulassung eines Produkts übergibt die Entwicklung die Analysemethoden an die Qualitätskontrolle der Produktion. Dieser Prozess heißt Testmethodentransfer, begleitet durch die Funktion „Science & Technology (S&T)“. S&T ist spezialisiert auf wissenschaftlich-technische Fragen und sitzt an der Schnittstelle zwischen Entwicklung und Produktion.

Analytik in der Forschung

■ Die Aufgaben der Forschungsanalytik reichen von der Reinigung einer neuen Substanz über die Aufklärung ihrer Struktur bis hin zur Bestimmung ihrer Reinheit und ihrer physikochemischen Eigenschaften. Dabei kommen am Standort Ludwigshafen hauptsächlich chromatographische und massenspektrometrische Methoden sowie Kernspinresonanzspektroskopie (NMR) zum Einsatz, um Probenmengen von unter einem Milligramm bis zu wenigen Gramm zu untersuchen. Nach der organischen Synthese wird mit Chromatographie und Massenspektrometrie die Zusammensetzung der Reaktionsmischung bestimmt. Hierfür steht ein breiter Gerätepark für die Flüssigkeitschromatographie (HPLC und UPLC) und die überkritische Flüssigkeitschromatographie (SFC) zur Verfügung. Mit äquivalenten Geräten im präparativen Maßstab wird schließlich die Zielverbindung isoliert. Im nächsten Schritt untersucht man die Proben mit NMR und prüft die Identität der Substanz auf Basis von 1-D- und 2-D-Spektren. Die Forschungsanalytik bearbeitet so jedes

Jahr bis zu 60 000 Proben mit Chromatographie und bis zu 10 000 Proben mit NMR. Die Messungen lassen sich manuell oder auch fast vollautomatisch durchführen; die Ergebnisse werden elektronisch direkt ans Labor übermittelt und archiviert.

Neben der qualitativen Bestätigung der Strukturidentität einer Forschungssubstanz spielt auch der quantitative Aspekt eine wichtige Rolle: Reaktions-, Qualitäts- und Stabilitätskontrollen finden mit chromatographischen Techniken statt sowie unter Zuhilfenahme von NMR. Bei der Suche nach einem neuen Wirkstoff sind neben den eigentlichen Strukturmerkmalen auch physikochemische Eigenschaften wichtig, beispielsweise die Löslichkeit einer Substanz, der pK_s -Wert und die Lipophilie. Diese Werte beeinflussen zum einen die Bioverfügbarkeit oder – was insbesondere für die Neuroforschung wichtig ist – das Vermögen zum Durchqueren der Blut-Hirn-Schranke. Analytische Fragen werden auch in Zusammenarbeit mit anderen Abteilungen in Ludwigshafen und sogar anderen Standorten in Europa bearbeitet – insbesondere, da Ludwigs-



Biologika (New Biological Entities, Neue Biologische Entitäten, NBEs, rechts) sind 100- bis 1000-mal größer als NCEs (New Chemical Entities, Neue Chemische Entitäten, links). Chemische Entitäten bestehen aus wenigen Atomen, etwa aus 20 Atomen beim Paracetamol (151 g/mol), während sich Biologika wie monoklonale Antikörper aus >1300 Aminosäuren bzw. 25 000 Atomen zusammensetzen.

hafen europaweit der einzige AbbVie-Standort ist, der über NMR verfügt.

Analytik in der Entwicklung

Am Ende der Forschungsaktivitäten zu einem Projekt steht ein Wirkstoffmolekül, das der Entwicklung übergeben wird. Zentrale Aufgaben sind es jetzt, für diesen Wirkstoff eine geeignete Darreichungsform zu entwickeln und deren Wirksamkeit und Sicherheit in klinischen Studien zu belegen. Die Entwicklungsanalytik untersucht vor allem Reinheit und chemisch-physikalische Stabilität des Wirkstoffs und Arzneimittels. In jedem Entwicklungsprojekt sind für die Prüfpunkte Identität, Gehalt und Reinheit analytische Methoden zu entwickeln, die im Rahmen der Prozess- und Formulierungsentwicklung, der Freigabe von Wirkstoff- und Arzneimittelchargen für klinische Studien und bei Stabilitätsstudien zur Anwendung kommen. Alle Methoden, die für Routineprüfungen vorgesehen sind, werden validiert, um ihre Richtigkeit und Verlässlichkeit sicherzustellen.

Die Methoden lassen sich unterteilen in chromatographische, spektroskopische, maßanalytische, nasschemische und biologische. Für Reinheit, Wirkstoffgehalt und Nebenproduktprofil – bei allen Projekten zentrale Fragen – kommt die HPLC zur Anwendung, zunehmend in Form der noch effizienteren UPLC. Treten Nebenprodukte ober-

halb eines Schwellenwerts auf, ist deren Strukturaufklärung und toxikologische Qualifizierung erforderlich, in der Regel mit HPLC-MS-Kopplungstechniken. Um co-eluierende Verunreinigungen zu trennen, stehen Methoden mit zwei gekoppelten HPLCs zur Verfügung (2D-LC). Ein weiterer wichtiger Prüfpunkt sind Elementverunreinigungen, die beispielsweise von Katalysatoren bei der Wirkstoffsynthese herrühren können. Der Nachweis elementarer Verunreinigungen erfolgt nach Aufschluss der Probe mit ICP-MS (Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma) oder ICP-OES (optische Emissions-

spektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma).

Der Ludwigshafener Standort ist innerhalb von AbbVie ein Expertenzentrum für Formulierungsentwicklung, sowohl für Biologika als auch für synthetische Moleküle.

Entwicklungsanalytik synthetischer Wirkstoffmoleküle

Synthetische Wirkstoffmoleküle werden in der Regel als Tablette oder Kapsel zur oralen Einnahme formuliert, der bevorzugten Darreichungsform von Arzneimitteln. Nur wenn die orale Verabreichung nicht möglich oder unvorteilhaft ist, beispielsweise bei Biologika, wählt man andere Applikationswege, häufig die subkutane oder intravenöse Injektion. Die orale Verabreichung einer festen Darreichungsform erfordert, dass die Tablette oder Kapsel im Verdauungstrakt zerfällt und der Wirkstoff in einer vorgegebenen Zeit in Lösung geht, damit der Körper ihn aufnehmen kann. Aus diesem Grund ist die Wirkstofffreisetzung aus der oralen Darreichungsform ein wichtiges Qualitätsattribut. Für Untersuchungen zur Wirkstofffreisetzung stehen im Wesentlichen vier Typen von Apparaturen zur Verfügung, die in Arzneibüchern beschrieben sind (genannt „Apparatur 1–4“).

Weitere Prüfpunkte für feste Darreichungsformen sind der Wassergehalt, in der Regel bestimmt über Karl-Fischer-Titration, und die Anwesenheit



Elektronenmikroskop mit energiedisperser Röntgenspektroskopie

flüchtiger Komponenten, gemessen mit Gaschromatographie.

Amorphe feste Dispersionen

■ In der Pharmaindustrie gibt es bei synthetischen Wirkstoffmolekülen einen seit Jahrzehnten andauernden Trend zu höherer Molmasse und niedrigerer Löslichkeit. Grund ist, dass es für eine hohe Affinität von Wirkstoff und Rezeptor hydrophobe Wechselwirkungen braucht. Pharmazeutische Darreichungsformen, die die schlechte Löslichkeit von Wirkstoffen erhöhen, sind daher zunehmend Schlüsseltechniken für neue Medikamente. Ein Ansatz ist die Formulierung als amorphe Feststoffdispersion (Amorphous Solid Dispersion, ASD): In ihr ist der Wirkstoff molekular dispergiert in einer Matrix (aus wasserlöslichem Polymer und häufig auch Tensid) eingebettet. Der Löslichkeitsgewinn ist meist beträchtlich und beträgt bis mehrere Zehnerpotenzen. Der Ludwigshafener Standort ist das Expertenzentrum für die Entwicklung solcher ASD-basierter fester Darreichungsformen.

ASD-basierte Darreichungsformen werfen spezifische analytische Fragen auf. Ein wichtiges Qualitätskriterium ist die vollständige oder weitgehende Abwesenheit kristalliner Wirkstoffanteile. Im Rahmen der Formulierungsentwick-

lung untersucht man Formulierungskandidaten nicht nur hinsichtlich ihrer Zusammensetzung, sondern auch hinsichtlich ihrer physikalischen Eigenschaften, Homogenität, physikalischen Stabilität und kristallinen Wirkstoffanteile. Zum Einsatz kommen hier Thermoanalyse, die dynamische Wasserdampfsorption, optische Mikroskopie, Elektronenmikroskopie, schwingungsspektroskopische Methoden und die Röntgenpulverbeugung. Um die physikalische Stabilität einer ADS-basierten Darreichungsform vorherzusagen, ist eine Risikobewertung bezüglich Rekrystallisation etabliert: Sie ermöglicht eine zuverlässige Aussage, ob sich unter regulären Lagerbedingungen während der Laufzeit des Arzneimittels eine Kristallisation ausschließen lässt.

Entwicklungsanalytik Biologika

■ Die Molekülklasse der Biologika lässt sich aufgrund ihrer Größe und Komplexität nicht auf dem klassischen Weg der chemischen Synthese herstellen, sondern nur biotechnologisch in lebenden Zellen als Expressionssystem. Es handelt sich meist um Proteine. Bereits Modifikationen auf spezifischen Aminosäuren können die 3-D-Struktur des Moleküls signifikant beeinflussen und Stabilität, Wirksamkeit oder sogar die Patientensicherheit beeinträchtigen.

Aus diesem Grund befasst sich die biologische analytische Entwicklung (Biologics Analytical Research and Development, BARD) bei AbbVie mit der Qualitätskontrolle, Potenzanalytik und Charakterisierung von Biologika und deren Hilfsstoffen in (vor-)klinischen Phasen. Sie verwendet ein breites Methodenportfolio von den klassischen Arzneibuchmethoden über State-of-the-art-Techniken wie Kapillarelektrophorese und Massenspektrometrie bis hin zu zellbasierten Assays zur Wirksamkeitsbestimmung (Potency Assay). Als eine der wichtigsten Analysemethoden etabliert hat sich die Massenspektrometrie in Form von Peptide Mapping, bei dem die Proteine mit Protease in kleinere Peptide zerlegt und anschließend per Reversed-Phase-LC-MS/MS analysiert werden. Zusammen mit der intakten Masse, die sich aus der Kopplung von Reversed-Phase-LC-MS oder auch Größenausschluss-Chromatographie (SEC)-MS ergibt, erhält der/die Analytiker:in ein vollständiges Bild über Modifikationen bzw. Abbauewege, Fragmentierungen und die Bildung von Aggregaten. Um das Molekülverhalten besser zu verstehen, wird die Substanz künstlichen Stressbedingungen unterworfen, um frühzeitig Hotspots zu identifizieren, die während der Herstellung oder Lagerung degradieren können.

Testkriterien und Methoden in der Biologikaanalytik

Testkriterium	Attribut	Methode	Testkriterium	Attribut	Methode		
Primärstruktur	Molekülgewicht des intakten Proteins sowie der Untereinheiten	Reducing/Non-reducing SDS-PAGE	Heterogenität	Aggregation/Partikelbildung	SEC		
		LC-ESI-MS			Plasma Stability		
		MALDI			MALLS		
	Sequenzvarianten	CE/MS			DLS		
	Freie Cysteine	Peptide Map			AUC		
		Ellman's Assay			MFI		
	Disulfidbrücken	Non-red Peptide Map		Achilles			
		Thioether		cGE	Light Microscopy		
	Heterogenität	C- und N-terminale Lys, pyro Glu		Non-red Peptide Map	Higher order structure	Sekundär- und Tertiärstruktur	CD Spectroscopy
				CEX	Differential Scanning Calorimetry		
Peptide Map			H-D Exchange				
Oxidation		RP-HPLC	Glykosylierung	Glykanstrukturen	Released Glycans by HILIC-MS		
		RP-HPLC	Middle-down MS Assay				
		Peptide Map	Peptide Map				
Deamidierung		CEX	In-vitro-Funktionsassays	Rezeptorbindung, Aufnahmeassays, Potenzassays	ELISA		
		IdeS-IEX			Surface Plasmon Resonance		
		Peptide Map			Zellbasierte Assays		
Fragmentation		Fragmentation	SEC	Interaktionschromatographie			
	RP-HPLC/MS						
	MALLS						

Diese Abbauege bilden die Grundlage für die Qualitätskontrollanalytik, durchgeführt im Rahmen der Guten Herstellungspraxis. Neben den Arzneibuchmethoden wie Trübungsmessungen werden in erster Linie physikochemische Methoden eingesetzt. Insbesondere Chromatographie und Elektrophorese spielen als klassische Freigabeanalytik eine zentrale Rolle. Bindungsassays und zellbasierte Assayformate wie der Reporter-Gen-Assay komplettieren die Freigabeanalytik.

Qualitätskontrolle

■ In der Produktion bei AbbVie in Ludwigshafen gibt es zwei Analytik-Funktionen: „Science & Technology Analytical Sciences“ (S&T-Analytik) und die Qualitätskontrolle. In der Pharmaindustrie setzt die Qualitätskontrolle im Grunde die gleichen Methoden wie die Entwicklung ein: Das, was die Entwicklung etabliert hat, führt die Qualitätskontrolle am Marktmaterial fort.

Wissenschaftliche Fragen stehen in der Entwicklung (R&D) sowie bei Science & Technology (S&T) im Vordergrund, regulatorische Fragen in der Qualitätskontrolle. Am Standort Ludwigshafen arbeiten in der Qualitätskontrolle 130 Mitarbeitende, die monatlich 12.000 Analysergebnisse mit über tausend Methoden erfassen. Das getestete Material umfasst Packmittel, Hilfsstoffe, Wirkstoffe, Zwischenprodukte, Medical Devices, Solida- und Biologika-Produkte. Die Qualitätskontrolle garantiert die Sicherheit und den therapeutischen Nutzen jedes AbbVie-Produkts. Mit anderen Worten: Jeder Produktionsschritt wird analytisch begleitet. Um diese immense Komplexität an fachübergreifendem Know-how zu bewältigen, arbeiten in der Qualitätskontrolle Chemie- und Biogielaboranten, Ingenieurinnen, Apotheker und Akademikerinnen diverser naturwissenschaftlicher Fachrichtungen Hand in Hand. Diese Vielfalt an Kompetenzen ist aufgrund des produktspezifischen

Spektrums an chemischen, physikalischen, mikrobiologischen und molekularbiologischen Methoden auch zwingend nötig.

Analytik bei Science & Technology

■ Die S&T-Analytik übernimmt Entwicklungsaufgaben, unterstützt die kommerzielle Herstellung und stellt die Marktversorgung sicher. Eine Hauptaufgabe ist die Spätphasenentwicklung, die Validierung und der Transfer von analytischen Testmethoden. Die S&T-Analytik fungiert als Bindeglied zwischen der analytischen Entwicklung, der regulatorischen Einreichung und der kommerziellen Implementierung von Testmethoden für neue Arzneimittel.

Die Abteilung ist zuständig für die Analytik chemisch synthetisierter Ausgangsstoffe, von Hilfsstoffen, Zwischenprodukten und Wirkstoffen, oraler und parenteraler Darreichungsformen, Fermentationsprodukte, Enzym- und Peptid-basierter Arzneimittel und von Produkten im Bereich Augenheilkunde und medizinische Ästhetik. Es kommt ein breites Spektrum an analytischen Techniken zum Einsatz. Schwerpunkte sind die pharmazeutische Analytik für die analytische Freigabe und Stabilitätsbestimmung pharmazeutischer Stoffe für den menschlichen Gebrauch, außerdem die physikochemische Charakterisierung von Wirkstoffen und Arzneimitteln, die Untersuchung möglicher Produktfälschungen und die Identifizierung potenzieller Fremdstoffe (Extraneous Matter Identification, EMID) in allen kommerziellen AbbVie-Produkten.

Die pharmazeutische Analytik leistet einen bedeutenden Beitrag zur Arzneimittelsicherheit und Wertschöpfungskette von der frühen Forschung bis zum Handelsprodukt. Die analytischen Fragen sind außerordentlich vielfältig und oft anspruchsvoll. Hieraus ergeben sich hochspannende Tätigkeitsfelder für Analytikerinnen und Analytiker – das bestätigen die Autoren aus eigener Erfahrung.

*Norbert Nagel, Oliver Callies,
Markus Hollmann, Tolga Eichhorn
und Sebastian König
AbbVie Deutschland*



AbbVie in Ludwigshafen: Tor Sudermannstraße mit Produktionsgebäude

AbbVie in Deutschland und weltweit

■ AbbVie (an der New Yorker Börse unter dem Symbol „ABBV“ gehandelt) ist ein globales, forschendes Biotechnologie- und Pharmaunternehmen. AbbVie stellt neue Therapien für einige der komplexesten und schwerwiegendsten Krankheiten der Welt bereit und ist auf verschiedenen Therapiegebieten tätig: Immunologie, Onkologie, Neurologie, Augenheilkunde und Virologie sowie

mit dem Portfolio von Allergan Aesthetics in der medizinischen Ästhetik. In Deutschland ist AbbVie an seinem Hauptsitz in Wiesbaden und seinem Forschungs- und Produktionsstandort in Ludwigshafen vertreten. Insgesamt beschäftigt AbbVie weltweit 50.000 und in Deutschland rund 3.000 Mitarbeitende.

www.abbvie.com
www.abbvie.de

Agilent: Marktführer für HPLC und Elektrophorese

Agilent entwickelt und verkauft Instrumente, Produkte und Lösungen für Labore aller Art. Mit seinen Technologien und Dienstleistungen ermöglicht das Unternehmen exakte Analysen und Qualitätssicherung, etwa bei der Entwicklung von Pharmazeutika, in der Krebsforschung, für Lebensmittel-, Doping- und Bodenanalysen sowie in der Umweltanalytik. 2023 feierte Agilent sein 50-jähriges Jubiläum als Analytikhersteller in Deutschland – ein Rückblick.

Alles begann mit der HPLC

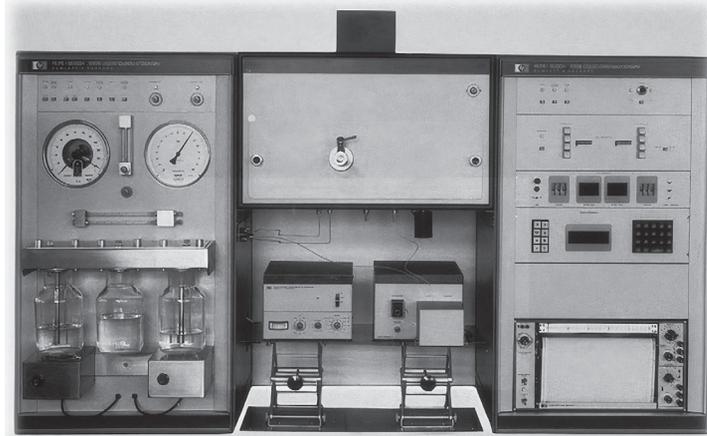
■ Anfang der 1970er-Jahre kamen die ersten kommerziellen Flüssigkeitschromatographiergeräte auf den Markt, und 1973 gliederte Hewlett-Packard (HP) das Karlsruher Start-up Hupe + Busch in den Konzern ein. Der Gründer und Pionier der kleinen Firma, Peter Hupe, wurde erster Geschäftsführer des Flüssigkeitschromatographiegeschäfts von HP (und erhielt übrigens 2021 den Pittcon Heritage Award für sein Lebenswerk).

Seit diesem Kauf in den 1970er-Jahren liegt die weltweite Zuständigkeit für HPLC-Produkte bei der heutigen Agilent Technologies Deutschland (ehemals HP und seit 1999 ein eigenständiges Unternehmen). Der Hauptsitz ist in Waldbronn. Neben dem HPLC-Bereich bildet dort seit 1992 die Elektrophorese ein weiteres Unternehmensstandbein.

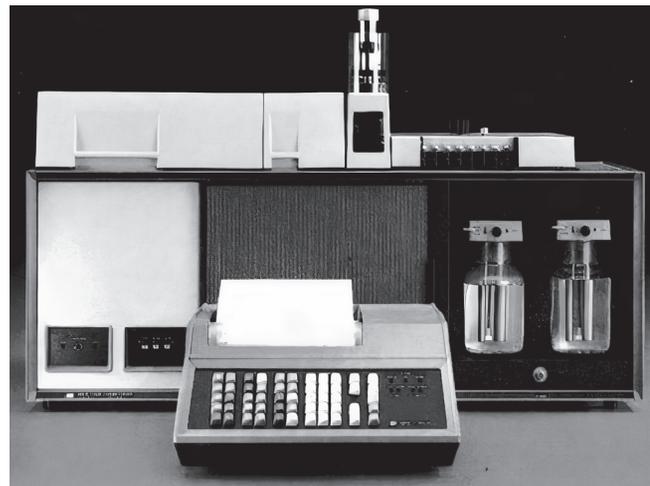
Den ersten kommerziellen Flüssigkeitschromatograph brachte HP bereits im Jahr 1973 auf den Markt: Der HP1010 wog über 500 Kilogramm und setzte auf für damalige Zeit „hochmoderne“ gepackte 57-Mikrometer-Partikelsäulen und einen integrierten Streifenschreiber. Im Jahr 1976 folgte dann ein kleineres, „platzsparendes“ Produkt, das nur noch die Hälfte des Platzes auf dem Labortisch einnahm: der HP1084 – das erste HPLC-Gerät mit einem Autosampler und elektronischem Integrator.

Sieben Jahre später, 1983, überraschte HP mit einer Innovation, die damals ihrer Zeit voraus war und noch heute genutzt wird: der HP1090, ein System mit sehr geringer Dispersion für moderne Säulen und Flussraten ab 0,2 ml/min. Die integrierte Modularität und Computersteuerung bot verschiedene UV-Detektionsoptionen, darunter einen Photodiode-Array-Detektor mit 211 Dioden – der erste Array-Detektor seiner Art, der auch spektral messen konnte.

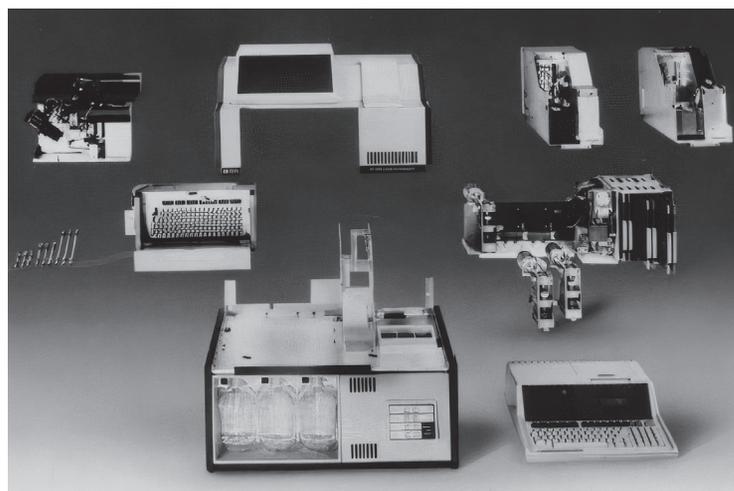
Wurden die HPLC-Geräte zu Beginn hauptsächlich in der Chemie eingesetzt,



1973: Der Flüssigkeitschromatograph HP1010 wiegt über 500 kg. Die Chromatographiesäulen sind gepackt mit „state-of-the-art“ 57-Mikrometer-Partikeln. (Alle Fotos: Agilent)



1976: Der HP1084 benötigt fast 50 Prozent weniger Platz auf der Laborbank.



1983: Der Flüssigkeitschromatograph HP1090 mit integrierter Modularität erscheint.



Heute: Infinity II LC / MSD iQ
massenselektiver Detektor



HPLC-Chip für Nano-Flow-LC/MS



Tapestation mit ScreenTapes

kamen über die Jahre neue Bereiche hinzu, beispielsweise die Pharma- und Lebensmittelindustrie. Aufgrund des breiter werdenden Anwendungsspektrums gewann Modularität immer mehr an Bedeutung. Mit dem HP1050 aus dem Jahr 1988 und seinem Nachfolger HP1100 im Jahr 1995 bot HP erstmals Systeme aus verschiedenen Pumpen, Samplern, Öfen und Detektormodulen an, um sie an die jeweiligen Anwendungen anzupassen, von nano-LC bis Prep-LC. Mit über 50 Modulen und mehr als 50000 installierten Geräten zählten die Produkte der HP1100-Serie im Jahr 2006 mit zu den erfolgreichsten auf dem Markt.

Heutzutage nutzen HPLC-Instrumente weitaus leistungsfähigere Säulen, die auf Sub-2-Mikrontechnik basieren und eine noch geringere Dispersion und noch höhere Drücke über 1000 bar sicherstellen – Ergebnis ist eine schnelle Chromatographie, ein hoher Durchsatz sowie eine sehr hohe Auflösung und Peakkapazität.

2009 führte Agilent die Infinity-Serie mit neuen hochflexiblen Instrumenten ein: Durch seine erweiterte Modularität lässt sich immer das bestmögliche System für spezifische Anwendungen zusammensetzen.

Generell – aber insbesondere in regulierten Märkten – muss eine Methode kompatibel sein. Rückwärtskompatibilität zu früheren Systemen ist sichergestellt und auch Kompatibilität mit Nicht-Agilent-Systemen ist über einen Emulationsmodus möglich. Zusätzlich kamen automatisierte Systeme dazu, etwa für die zweidimensionale HPLC für komplexe Proben, sowie Online-LC

zur Prozessüberwachung und Methodenentwicklung.

Die Massenspektrometrie in die Analytik zu integrieren ist heute längst Routine, etwa, um die Identität von Substanzen zu bestätigen, für Quantifizierungen, Identifizierungen und Screenings. Kunden erwarten vollständige softwaregestützte Arbeitsabläufe mit Methoden, Standards und Reagenzien, die in ihre Laborinfrastruktur passen.

Zweites Standbein Kapillarelektrophorese

■ In den 1980er-Jahren wurde es mit der Kapillarelektrophorese (CE) möglich, Biomoleküle wie Proteine oder DNA schnell und hochaufgelöst mit hohen elektrischen Feldern zu trennen. Daher brachte HP im Jahr 1992 erstmals ein Gerät für die Hochleistungskapillarelektrophorese (HPCE) auf den Markt: das G1600 mit Probenkarussell, Dioden-Array-Detektoren und Kapillarkühlung.

Ein weiterer Entwicklungsschritt folgte 1995: die Kopplung der CE mit der Massenspektrometrie durch eine neue koaxiale Flüssigkeitsschnittstelle. Diese machte es möglich, den Trennpuffer auf die Elektrospraybedingungen abzustimmen, und erweiterte den Anwendungsbereich der CE durch eine höhere Konzentrationsempfindlichkeit – die geringe Empfindlichkeit war bis dahin einer der Nachteile der Kapillarelektrophorese gewesen.

Im Jahr 2009 führte Agilent mit dem G7100 zusätzliche Detektoren ein, etwa basierend auf laserbasierter Fluoreszenz und kontaktloser Leitfähigkeit, um beispielsweise biologische Proben zu analysieren. Mit der Übernahme von Advanced Analytical Technologies im Jahr 2018 kam zum Repertoire der Fragment Analyzer hinzu, mit bis zu 96 parallelen Kapillaren. Er ermöglicht eine Hochdurchsatzanalyse von DNA, RNA und Proteinen und wurde unter anderem für die Qualitätskontrolle bei der Covid-Impfstoffforschung eingesetzt.

Die Mikrofluidik hält Einzug

■ Ausgehend von den fotolithografischen Fertigungsverfahren der Halbleiterindustrie entstand in den 1990er-Jahren die Lab-on-a-chip(LOC)-Technik. Die Idee ist es, analytische Arbeitsschritte auf einem mikrofluidischen

Chip abzubilden, um kleinste Probenmengen schnell, einfach und automatisch zu analysieren. Caliper Technologies war einer der Pioniere bei der LOC-Technik, und basierend darauf brachte Agilent im Jahr 1999 den 2100 Bioanalyzer auf den Markt. Die auf Elektrophorese basierenden anwendungsspezifischen

Chips bestimmen und quantifizieren die Größe von DNA- und RNA-Fragmenten sowie von Proteinen aufgrund ihrer Fluoreszenz. Diese Technik etablierte sich schnell als Qualitätsstandard und wird auch heute noch zur Qualitätskontrolle von Proben vor DNA-Microarrays, Next-Generation-

Sequencing-Analysen oder der Qualitätskontrolle monoklonaler Antikörper eingesetzt.

Im Jahr 2010 erreichte der Verkauf den Meilenstein von insgesamt fünf Millionen Chips, und bereits im Jahr 2019 erwähnten 57 000 Veröffentlichungen den Bioanalyzer. Heutzutage ist



Campus von Agilent Technologies Deutschland in Waldbronn

Über Agilent

Agilent Technologies ist ein weltweit führendes Technologieunternehmen mit Hauptsitz in Santa Clara, Kalifornien, USA. Es bietet Instrumente, Software, Dienstleistungen und Verbrauchsmaterialien für den gesamten Arbeitsablauf im analytischen Labor.

Das Unternehmen unterstützt Kunden in den Biowissenschaften und angewandten Märkten, in Diagnostik und Genomics in mehr als 110 Ländern und beschäftigt weltweit rund 18 000 Mitarbeitende. Im Jahr 2022 erzielte Agilent einen Umsatz von 6,85 Milliarden US-Dollar.

Die Anfänge in Deutschland

Der Ursprung von Agilent Technologies in Deutschland war die Ansiedlung des ersten europäischen Werks von Hewlett-Packard (HP) im Jahr 1959 in Böblingen. Es folgte die Übernahme der Firma Hupe & Busch aus Karlsruhe-

Grötzingen im Jahr 1973 und die Gründung des Standorts Waldbronn im Jahr 1978. Seitdem entwickelt, produziert und vermarktet Agilent Technologies in Waldbronn Analytikkomplettlösungen, basierend auf Flüssigkeitschromatographie, Elektrophorese und Mikrofluidik.

1999 wurde der Bereich Messtechnik von HP abgespalten und unter dem heutigen Namen Agilent Technologies mit Konzernsitz in Santa Clara, USA, als eigenständiges Unternehmen weitergeführt. In einem weiteren Split-off im Jahr 2014 entstand aus dem Geschäftsbereich der elektronischen Messtechnik in Böblingen das Unternehmen Keysight Technologies. Seitdem ist Waldbronn mit rund 1100 Mitarbeitenden einer der größten Agilent-Standorte weltweit und beschäftigt rund 1400 Mitarbeitende in ganz Deutschland.

Karrierewege für Analytiker:innen

Waldbronn ist einer der wichtigsten Agilent-Standorte weltweit und bietet viele Karrieremöglichkeiten in unterschiedlichen Bereichen:

- Produktion von Analytikkomplettlösungen
- Entwicklung von Hardware, Software und Applikationen
- Internationale Produktvermarktung für spezifische Marktsegmente
- Technische Beratung und Unterstützung für Kunden in aller Welt
- Internationale Logistik
- Disposition und technischer Einkauf
- Globales Agilent Usability & Design Center
- Europäisches Zentrum für Kundens Schulungen und Produktvorführungen
- European CrossLab Education Center (CEC)
- European Field Service and Repair Center (EFSC)
- Deutsche Vertriebsorganisation für das gesamte Produktportfolio
- Deutsche Kundendienstzentrale

Analytiker:innen bieten sich zahlreiche Einstiegsmöglichkeiten. Auch erfahrene Analytikerinnen und Analytiker werden regelmäßig gesucht.

Unternehmerische Sozialverantwortung ist bei Agilent fester Bestandteil der Firmenkultur; Vielfalt und Integration spielen eine entscheidende Rolle. Das Ziel ist ein positives Arbeitsumfeld, in dem sich jeder Mitarbeitende bei der Arbeit wohlfühlt und sich selbst verwirklichen kann.

Ein weiteres zentrales Thema bei Agilent ist die Nachhaltigkeit. Bereits mehrere Produkte tragen das „my green lab“-ACT-Umweltverträglichkeitssiegel, und Kundenlabore sind von „my green lab“ zertifiziert.

eine Publikation in vielen Bereichen fast nicht mehr möglich, ohne den Bioanalyzer zu referenzieren. Der Grund: Es wurden eine DIN (DNA-Integritäts-Nummer) und RIN (RNA-Integritäts-Nummer) eingeführt, die bei der Analyse automatisch errechnet werden und bei Publikationen anzugeben sind.

Der Einsatz von Nano-Flow-LC-MS für die Proteomforschung in den 1990er-Jahren wurde durch die Tatsache vorangetrieben, dass Nanospray bei weitem die effizienteste Ionisierungstechnik mit höherer Empfindlichkeit war. Die Forschung kam jedoch nur langsam voran, da die Dispersion zu hoch war und die Instrumentierung nicht robust genug – so waren Abläufe beispielsweise nicht reproduzierbar und ließen sich nicht routinemäßig einsetzen.

Ein großer Schritt nach vorn war die HPLC-Chip-Technologie und die Chip-Cube-Schnittstelle zum Massenspektrometer im Jahr 2006. Die auf der Tintenstrahltechnologie von Hewlett-Packard basierenden mikrofluidischen Chips auf Polyimidbasis vereinten Proteomik-Workflows für die Probenvorbereitung, Analyse und Elektrosprayionisierung. Die MS-Schnittstelle ermöglichte es, die Chips per Knopfdruck zu laden, sodass keine manuelle Optimierung erforderlich war. In den folgenden Jahren führte das Unternehmen zusätzliche Arbeitsabläufe für phosphorylierte Peptide und Glykane aus monoklonalen Antikörpern ein. Im Gegensatz zu den Bioanalyzer-Chips erreichte man jedoch bei diesen Assay-Chips keine Standardisierung.

Im Jahr 2011 erwarb Agilent das Unternehmen Lab901; es hatte automatisierte Elektrophoreseprodukte für DNA-, RNA- und Proteinproben entwickelt. Herzstück ist das Elektrophoresegerät TapeStation und die dazugehörigen ScreenTapes – dünne Verbrauchsmaterialien aus Folien auf Kunststoffbasis mit integrierten Reagenzien. Dies ermöglicht automatisierte und skalierbare Arbeitsabläufe mit 96-Well-Platten, was den Life-Science-Anwendungsbereich erweiterte. Zwölf Proben werden parallel analysiert, und die Fluoreszenzabbildung des gesamten ScreenTapes ermöglicht eine automatische Detektion.

Zwei neue Instrumente, für das manuelle bzw. automatische Laden der ScreenTapes, wurden seitdem eingeführt. Darüber hinaus wurden eDIN und eRIN, die elektronischen Äquivalente von DIN und RIN, validiert, einsetzbar für die gleichen Anwendungen wie die des Bioanalyzers. Der Ausbau der ScreenTape-Produktion am Standort Waldbronn mit moderner Automatisierung war einer der Gründe für das schnelle Wachstum dieses Geschäftsbereichs in den letzten Jahren.

Im August 2022 übernahm Agilent Polymer Standards Service (PSS), ein Unternehmen für Polymercharakterisierung mit Sitz in Mainz. PSS ist spezialisiert auf Hardware und Software sowie Trennsäulen und Standards für Komplettlösungen für die Gelpermeationschromatographie (GPC) und die Größenausschlusschromatographie (SEC), um das Molekulargewicht und die Größenverteilung von Makromolekülen zu bestimmen.

*Tom van de Goor
Agilent Technologies*

Aus den Arbeitskreisen

Neues vom DAAS



Alter und neuer Vorstand des DAAS in der Fachgruppe Analytische Chemie während der Vorstandssitzung in Ludwigshafen am 24. Januar 2023. Von links: Ulrich Engel, Martin Wende, Stefanie Fingerhut, Ann-Christin Niehoff, Kerstin Leopold, Cornel Venzago, Wolfgang Buscher, Jörg Feldmann, Carsten Engelhard. Es fehlt: Uwe Karst. (Foto: C. Engelhard)

■ Der neue Vorstand für die Amtsperiode 2023–2026 setzt sich folgendermaßen zusammen:

Bereich Hochschule / Forschungseinrichtungen

- Carsten Engelhard, Siegen
- Uwe Karst, Münster
- Jörg Feldmann, Graz

Bereich Industrie

- Stefanie Fingerhut, Darmstadt
- Cornel Venzago, Hanau
- Ann-Christin Niehoff, Duisburg

Die erste Sitzung des neuen Vorstands fand am 24. Januar 2023 auf Einladung der BASF in Ludwigshafen statt. Zur Übergabe der Amtsgeschäfte tagten zunächst der alte und der neue Vorstand gemeinsam. An der Sitzung nahmen teil: Stefanie Fingerhut, Kerstin Leopold, Ann-Christin Niehoff, Wolfgang Buscher, Ulrich Engel, Carsten Engelhard, Jörg Feldmann, Cornel Venzago und Martin Wende. In der anschließenden Sitzung des neuen Vorstands wurde Carsten Engelhard zum neuen Vorstandsvorsitzenden des DAAS gewählt, Stefanie Fingerhut zur stellvertretenden Vorsitzenden.

Carsten Engelhard

Geringste Schadstoffspuren nachweisen

Materialforschende entwickeln wiederverwendbares Nanomaterial für ultrasensitive Analysen – Ausgründung geplant

■ Selbst geringe Schadstoffspuren in Wasser oder anderen Flüssigkeiten lassen sich mit spektroskopischen Untersuchungsmethoden nachweisen. Für den Einsatz in der Forensik, der Sicherheitsbranche, der Lebensmittelindustrie oder der medizinischen Diagnostik sind Methoden wie die oberflächenverstärkte Raman-Streuung (SERS, surface-enhanced Raman scattering) allerdings noch zu teuer und nicht zuverlässig genug. Einem Forschungsteam aus der Materialwissenschaft der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel (CAU) ist es jetzt gelungen, die Leistungsfähigkeit der Methode um das 50-Fache zu steigern. Sie entwickelten ein Substrat mit besonderen Nanostrukturen, das die Empfindlichkeit und die räumliche sowie zeitliche Auflösung der Methode deutlich erhöht. Das führt selbst im Spurenbereich zu hochpräzisen und schnellen Ergebnissen. Außerdem lässt sich das Substrat wiederverwenden, was die Kosten der Analyse erheblich senkt. Die Ergebnisse des Forschungsteams sind in der Fachzeitschrift *Small* erschienen.

Substrat spielt entscheidende Rolle

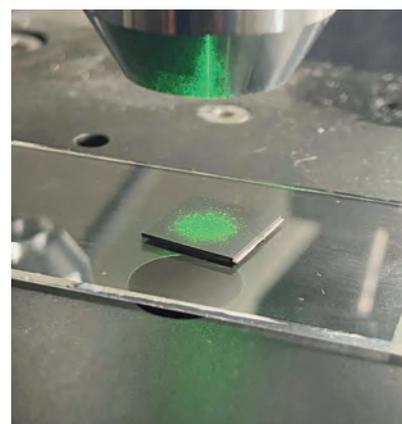
■ Die Raman-Spektroskopie – benannt nach dem indischen Physiker und Nobelpreisträger Chandrasekhara Venkata Raman – ist eine Methode, um die chemische Zusammensetzung von Materialien zu bestimmen und so auch schädliche Stoffe nachzuweisen. Hierzu wird eine Stoffprobe mit einem Laser bestrahlt. Anhand des zurückgeworfenen Raman-Signals lassen sich Rückschlüsse auf die Eigenschaften des Materials ziehen. „Eine entscheidende Rolle spielt hierbei das Substrat, die Unterlage, auf der die zu analysierende Stoffprobe liegt. Denn es kommt zu Wechselwirkungen mit dem Laserlicht, die das Raman-Signal beeinflussen“, erklärt Josiah Ngenev Shondo, Doktorand am Lehrstuhl für Materialverbunde.

Forschenden des Lehrstuhls ist es jetzt gelungen, ein Substrat herzustellen, mit dem das Raman-Signal um das 50-Fache verstärkt wird im Vergleich zu klassischen SERS-Methoden. „Das ist mehr als jemals zuvor für diese Methode berichtet wurde“, sagt Oral Cenk Aktas. Damit erhöht sich die Empfindlichkeit der Methode und ihre räumliche und zeitliche Auflösung. So lassen sich in kurzer Zeit auch sehr geringe Stoffmengen analysieren. Nach der Analyse zersetzen die Forschenden die Stoffprobe mit UV-Licht. „Das relativ teure Substrat wird so gereinigt und kann zum ersten Mal mehrmals verwendet werden – in unseren Test bis zu zwanzig Mal“, so Aktas weiter.

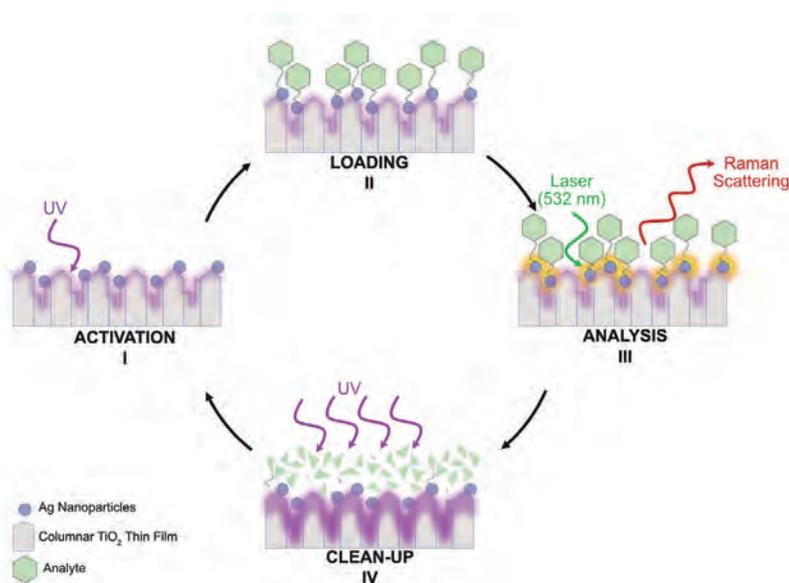
Material kombiniert herausragende Eigenschaften

■ Der Grund für die besonderen Eigenschaften des Substrats liegt in seinem Aufbau. „Hier kommen Materialien mit

herausragenden Eigenschaften zusammen“, sagt Salih Veziroglu, der im Rahmen einer Förderung des CAU-Forschungsschwerpunkt KiNSIS (Kiel



Mit Laserlicht und dem Raman-Signal lassen sich geringe Materialproben analysieren und zum Beispiel Schadstoffspuren nachweisen. Eine entscheidende Rolle spielt dabei das Substrat, auf dem die Probe liegt. (Foto: C. Aktas / J. Shondo)



Ablauf der neuen PIERS-Analysemethode: Zuerst wird das zugrundeliegende Substrat mit UV-Licht aktiviert (I). Anschließend wird die zu untersuchende Materialprobe (grün) aufgetragen (II). Die Probe wird mit Laserlicht bestrahlt. Aus der reflektierten Raman-Streuung lassen sich Rückschlüsse auf die Eigenschaften des Materials ziehen (III). Abschließend wird das Substrat noch einmal mit UV-Licht bestrahlt, um das Material zu zersetzen und das Substrat zu reinigen (IV). Anschließend lässt es sich wiederverwenden. (Grafik: S. Veziroglu)

Nano, Surface and Interface Science) zu den Substratmaterialien forsch. „Es besteht zum Beispiel aus einer extrem aktiven photokatalytischen Titandioxid-schicht und aus besonderen plasmonischen Nanostrukturen.“ Auf der Oberfläche des Substrats kombinierten die Forschenden vier verschiedene Nanostrukturen, darunter Gold- und Silberpartikel, zwischen denen es zu Licht-Materie-Wechselwirkungen kommt – plasmonische Effekte.

Mit ihrem Substrat hat das Team der CAU einen Beitrag geliefert zu einem neuen Ansatz der Raman-Spektroskopie, der kürzlich vorgestellten PIERS-Methode (Photo Induced Enhanced Raman Spectroscopy). Durch die Kombination von plasmonischen und photokatalytischen Effekten wird hier das Raman-Signal und damit die Auflösung der Methode deutlich verbessert.

Ergänzung um KI-Methoden und Ausgründung geplant

Das Substrat lässt sich in andere Raman-Spektroskopie-Methoden integrieren und macht so verschiedene Einsatzmöglichkeiten denkbar. Um es zur Marktreife zu bringen, sind die Forschenden jetzt auf der Suche nach anderen Forschungsgruppen und Unternehmen der Labor- und Analysetechnik. Außerdem planen sie, ihren Ansatz um Methoden der Künstlichen Intelligenz zu ergänzen, um eine umfassende

Datengrundlage für die Materialanalyse schaffen. So sollen sich auch einzelne Moleküle noch schneller und präziser bestimmen lassen.

Eine Idee für eine konkrete Anwendung hat Doktorand Shondo bereits in seiner Promotion erforscht, die kurz vor dem Abschluss steht. 2018 kam der Materialwissenschaftler mit einem Stipendium des Deutschen Akademischen Auslandsdienstes (DAAD) an die CAU nach Kiel, um etwas gegen die Umweltverschmutzung in seinem Heimatland Nigeria zu tun. Die Förderung der großen Ölvorkommen des Landes verunreinigt Böden, Flüsse und sogar das Trinkwasser. Mit dem neuen Substrat, das er und die Kollegen in Kiel entwickelt haben, sieht er auch Potenzial, um tragbare Raman-Spektroskopie-Geräte in Nigeria einzusetzen: „Da sich damit bereits geringe Mengen an Öl nachweisen und sogar entfernen lassen, könnte diese Methode bereits frühzeitig zum Einsatz kommen und schlimmere Umweltschäden verhindern.“

Quelle: Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

Originalpublikation

J. Shondo, S. Veziroglu, T. Tjardts, T. B. Sarwar, Y. K. Mishra, F. Faupel, O. C. Aktas, „Nanoscale Synergetic Effects on Ag-TiO₂ Hybrid Substrate for Photoinduced Enhanced Raman Spectroscopy (PIERS) with Ultra-Sensitivity and Reusability“; *Small* 2022, 18, 2270271. doi: 10.1002/smll.202270271

Auswertelgorithmen unter der Lupe

Erste vergleichende Untersuchung zu automatisierten Analyseverfahren großer Datensätze in der Mikroplastikforschung

Das Fehlen einheitlicher analytischer Standards verhindert derzeit die Vergleichbarkeit von Daten zu Mikroplastik in der Umwelt. Forschende der Universität Bayreuth und des Alfred-Wegener-Instituts, Helmholtz-Zentrum für Polar- und Meeresforschung (AWI) haben nun erstmals zwei automatisierte Analyseverfahren für Mikroplastikdaten hinsichtlich der Ergebnisse verglichen. Signifikante Abweichungen zeigten sich vor allem bei kleinen Partikeln mit vergleichsweise hohem Gefährdungspotenzial. Die in der Zeitschrift *Analytical and Bioanalytical Chemistry* erschienene Studie zeigt, dass die Standardisierung analytischer Verfahren ein zentrales Forschungsziel sein muss.

Partikel aus Kunststoff werden als Mikroplastik bezeichnet, wenn sie kleiner als fünf Millimeter sind. In den Anfängen der Forschung wurde Mikroplastik allein anhand rein visueller Kriterien identifiziert. Die Entscheidung darüber, ob es sich bei einem verdächtigen Partikel um Mikroplastik handelte, basierte daher auf der individuellen Wahrnehmung der Forschenden. Dies kann jedoch zu stark fehlerbehafteten Ergebnissen führen. Mittlerweile ist klar, dass gerade bei kleinen Mikroplastikpartikeln nur eine Identifizierung mittels chemischer Analysen belastbare Daten zu Mikroplastik liefert. Die Mikro-Fourier-Transformations-Infrarot-Spektroskopie – kurz: Mikro-FTIR-Spektroskopie – ist auf diesem Gebiet derzeit eines der verlässlichsten Messverfahren.

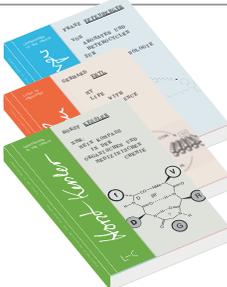
Zur Untersuchung von Mikroplastikpartikeln die kleiner als 0,5 Millimeter sind, müssen die Proben auf Filtern aufgebracht und können dann mit Mikro-FTIR-Spektroskopie analysiert werden. Hierbei wird der komplette Probenfilter mit einer hohen Auflösung gemessen. So entsteht eine „chemische Landkarte“ des Filters, die es ermöglicht, Mikroplastik bis zu einer Größe von zehn

LIVES
IN
CHEMISTRY

L—C

LEBENSWERKE
IN DER
CHEMIE

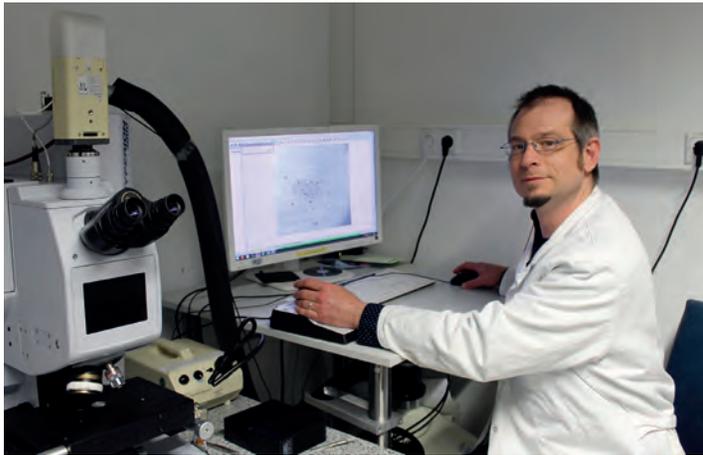
NEU 2023:
[Franz Effenberger](#): Von Aromaten zur Bio- und Nanotechnologie
[Gerhard Ertl](#): My Life with Science (extended English ed.)
[Horst Kessler](#): NMR – Mein Kompass in der Organischen Chemie





FACHGRUPPE
GESCHICHTE
DER CHEMIE

HIER
BESTELLEN:
1-i-c.org/order



Martin Löder an einer Anlage für FTIR-Spektroskopie an der Universität Bayreuth (Foto: UBT / C. Wißler)

Mikrometern eindeutig zu identifizieren. Bei der Messung entstehen allerdings bis zu mehrere Millionen FTIR-Spektren, so dass eine manuelle Auswertung auf Mikroplastik unmöglich ist. Für eine solche Analyse sind verlässliche automatisierte Computerverfahren erforderlich.

Zur automatischen Analyse von FTIR-Datensätzen werden heute in der Mikroplastikforschung verschiedene Auswertelgorithmen eingesetzt. Zwei gut etablierte und häufig angewendete Algorithmen zur Identifizierung von Mikroplastik-FTIR-Spektren sind vom AWI und von der Universität Bayreuth unabhängig voneinander entwickelt worden: das *simPLe*-Analyse-Tool (*systematic identification of MicroPlastics in the environment*) und der *BPF* (*Bayreuth Particle Finder*).

Beide Algorithmen haben den Vorteil, dass die großen Messdaten in ihrer Gesamtheit untersucht werden können. Dadurch lassen sich Verzerrungen vermeiden, die entstehen, wenn nur Teile einer Probe ausgewählt und die Analyseergebnisse auf die Gesamtheit der Probe hochgerechnet werden.

Im Rahmen ihrer vergleichenden Studie untersuchten die Forschenden an der Universität Bayreuth und am Standort Helgoland des AWI zwei Probensätze mit beiden Auswertelgorithmen. Gemessen wurden Menge und Größe der Mikroplastikpartikel sowie die Anteile verschiedener Polymere. Der eine Probensatz enthielt zehn Wasserproben aus der Ober- und Mittelweser, der andere Probensatz zehn Wasser-

proben, die aus der Unter-/Außenweser und dem Jadebusen stammten. „Wir haben uns bewusst dafür entschieden, unseren Vergleich der beiden Analyse-Tools mit Probensätzen aus der Umwelt durchzuführen, denn hier sind alle umweltrelevanten Typen, Formen und Größen von Polymeren anzutreffen. Zudem kommen die sehr kleinen Mikroplastikpartikel in der Umwelt besonders häufig vor, und je kleiner die Partikel sind, desto höher ist ihr Gefährdungspotenzial. Umso wichtiger ist es, neueste Verfahren wie die Mikro-FTIR-Spektroskopie und die automatisierte Auswertung der FTIR-Datensätze zu evaluieren, die für Untersuchungen dieser Partikel geeignet sind“, sagt Christian Laforsch, Sprecher des SFB „Mikroplastik“ an der Universität Bayreuth und korrespondierender Co-Autor der Studie.

Für die neue Studie haben die Forschenden in Bayreuth und auf Helgoland die parallel mit den beiden Analyse-Tools erzielten Ergebnisse verglichen. Insgesamt gesehen stimmen die Ergebnisse größtenteils überein. Doch es gibt auch Abweichungen: Vor allem bei Partikeln, die kleiner als 50 Mikrometer sind, gibt es unterschiedliche Resultate, da hier die Algorithmen infolge einer schlechteren FTIR-Spektrenqualität auch Fehlentscheidungen treffen können.

„Unsere Studie zeigt, dass weitere vergleichende Forschungsarbeiten notwendig sind, damit Mikroplastikpartikel aller Größen mit automatisierten Verfahren fehlerfrei identifiziert werden können. Bisher erzielte Ergebnisse

zur Kontamination der Umwelt durch Mikroplastik sind gerade im Hinblick auf kleinere Größenklassen durchaus mit einer gewissen Skepsis zu betrachten. Darüber hinaus belegt unsere Studie, dass wir gute und belastbare Daten erhalten, wenn wir die mit den Analyse-Tools gewonnenen Daten abschließend einer kritischen Überprüfung unterziehen“, sagt Co-Autor Martin Löder von der Universität Bayreuth.

„Bei allen derzeit angewandten Techniken und Verfahren bleibt jedoch letztlich unklar, wie gut die dabei erzielten Ergebnisse die tatsächlichen Mikroplastikbelastungen in der Umwelt widerspiegeln. Selbst wenn wir moderne, technisch avancierte Untersuchungsverfahren einsetzen, ist die Frage, wie viele und welche Mikroplastikpartikel die Umwelt tatsächlich belasten, noch nicht abschließend zu beantworten. Gerade bei den ganz kleinen Partikeln sind wir hier noch ganz am Anfang“, betont Christian Laforsch.

Quelle: Universität Bayreuth

Originalpublikation

S. R. Moses et al., „Comparison of two rapid automated analysis tools for large FTIR microplastic data sets“, *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 2023.

doi: 10.1007/s00216-023-04630-w

Neues Fenster in die chemische Welt

Ein Durchbruch in der Big-Data-Verarbeitung hilft, Chemikalien in komplexen Gemischen aufzuspüren.

■ Ein internationales Team von Wissenschaftlern unter der Leitung von Tomáš Pluskal vom Institut für Organische Chemie und Biochemie der Tschechischen Akademie der Wissenschaften (IOCB Prag) hat eine neue Generation von Software vorgestellt, die es ermöglicht, große Datenmengen aus der Massenspektrometrie zu analysieren. Die neuesten Fortschritte zum Open-Source-Projekt MZmine wurden jetzt in *Nature Biotechnology* veröffentlicht.

Bei Untersuchungen zur chemischen Zusammensetzung komplexer Proben

mit der Massenspektrometrie fallen Gigabytes an Rohdaten an, die verarbeitet und interpretiert werden müssen. Die Verarbeitung, die Analyse und der Vergleich einer Vielzahl molekularer Daten gehören heute zu den schwierigsten Schritten in der biochemischen Analyse.

Aus diesem Grund begann eine Gruppe internationaler Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler 2005 mit der Entwicklung der Open-Source-Software MZmine zur Unterstützung der Analyse von Massenspektrometriedaten. Die Gemeinschaft, die diese Software entwickelt, wurde von dem tschechischen Wissenschaftler Tomáš Pluskal mitbegründet, der das Projekt fast von Anfang an koordiniert hat und derzeit Gruppenleiter am IOCB Prag ist.

Die neueste Version MZmine 3 bringt mehrere wichtige Verbesserungen mit sich. Während die Vorgängerversion es ermöglichte, Hunderte von Proben in wenigen Tagen zu analysieren, können mit der neuen Generation Tausende von Proben pro Stunde verarbeitet werden. Die neue Version der Software beschleunigt nicht nur die Datenverarbeitung erheblich, sondern ermöglicht erstmals auch die Verknüpfung verschiedener Datentypen, insbesondere zeitaufgelöster und bildgebender Daten.

Dies eröffnet Forschenden die Möglichkeit, komplexe biologische Proben einfacher zu analysieren und zu interpretieren. MZmine ist ein Werkzeug zur Erforschung der Ursachen und Mechanismen von Krankheiten, zur Ermittlung nützlicher klinischer Biomarker für die Diagnostik und zur Identifizierung von Chemikalien in der Umwelt. Dazu gehören auch bisher unbekannte chemische Strukturen, die sich als wertvoll für die Entdeckung und Entwicklung neuer Medikamente für medizinische Anwendungen erweisen könnten.

Die dritte Generation von MZmine wurde in einem Papier angekündigt, das neben Tomáš Pluskal als korrespondierendem Autor von den Erstautoren Robin Schmid (IOCB Prag und UC San Diego) sowie Steffen Heuckeroth und Ansgar Korf (beide Universität Münster) verfasst wurde, denen sich über

drei Dutzend weitere Autorinnen und Autoren aus der ganzen Welt angeschlossen haben.

Quelle: Czech Academy of Sciences / IOCB Prag

Originalpublikation

R. Schmid, S. Heuckeroth, A. Korf et al., „Integrative analysis of multimodal mass spectrometry data in MZmine 3“, *Nat. Biotechnol.* 2023. doi: 10.1038/s41587-023-01690-2

Waters erwirbt Wyatt Technology

Die Waters Corporation hat eine Vereinbarung zur Übernahme von Wyatt Technology, einem Pionier bei Lichtstreuungs- und Feldflussfraktionierungsgeräten, Software, Zubehör und Dienstleistungen, für 1,36 Milliarden US-Dollar in bar abgeschlossen, vorbehaltlich bestimmter Anpassungen. Die Transaktion wird voraussichtlich im zweiten Quartal 2023 abgeschlossen, vorbehaltlich der behördlichen Genehmigungen und anderer üblicher Abschlussbedingungen.

Wyatt mit Sitz in Santa Barbara, USA, ist ein privates Familienunternehmen mit einem Umsatz von ca. 110 Millionen US-Dollar im Jahr 2022. Mit mehr als 200 Mitarbeitenden weltweit bietet Wyatt Schulungen und persönlichen Service für einen globalen Kundenstamm aus der Wissenschaft. Seit die Wissenschaftler von Wyatt vor mehr als 40 Jahren als Erste Online-Mehrwinkel-Laserlichtstreuungsinstrumente auf den Markt brachten, hat Wyatt Instrumente, Software und Dienstleistungen für die makromolekulare Charakterisierung definiert und neu definiert. Im Laufe der Jahre hat Wyatt mehrere ergänzende Technologien eingeführt, darunter die dynamische Lichtstreuung auf Basis von Wellplatten und die Feldflussfraktionierung zur Trennung von Nanopartikeln in Lösung. Die Produkte werden in der gesamten Wertschöpfungskette in der Forschung, Produktentwicklung, Herstellung und Qualitätssicherung eingesetzt, um die Qualitätsmerkmale neuer Therapeutika wie Zell- und Gentherapien, Impfstoffe und Proteine sowie synthetischer Polymere und Nanopartikel zu bestimmen.

Quelle: Waters Corporation

Rekordumsatz für deutsche Analysen-, Bio- und Labortechnik

2022 Umsatz von über 11 Milliarden Euro erwirtschaftet

Die deutsche Industrie für Analysen-, Bio- und Labortechnik setzt ihren Erfolgskurs auch 2022 fort. Nach Angaben des deutschen Industrieverbandes Spectaris erwirtschaftete die Branche im Jahr 2022 erstmals einen Umsatz von über elf Milliarden Euro (exakt: 11,68 Milliarden Euro). Das entspricht einem Wachstum von 7,4 Prozent. 5,3 Milliarden Euro wurden durch das Inlandsgeschäft erzielt (plus neun Prozent), 6,4 Milliarden Euro im Ausland (plus sechs Prozent). Die wichtigsten Exportmärkte sind China, die USA, Frankreich, Großbritannien und Italien. Während die drei erstgenannten Länder Exportzuwächse verzeichneten, die USA sogar im zweistelligen Bereich, mussten Großbritannien und Italien leichte Rückgänge hinnehmen. Die Zahl der Beschäftigten in den rund 330 Betrieben stieg auf rund 53.000, ein Plus von fünf Prozent.

Auch die Aussichten für das Jahr 2023 sind überwiegend positiv. So rechnet Spectaris für das laufende Jahr mit einem Umsatzplus von knapp 7 Prozent auf dann rund 12,5 Milliarden Euro.

„Allerdings gibt es auch geopolitische und finanztechnische Faktoren, die sich negativ auf das Geschäft und die Wettbewerbsfähigkeit der Branche auswirken. An erster Stelle sind hier der Fachkräftemangel und die allgemeinen Kostensteigerungen zu nennen, aber auch das drohende PFAS-Verbot, das für alle unsere Mitglieder hochkritisch ist“, betont Mathis Kuchejda, Vorsitzender der Analysen-, Bio- und Labortechnik bei Spectaris. „Auch die Verfügbarkeit von Materialien und Komponenten wird von den Unternehmen als Hemmnis gesehen, wenn auch deutlich weniger ausgeprägt als 2022.“

Quelle: SPECTARIS

Medien

ABC in Kürze

Neuigkeiten rund um Analytical and Bioanalytical Chemistry

Neues aus dem Team der ABC-Editoren

■ Im letzten Mitteilungsblatt haben wir Ihnen die drei neuen ABC-Herausgeber vorgestellt. Lernen Sie jetzt María Soledad Cárdenas Aranzana, Alberto Cavazzini und Ulrich Panne durch ihr gemeinsames Editorial besser kennen: „Meet the three newest ABC Editors“.¹⁾

Neues aus dem International Advisory Board

■ Im ersten Quartal dieses Jahres begrüßte ABC ein neues International Advisory Board, das die Herausgeber bis Ende 2025 tatkräftig beraten und unterstützen wird. Um stets unterschiedliche Sichtweisen, Fachgebiete und Geographien in diesem Gremium zu versammeln und so die Entwicklung der Zeitschrift kontinuierlich voranzutreiben, wechselt alle drei Jahre die Zusammensetzung dieses Gremiums. Den ausgezeichneten Mitgliedern danken Herausgeber und Redaktion an dieser Stelle für ihre Mitwirkung, den neuen Mitgliedern gilt unser herzliches Willkommen.

Die derzeitigen Mitglieder repräsentieren 23 Länder (Abbildung 1); neu aus den deutschsprachigen Regionen hinzugekommen sind Larysa Baraban, Natalia Ivleva und der langjährige ABC-Herausgeber Günter Gauglitz aus Deutschland sowie David Clases, Johanna Irrgeher und Christoph Kleber aus Österreich. Die vollständige Liste aller Mitglieder finden Sie auf der ABC-Homepage (www.springer.com/abc) unter Journal Updates -> Meet the ABC Editors, Column Editors and ABC's International Advisory Board.

ABC unterwegs

■ ABC-Herausgeber und -Redaktion freuen sich auf viele Treffen mit unseren Autoren, Gutachtern und Lesern:

- HPLC 2023, 18.-22. Juni, Düsseldorf
- CSI XLIII (43rd CSI) & ASLIB2023 (Colloquium Spectroscopicum Internationale XLIII und 5th Asian

Symposium on Laser Induced Breakdown Spectroscopy), 26.-30. Juni, Tokushima, Japan

- ExTech2023 (25th International Symposium on Advances in Extraction Technologies), 18.-21. Juli, Teneriffa, Spanien
- Euroanalysis XXI, 26.-31. August, Genf, Schweiz
- EBS2023 (4th European Biosensor Symposium), 27.-30. August, Aachen

Neues aus den Rubriken

■ Im April gab es wieder ein neues Rätsel aus der Reihe der Analytical Challenges, dieses Mal wieder eines der beliebten Spectroscopy Challenges. Autor ist Reinhard Meusinger, und die Aufgabe besteht darin, eine Substanz anhand ihrer Spektren zu identifizieren, die sowohl in tierischem als auch menschlichem Gewebe weit verbreitet ist: „Wing-giving challenge“.²⁾ Einreichungsdatum für die Lösung ist der 1. Juli.

Auch die Rubrik „ABCs of Education and Professional Development in Analytical Science“ lädt zum Lesen eines neuen Beitrags ein: J. Bergquist, Å. Emmer, A. Farbroth et al., „Research and education in analytical chemistry – industrial and academic perspectives from a survey conducted in Sweden“.³⁾

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

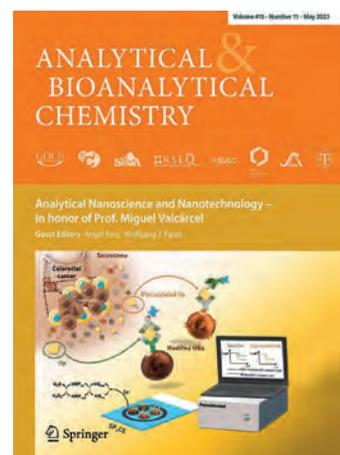


Abb. 2. Das Cover zu Heft 11 stammt aus einem Beitrag der beiden Board-Mitglieder María Jesús Lobo-Castañón und Susana Campuzano und ist Teil eines Themenschwerpunktes, der Miguel Valcarcel gewidmet ist.

ABC-Themenschwerpunkte des Sommers

■ „Analytical Nanoscience and Nanotechnology – In honor of Prof. Miguel Valcárcel“: Analytische Nanowissenschaft und Nanotechnologie verfolgte Miguel Valcárcel während seiner letzten Forschungsperiode. Die Gastherausgeber Ángel Ríos (University of Castilla – La Mancha) und Wolfgang J. Parak (Universität Hamburg) haben daher dieses Thema für einen Schwerpunkt zu seinen Ehren ausgewählt (Abbildung 2). Lesen

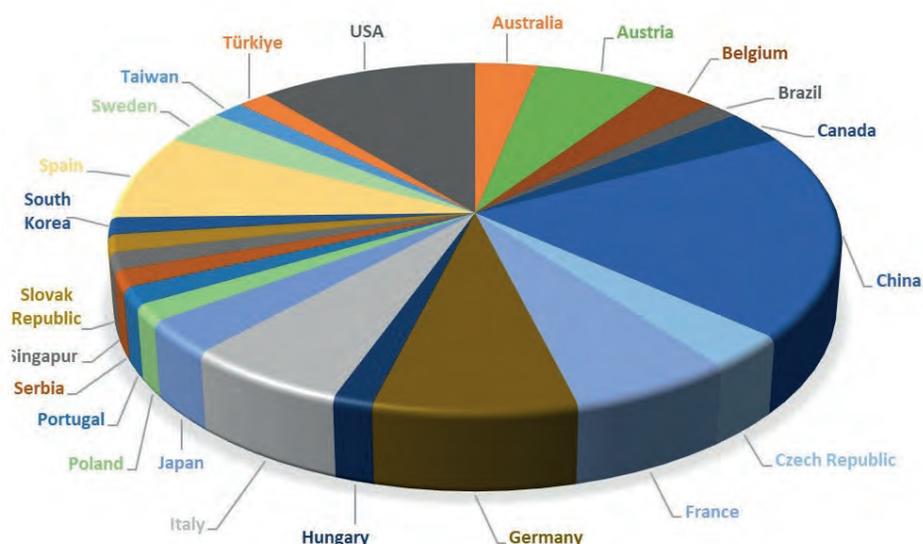


Abb. 1. Geographische Diversität im International Advisory Board von ABC

Sie über die Charakterisierung von Nanomaterialien, den Einsatz von Nanomaterialien als Nanowerkzeuge und über die analytische Nanometrologie.⁴⁾

Ein weiterer Schwerpunkt im Sommer beschäftigt sich mit „Comprehensive 2D Chromatography“. Dieser Schwerpunkt mit 25 Beiträgen kam dank Peter Tranchida und Luigi Mondello (University of Messina, Italien) als Gastherausgeber zustande.⁵⁾

Es folgen mit „Advances in Chemical Analysis of Micro- and Nanoplastics“ Beiträge zu einer der größten Herausforderungen der heutigen Umweltanalytik. Unser Dank geht an die Gastherausgeber Natalia P. Ivleva (TU München), Jennifer M. Lynch (NIST) und Sebastian Primpke (Alfred-Wegener-Institut).⁶⁾

Im Namen des Herausgeberteams und der ABC-Redaktion grüßt Sie herzlich

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

Literatur

- 1) A.T. Woolley, S. Cárdenas, A. Cavazzini, U. Panne, *Anal. Bioanal. Chem.* 2023, 415. doi: 10.1007/s00216-023-04615-9
- 2) doi: 10.1007/s00216-023-04561-6
- 3) *Anal. Bioanal. Chem.* 2023, 415. doi: 10.1007/s00216-023-04661-3
- 4) <https://bit.ly/422eJOC>
- 5) <https://bit.ly/3nxbsb5>
- 6) <https://bit.ly/3oXSMlc>

So lesen Sie ABC online

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

Sessions auf der ANAKON 2023

Miniaturization

Chair: Detlev Belder

Co-Chair: David Cocovi-Solberg

■ Die Vortragsrunde zur Miniaturisierung leitete Sebastiaan Eeltink von der Vrije Universiteit Brüssel ein. Sein Vortrag „Novel microchip designs for establishing the next generation of multi-dimensional LC“ adressierte den Bedarf neuer chromatographischer Trenntechniken für sehr komplexe Proben. Die mehrdimensionale Flüssigkeitschromatographie wurde dabei – gerade auch in Verbindung mit der Mikrofluidik – als vielversprechender Ansatz vorgestellt. So wurde ein druckstabiler Chip-Modulator eingesetzt, um, in Kombination mit einem Ventil, den Probentransfer von einer Trennsäule zur nächsten (2D-LC) zu gewährleisten. Des Weiteren zeigte Eeltink Chip-Prototypen, um eine weitere Trenndimension einzuführen, bei der die chromatographische Entwicklung der zweiten und dritten Trennstufe quasi parallel stattfindet. Damit verbunden steht die Vision, die chromatografische Auflösung noch einmal auf eine neue Ebene zu heben.

Im Anschluss sprach Marie van der Loh (Universität Leipzig) über „Analysis of double emulsion droplets with ESI-MS“, wobei sie herausstellte, dass nicht nur einfache Tropfen, sondern ebenso Doppelmulsionstropfen (DED) hervorragend geeignet sind, um Reaktionen in separaten „Reaktionsgefäßen“ im nL- oder sogar pL-Maßstab zu verfolgen, und dass diese sogar weitere Vorteile mit sich bringen. Am Beispiel einer lipasekatalysierten Reaktion von p-Nitrophenylpalmitat zu p-Nitrophenol in DED der Konfiguration Öl/Wasser/Öl wurde gezeigt, dass sich das wasserlösliche Produkt mit der Zeit in der Wasserphase anreichert. Die Kopplung zur ESI-MS ermöglichte es, zwischen den Produktausbeuten einzelner DED zu unterscheiden. Die Produktion der DED erfolgte in einem eigens hergestellten Chipsystem mit sowohl hydrophilen als auch hydrophoben Funktionalitäten.

Amelie Hohensee (LMU Klinikum München/TU München) stellte die

Ergebnisse aus Vorarbeiten zu ihrem Forschungsprojekt „Developing a multiplex PCR for the highly parallel detection of respiratory pathogens on a lab-on-a-chip platform“ vor. Die Entwicklung eines miniaturisierten Diagnostiksystems, welches innerhalb einer Stunde parallel sowohl bakterielle als auch virale Atemwegserreger via Multiplex-PCR und DNA-Mikroarray detektieren soll, setzt das Design und die genaue Evaluation von Primerpaaren voraus. Bereits 11 von 16 finalen Primerpaaren der acht Zielorganismen ließen sich auf ihre Funktionalität mit Echtzeit-PCR und Agarosegelelektrophorese prüfen. Dabei erwiesen sich sechs Paare als funktional und lassen sich nun weiter optimieren.

Weiterhin berichtete Torsten Mayr (TU Graz) über „Determination of respiration and acidification rates in dynamic cell cultures and organ-on-chips“. Um die metabolische Aktivität statischer Zellkulturen zu beurteilen, hat sich bereits das Seahorse-System etabliert, jedoch fehlt es noch an Methoden, um Parameter wie Sauerstoff, pH-Wert und Glucose in dynamischen, mikrofluidischen Zellkulturen und Organ-on-a-Chip-Systemen zu überwachen. Um dieses Problem anzugehen, wurden miniaturisierte lumineszente Sensoren entwickelt und diese über Inkjet-Printing-Technik in mikrofluidische Zell- und Gewebekulturen integriert. Die optischen Sensoren werden durch rotes Licht angeregt und emittieren Licht im nahen Infrarotbereich. Stresstests in Stop-Flow-Experimenten ermöglichten den Vergleich mit etablierten statischen Messmethoden und ergaben vergleichbare Ergebnisse. Diese Messungen können wegweisend für die präzise Analyse in komplexen dynamischen Organ-on-a-Chip-Systemen sein.

Maximilian Breithfeld (ETH Zürich) schloss die Session mit dem Vortrag „High-throughput droplet-printing of

concentration gradients for multi-modal fluorescence and MALDI-MS analysis". Darin stellte er eine Technik vor, um bis zu 25 000 Tropfen in 30 Minuten auf einer hydrophob-hydrophil strukturierten Array-Platte zu platzieren, welche die Vorteile von Mikrotiterplatten (leichte Zugänglichkeit) und der Tropfenmikrofluidik (minimale Volumina) kombiniert. Des Weiteren ermöglicht das System die Erzeugung von Konzentrationsgradienten und die Analyse der Tropfen mit Fluoreszenzmikroskopie und MALDI-MS. Das Verfahren wurde mit einer Fluorescein-markierten Peptidlösung (Angiotensin II) evaluiert und im Hinblick auf Pumpdruck, Geschwindigkeit sowie Abstand zwischen Flüssigkeitskapillare und strukturierter Platte optimiert, sodass Tropfen mit einem Volumen von jeweils 500 pL und einer Varianz der Fluoreszenzintensität von 16 Prozent erhalten wurden. Dies entspricht mit einem Gesamtvolumen von 12,5 µL lediglich einem Bruchteil an typischerweise benötigtem Probenvolumen für die Analyse in Mikrotiterplatten und deutet auf eine homogene Tropfenerzeugung hin.

Jantje Bäcker, Universität Leipzig

Biosensing

Chair: Peter Lieberzeit

Co-Chair: Alexandra Schroter

Die Biosensorik war mit einer Vortragseinheit und in einer Postersession vertreten, die sowohl Bio- als auch Chemosensoren umfassten. Ein relativ starker Fokus lag auf der Entwicklung immunanalytischer Methoden mit spezifischen Antikörpern sowie biomimetischer Methoden auf Basis künstlicher Erkennungsmaterialien. Sicher auch aufgrund der Covid-Pandemie fokussierten viele der Arbeiten auf diagnostische Systeme im weitesten Sinn; im Vergleich dazu spielten Umwelt- und Prozessanalytik nur eine untergeordnete Rolle. Das spiegelt bis zu einem gewissen Grad den generellen Trend zur Sensorik in biologischen Matrices wider. Vor allem Immunsensoren standen im Fokus der Präsentationen. Amplifi-

kationstechniken gewinnen zwar auch an Bedeutung, waren bei der Konferenz aber weniger sichtbar. Eine etwas geringere Rolle spielten auch biomimetische Rezeptoren.

Der eingeladene Vortrag „Bioanalytical nanotools to quantify neurotransmitters in the brain“ von Nako Nakatsuka (ETH Zürich) behandelte miniaturisierte elektrochemische Sensoren auf Basis nanoporöser Elektrodenmaterialien, um in situ Neurotransmitter in oder zwischen Nervenzellen zu detektieren. Das macht zwei Trends deutlich, die sich auch in den anderen Beiträgen der Session grosso modo widerspiegelten: Einerseits werden neuartige, oft nanostrukturierte Materialien entwickelt, andererseits besteht der Anspruch, die Sensorik näher an die angepeilte Anwendung zu bringen und somit in Realproben zu messen.

Der erste Trend schließt unter anderem die Nanostrukturierung von Oberflächen ein, um gezielt „digital“ arbeitende Sensoren zu generieren; im Gegensatz zu „analogen“ Systemen, die idealerweise konzentrationsabhängige Signale liefern, nutzen diese kurzfristige Messpulse und zählen sie. Das führt üblicherweise zu sehr niedrigen Detektionslimits und hohen Signal-Rausch-Verhältnissen.

Der zweite Trend umfasst eine zunehmende Fokussierung auf robuste, aber sensitive Transducersysteme – vor allem elektrochemische und optische –, um auch tatsächlich in Realproben messen zu können. Studien, welche die Probenmatrix nicht berücksichtigen, spielen eine immer geringere Rolle. Im Transducerdesign profitiert die Elektrochemie sehr stark von der Miniaturisierbarkeit von Elektroden und dem Design von Kompositmaterialien. In der optischen Sensorik liegen die Entwicklungsschwerpunkte derzeit auf der Synthese von Kompositmaterialien mit (fluoreszierenden) Quantendots sowie auf der plasmonischen Sensorik, insbesondere SERS. In diesen Bereich fällt auch der Trend zu Lateral-Flow-Assays; diese ermöglichen eine direkte Analytik in der Probenmatrix und sind gleichzeitig kostengünstig und einfach zu handhaben.

Peter Lieberzeit

Separation Science I

Chair: Carolin Huhn

Co-Chair: Martin Vogel

The session was introduced with a talk given by Nicole Pamme from Stockholm University. In her keynote lecture, she showed history and state of the art of manipulated droplets generated in microfluidic devices. She presented various strategies to isolate particles and cells by optimising microfluidic channel designs. It was impressive to see applications for biological samples. Acoustic waves can also be used for focusing purposes as it was demonstrated in various examples such as the purification of pathogens. In the last part of her talk, Nicole Pamme presented results for the magnetic separation of particles, either magnetic particles or particles with magnetic labels, thus leading to magnetophoresis. This keynote lecture was impressive and inspiring regarding the outstanding instrumental work intertwined with applications in various fields.

Afterwards, Simon Jaag from the University of Tübingen discussed the separation of protein-based pharmaceuticals, here standard proteins and antibody subunits. Therefore, he compared the performance of 12 different reversed-phase columns with different chemistries, morphologies and particle sizes. Kinetic plots were used for the interpretation of the large data sets obtained. For these applications, Simon Jaag demonstrated that superficially porous particles performed better than fully porous particles or monolithic columns. He discussed his results with regard to underlying mechanisms, thus providing the audience a deeper and fascinating look into chromatography.

Pharmaceutical analysis was further discussed by Lukas Schwalb from Helmholtz Zentrum München. He focused on bitumosulfonate obtained from the sulfonates of shale-oil distillates that are present in many well-established pharmaceuticals and that are rather complex in their chemistry. Therefore, two-dimensional GCxGC coupled to ToF-MS was used to unravel the chemical composition after on-line derivatization.

Lead structures were identified together with their degree of alkylation. Lukas Schwalb clearly demonstrated the successful application of his method presenting chemical fingerprints.

Another complex class of compounds are phospholipids. Focusing on cardiolipins, Vera Schwantes from the University of Münster also developed a separation based on a two-dimensional approach. But in her case, she coupled 2D-LC to high-resolution mass spectrometry. Therefore, a HILIC column was used in the first dimension, while a reversed-phase column was used in the second. Vera Schwantes could furthermore show that she was able to compare cell cultures with regard to biochemical processes using charged-aerosol detection (CAD) in addition to mass spectrometry. Thus, various cardiolipins could be identified. Mass fragmentation allowed the identification of fatty acyl residues. For sure, the method presented is very promising for the further in-depth evaluation of phospholipids.

The last talk of the session was given by Sven Kochmann from the University of Natural Resources and Life Sciences/BOKU in Vienna. He showed his developments in molecular stream separations achieved with electrophoresis as the separation principle in a continuous flow set-up as well as versatile solutions to many bottlenecks in molecular stream separations including problems in quantification. His approach was to abandon classical rectangular geometries and to replace them by circular separations. Besides a large body of work with regard to instrumental optimization, it also required to integrate new software for data analysis. Indeed, the work presented will have the potential to become state of the art.

Overall, the talks of this separation sciences session covered miniaturization, in-depth methodological approaches and understanding of effects, instrumental developments and creative ideas to overcome analytical challenges related to sample complexity. The large interest in these fields was well reflected by the many conferees attending this session, listening carefully and debating the talks intensely.

Carolin Huhn and Martin Vogel

Chemometrics

Chair: Günter Gauglitz

Co-Chairs: Catherine Kiefer

■ Die gut besuchte Session startete mit dem Keynote-Vortrag von Anna de Juan aus Barcelona, bekannt durch ihre Beiträge zur multivariaten Kurvenauflösung (Multivariate Curve Resolution, MCR). Der Vortrag behandelte die hyperspektrale Bildbearbeitung (Hyperspectral Imaging, HSI). Durch HSI werden viele (Tausende, sogar Millionen) Spektren oder Pixel aufgenommen, zum Beispiel mit einer Hyperspektralkamera. Jeder Pixel erfasst viele spektrale Kanäle schmalere Wellenlängenbereiche als Spektrum. So werden riesige Datenmengen in kurzer Zeit generiert, auf denen einzelne Komponenten identifiziert und quantifiziert werden sollen. Die Bildauflösung ermöglicht dabei auch das Erkennen von Substrukturen bei medizinischen oder biologischen Proben, Heterogenität bei Material in der Industrie, bei landwirtschaftlichen oder pharmazeutischen Produkten bis hin zum Umwelt-Monitoring. De Juan zeigte, wie sich Daten unterschiedlicher Techniken und Dimensionalitäten theoretisch verknüpfen lassen. Beispiele verdeutlichen die Grenzen und Möglichkeiten chemometrischer Ansätze bei der Auswertung hyperspektraler Bilder und verknüpfter Daten.

Im Vortrag von Claudia Beletes standen die typischen Probleme der Analytik wie Rauschen, Variationsbreite biologischer Proben und Messunsicherheiten im Vordergrund. Dabei ging sie ein auf Probleme des Experimental Design, die Probennahme, Probenvorbereitung und die notwendige Zahl von Replica. Anhand der Aufgaben zur Qualitätskontrolle während der Fermentation des Rohstoffs Kakao diskutierte sie beispielhaft die Ergebnisse bei der Bestimmung von Theobromin und Koffein.

Zwei weitere Vorträge beschäftigten sich mit der Analyse von Lignin. Zunächst zeigte Ivan Sumerskii von der Universität für Bodenkultur (BOKU) Wien für Messungen im MIR-Spektroskop, dass sich durch validierte Kalibrierung alle wichtigen chemischen Parameter von Lignin bestimmen und die Verweilzeit sowie die notwendige Proben-

menge reduzieren lassen. Jan Zuber aus Freiberg charakterisierte Lignin-Oligomere mit Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry (FT-ICR). In seinem Vortrag ging er auf wenig lösliche und unlösliche Strukturen ein. Durch Kombination von Chemometrie, MS und NMR gewann er weitgehende strukturelle Informationen.

Zum Schluss zeigte Peter Filzmoser aus Wien Möglichkeiten, um mit robuster Statistik auch hochdimensionale Datensätze zu verarbeiten. Nicht-parametrische Verfahren helfen mit alternativen Fehlerfunktionen dabei, Ausreißer zu ermitteln, und liefern bessere statistische Modelle. Dies diskutierte Filzmoser an der Alterung von Öl beim Messen von FT-IR-Spektren und anhand der Hochauflösungsspektren bei Tribologie-Experimenten.

Die Session zeigte den Nutzen neuer Algorithmen, der Chemometrie allgemein, aber auch die Herausforderungen chemometrischer Datenauswertung. Zusätzlich wurde deutlich, wie die schnell wachsende Rechenleistung die Analytik und Chemometrie voranbringen.

Catherine Kiefer und Günter Gauglitz

Foodomics

Chair: Erich Leitner

Co-Chair: Natalie Manousi

■ Eine Keynote von Alejandro Cifuentes vom spanischen Institute of Food Science Research (CIAL) in Madrid eröffnete diesen Vortragsblock. Cifuentes gilt als der Namensgeber des Forschungsgebiets „Foodomics“, das fortgeschrittene analytische Techniken kombiniert, um Inhaltsstoffe von Lebensmitteln und deren Auswirkung auf den menschlichen Organismus zu erforschen. Alejandro Cifuentes berichtete von einer Studie zur Evaluierung von bioaktiven Verbindungen, welche sich aus Nebenprodukten der Orangensaftverarbeitung gewinnen lassen. Die bioaktiven Verbindungen in diesem Ausgangsmaterial könnten in der Behandlung von Alzheimerpatienten eine wichtige Rolle spielen. Bei Fütterungsversuchen an Würmern mit einem Extrakt

aus Orangenabfällen zeigte sich eine signifikante Schutzwirkung gegen Aß-Peptid-Lähmungstoxizität, woraufhin die neuroprotektive Wirkung des Extraktes diskutiert wurde.

Einen Schwenk von Orangenschalen zu Fischen machte der Vortrag von Bernadette Moser von der Universität für Bodenkultur (BOKU) Wien. Sie berichtete von der Identifikation von Frische- beziehungsweise Verderbsmarkern heimischer Süßwasserfische in Abhängigkeit von der Lagerdauer. Dazu diente eine Methode basierend auf dynamischer Dampfdruckanalyse in Kombination mit gaschromatographischer Trennung und Time-of-Flight-Massenspektrometrie. Nach Optimierung der Parameter wurden 40 Marker-substanzen unterschiedlicher chemischer Klassen in Forellen erfasst, wovon 11 hoch signifikant waren. Ähnliche Resultate fand man auch bei Karpfen.

Michael Sulyok vom Department für Agrarbiotechnologie, IFA Tulln in Österreich schwenkte zu einer Multimethode aus der Lebens- und Futtermittelanalytik basierend auf LC-MS/MS. Er stellte eine validierte Methode vor, um Mykotoxine, andere sekundäre Pilzmetaboliten sowie Pflanzentoxine zu bestimmen. Er beschrieb die Herausforderungen in der Pflege und Adaptierung dieser Methode, die für Lebensmittelmatrizes wie Getreidekörner, Nüsse und Trockenfrüchte angewandt wird. Die Probenvorbereitung besteht dabei nur aus einer Lösungsmittelextraktion, um eventuelle Analytverluste zu vermeiden. Sulyok stellte die analytischen Parameter wie Wiederfindungsraten und Standardabweichungen der Methode vor.

Auch der vierte Vortrag widmete sich der Flüssigchromatographie: Florian Stappert von der Universität Duisburg-Essen referierte über die Herausforderung bei der Kopplung unterschiedlicher Säulen für eine optimierte Trennung mit zweidimensionaler comprehensive LCxLC-Kopplung für Lebensmittelproben, die einen großen Polaritätsbereich umfassen. Diskutiert wurden Optimierungsstrategien in der Auswahl und der Kombination von Reversed-phase- und HILIC-Phasen sowie deren Einfluss auf die Trennung.

Den Abschluss machte Burkhard Horstkotte von der Charles University,

Tschechische Republik, mit einem Vortrag zu automatisierter Probenvorbereitung. Oftmals müssen bei Proben aus dem klinischen oder Lebensmittelbereich Proteine ausgefällt und durch Filtration oder Zentrifugation abgetrennt werden. Eine unvollständige Abtrennung kann Probleme bei der anschließenden chromatographischen Trennung verursachen. Durch eine automatische Spritzenpumpe mit Ventil-schaltungen lässt sich dieser Fällungsschritt automatisieren und direkt an das Trennsystem koppeln. Anhand von Milch- und Serumproben wurde die Praxistauglichkeit an der Kopplung mit HPLC-UV und UHPLC-MS/MS getestet.

Erich Leitner

Separation Sciences II

Chair: Christian W. Klampfl

Co-Chair: Katharina Böttinger

■ Diese Session wurde mit einem Key-Note-Vortrag von Günther Gmeiner vom Forschungszentrum in Seibersdorf eröffnet. Er referierte über Ähnlichkeiten und Unterschiede bei analytischen Fragen aus der Dopinganalytik und der forensischen Analytik. Während es in der Forensik ein großes Spektrum an Proben gibt (unter anderem die in der anschließenden Diskussion erwähnten Schnürsenkel), beschränkt sich die Dopingkontrolle auf wenige Probenmaterialien, beispielsweise Haare, Urin und Blut. Außerdem gibt es in der Forensik keine Beschränkungen bezüglich der Quantität, in denen die Substanzen im Körper vorkommen dürfen. In beiden Fällen muss sich die analytische Fachperson vor von Juristen geprägten Gremien verantworten und ihre Analyseergebnisse verteidigen. Alle Aspekte untermauerte Günther Gmeiner mit spannenden Fallbeispielen, wodurch die Ausführungen für eine breite Zuhörerschaft interessant waren. Dies zeigte sich auch in der lebhaften Diskussion im Anschluss.

Gut zum Thema passend, berichtete danach Simone Bräuer von der Karl-Franzens-Universität in Graz über ihre Untersuchungen zur Analytik von Vanadium in – selbstgesammelten – Fliegen-

pilzen. Mit moderner Elementanalytik sowie durch die Kopplung dieser mit chromatographischen Techniken lassen sich selbst Spuren dieses Schwermetalls in den Pilzen nachweisen sowie Informationen zu den molekularen Strukturen sowie der Verteilung der Verbindungen im Pilzgewebe gewinnen. Vanadium wurde auch in Seescheiden gefunden.

Alisa Höchsmann von der Hochschule Aalen berichtete über ihre Ergebnisse zur Kopplung von Kapillarelektrophorese (CE) mit der Massenspektrometrie und ein an dieser Forschungsstätte entwickeltes und gebautes Nano-CE-MS-Interface (nanoCEasy). Dabei diskutier-te sie insbesondere Untersuchungen zur Flussrate, die bereits durch geringe Änderungen in der Stromspannung beeinflusst wird. Auch erwähnt wurde der Einfluss von Kapillarbeschichtungen auf diesen wichtigen Parameter.

Den anschließenden Vortrag aus dem Industrieumfeld hielt Stephan Buckenmaier von Agilent Technologies. Thema waren Probleme der zweidimensionalen Chromatographie und Vorschläge, wie sich diese mit angepasster Instrumentierung lösen lassen. Damit lassen sich viele Peaks aus der ersten Dimension parken, um später in der zweiten Dimension noch einmal analysiert zu werden. Diese Vorgehensweise bedingt allerdings sehr konstante Retentionszeiten in der ersten Dimension – ein Problem, das sich mit „Dynamic Peak Parking“ in den Griff bekommen lässt.

Zum Abschluss stellte Peter Boeker (Universität Bonn sowie HyperChrom) Neuheiten aus der schnellen Gaschromatographie (GC) vor. Er präsentierte die Vorteile sowie Ergebnisse der von ihm entwickelten „Flow-field thermal gradient“-GC. Mit diesem Gerät lassen sich extrem schnelle Temperaturrampen fahren, was nicht nur die Retentionszeit verkürzt, sondern auch die Auflösung drastisch erhöht. Ob letzteres primär durch den negativen Temperaturgradienten oder eher durch die ultraschnelle Aufheizrate bedingt ist, war Inhalt der sich anschließenden Diskussion.

*Katharina Böttinger und
Christian W. Klampfl*

Tagungen & Fortbildungen

Jahrestagung Archäometrie und Denkmalpflege

28. bis 31. März 2023 in Mannheim

Die alle zwei Jahre stattfindende Jahrestagung Archäometrie und Denkmalpflege ist ein wichtigstes Element für den wissenschaftlichen Austausch der Archäometrie und Denkmalpflege im deutschsprachigen Raum. Zur Freude der mehr als 90 Teilnehmenden fand die Tagung dieses Jahr in Präsenz statt, und zwar in Mannheim am Curt-Engelhorn-Zentrum Archäometrie (CEZA) und in den Reiss-Engelhorn-Museen. Ein herzlicher Dank für die Organisation vor Ort an die Kollegen vom CEZA, Daniel Berger und Ernst Pernicka, sowie an Sabine Klein und Christoph Berthold von der Gesellschaft für Naturwissenschaftliche Archäologie (GNAA).

Das wissenschaftliche Programm hatte ein Komitee aus Mitgliedern der GNAA, dem Arbeitskreis Archäometrie und Denkmalpflege der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG) und des Arbeitskreises Archäometrie der GDCh zusammengestellt. Es umfasste 39 Vorträge und 7 Posterbeiträge. Die Themen erstreckten sich von der Konservierung bis zur archäometrischen Untersuchung von Biomaterialien, Pigment und Malerei, Keramik und Ton, Metallobjekten, Glas, Gestein und Kunststoff. Die meisten Beiträge gab es aus dem Themenfeld der Metallurgie. Der Tagungsband mit den Kurzfassungen der Beiträge wurde in einem Sonderheft der Zeitschrift *METALLA* veröffentlicht.¹⁾ Zum Abschluss des wissenschaftlichen Programms wurden zwei Posterpreise vergeben. Der erste ging an Alice C.S. Knaf, Grace MacDonald, Elizabeth Knott, Richard R. Hark und Agnete W. Lassen für „Geochemical characterization of ancient Mesopotamian seals by pXRF, pRaman and pLIBS: A comparative study“. Der zweite Posterpreis ging an Ivan S. Stepanov, Michael Brauns, Uzi Avner, Nicole Lockhoff und Adi Eliyahu-Behar für „Integrated approaches to the provenance of ancient iron artefacts from the Southern Levant“.

Das Rahmenprogramm der Tagung bestand aus einem Vorabendtreffen,



Tagungsteilnehmende vor dem Museum Zeughaus in Mannheim
(Fotos: A. E. Kramell)



Führung durch ein rekonstruiertes Gebäude nach karolingerzeitlichem Vorbild im Freilichtlabor Lauresham

einem öffentlichen Abendvortrag von Klaus Wirth, dem Leiter der Abteilung Archäologische Denkmalpflege und Sammlungen der Reiss-Engelhorn-Museen, einem Gesellschaftsabend im Brauhaus Mannheim und einer Exkursion zum Unesco-Welterbe Kloster Lorsch. Im Zuge der Exkursion erhielten die Tagungsteilnehmenden Führungen durch die Anlagen des Klosters Lorsch, der einstigen Reichsabtei Karl des Großen. Ein Besuch des Freilichtlabors Lauresham gab einen lebendigen Einblick in die karolingerzeitliche Gesellschaftsstruktur. Außerdem hatten die Tagungsteilnehmenden die Möglichkeit, während der Vortragstage kostenfrei die Ausstellungen des Museums Zeughaus und des Museums Weltkulturen zu besuchen.

Der Arbeitskreis Archäometrie der Fachgruppe Analytische Chemie hielt

auch dieses Jahr seine Mitgliederversammlung während der Jahrestagung ab. Zudem fand eine Versammlung zusammen mit der GNAA und dem Arbeitskreis Archäometrie und Denkmalpflege der DMG statt.

Die wissenschaftliche Federführung für die nächste Jahrestagung hat der Arbeitskreis Archäometrie (Vorstand: Anika Retzmann, Ester S.B. Ferreira, Annemarie E. Kramell). Christoph Herm und Kollegen werden als Veranstalter vor Ort die Jahrestagung Archäometrie und Denkmalpflege im März 2025 an der Hochschule für Bildende Künste Dresden ausrichten.

Anika Retzmann, Ester S.B. Ferreira
Annemarie E. Kramell

Literatur

1) doi: 10.46586/metallav.2023.i12

Ankündigung

Aufbaustudium Analytik & Spektroskopie

Immatrikulationsjahr ab 09.10.2023,
Institut für Analytische Chemie der
Universität Leipzig

Verlauf des Studiengangs

Das Aufbaustudium „Analytik & Spektroskopie“ an der Fakultät für Chemie und Mineralogie der Universität Leipzig existiert seit fast 50 Jahren und hatte über tausend Absolventen. Am 09.10.2023 beginnt wieder ein neuer Zyklus des Aufbaustudiums, der in Form von acht einwöchigen Kursen innerhalb eines Zeitraums von zwei Jahren durchgeführt wird. Unser anspruchsvolles Studium bietet einen umfassenden Überblick über das gesamte Feld der klassischen Methoden sowie viele vertiefende Einblicke in die aktuelle Forschung.

Voraussetzungen

Das Aufbaustudium ist für Teilnehmende mit einem Hoch- oder Fachhochschulabschluss in Chemie konzipiert. Absolventen einer anderen naturwissenschaftlich-technischen Fachrichtung können ebenfalls teilnehmen.

Bewerbungsverfahren

Die Bewerbung für das Aufbaustudium findet online vom 01.05. bis 15.09.2023 statt: <https://almaweb.uni-leipzig.de>

Kosten pro Semester

500 Euro Studiengebühren zuzüglich Semesterbeitrag (Sommersemester 2023: 255,50 Euro).

Zuschüsse sind möglich, siehe: www.test.de/thema/weiterbildungsberatung

Zeitplan Studienjahr 2023/2024

- 1. Kurs: 09.-13.10.2023
- 2. Kurs: 05.-09.02.2024
- 3. Kurs: 25.-29.03.2024
- 4. Kurs: 08.-12.07.2024
- 5.-8. Kurs: Termine werden bekannt gegeben

www.chemie.uni-leipzig.de/weiterbildung-und-transfer/aufbaustudium-analytik-und-spektroskopie

Ankündigung

AOFKA 2023

Conference on Applied Surface
and Solid Material Analysis
10.-13. September, Zürich, Schweiz

AOFKA ist die DACH-Konferenz für angewandte Oberflächen- und Festkörperanalytik. 2023 steht die Konferenz im Zeichen der fortschrittlichen Methoden mit Photonen, die in den letzten Jahren an Popularität gewonnen haben. Etablierte Techniken, die auf Elektronen und Ionen basieren, sind auf der AOFKA stark vertreten. AOFKA ist ein Zusammenschluss zweier etablierter Konferenzen mit fast 50-jähriger Geschichte, AOFA und FKA.

Themen

- Fortgeschrittene Materialien
- Oberflächenwissenschaft & Bildgebung
- Dünne Schichten & Batterien
- Biomaterialien
- Nanostrukturen und Quantenmaterialien
- Tiefenprofilanalyse
- Mikroanalytik & Bildgebung
- Ionen-Methoden (SIMS)
- Photonen-Methoden (LA-ICP-MS, LIBS, XRF, XAFS)
- Elektronen-Methoden (XPS, EPR, SEM/TEMs)

<https://aofka23.scg.ch>

Ankündigung

DAAS-Doktoranden-seminar

15.-17. November 2023, Berlin

We cordially invite you to the 7th PhD seminar of the German Working Group for Analytical Spectroscopy (DAAS) of the GDCh Division of Analytical Chemistry.

The event will take place in person in Adlershof, Berlin at the Federal Institute for Materials Research and Testing (BAM) on 15–17 November 2023 and is organized by the working group of Björn Meermann (Division 1.1 – Inorganic Trace Analysis).

The event includes a workshop on electrothermal vaporization (ETV).

Participation in this workshop is independent of the PhD seminar and provides a great opportunity to:

- Learn about fundamentals, applications, and novel developments of this solid sampling technique
- Exchange ideas between ETV users, manufacturers, and PhD students

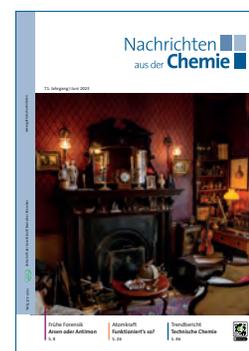
Preliminary programme:

- 15 Nov: ETV workshop
- 16–17 Nov: presentations and posters from PhD students

PhD students who want to benefit from networking and scientific discussion without contribution are also welcome to participate. Besides the ETV workshop, the event will also include keynote talks from young successful scientists, social events and more.

Registration is open until 12 October. There is no registration fee. Registration at phdseminar2023@bam.de.

<https://bam.de/daas2023>



Die Nachrichten online weiter blättern mit der neuen GDCh-App!



www.gdch.app

Karriere

Der analytische Nachwuchs fragt

Fragen & Antworten zu Bewerbungsverfahren, Berufseinstieg und Karriereplanung in der analytischen Chemie

■ In dieser Rubrik beantwortet das Mitteilungsblatt ab sofort die Fragen von Junganalytiker:innen. Die Antworten stellen Analytikerinnen und Analytiker mit Berufserfahrung zusammen – in dieser Ausgabe sind das Michael Arlt (Merck), Tom van de Goor (Agilent) und Martin Wende (BASF).

Wie viel Gehalt kann ich bei einer Anstellung erwarten bzw. fordern?

Der Führungskräfteverband Chemie (VAA) hat mit seinen Chemiesozialpartnern einen Manteltarifvertrag abgeschlossen, der das Vorgehen bei Gehaltsfestlegungen für Absolvent:innen mit Master- oder Promotionsabschluss beschreibt; dort sind Jahresgehälter festgelegt. Vorausgesetzt, die Stellenbeschreibung nennt diese Abschlüsse als Qualifikation, entspricht das ziemlich genau den Gehältern der ersten ein bis zwei Jahre. Der Mittelstand oder kleine Unternehmen können auch geringere Gehälter zahlen. Für Personen mit mehr Berufserfahrung ist die regelmäßige Gehaltsumfrage des VAA aufschlussreich. Achtung: Neben dem monatlichen Gehalt bieten viele Firmen zusätzliche (geldwerte) Vorteile wie günstige Versicherungen, Aktienprogramme, eine Pensionskasse etc. Bewerber:innen sollten daher immer das Gesamtpaket betrachten.

Wie stark und in welcher Form werden Berufseinsteiger in den ersten Wochen an die Hand genommen und in das Unternehmen sowie die Aufgaben eingeführt?

Praktisch alle mittelgroßen und großen Unternehmen haben Einarbeitungsprogramme, die auch eine Reihe von Fortbildungen einschließen. Meist wird den Berufsanfänger:innen, unabhängig vom Abschluss, eine

erfahrene Führungskraft auf der gleichen Ebene als Mentor:in an die Seite gestellt, um den Einstieg zu erleichtern.

Welche Wochenarbeitszeit erwarten die Unternehmen von Berufseinsteigern?

Im außertariflichen Bereich sind Arbeitszeiten nicht festgelegt. Als Richtschnur kann die tarifliche Arbeitszeit gelten, also 37,5 Stunden pro Woche. Die Obergrenze gibt das Arbeitszeitgesetz vor: maximal zehn Stunden pro Tag. In



vielen Unternehmen sind 40 Stunden pro Woche üblich. Wie man mit den Überstunden von Mitarbeitenden umgeht, unterscheidet sich von Unternehmen zu Unternehmen teilweise deutlich. Meist ist notwendige Mehrarbeit mit dem außertariflichen Gehalt abgegolten.

Wie wichtig ist das Thema der Dissertation für die Anstellung?

Natürlich muss man Kenntnisse in dem Arbeitsgebiet nachweisen, auf das man sich bewirbt. Das geht am einfachsten, wenn man in der Dissertation auf einem ähnlichen Thema gearbeitet hat. Aber: 100 Prozent Übereinstimmung zwischen dem Thema der Dissertation und dem Arbeitsgebiet im Berufsumfeld gibt es nie. Im Bewerbungsverfahren

geht es daher eher darum, die Person zu bewerten als die Dissertationsarbeit. Sprich: Das „Wie“ ist wichtiger als das „Was“. Passt das Thema der Dissertation zu der ausgeschriebenen Stelle, ist das ein Plus, aber noch kein Einstellungsgrund. Denn das Gesamtbild muss passen. Zudem gibt es immer Stellen mit Themenschwerpunkten, an denen Universitäten nicht mehr oder noch nicht forschen. Also: ruhig bewerben, auch wenn das Thema nicht perfekt passt – für die Vermittlung des nötigen Fachwissens sorgen die Firmen schon.

Welchen Stellenwert haben Fortbildungen, beispielsweise zu Projekt- und Zeitmanagement, Mitarbeitendenführung etc.?

Fortbildungen zeigen natürlich Initiative und den Willen zu lernen. Dies bleibt auch im Beruf wichtig. Aber die Unternehmen erwarten nicht, dass an der Uni Themen wie Mitarbeitendenführung, Qualitätsmanagement, Projektmanagement etc. vermittelt werden. Weiterbildungen mit Teilnahmezertifikaten machen die Bewerbungsmappe zwar dicker, aber Bewerber:innen nicht qualifizierter für die ausgeschriebene Stelle. Die für die Firmen relevanten Softskills lernt man am besten in firmenspezifischen Veranstaltungen nach der Einstellung. Praktisch alle mittelgroßen und großen Unternehmen haben einen Katalog an Weiterbildungsmaßnahmen für Soft Skills. Fachliche Weiterbildungen organisieren die Fachbereiche selbst, meist als Learning on the Job, gegebenenfalls unterstützt durch externe Weiterbildungsmaßnahmen, beispielsweise von Geräteherstellern.

Weitere Fragen?

Dann per E-Mail schicken an mitteilungsblatt@gdch.de

PREISE DER GDCh 2024

Wir geben Chemie ein Gesicht.



Mit ihren Preisen würdigt die GDCh besondere Leistungen für die und in der Chemie. Die vorbildhafte Persönlichkeit und die exzellente wissenschaftliche Leistung der Nominierten stehen bei der Bewertung im Vordergrund. Die GDCh hat sich in ihrer Satzung zu Chancengleichheit verpflichtet. Deshalb sind Nominierungen ausdrücklich aus allen Bereichen wie z. B. Hochschulen, öffentliche Institute oder Industrie sowie der Vielfalt an Menschen erwünscht.

Bitte reichen Sie Ihre Nominierung von Einzelpersonen oder Teams mit allen erforderlichen Unterlagen bis zum 15. September 2023 unter www.gdch.de/nominierungen ein.

Geben Sie Chemie ein Gesicht. –
Nominieren Sie.



Dr. Karsten Danielmeier
GDCh-Präsident

www.gdch.de/gdch-preise
#gdchpreise #gdchawards

Eigenbewerbungen sind mit Ausnahme des Carl-Roth-Förderpreises nicht zugelassen. Weitere spezifische Bedingungen und Informationen zu den für 2024 ausgeschriebenen Preisen finden Sie auf unserer Webseite unter www.gdch.de/gdch-preise.

Die GDCh schreibt aus

ALBRECHT-KOSSEL-PREIS

- Δ Biochemie
- 7500 €, Urkunde

AUGUST-WILHELM-VON-HOFMANN-DENKMÜNZE

- Δ Alle Gebiete der Chemie an Personen außerhalb Deutschlands
- Urkunde, Medaille

CARL-DUISBERG-GEDÄCHTNISPREIS

- Δ Akademischer Nachwuchs in der Chemie
- 7500 € (2500 € für Arbeitsgruppe), Urkunde

CARL-ROTH-FÖRDERPREIS

- Δ Ressourcenschonende Synthesewege oder innovative Anwendungen von Chemikalien
- 5000 €, 3000 € - Gutschein, Urkunde

EMIL-FISCHER-MEDAILLE

- Δ Organische Chemie
- 7500 €, Urkunde, Medaille

ERICH-HÜCKEL-PREIS

- Δ Theoretische Chemie
- 7500 €, Urkunde

GDCh-PREIS FÜR BIOKATALYSE

- Δ Promotionspreis
- 2000 €, Urkunde

GDCh-PREIS FÜR JOURNALISMUS UND LITERATUR

- Δ Publizistische oder schriftstellerische Leistungen
- 7500 €, Urkunde

GMELIN-BEILSTEIN-DENKMÜNZE

- Δ Chemische Literatur, Chemieinformation oder Geschichte der Chemie
- 7500 €, Urkunde, Medaille

HERMANN-STAUDINGER-PREIS

- Δ Makromolekulare Chemie
- 7500 €, Urkunde, Medaille

LIEBIG-DENKMÜNZE

- Δ Alle Gebiete der Chemie
- 7500 €, Urkunde, Medaille

MARIANNE-BAUDLER-PREIS

- Δ Anorganische Chemie
- 7500 €, Urkunde

Preise & Stipendien

Fachgruppenpreis Analytische Chemie an Nicole Strittmacher

Der Fachgruppenpreis Analytische Chemie wurde am 12. April 2023 anlässlich der ANAKON in Wien an Nicole Strittmacher verliehen, in Würdigung ihrer hervorragenden, originären und zukunftsweisenden Forschungsarbeiten auf dem Gebiet der Imaging-Massenspektrometrie. Nicole Strittmacher konnte mit ihren beeindruckenden instrumentellen und methodischen Arbeiten zur Rapid Evaporative Ionisationsmassenspektrometrie Bakterien aufgrund ihres spektralen Fingerabdruckes unterscheiden. Ihre Entwicklungen im Bereich des Imagings mit Desorptions-Elektrospray-Ionisations-Massenspektrometrie führten zu ganz neuen Anwendungen in der Pharmazie, unter anderem durch eine Erhöhung des Probandurchsatzes und der Probenstabilität. Darüber hinaus entwickelte Strittmacher Imaging-Methoden der Massenzytometrie zur Bestimmung der Medikamentenverteilung in Dendrimernanopartikeln mit einer neuen Metallmarkierung. Ihre sehr interdisziplinären Arbeiten mit vielen Kooperationspartnern sind in zahlreichen Publikationen in führenden Zeitschriften der analytischen Chemie und der Lebenswissenschaften veröffentlicht und werden regelmäßig zitiert.



Fachgruppenvorsitzende Carolin Huhn (rechts) überreicht den Fachgruppenpreis Analytische Chemie an Nicole Strittmacher. (Foto: GDCh)

Mario Thevis erhält Fresenius-Preis

Im Dauereinsatz gegen Doping

Die GDCh verleiht Mario Thevis, Deutsche Sporthochschule Köln, den Fresenius-Preis. Er erhält die Auszeichnung, die mit einer Goldmedaille sowie einem Preisgeld in Höhe von 7500 Euro verbunden ist, für besondere Verdienste um die analytische Chemie. Denn der international renommierte Dopingexperte zeigt mit seiner Arbeit, wie wichtig und relevant Analytik für die Gesellschaft ist.

Mario Thevis ist als weltweit renommierter Dopingexperte ein Aushängeschild der deutschen analytischen Chemie. Bereits seit rund zwanzig Jahren ist er im Bereich der Dopingkontrolle bei Weltmeisterschaften und Olympischen Spielen aktiv. Durch die damit verbundene öffentliche Sichtbarkeit in allen Medien repräsentiert er die analytische Chemie nicht nur innerhalb der Wissenschaft, sondern ebenfalls in der öffentlichen Wahrnehmung. Aber auch seine Forschungsergebnisse sprechen für sich: Thevis entwickelte bereits zahlreiche neue, leistungsstarke Analyseverfahren für eine Vielzahl von Substanzen und ihren Metaboliten, die aktuell als Dopingmittel verwendet werden oder in Zukunft verwendet werden könnten.

Dabei ist sich der Experte stets seiner großen Verantwortung bewusst. Denn jedes analytische Ergebnis kann einen unmittelbaren und entscheidenden Einfluss auf die Karriere, das Ansehen und die Zukunft der betroffenen Personen haben. Vielfach zeigte er, dass zunächst unerklärliche und besonders seltene analytische Ergebnisse weitere detaillierte Untersuchungen erfordern. Aus diesem Grund wird Thevis auch regelmäßig in sportrechtlichen sowie strafrechtlichen Verfahren als Experte herangezogen.

Nicht zuletzt gelingt es ihm, seine Forschung mitreißend zu präsentieren. Er war als Plenarredner bereits auf vielen internationalen Tagungen zu Gast und wurde von der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie zum Redner für die



Mario Thevis erhält den Fresenius-Preis am 11. April bei der ANAKON 2023 in Wien. (Foto: V. Blüml)

Fresenius Lecture in den Jahren 2022/23 ernannt.

Mario Thevis, geboren 1973 in Aachen, studierte Chemie an der RWTH Aachen sowie Sportwissenschaften an der Deutschen Sporthochschule Köln, an der er 2001 am Institut für Biochemie auch promovierte. Nach einem Forschungsaufenthalt an der University of California, Los Angeles, USA, habilitierte er sich an der Deutschen Sporthochschule Köln. Seit 2006 ist er dort Professor für präventive Dopingforschung. Seit 2016 ist er Direktor des Instituts für Biochemie und des von der Welt-Anti-Doping-Agentur (WADA) zertifizierten Anti-Doping-Labors Köln. Bereits während seiner Dissertation unterstützte er das Dopingkontrolllabor Helsinki (Finnland) im Rahmen der Nordischen Skiweltmeisterschaft 2001. Seither begleitete er zahlreiche Weltmeisterschaften und Olympische Spiele mit seinem wissenschaftlichen Know-how. Thevis ist Direktor des Europäischen Überwachungszentrums für neue Dopingmittel (EUMOCEDA), und Chefredakteur der Zeitschrift *Drug Testing and Analysis*, die im Verlag Wiley-VCH erscheint.

Quelle: GDCh

DAAS-Preis für Carla Kirschbaum

■ Der DAAS-Preis 2022 wurde anlässlich der ANAKON in Wien an Carla Kirschbaum verliehen. Sie wurde ausgezeichnet für ihre Dissertation „Lipid Fingerprinting by Mass Spectrometry and Laser Light“, angefertigt unter der Betreuung von Kevin Pagel an der Freien Universität Berlin und dem Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft.

Carla Kirschbaums Leistung illustrieren sechs Preise und fast zwanzig Veröffentlichungen zur analytischen Spektroskopie von Lipiden, zum Teil erschienen in den angesehensten Fachzeitschriften. Ihr gelangen wegweisende Arbeiten zur Untersuchung von komplexen Biomolekülen mit kryogener Gasphaseninfrarotspektroskopie. Insbesondere konnte sie zwischen Isomeren von Glycolipiden, Sphingolipiden und Fettsäuren mittels Fingerprint im IR-Spektrum unterscheiden. Weiterhin hat sich Carla Kirschbaum mit einer Vielzahl analytischer



Ulrich Engel und Carsten Engelhard übergeben den DAAS-Preis an Carla Kirschbaum bei der ANAKON in Wien. (Foto: C. Engelhard)

spektrometrischer Techniken auseinandergesetzt – zum Beispiel der Tandem-Massenspektrometrie, mit der sie eindrucksvoll den Mechanismus der Glycolipidfragmentierung aufklärte.

Seit April 2023 ist die Preisträgerin als Postdoktorandin in der Arbeitsgruppe von Carol Robinson an der Universität Oxford in England tätig.

Kristallographiepreis für Florian Meurer

Raffinierter Methodenmix macht bessere Kristallstrukturanalysen möglich

■ Mitunter müssen Wissenschaftler feststellen, dass eine Methode, mit der sie seit Jahren erfolgreich experimentieren, unter gewissen Umständen doch nicht so gut funktioniert. Dann gilt es, die Mängel akribisch zu analysieren und anschließend auszubügeln. Genau das gelang nun einer Arbeitsgruppe der Universität Regensburg, der Universität Durham und des Helmholtz-Zentrums Dresden-Rossendorf (HZDR) mit der Röntgenbeugung, einer verbreiteten Methode zur Enträtselung von Kristallstrukturen. Um sie zu optimieren, kombinierte das Team die Röntgenbeugung mit einem anderen Analyseverfahren, der Röntgenspektroskopie, und konnte dadurch den Makel der Methode ausmerzen. Ein Resultat, für das die Deutsche Gesellschaft für Kristallographie einen der Forscher nun mit dem Lieselotte-Templeton-Preis auszeichnet.

Die Röntgenbeugung ist seit langem etabliert. Dennoch stieß ein Forschungsteam vor einiger Zeit auf ein grundlegendes methodisches Problem: An der Universität Regensburg hatte die Arbeitsgruppe von Michael Bodensteiner eine Kupferverbindung mit einer Röntgenröhre untersucht – allerdings mit einer eher ungewöhnlichen „Röntgenfarbe“, sogenannter $K\beta$ -Strahlung.

„Wir hatten einen nahezu perfekten Kristall verwendet und eigentlich erwartet, dessen Struktur präzise ermitteln zu können“, erzählt der Chemiker. „Doch dann mussten wir feststellen, dass bei manchen Messpunkten etwas physikalisch Unsinniges herauskam: Vereinfacht gesagt, saßen die Kupferatome nicht so im Kristallgitter, wie es eigentlich hätte sein müssen.“ Um dem Rätsel auf die Spur zu kommen, schaute sich das Team das Verfahren näher an. Dabei stellten die Fachleute fest, dass gewisse Korrekturen, die in die Methode mit einfließen, die Ergebnisse in einigen Bereichen verfälschen, statt sie zu verbessern. „Früher reichten diese mathematischen Verfahren in der Regel aus“,



Der Lieselotte-Templeton-Preisträger Florian Meurer (Foto: A. Weil-Jung)

erläutert Bodensteiner, „aber mittlerweile liefern unsere Messgeräte derart präzise Daten, dass diese Korrekturen an ihre Grenzen stoßen und deshalb verbessert werden müssen.“

Durchbruch in Grenoble

■ Um das Manko zu beheben, tat sich das Regensburger Team mit HZDR-Forscher Christoph Hennig zusammen. Der arbeitet am European Synchrotron (ESRF) im französischen Grenoble. Im Vergleich zu gewöhnlichen Laborröntgenröhren liefert die beschleunigerbasierte Anlage einen deutlich intensiveren und stärker gebündelten Röntgenstrahl. In Grenoble unterhält das HZDR eine Messstation, die Rossendorf-Beamline (ROBL). „Sie bietet sehr gute Voraussetzungen für solche Messungen“, erklärt Hennig. „Unter anderem gibt es ein leistungsfähiges Diffraktometer, das hochaufgelöste Beugungsbilder aufnehmen kann.“ Simultan dazu sind auch spektroskopische Messungen möglich – eine ausgewiesene Spezialität von ROBL. Dabei wird eine Probe mit wechselnden „Röntgenfarben“ durchleuchtet. Dadurch lässt sich zum Beispiel auf gewisse chemische Eigenschaften jener Elemente schließen, aus denen ein Kristall besteht.

Die Idee des Teams, beide Methoden, also Röntgenbeugung und -spektroskopie, miteinander zu kombinieren, ist ein bislang kaum erprobter Ansatz. „Eine der Herausforderungen dabei war, die verschiedenen Gerätekomponenten aufeinander abzustimmen, etwa die Detektoren, die die Messwerte aufnehmen“,

erzählt Nachwuchsforscher Florian Meurer von der Universität Regensburg. Bei ihren Experimenten nahmen die Fachleute dann vor allem jene Messpunkte ins Visier, bei denen die übliche Methode unzuverlässige Resultate ergeben hatte. „Durch die Kombination von Röntgenbeugung und -spektroskopie kamen stimmige Werte heraus“, freut sich Meurer. „Das heißt: Unsere Methode funktioniert.“ Für seine Masterarbeit, die er über dieses Projekt schrieb, erhält er den Lieselotte-Templeton-Preis der Deutschen Gesellschaft für Kristallographie.

Perspektiven für die Endlagerforschung

■ Zwar müssen die Fachleute ihr Verfahren noch verfeinern, doch für die Zukunft verspricht es einiges. So dürften sich die Strukturen gewisser Kristalle genauer analysieren lassen als bisher. Und: „Neben der reinen Strukturinformation könnten wir in derselben Messung mehr erfahren, etwa über die Oxidationsstufe eines Elements“, hofft Bodensteiner. „Das wäre zum Beispiel für die Untersuchung von katalytischen Reaktionen in der Chemie hilfreich.“ Auch für künftige Projekte an der ROBL-Messstation in Grenoble dürfte das Kombiverfahren von Nutzen sein: Hier untersuchen Hennig und seine Leute das Verhalten von radioaktiven Substanzen, wie sie in nuklearen Abfällen zu finden sind. „Wir hoffen, die Strukturen bestimmter radioaktiver Molekülverbindungen genauer erfassen zu können“, sagt der HZDR-Kristallograph Christoph Hennig. „Dadurch könnten wir besser abschätzen, ob eine bestimmte Substanz dauerhaft in einem Endlager verbleibt oder aber irgendwann in die Umwelt gelangen könnte.“

Quelle: Uni Regensburg

Originalpublikation

F. Meurer, O.V. Dolomanov, C. Hennig, N. Peyerimhoff, F. Kleemiss, H. Puschmann, M. Bodensteiner, „Refinement of anomalous dispersion correction parameters in single-crystal structure determinations“, *IUCr* 2022.
doi: 10.1107/S2052252522006844

Personalien

Geburtstage

Wir gratulieren unseren Mitgliedern, die im dritten Quartal 2023 einen runden Geburtstag feiern, und wünschen alles Gute:

Zum 60. Geburtstag

Albert Sieghard, Zürich, Schweiz
Ralf Zimmermann, München
Axel Göhr, Haltern am See
Dieter Wildhagen, Ehingen
Ulrike Schumann, Kassebohm
Klaus Kerpen, Mülheim
Michael Arlt, Alsbach-Hähnlein
Frank Schmidt-Döhl, Braunschweig
Thomas Polzer, Bad Neustadt
Frank Kühnemann, Freiburg
Fred Lisdat, Berlin
Christian Scherer, Bad Aibling
Michael Kumke, Golm
Frank Kohl, Oer-Erkenschwick

Zum 65. Geburtstag

Werner J. Günther, Münster
Christine Fuchs, Potsdam
Jutta Witten, Idstein
Wolfgang Gerber, Lohr
Raimund Wyzgol, Dortmund
Franz-Rudolf Kunz, Gelnhausen
Regina Kalähne, Hennickendorf
Martin Geßner, Gemünden
Roland Welle, Neuenburg

Zum 70. Geburtstag

Wolf-Dieter Hergeth, Julbach
Heidi Helmsmüller, Syke
Wolfgang Frenzel, Berlin

Horst Mittelstädt, Dinslaken
Heribert Hohmann, Datteln
Bernd Hoffmann, Karlsdorf-Neuthard
Sibylle Mothes, Leipzig
Wolfgang Schulz, Schwäbisch Gmünd
Ursula Rottmann-Marx, Saarbrücken
Dietrich Palm, Berlin

Zum 75. Geburtstag

Klaus-Peter Lörcher, Ludwigsburg
José Alfons Clément Broekaert, Hamburg
Gustavo Herrera-Perez, Berlin
Thomas Stiefel, Stuttgart
Heinz-Friedrich Schöler, Troisdorf
Hans Detlef Meyer, Grünstadt
Gerd Burgbacher, Münster

Zum 80. Geburtstag

Peter Luger, Berlin
Franz L. Dickert, Klosterneuburg, Österreich

Zum 85. Geburtstag

Walter Pack, Gau-Algesheim
Helmut Rasmussen, Illertissen

Zum 90. Geburtstag

Horst Friebolin, Heidelberg
Carl Krüger, Mülheim

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.

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@go.gdch.de

Grafik: Jürgen Bugler

Druck: Seltersdruck & Verlag Lehn GmbH & Co. KG

Bezugspreis im Mitgliedsbeitrag enthalten

Erscheinungsweise: 4 x jährlich

ISSN 0939–0065

Redaktionsschluss Heft 03/2023:
28.06.2023

Beiträge bitte an die Redaktion

Zum Tode von Michael Przybylski (1948 – 2023)

Michael Przybylski studierte Chemie und promovierte an der Universität Mainz. Nach seiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter in der bioorganischen Chemie in Mainz verbrachte er zwei Jahre als Gastwissenschaftler am National Cancer Institute in den USA. Im Jahr 1989 wurde er auf den Lehrstuhl für Analytische Chemie an der Universität Konstanz berufen, wo er als Direktor des Labors für Analytische Chemie und Biopolymerstrukturanalyse tätig war. Aus dem überaus produktiven Konstanzer Labor sind über hundert promovierte und diplomierte bzw. Master-Biologen, -Chemikerinnen und -Biochemiker sowie mehr als ein Dutzend national und international tätige Hochschullehrer hervorgegangen.

Noch während seiner professoralen Tätigkeit eröffnete Michael Przybylski im Jahr 2008 das Steinbeis-Zentrum für Biopolymeranalytik und Biomedizinische Massenspektrometrie, das acht Jahre an der Universität Konstanz angesiedelt war. Nach seiner Emeritierung im Jahr 2016 siedelte Michael Przybylski das Steinbeis-Zentrum in Rüsselsheim an. Er war bis zu seinem Tode Direktor des von ihm gegründeten Forschungszentrums.

Seit 2016 gibt es eine erfolgreiche Zusammenarbeit mit dem Fachbereich Ingenieurwissenschaften der Hochschule RheinMain. Michael Przybylski richtete zwei internationale Massenspektrometrie-Workshops sowie eine Summer School am Fachbereich aus. Zudem war er als Lehrbeauftragter tätig und unterrichtete die Studierenden des Masterstudiengangs Medizintechnik der Hochschule RheinMain.

Durch seinen Einsatz und sein anwendungsbezogenes biochemisches Know-how weitete er den Blick der zukünftigen Ingenieurinnen und Ingenieure hin zur Medizin und zu den Biowissenschaften. Erst durch Einbeziehung des Steinbeis-Zentrums wurde es der Hochschule möglich, Praktika und wissenschaftliche Abschlussarbeiten an der Schnittstelle zwischen Ingenieurwissenschaften und biomedizinischer Analytik in die Ausbildung der zunehmend international orientierten Studierenden zu integrieren.



Michael Przybylski

Von Beginn an war die Forschung von Michael Przybylski interdisziplinär und in vielerlei Hinsicht bahnbrechend. Sie brachte neue massenspektrometrische Methodenkombinationen hervor, die weltweit eingesetzt werden. Er erfand gemeinsam mit einem Wissenschaftskonsortium die Proteolyse-Exzisions-Massenspektrometrie, um Protein-Ligand-Wechselwirkungsstrukturen und Peptid/Protein-Epitope aufzuklären, und entschlüsselte die Strukturen mehrerer Membranproteine, etwa des Lungensurfactant-Protein-C. Sein Laboratorium führte zahlreiche Neuentwicklungen und Methoden der Biopolymermassenspektrometrie in Kombination mit protein- und peptidchemischen Methoden durch, die Tertiärstrukturcharakterisierung durch proteinchemische Modifikation und Massenspektrometrie sowie die massenspektrometrische Bestimmung von Biopolymererkennungsstrukturen. Seine Forschungsarbeiten konzentrierten sich auf die Entwicklung von Biosensor- und Massenspektrometrietechnologien, um Antikörper-Epitope aufzuklären, sowie Anwendungen der Massenspektrometrie zur Strukturklärung und pathophysiologischen Modifikation von lysosomalen Proteinen.

Michael Przybylski hat über 400 wissenschaftliche Publikationen in internationalen Fachzeitschriften sowie rund 25 Patente veröffentlicht und hielt etwa 150 eingeladene Vorträge. Unter anderem wurde er mit dem St-Denis-Preis

für Krebsforschung, mehreren internationalen Gastprofessuren, dem Life-Science-Preis der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie und der Ehrendoktorwürde der Universität Iasi in Rumänien ausgezeichnet. Michael Przybylski war Gastprofessor der Chinesischen Akademie der Wissenschaften, Adjunct-Professor für analytische Chemie an der Indiana University in den USA und Adjunct-Professor für Biochemie an der Victoria University in Kanada. Zudem war er Mitglied der wissenschaftlichen Ausschüsse mehrerer internationaler Konferenzen, Herausgeber und Mitglied des Editorial Boards mehrerer internationaler Zeitschriften und von 2000 bis 2003 Präsident der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie.

Michael Przybylski verstarb plötzlich und unerwartet kurz vor seinem 75. Geburtstag; er ist mitten aus dem Leben geschieden. Mit ihm ist eine fachlich überaus kompetente Persönlichkeit und ein stets menschenverbindender sowie sehr geschätzter Freund von uns gegangen.

*Michael Glocker und
Wolfgang Kleinekoft*

GDCh-Fortbildungen

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

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

26. – 27. Juni 2023, Frankfurt am Main

Aufgaben und Verantwortung des Labormanagements, Arbeitsschutz in der Chemie-, Pharma- und Lebensmittelindustrie (Kurs 980/23)

Leitung: Dr. Gitta Weber

17. – 20. Juli 2023, Coburg

Einführung in die HPLC, Basiskurs mit Experimenten (Kurs 309/23), Leitung: Prof. Dr. Stefan Kalkhof

6. – 27. September 2023 (mittwochs), online

NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung, Fortgeschrittenenkurs (Kurs 506/23)

Leitung: Prof. Dr. Reinhard Meusinger

12. September 2023, online

Qualitätsrisikomanagement (Kurs 538/23)

Leitung: Dipl.-Ing. Jürgen Ortlepp

14. September 2023, Frankfurt am Main oder online

Die Qualitätssysteme GMP (Gute Herstellungspraxis) und GLP (Gute Laborpraxis) im Überblick – Ein Leitfaden der Guten Praxis, einzeln oder als Modul im Fachprogramm „Geprüfter Qualitätsexperte GxP GDCh (m/w/d)“ buchbar (Kurs 511/23)

Leitung: Dr.-Ing. Barbara Pohl

14. – 15. September 2023, Frankfurt am Main

Innovationsmanagement in der Chemie, Kurs einzeln oder als Fachprogramm „Geprüfter Wirtschaftschemiker GDCh (m/w/d)“ buchbar (Kurs 929/23)

Leitung: Prof. Dr. Johann Nils Foegel

21. – 22. September 2023, Frankfurt am Main

Moderne Rietveld-Analyse in der praktischen Übung (Kurs 389/23)

Leitung: Prof. Dr. Robert E. Dinnebir

26. – 28. September 2023, Frankfurt am Main

GLP-Intensivtraining mit QS-Übungsaufgaben: Methodenvalidierung und Gerätequalifizierung unter GLP (Gute Laborpraxis) – Mit Praxisteil, einzeln oder als Modul im Fachprogramm „Geprüfter Qualitätsexperte GxP GDCh (m/w/d)“ buchbar (Kurs 536/23)

Leitung: Prof. Dr. Jürgen Pomp

26. – 27. September 2023, online

Störungs- und Notfallmanagement: Business Continuity Management (BCM) vor dem Hintergrund von Altlasten und Schadenssanierung, Kurs einzeln oder als Fachprogramm „Geprüfter Notfallmanager GDCh (m/w/d)“ buchbar (Kurs 912/23)

Leitung: Dr. Bernd Herber



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Inhouse-Kurse



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

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

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

RETHINKING CHEMISTRY

4. – 6. September 2023
Leipzig

Platzieren Sie Ihr
Unternehmen als
Partner und Aussteller!
Detaillierte Informationen
erhalten Sie unter
[www.wifo2023.de/
partnerundaussteller](http://www.wifo2023.de/partnerundaussteller)



© Andreas Schmidt



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Fachgruppe Analytische Chemie

Die Stimme der analytischen Chemie



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

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

AUSTAUSCH & INFORMATION

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

PREISE & EHRUNGEN

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

STIPENDIENPROGRAMM & MEHR

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

GDCh-Geschäftsstelle

Dr. Carina S. Kniep

Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V.

Varrentrappstraße 40-42
60486 Frankfurt am Main

Telefon: +49 (0)69 7917-499

E-Mail: c.kniep@gdch.de



TAGUNGEN & VERANSTALTUNGEN

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

KOOPERATIONEN

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

MITGLIEDSCHAFT

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

VORSTAND DER FACHGRUPPE

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

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

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

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

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

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

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

Dr. Maria Viehoff, Merck KGaA, Darmstadt

www.gdch.de/analytischechemie