



GDCh

Gesellschaft  
Deutscher Chemiker

Fachgruppe  
Analytische Chemie

**analytica conference 2024**

**Lehre an der Uni Münster**

**Nachruf Herbert Knauer**

Mitteilungsblatt  
2/2024



ISSN 0939-0065



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER



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

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

**Arbeitskreis  
Archäometrie**

Vorsitz 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 2024–2027  
Dr. Claudia Beleites  
Wölfersheim  
claudia.beleites@chemometrix.gmbh

**Arbeitskreis  
Chemo- & Biosensoren**

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

**Fachgruppe  
Analytische Chemie**



**Vorstand 2024–2027**

Vorsitz  
Dr. Michael Artl  
Darmstadt  
michael.artl@merckgroup.com

Stellvertretender Vorsitz  
Dr. Björn Meermann  
Berlin

Repräsentanz Hochschule  
Prof. Dr. Margit Geissler  
Rheinbach

Prof. Dr. Kerstin Leopold  
Ulm

Repräsentanz Industrie  
Prof. Dr. Tom van de Goor  
Waldbronn/Marburg

Dr. Martin Wende  
Ludwigshafen

Repräsentanz Junganalytiker:innen  
Dr. Catharina Erbacher  
Ludwigshafen

Dr. Jens Fangmeyer  
Leverkusen

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

Vorsitz 2023–2026  
Prof. Dr. Carsten Engelhard  
Berlin/Siegen  
carsten.engelhard@bam.de

**Arbeitskreis  
Elektrochemische  
Analysenmethoden (ELACH)**

Vorsitz 2024–2027  
Prof. Dr. Gerd-Uwe Flechsig  
Coburg  
gerd-uwe.flechsig@hs-coburg.de

**Arbeitskreis  
Prozessanalytik (PAT)**

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

**Arbeitskreis  
Separation Science**

Vorsitz 2024–2027  
Dr. Martin Vogel  
Münster  
martin.vogel@uni-muenster.de

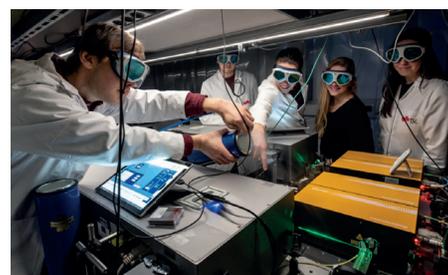
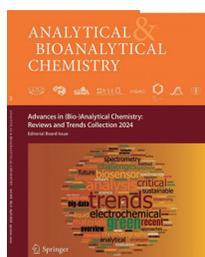
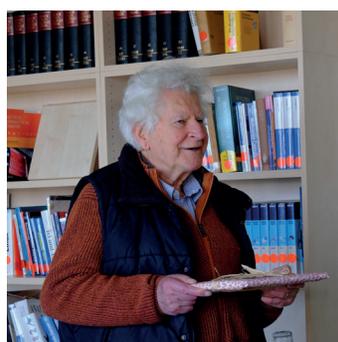
**Industrieforum Analytik**

Sprecherin  
Dr. Kathrin Wolter  
Ludwigshafen  
kathrin.wolter@basf.com

**Mitglieder**

## Inhalt 2/2024

<b>Editorial</b>	4
<b>Aus den Arbeitskreisen</b>	
AK Chemometrik & Qualitätssicherung	5
AK ELACH	5
<b>Analytik in Deutschland</b>	
Lehre an der Universität Münster	6
<b>Chemie Aktuell</b>	
UV-Breitband-Spektrometer für Luftschadstoffanalyse	8
Erstmals Zwei-Farben-Modus eines Infrarot-FELs	9
Künstliche Nase durch ultraschnelle Lichtpulse	10
Umsatzrückgang mit Lichtblicken	11
<b>Medien</b>	
ABC in Kürze	12
<b>Analytica 2024</b>	
Weltleitmesse der Laborbranche	13
Sessions auf der analytica conference	14
<b>Tagungen &amp; Fortbildungen</b>	
55. Jahrestagung der DGMS	27
7. DAAS-Doktorandenseminar	29
CE-Forum	30
<b>Preise &amp; Stipendien</b>	
Bunsen-Kirchhoff-Preis für Björn Meermann	31
Eberhard-Gerstel-Preis für Anish Das	32
<b>Personalia</b>	
Zum Tode von Herbert Knauer	33
Zum 80. Geburtstag von Günter Gauglitz	33
Geburtstage	34
<b>GDCh-Fortbildungen</b>	34
<b>Impressum</b>	26



## Editorial

### Liebe Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie,

im vergangenen Jahr haben Sie einen neuen Fachgruppenvorstand gewählt – ein großes Ziel im Rahmen der Vorstandsarbeit ist dabei die noch engere Zusammenarbeit und Verzahnung mit den österreichischen Kolleginnen und Kollegen. Die Österreichische Gesellschaft für Analytische Chemie (Austrian Society of Analytical Chemistry, ASAC) mit ihren rund 500 Mitgliedern feierte erst im Vorjahr ihr 75-jähriges Bestehen.

Unsere Fachgruppen arbeiten bereits jetzt zusammen, sichtbar etwa bei Organisation und Ausrichtung der ANAKON 2023 an der Technischen Universität Wien und 2015 an der Universität Graz durch die österreichischen Kolleg:innen. Nun haben die Vorstände beider Fachgruppen im Rahmen eines ersten Austausches viele weitere Aktivitäten identifiziert, die in enger Zusammenarbeit mehr „Impact“ für die analytische Chemie erzielen werden.

So werden beispielsweise zukünftig Veranstaltungen für die gegenseitige Teilnahme geöffnet: Die erfolgreiche Vortragsreihe „Meine ersten Tage bei...“, organisiert von den Junganalytiker:innen der GDCh, wird zukünftig durch die Teilnahme junger Kolleg:innen aus Österreich flankiert und somit gestärkt.

Wir werden zudem die Frühjahrschule Industrielle Analytik für österreichische Studierende öffnen. Die nächste Ausrichtung wird in Reutlingen sein, was für eine Teilnahme der österreichischen Studierenden gut gelegen ist.

Auch die Doktorandenseminare der Arbeitskreise wie Separation Science, DAAS, ELACH und PAT erscheinen uns als attraktive Gelegenheiten, den Austausch zwischen den deutschen und österreichischen Arbeitsgruppen zu fördern. Vereinzelt nehmen österreichische Kolleg:innen hier bereits teil – dies wollen wir verstärkt fördern und ausbauen.

Die Kolleginnen und Kollegen der ASAC haben in enger Kooperation mit der Österreichischen Chemischen Gesellschaft (GÖCH) ebenfalls ein großes Portfolio an Veranstaltungen und Aktivitäten, die für Mitglieder der FG Analytische



Rudolf Krška



Björn Meermann



Michael Arlt

Chemie attraktiv sind: So findet bereits seit zwei Jahrzehnten alljährlich das ASAC-Junganalytiker:innen-Forum in Österreich statt ([www.goech.at/veranstaltungen/junganalytikerforum-2024](http://www.goech.at/veranstaltungen/junganalytikerforum-2024)), das vor allem der Vernetzung von Forschenden vor und nach der Promotion dient. Auch zu dieser Veranstaltung heißt die ASAC deutsche Junganalytiker:innen willkommen. Seit 2021 organisiert die ASAC im Zweijahresrhythmus zudem die Minisymposiumsreihe „Next Generation Analytical Chemistry“, die Wissenschaftler:innen eine Bühne bietet, die an der Schwelle zur Gründung einer eigenen Gruppe stehen. Der Vernetzung innerhalb der jüngeren Generation widmete sich 2022 auch das Special Issue der Zeitschrift *Analytical and Bioanalytical Chemistry* „Making waves in analytical chemistry“, das von der ASAC initiiert wurde. Auch einige hochrenommierte Preise stehen für internationale Forschende offen, etwa die Fritz-Pregl-Medaille der ASAC für Persönlichkeiten, die im Besonderen die organische Spurenanalytik vorangetrieben haben.

Dabei wollen wir nicht nur einen Rahmen für den gegenseitigen Austausch schaffen, sondern diesen auch aktiv unterstützen und dazu anregen, die von der Fachgruppe vergebenen ABC-Publikationsstipendien für eine stärkere Vernetzung mit den österreichischen Kolleg:innen zu nutzen. Im Rahmen dieser Stipendien können junge Wissenschaftler:innen bis zu zwei Monate im europäischen Ausland wissenschaftliche Arbeiten durchführen, aus denen im Nachgang ein gemeinsamer Artikel in *Analytical and Bioanalytical Chemistry* hervorgeht.

Pachtzahlungen aus der Miteigentümerschaft an *ABC* werden auf diese Weise einerseits zur Förderung von Kooperationen zwischen Analytikarbeitsgruppen in Europa und andererseits zur Unterstützung des Journals eingesetzt.

In diesem Jahr wird es zudem eine gemeinsame Vorstandssitzung zwischen der ASAC und der Fachgruppe Analytische Chemie geben. Wir werden diesen Rahmen nutzen, um uns und die vielfältigen Aktivitäten und Veranstaltungen noch besser kennenzulernen und somit eine engere Vernetzung voranzutreiben.

Die Vorstände beider Fachgruppen freuen sich auf eine enge Zusammenarbeit.

Rudolf Krška,  
Präsident der Österreichischen Gesellschaft für Analytische Chemie (ASAC)

Björn Meermann,  
Stellvertretender Vorstandsvorsitzender  
der Fachgruppe Analytische Chemie

Michael Arlt,  
Vorstandsvorsitzender der Fachgruppe  
Analytische Chemie

### Der neue Vorstand des AK Chemometrik und Qualitätssicherung stellt sich vor

■ Für die Legislaturperiode 2024–2027 hat der Arbeitskreis Chemometrik und Qualitätssicherung regulär einen neuen Vorstand gewählt. Claudia Beleites (Chemometrix, Wölfersheim) und Andrea Paul (Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, BAM, Berlin) wurden nach einer erfolgreichen ersten Amtsperiode wiedergewählt. Neu dabei sind Stephan Seifert (Universität Hamburg) und Joscha Christmann (Hochschule Mannheim).

Der neue Vorstand ist wie folgt konstituiert:

- Vorsitz: Claudia Beleites
- Stellvertretender Vorsitz: Stephan Seifert
- Schriftführung: Joscha Christmann
- Beisitz: Andrea Paul

Tatkräftige Unterstützung wird Marcel Dahms als ständiger Gast leisten.

Die Mitglieder des Vorstands repräsentieren sowohl industrielle, akademische und institutionelle Bereiche als auch selbstständig tätige Mitarbeitende. Wir danken den scheidenden Vorstandsmitgliedern Jörg Kraft und Gerald Steiner herzlich für ihr Engagement.



AK Chemometrik & Qualitätssicherung

Ein erster Beschluss des neuen Vorstands bestand darin, ein Logo für den Arbeitskreis einzuführen.

2023 nahmen zwei Taskforces im Arbeitskreis ihre Arbeit auf.

#### Taskforce Leitlinien

■ Die Taskforce Leitlinien wird sich damit beschäftigen, Anwendern chemometrischer Methoden in Forschung und Industrie praktische und verständliche Leitlinien anzubieten. Wert soll dabei besonders auf Fallbeispielen inklusive Daten und Software liegen, mit dem Ziel, die Qualität und Zweckmäßigkeit der Datenanalyse zu verbessern. In diesem Rahmen wird eine Vernetzung und Zusammenarbeit mit dem europäischen Netzwerk Eurachem angestrebt.

Die genauen Inhalte werden aktuell diskutiert. Für Beteiligung und Vorschläge sind wir offen. Beitreten können Sie unter <https://groups.google.com/a/go.gdch.de/g/leitlinien-chemometrik>.

#### Taskforce Lehre

■ Ziel ist es, Lehrinhalte der Chemometrie und Qualitätssicherung im Studium zu verbessern und Weiterbildungsangebote für junge Forschende zu organisieren. Um der Taskforce beizutreten, melden Sie sich an unter <https://groups.google.com/a/go.gdch.de/g/lehre-chemometrik>. Als erstes Projekt wird der Arbeitskreis ein Doktorandenseminar anbieten. Zielgruppe sind alle Doktoranden der analytischen Chemie, die bereits chemometrische Methoden anwenden oder mehr darüber lernen wollen, sowie Doktoranden, die mathematische Grundlagen der Chemometrie entwickeln und implementieren. Das Seminar soll auch neuen, unerfahrenen Promovierenden eine Gelegenheit bieten, Vorträge zu halten. Außerdem bietet sich

dabei die Möglichkeit, sich untereinander und mit Industriepartnern auszutauschen und zu vernetzen.

Das Doktorandenseminar wird vom 31. Juli bis 2. August 2024 an der Hochschule Mannheim stattfinden. Es startet mit einer Exkursion zur BASF. Alle Informationen unter <https://chemometrics.gdch.events>.

Wir freuen uns über Ihre tatkräftige Unterstützung und laden Sie herzlich ein, über [ak-chemometrik@go.gdch.de](mailto:ak-chemometrik@go.gdch.de) mit uns Kontakt aufzunehmen und an der Mitgliederversammlung am 31. Juli live oder online teilzunehmen. Wir bedanken uns bei allen Mitgliedern für das Vertrauen.

*Claudia Beleites, Chemometrix  
Stephan Seifert, Universität Hamburg  
Joscha Christmann, Hochschule Mannheim  
Andrea Paul, BAM, Berlin  
Marcel Dahms, Light:Guard, Dresden*

### AK ELACH: Neuer Arbeitskreisvorstand

■ Der neue Vorstand des AK ELACH hat sich konstituiert. Mitglieder des Vorstands für die Amtsperiode 2024–2027 werden sein:

- Vorsitzender: Gerd-Uwe Flechsig, Hochschule Coburg
- Stellvertretender Vorsitzender: Jens Zosel, Kurt-Schwabe-Institut Meinsberg
- Schriftführer: Sandro Haug, Deutsche Metrohm, Filderstadt

LIVESWERKE  
IN DER  
CHEMIE

LARRY E. OVERMAN  
DESIGNING SYNTHETIC  
METHODS  
AND  
NATURAL  
PRODUCTS  
SYNTHESIS

FACHGRUPPE  
GESCHICHTE  
DER CHEMIE

GDCh  
rethinking chemistry

LARRY E. OVERMAN:  
DESIGNING SYNTHETIC  
METHODS AND NATURAL  
PRODUCTS SYNTHESIS  
252 S. / 213 ABB. / 39,80 €  
L-I-C.ORG/1133  
TWITTER.COM/LIVESINCHEM

## Analytik in Deutschland

### Analytische Lehre an der Universität Münster

■ Bis zur Einführung des Bachelor-Master-Systems wurde in Münster – wie an fast allen Studienstandorten der Chemie in Deutschland – ein klassisches Programm der qualitativen und quantitativen Analytik gelehrt. Dabei vermittelte die Grundvorlesung der analytischen Chemie mit zwei Semesterwochenstunden (SWS) im ersten Fachsemester den stoffchemischen Hintergrund für das chemische Einführungspraktikum, das die Kollegen der anorganischen Chemie durchführten und in dem der Trennungsgang die zentrale Rolle spielte. Die Vorlesung „Analytische Chemie II“ machte dann mit der wässrigen quantitativen Analytik vertraut, und das entsprechende Praktikum mit wässrigen und technischen Analysen fand nach dem vierten Fachsemester statt. Es führte neben Aufschlussverfahren, Titration, Gravimetrie und Elektrogravimetrie kurz die instrumentellen Verfahren wie Photometrie und Atomabsorptionsspektroskopie (AAS) ein.

Mit dem Start des Bachelor-Master-Systems in Münster trafen wir (Jan Andersson als Vorgänger von Heiko Hayen sowie Uwe Karst) die strategische Entscheidung, das Lehrprogramm der analytischen Chemie grundlegend zu ändern: Es sollte den aktuellen Anforderungen an Studierende der Chemie und der Lebensmittelchemie besser gerecht werden.

Bei dieser Entscheidung fiel es uns schwer, die bei den Studierenden geschätzten klassischen Arbeitstechniken im Lehrprogramm weitestgehend zu streichen (Abbildung 1). Aber es war uns wichtig, den begrenzten Lehrumfang unseres Fachs auf die Aspekte zu fokussieren, die heute im Berufsleben sämtlicher Chemikerinnen und Chemiker eine immer weiterwachsende Rolle spielen – nicht nur bei auf die analytische Chemie spezialisierten Personen. Heute werden auch von Laborleitungen in der Synthesechemie grundlegende Kenntnisse der (quantitativen) analytischen Chemie erwartet sowie die Fähigkeit einzuschätzen, welches analytische

*Abb. 1. Auch im instrumentell-analytischen Praktikum erlernen die Studierenden grundlegende Arbeitstechniken. (Alle Fotos: H. Engler, Uni Münster)*



Verfahren für welche Frage am besten geeignet ist. Dies gilt in mindestens demselben Umfang auch für viele andere Tätigkeiten in Chemie- und Pharmaindustrie, im öffentlichen Dienst (Lebensmitteluntersuchung, Umwelt, Wasser etc.) sowie bei Herstellern von Analysegeräten.

#### Bachelorstudium

■ Das heutige analytisch-chemische Lehrprogramm für Bachelorstudierende der Chemie und der Lebensmittelchemie besteht aus einer instrumentell-analytischen Grundvorlesung mit vier SWS im dritten Fachsemester unter dem Titel „Moderne Methoden der analytischen Chemie“; sie deckt breit die quantitativen Analysemethoden ab. Eine zweistündige Klausur überprüft den Lernerfolg, und ihr Bestehen ist Zugangsvoraussetzung für das zugehörige Praktikum. Die

Methoden der Strukturaufklärung (NMR, Röntgendiffraktometrie etc.) zur Synthesekontrolle werden dagegen von den Kolleginnen und Kollegen der anorganischen Chemie und der organischen Chemie in einem gesonderten Modul vermittelt. Im vierten Fachsemester findet ein Seminar (1 SWS) statt, das den Vorlesungsstoff in der quantitativen Analytik vertieft und auf das Praktikum vorbereitet, welches als vierwöchiger Kurs in der vorlesungsfreien Zeit nach dem vierten Fachsemester stattfindet.

Für das Praktikum steht ein eigener Praktikumsaal zur Verfügung, der auch für Master- und Schülerveranstaltungen genutzt wird (Abbildung 2); daher sind die erforderlichen Rüstzeiten gering. In den letzten Jahren haben das Praktikum im Durchschnitt jährlich 100 bis 120 Bachelorstudierende der Chemie und



*Abb. 2. Blick in den Praktikumsaal, hier bei einem Praktikum für Chemie-Leistungskurse*



Abb. 3. Carbonylverbindungen aus Zigarettenrauch werden nach Probenahme mittels Derivatisierung bestimmt.

Lebensmittelchemie besucht. In zehn Versuchen, die jeweils in Vierergruppen organisiert sind, behandeln die Studierenden Trenntechniken (GC, HPLC, IC, CE), spektroskopische Methoden (AAS, Flammenphotometrie/ICP-OES, UV/Vis-Spektroskopie, Fluoreszenz, TXRF/ $\mu$ XRF) sowie massenspektrometrische Methoden (LC/MS). Auch Verfahren der Probenvorbereitung (Abbildung 3) und der Datenauswertung werden gelehrt. Im Praktikum arbeiten jeweils zwei Studierende an einem Gerät zusammen; ein Assistent betreut zwei Zweiergruppen.

### Eine freiwillige Klausur

■ Eine Modulabschlussklausur über die Inhalte von Vorlesung, Seminar und Praktikum rundet das Bachelormodul ab. Um die Zahl von Drittversuchen bei den Klausuren gering zu halten, bietet dieses Modul als einziges in den beiden Bachelorstudiengängen die Möglichkeit, eine freiwillige Klausur ein bis zwei Wochen vor der offiziellen Klausur zu schreiben. Wird diese freiwillige Klausur mindestens mit der Note 2,0 bestanden, so kann diese Note gewertet werden. Es besteht für diese Studierenden trotzdem die Möglichkeit, sich in der offiziellen Klausur zu verbessern, da automatisch die bessere der beiden Klausuren zählt. Ist das Ergebnis der freiwilligen Klausur die Note 2,3 oder schlechter, so zählt automatisch das Ergebnis der offiziellen Klausur, und diese muss mitgeschrieben werden. Über 80 Prozent der Studierenden nehmen die in den Studienordnungen verankerte Möglichkeit der freiwilligen Klausur wahr; das führt dazu, dass sich die

meisten Studierenden bereits gut auf die freiwillige Klausur vorbereiten und somit über 95 Prozent von ihnen spätestens die offizielle Klausur bestehen.

Studierende evaluieren das Praktikum sehr positiv – sicher ein wichtiger Grund dafür, dass im sechsten Fachsemester die Angebote für Bachelorarbeiten aus der analytischen Chemie stark gefragt sind. Bisher haben jedes Jahr seit Beginn dieses Programms zwischen 10 und 15 Studierende der Chemie und der Lebensmittelchemie eine Bachelorarbeit über sechs bis acht Wochen in den analytisch-chemischen Arbeitskreisen angefertigt. Eine solche ist in der Regel das Tor zu späteren Masterarbeiten und Promotionen in der analytischen Chemie.

### Masterstudium

■ Da an der Universität Münster das Bachelorstudium der Chemie sehr strikt durchorganisiert ist und nur wenige Wahlfreiheiten bestehen, entschied sich der Fachbereich, im Masterstudium keine Pflichtmodule festzulegen. Stattdessen können die Studierenden im ersten Jahr des Masterstudiums der Chemie vier halbsemestrige Blöcke aus jeweils mindestens vier Optionen wählen, so dass eine deutliche Spezialisierung möglich ist. Aus der analytischen Chemie stehen zwei Module zur Wahl, von denen eines eher methoden-, das andere eher anwendungsorientiert ist. Im Durchschnitt entscheiden sich insgesamt über 60 Studierende der Chemie und der Wirtschaftschemie pro Jahr für mindestens eines der beiden. Damit sind diese Module jährlich unter den

meistgewählten Modulen des gesamten Masterstudiengangs.

Beide Module finden als sechswöchige Projekte statt, mit einem zusätzlichen zweiwöchigen Zeitfenster zur Prüfungsvorbereitung. In den Projekten bearbeiten die Studierende im Labor forschungsnahe Themen über die volle Breite der beteiligten Arbeitskreise, und Promovierende betreuen jeweils ein Thema aus dem Umfeld ihrer eigenen Forschungsarbeiten. Dabei nutzen sie sowohl die Geräte aus dem Praktikumssaal des Bachelorstudiums als auch die Forschungsgeräte der beiden Arbeitskreise.

Aus unserer Sicht ist es wichtig, dass die Studierenden, die im Bachelorstudium ein sehr verschultes Programm erfahren haben, nun so früh wie möglich aktiv werden und auch planerisch in ihre Projekte stark mit eingebunden werden. Die Projektberichte werden seit zwei Jahren im Format eines Manuskripts für eine vorher genannte wissenschaftliche Zeitschrift geschrieben. Nach Abrunden durch die betreuenden Promovierenden sind bereits mehrere Publikationen in renommierten Zeitschriften der analytischen Chemie auf Basis dieser Arbeiten erschienen.

### Fazit

■ Nach mehr als 15 Jahren können wir zur Umstellung auf das Bachelor-Master-System ein positives Zwischenfazit ziehen: Die analytische Chemie ist im Studiengang deutlich besser und zeitgemäßer sichtbar geworden. Dadurch, dass auch die vielen Studierenden, die sich nicht auf die analytische Chemie spezialisieren, einen umfassenderen Einblick in die Möglichkeiten der analytisch-chemischen Arbeitskreise erhalten, wurden in den letzten Jahren auch „auf dem kleinen Dienstweg“ über Promovierende zahlreiche Kooperationen zwischen den analytisch-chemischen Arbeitsgruppen und vielen anderen Arbeitsgruppen in den benachbarten Instituten initiiert. Promovierte aus anderen Arbeitsgruppen arbeiten nach ihrem Berufseinstieg auch häufiger als früher auf analytisch-chemischen Stellen, da sie hierfür eine deutlich bessere Basis mitbringen als zu Zeiten des Diplomstudiengangs.

*Uwe Karst und Heiko Hayen,  
Universität Münster*

## Chemie Aktuell

### UV-Breitband-Spektrometer revolutioniert Luftschadstoffanalyse

Eine an der TU Graz entwickelte laserbasierte Technik ermöglicht die kontinuierliche Echtzeitanalyse von Luftschadstoffen.

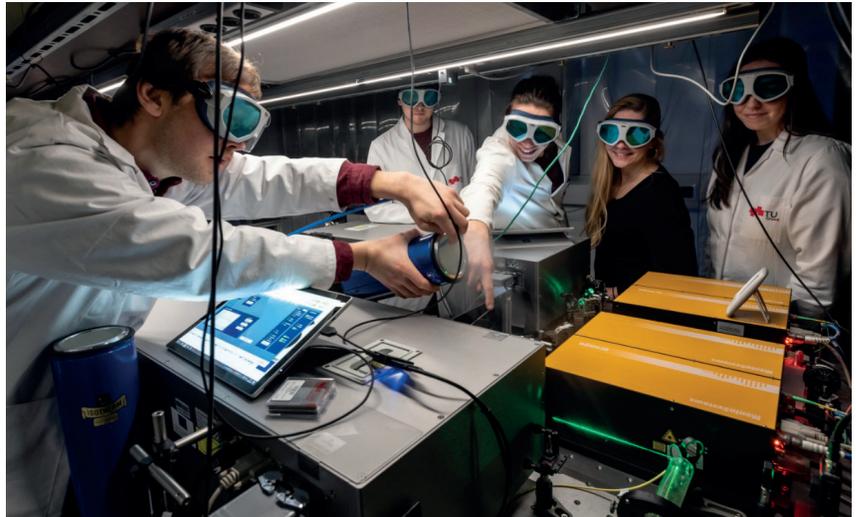
■ Sonnenlicht hat einen großen Einfluss auf chemische Prozesse; vor allem seine energiereiche UV-Strahlung wird von allen Materialien stark absorbiert und löst photochemische Reaktionen von Stoffen in der Luft aus. Ein bekanntes Beispiel ist die Bildung bodennahen Ozons, wenn UV-Licht auf Stickoxide trifft. Ein Forschungsteam um Birgitta Schultze-Bernhardt vom Institut für Experimentalphysik der TU Graz macht sich dieses hohe Reaktionspotenzial nun für eine neue Methode des Umweltmonitorings zunutze: Sie haben das weltweit erste Breitband-UV-Dualkamm-Spektrometer entwickelt, mit dem sich Luftschadstoffe kontinuierlich messen und ihre Reaktion mit der Umgebung in Echtzeit beobachten lassen.

Dualkamm-Spektrometer gibt es seit knapp 20 Jahren. Dabei emittiert eine Quelle Licht in einem breiten Wellenlängenbereich, das in der Darstellung nach seinen optischen Frequenzen geordnet an die Zinken eines Kamms erinnert. Durchdringt dieses Licht eine gasförmige Materialprobe, absorbieren die darin enthaltenen Moleküle einen Teil des Lichts. Die so veränderten Lichtwellenlängen lassen Rückschlüsse auf die Inhaltsstoffe und die optischen Eigenschaften des untersuchten Gases zu.

#### Gasmoleküle rotieren und vibrieren

■ Das Besondere an dem von Birgitta Schultze-Bernhardt entwickelten Spektrometer: Ein Lasersystem emittiert doppelte Lichtimpulse im ultravioletten Spektrum. Wenn dieses UV-Licht auf Gasmoleküle trifft, regt es die Moleküle elektronisch an und versetzt diese zusätzlich in Rotationen und Vibrationen – rovibronische Übergänge –, die bei jedem gasförmigen Stoff einzigartig sind.

Zudem kombiniert das Breitband-UV-Dualkamm-Spektrometer drei Eigenschaften, die gängige Spektrometer bislang nur in Teilen zu bieten hatten:



Das Team um Birgitta Schultze-Bernhardt (2.v.r.) am weltweit ersten Breitband-UV-Dualkamm-Spektrometer (Foto: Lunghammer – NAWI Graz)

- eine große Bandbreite des ausgestrahlten UV-Lichts, wodurch sich viele Informationen über die optischen Eigenschaften der Gasproben mit einer einzelnen Messung sammeln lassen
  - eine hohe spektrale Auflösung, die es in Zukunft auch möglich machen wird, komplexe Gasgemische wie die in unserer Erdatmosphäre zu untersuchen
  - kurze Messzeiten bei der Untersuchung der Gasproben.
- „Dadurch eignet sich unser Spektrometer für empfindliche Messungen, mit denen sich Änderungen von Gaskonzentrationen und der Verlauf chemischer Reaktionen sehr genau beobachten lassen“, erläutert Lukas Fürst, Doktorand in der Arbeitsgruppe „Coherent Sensing“ und Erstautor der Publikation.

#### Entwickelt und getestet am Beispiel Formaldehyd

■ Formaldehyd entsteht beim Verbrennen fossiler Brennstoffe und von Holz ebenso wie in Innenräumen durch Ausdünstungen von Klebstoffen aus Möbeln. „Mit unserem neuen Spektrometer ließen sich Formaldehydemissionen in

der Textil- oder Holzverarbeitenden Industrie oder in Städten mit erhöhtem Smogaufkommen in Echtzeit überwachen und so der Schutz von Personal und Umwelt verbessern“, erläutert Birgitta Schultze-Bernhardt.

Das Spektrometer kann auch auf andere Luftschadstoffe wie Stickoxide und Ozon und weitere klimarelevante Spurengase übertragen werden. Dadurch erhofft sich das Forschungsteam neue Erkenntnisse über deren Wirken in der Atmosphäre. Darauf aufbauend ließen sich neue Strategien ableiten, um die Luftqualität zu verbessern.

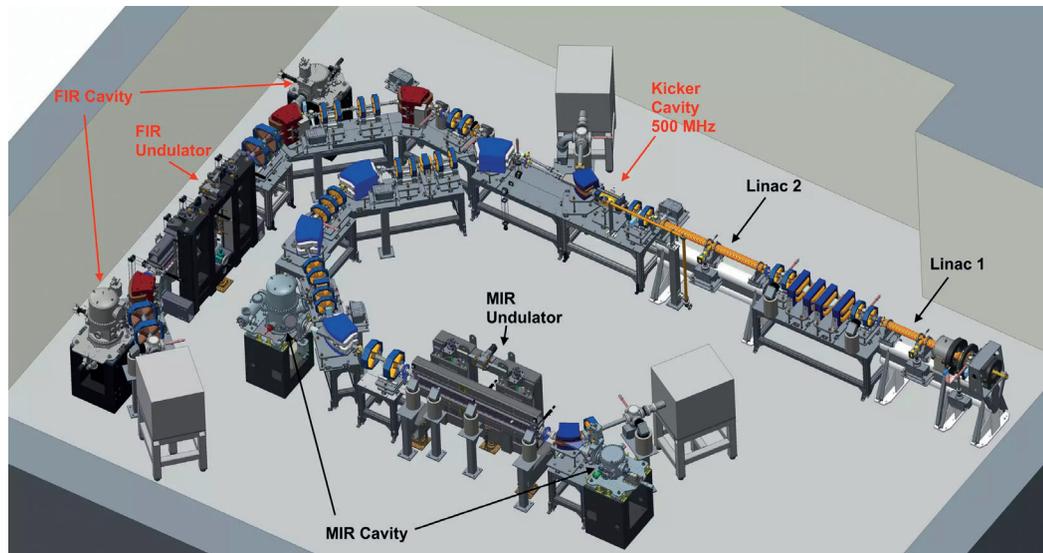
Quelle: TU Graz

Originalpublikation:

L. Fürst, A. Kirchner, A. Eber et al., „Broadband near-ultraviolet dual comb spectroscopy“, *Optica* 2024, 11, 4. doi: 10.1364/OPTICA.516783

## Erstmals Zwei-Farben-Modus eines Infrarot-Freie-Elektronen-Lasers in Betrieb

Neue experimentelle Studien in der physikalischen Chemie, den Materialwissenschaften, der Katalyseforschung bis hin zur Untersuchung von Biomolekülen möglich



Aufbau des 2-Farben-Infrarot-FEL am Fritz-Haber-Institut in Berlin (Foto: FHI)

Am Fritz-Haber-Institut (FHI) der Max-Planck-Gesellschaft in Berlin wurde ein technologischer Meilenstein erreicht. Erstmals ist es gelungen, einen Infrarot-Freie-Elektronen-Laser im Zwei-Farben-Betriebsmodus zu nutzen. Diese weltweit einzigartige Technik ermöglicht Experimente mit synchronisierten Zwei-Farben-Laserpulsen und eröffnet damit neue Möglichkeiten in der Forschung.

Freie-Elektronen-Laser (FEL), von denen es weltweit mehr als ein Dutzend gibt, variieren erheblich in Größe (von wenigen Metern bis zu einigen Kilometern), im Wellenlängenbereich (von Terahertzwellen bis zu harter Röntgenstrahlung) und in den Kosten (von Millionen bis über eine Milliarde). Sie alle produzieren jedoch intensive, kurze Strahlungspulse. Forschende am FHI haben nun in Zusammenarbeit mit US-Partnern eine Methode entwickelt, die es erlaubt, gleichzeitig Infrarotpulse in zwei verschiedenen Farben zu erzeugen. Das ist besonders wichtig, um zeitliche Prozesse in Festkörpern und Molekülen zu untersuchen.

In einem FEL werden Elektronenpakete zunächst durch einen Elektronenbeschleuniger auf sehr hohe kinetische Energien beschleunigt und erreichen dabei nahezu Lichtgeschwindigkeit.

Anschließend durchlaufen die schnellen Elektronen einen Undulator, wo starke Magnetfelder wechselnder Polarität sie auf eine slalomartige Bahn zwingen. Die Oszillationen der Elektronen führen zur Emission elektromagnetischer Strahlung, deren Wellenlänge sich durch Anpassen der Elektronenenergie und/oder der Magnetfeldstärke variieren lässt. Aus diesem Grund können FELs laserartige Strahlung in fast allen Bereichen des elektromagnetischen Spektrums erzeugen, von langwelliger Terahertz- bis kurzwelliger Röntgenstrahlung.

Am Fritz-Haber-Institut ist seit 2012 ein FEL in Betrieb, der intensive, gepulste Strahlung im mittleren Infrarot (MIR) erzeugt, die kontinuierlich von 2,8 bis 50 Mikrometer Wellenlänge durchstimmbare ist. In den letzten Jahren haben Wissenschaftlerinnen und Ingenieure am FHI an einem Zwei-Farben-Ausbau gearbeitet, bei dem ein zweiter FEL-Zweig installiert wurde, der Strahlung im fernen Infrarot (FIR) bei Wellenlängen zwischen 5 und 170 Mikrometern erzeugt. Der FIR-FEL-Zweig umfasst einen neuen Hybrid-Magnet-Undulator, der eigens im FHI gebaut wurde. Des Weiteren wurde hinter dem Elektronen-Linearbeschleuniger (LINAC) eine 500-MHz Kicker-Kavität zur transversalen Ablenkung der Elektronen

installiert. Die Kicker-Kavität kann die Richtung der hochenergetischen Elektronenpakete eine Milliarde Mal pro Sekunde ändern.

Im Juni 2023 demonstrierte das FHI-Team das erste „Lasern“ des neuen FIR-FEL, wobei alle vom LINAC kommenden Elektronenpakete zum FIR-FEL gelenkt wurden. Im Dezember 2023 demonstrieren sie erstmals den Zwei-Farben-Betrieb. Hierbei lenkt das starke oszillierende elektrische Feld, das sich in der Kicker-Kavität bildet, jedes zweite Elektronenpaket nach links und jedes andere zweite nach rechts ab. Auf diese Weise wird der vom LINAC kommende Elektronenpulszug mit hoher Repetitionsrate (1 GHz; 1 Paket pro ns) in zwei Paketzüge mit jeweils halber Repetitionsrate aufgeteilt, von denen einer zum alten MIR-FEL und der andere zum neuen FIR-FEL gelenkt wird. In jedem der beiden FELs lässt sich durch Variation der Undulator-Magnetfeldstärke die Wellenlänge stufenlos um bis zu einem Faktor vier verstellen.

Der neue Zwei-Farben-Modus, der an keiner anderen IR-FEL-Anlage auf der Welt verfügbar ist, wird es ermöglichen, neue Experimente wie MIR/MIR- und MIR/FIR-Pump-Probe-Experimente in Angriff zu nehmen.

Quelle: Fritz-Haber-Institut

## Künstliche Nase durch ultrakurze Lichtpulse

*Eine neue Spektroskopiemethode wurde an der TU Wien entwickelt: Mit Hilfe einer Serie von Lichtblitzen kann man chemische Analysen viel schneller und präziser durchführen als bisher.*

■ Egal, ob man Umweltproben in der Natur analysieren möchte oder ein chemisches Experiment überwacht: Oft braucht man hochempfindliche Sensoren, die mit extremer Genauigkeit selbst winzige Spuren eines bestimmten Gases „erschnüffeln“ können. Oft setzt man dafür Varianten der Raman-Spektroskopie ein: Unterschiedliche Moleküle reagieren auf ganz charakteristische Weise auf Licht unterschiedlicher Wellenlängen. Wenn man eine Probe mit dem passenden Licht bestrahlt und genau misst, auf welche Weise das Licht von der Probe verändert wird, kann man herausfinden, ob die Probe ein bestimmtes Gas enthält oder nicht.

An der TU Wien gelang nun ein bedeutender Schritt nach vorne: Forschende entwickelten eine neue Methode, passendes Licht für solche Experimente zu erzeugen und exakt zu kontrollieren. Dadurch ist nun nicht nur eine viel höhere Genauigkeit möglich als bisher, die Methode funktioniert außerdem auch ohne bewegliche Teile und arbeitet daher viel schneller als die bisher besten Technologien.

### Stimulierte Raman-Emission: Wackelnde Atome

■ Basis der neuen Technik ist die stimulierte Raman-Emission – ein quantenphysikalischer Prozess, an dem mehrere Photonen gleichzeitig beteiligt sind. Man bestrahlt eine Probe mit Licht, das aus zwei geringfügig unterschiedlichen Wellenlängen besteht. Ein Molekül der Probe kann somit gleichzeitig von zwei Photonen getroffen werden, die geringfügig unterschiedlich viel Energie haben. Dann kann es passieren, dass aus dem energiereichen und dem energieärmeren Photon zwei energieärmere Photonen werden – die verbleibende Energiedifferenz führt dazu, dass das Molekül plötzlich ein bisschen mehr Energie hat. Die Atome des Moleküls können so zum Beispiel zum Wackeln oder Rotieren angeregt werden.

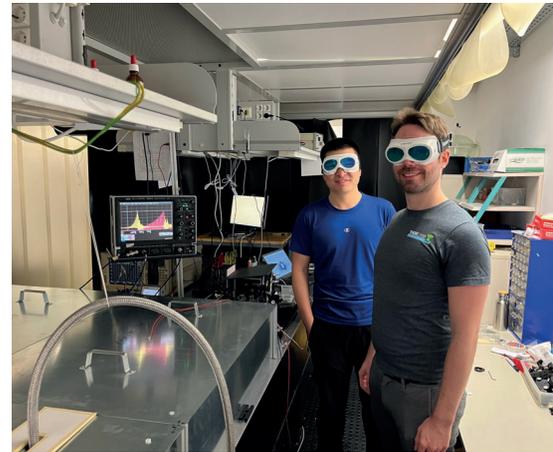
Das bedeutet, dass die Zahl der energiereicheren Photonen sinkt, und die

Zahl der energieärmeren Photonen steigt. Daran lässt sich erkennen, dass sich das gesuchte Molekül in der Probe befindet. „Normalerweise ist das ein mühsamer Prozess“, erklärt Hongtao Hu vom Institut für Photonik der TU Wien, Erstautor des Papers. „Man muss sorgfältig eine Wellenlänge nach der anderen ausprobieren – zum Beispiel, indem man den Lichtstrahl auf einen Kristall richtet und dann den Kristall langsam dreht oder seine Temperatur ändert, sodass die Probe im Lauf der Zeit von vielen unterschiedlichen Wellenlängen getroffen wird.“

### Femtosekundenlaserpulse

■ An der TU Wien arbeitete die Arbeitsgruppe von Andrius Baltuska seit Jahren gemeinsam mit Xinhua Xie (SwissFEL am Paul Scherrer Institut, Schweiz) und Alexei Zhletikov (Texas A&M University, USA) daran, das Raman-Spektrum mit ganz speziellen Lichtquellen zu messen. Das Team von Andrius Baltuska hatte bereits seit Jahren an dieser speziellen Lichtquelle gearbeitet. Hongtao Hu zeigte nun unter anderem durch umfangreiche Computersimulationen, dass damit eine viel höhere Präzision zu erreichen ist als mit herkömmlichen Methoden. „Wir produzieren nicht nur eine Wellenlänge, sondern eine Serie ultrakurzer Lichtpulse“, erklärt Andrius Baltuska. „Jeder dieser Pulse hat eine Dauer im Bereich von Femtosekunden.“

Diese Lichtpulsserien haben nicht eine bestimmte Wellenlänge – sie setzen sich aus vielen verschiedenen Wellenlängen zusammen. Entscheidend ist nun die Phase der Lichtwellen, also die Position von Wellenbergen und Wellentälern. „Indem wir die Phase verändern, können wir all diese Wellenlängen, aus denen der Puls besteht, gleichzeitig ein bisschen verschieben“, sagt Hongtao Hu. „Bei ganz bestimmten Wellenlängen erhält man dann ein Raman-Signal, bei anderen nicht. Wir können mit unserer Methode also auf sehr elegante Weise einen bestimmten Wellenbereich



*Hongtao Hu und Vinzenz Stummer arbeiten an künstlichen Nasen. (Foto: TU Wien)*

untersuchen, ohne dabei irgendwelche beweglichen Teile einstellen zu müssen. Auf diese Weise kann man im Prinzip unterschiedlichste Moleküle voneinander unterscheiden.“

Hongtao Hu zeigte: Je länger die Serie von Lichtpulsen, desto höher die Präzision: „Man kann mit einer Serie aus vielen Einzelpulsen somit eine deutlich höhere spektrale Auflösung erreichen als bisher“, sagt Hongtao Hu. Im Prinzip lassen sich so also auch Raman-Übergänge voneinander unterscheiden, die von unterschiedlichen Molekülen kommen, deren Signale mit bisherigen Techniken aber fast exakt gleich aussehen. Anwendungsmöglichkeiten der neuen Technik reichen von Umwelanalytik bis zur Qualitätssicherung in der chemischen Industrie.

*Quelle: TU Wien*

#### Originalpublikation:

H. Hu, T. Flöry, V. Stummer et al., „Hyper spectral resolution stimulated Raman spectroscopy with amplified fs pulse bursts“, *Light: Science & Applications* 2024, 13.  
doi: 10.1038/s41377-023-01367-0

# Deutsche Analysen-, Bio- und Labortechnik verzeichnet Umsatzrückgang mit Lichtblicken

*KI bietet neue Chancen*

■ Nach Angaben des Deutschen Industrieverbands Spectaris erwirtschaftete die deutsche Analysen-, Bio- und Labortechnik im Geschäftsjahr 2023 einen Umsatz von 11,22 Milliarden Euro. Das entspricht einem nominalen Minus gegenüber dem Vorjahr von 4,2 Prozent. Insbesondere das internationale Geschäft gestaltet sich schwierig: Der Auslandsumsatz lag 2023 mit 5,96 Milliarden Euro um 6,8 Prozent unter dem Vorjahresniveau. Auch das Inlandsgeschäft war leicht rückläufig und sank um 0,8 Prozent auf 5,26 Milliarden Euro. Aufgrund der schwachen Geschäftsentwicklung ging auch die Zahl der Beschäftigten der rund 330 Betriebe zurück: Mit 52.600 Mitarbeitenden lag sie um 0,7 Prozent unter dem Jahreswert 2022.

Für das Jahr 2024 wird eine Erholung und Rückkehr auf den Wachstumspfad erwartet: So rechnet der Industrieverband für das Geschäftsjahr 2024 mit

einem Umsatzplus der deutschen Hersteller von nominal rund fünf Prozent, was einem Gesamtumsatz von dann 11,76 Milliarden Euro entsprechen würde. Auch die Prognosen für das weitere Marktwachstum sorgen für Lichtblicke: Die Marktforschungsgesellschaft Strategic Directions International (SDI) rechnet bis 2027 mit einem jährlichen Wachstum des Weltmarktes für Analysen-, Bio- und Labortechnik von 5 Prozent.

„Auch in der deutschen Industrie für Analysen-, Bio- und Labortechnik ist der Exportmotor im vergangenen Jahr ins Stottern geraten“, erklärt Mathis Kuchejda, Vorsitzender der Analysen-, Bio- und Labortechnik bei Spectaris. „Neben der globalen Konjunkturschwäche hat sich in den Life Sciences ein Rückgang pandemiebezogener Produkte bemerkbar gemacht, und im Pharma-/Biotechnologiesektor sowie in anderen Kundenmärkten führte eine schwache

Investitionsbereitschaft zu geringen Ausgaben.“ Neben den Kostensteigerungen belasteten vor allem Hürden beim Export und der erneut gestiegene Bürokratieaufwand die Unternehmen.

Ein enormes Potenzial entfalten die Digitalisierung und insbesondere das Thema Künstliche Intelligenz. Die neue Publikation „Künstliche Intelligenz im Labor“ von Spectaris und der Messe München zeigt, dass 82 Prozent der Hersteller eher die Vorteile und Chancen als die Nachteile und Risiken Künstlicher Intelligenz im Labor sehen.

Seit Dezember 2023 ist auch der von Spectaris ins Leben gerufene Laboratory and Analytical Device Standard (LADS) frei verfügbar. LADS stellt sicher, dass alle Laborgeräte und daran angeschlossene Anwendungen eine gemeinsame Sprache sprechen und sich schnell und kostengünstig vernetzen können.

*Quelle: Spectaris*



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](http://www.gdch.de/inhouse)

## Medien

### ABC in Kürze

Neuigkeiten rund um Analytical and Bioanalytical Chemistry

#### ABC unterwegs

■ Im April konnten Sie ABC, ihre Herausgeber und Mitglieder des International Advisory Boards in München auf der analytica conference treffen. Wir danken vor allem Günter Gauglitz, der als ehemaliger Herausgeber und derzeitiges Mitglied des International Advisory Boards zusammen mit Kolleginnen und Kollegen sowie der Fachgruppe die folgenden Sessions organisierte:

- Trends in Analytical & Bioanalytical Chemistry: Towards self-driving labs (mit Detlev Belder, Leipzig; Seite 16)
- Trends in Analytical & Bioanalytical Chemistry: Lateral Flow Chips (mit Günther Proll, Reutlingen; Seite 20)
- Trends in Analytical & Bioanalytical Chemistry: Miniaturized Biosensors for Clinical Diagnostics (mit Larysa Baraban, Dresden-Rossendorf; Seite 19)

Alle drei Sessions trafen die Kernthemen der Messe analytica wie Methoden der Künstlichen Intelligenz und des maschinellen Lernens in Kombination mit der Automatisierung für das Self-driving-Lab-Konzept.

Im weiteren Verlauf des Jahres freuen sich ABC-Herausgeberteam und Redaktion auf gute Vorträge und anregende Gespräche bei:

- MIP2024 – 12. International Conference on Molecular Imprinting, 19.-21. Juni, Verona, Italien
- SEQA 2024 – XXIV Reunión de la Sociedad Española de Química Analítica, 1.-3. Juli, Zaragoza, Spanien
- ESEAC 2024 – 19. International Conference on Electroanalysis, 23.-26. Juli, Ulm
- ISSS 2024 – 28. International Symposium on Separation Science, 22.-25. September, Messina, Italien

#### Neues aus den Rubriken

■ Im April gab es wieder ein neues Rätsel aus der Reihe der Analytical Challenges. Autor ist Reinhard Meusinger, und die Aufgabe vergleicht die Wahrschein-



Nach Tag 1 der analytica conference mit hervorragendem Vortragsprogramm trafen sich Mitglieder des Editorial Boards von ABC. Von links: Natalia Ivleva, Torsten C. Schmidt, Ulrich Panne, Günter Gauglitz, Jiri Barek und Nicola Oberbeckmann-Winter. (Foto: N. Oberbeckmann-Winter)

lichkeit in der NMR-Spektroskopie mit einem vorbeifliegenden Raumschiff: „A passing spaceship NMR challenge“<sup>1)</sup> Einreichungsdatum für die Lösung ist der 1. Juli.

Einen Überblick über alle Beiträge der Rubrik finden Sie unter [https://bit.ly/ABC\\_Columns](https://bit.ly/ABC_Columns).

#### ABC in der Jahresmitte: Themenschwerpunkte

- „Luminescent nanomaterials for biosensing and bioimaging“: als Gastherausgeber arbeiteten mit ABC für diese Collection Li Shang (CN), Chih-Ching Huang (TW) und Xavier Le Guével (FR).
- „Emerging trends in electrochemical analysis“ – die ABC-Herausgeber:innen Sabine Szunerits (FR), Wei Wang (CN) und Adam Woolley (US) präsentieren Entwicklungen in der elektrochemischen Analytik mit einer abwechslungsreichen Mischung von Übersichtsartikeln und wissenschaftlichen Originalbeiträgen.

Im Spätsommer folgen weitere Schwerpunkte, ein Besuch auf der ABC-Homepage lohnt sich jederzeit ([www.springer.com/abc](http://www.springer.com/abc)).

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) doi: 10.1007/s00216-024-05210-2
- 2) [https://bit.ly/ABC\\_ReviewsTrends2024](https://bit.ly/ABC_ReviewsTrends2024)



Das Cover von Heft 9 zeigt eine Wortwolke basierend auf den Beiträgen der Collection „Advances in (Bio-)Analytical Chemistry: Reviews and Trends Collection 2024“.

#### So lesen Sie ABC online

■ Alle ABC-Ausgaben und Topical Collections sind online unter: [www.springer.com/abc](http://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](http://www.gdch.de) / MyGDCh / Fachgruppen exklusiv / FG Analytische Chemie

### Position als Weltleitmesse der Laborbranche untermauert

*Neuer Teilnehmerrekord bei der analytica conference*

■ Glänzende Stimmung in den Messehallen, lebhafte Gespräche und volle Gänge zeichneten die analytica 2024 aus, bei der sich vom 9. bis 12. April die internationale Laborbranche in München traf. 1066 Aussteller zeigten auf der Weltleitmesse den rund 34 000 Besuchern ihre Innovationen für das ganze Spektrum der Labortechnik, Analytik und Biotechnologie. Viel diskutierte Themen an den Ständen sowie im umfangreichen Konferenz- und Rahmenprogramm waren Lösungen für das digitale und nachhaltige Labor.

„Mit unseren Angeboten zu Digitalisierung, KI und Nachhaltigkeit haben wir einen Nerv getroffen, die jeweiligen Foren- und Konferenzprogramme waren sehr gut besucht. Damit ist unser Konzept, der Branche Orientierungswissen zu vermitteln, auch zur diesjährigen analytica voll aufgegangen“, freut sich Susanne Grödl, Deputy Exhibition Director der analytica. Dicht gedrängtes Publikum und volle Ränge auf der Sondertribüne gab es beim Live Lab, bei dem dreimal täglich gängige Laborprozesse präsentiert wurden. Auf der Sonderschau Digital Transformation konnten Interessierte ebenfalls mehrmals täglich das smarte Labor der Zukunft erleben und ausprobieren. Die beiden Sonderschauen zogen zusammen rund 3500 Zuschauer an.

Ein weiterer Publikumsmagnet war das Forum Arbeitsschutz und -sicherheit, das anhand explosiver Live-Demonstrationen anschaulich die Gefahren der täglichen Laborarbeit zeigte und einen besonderen Fokus auf den Umgang mit Lithium-Ionen-Akkus legte. Riesiger Andrang herrschte beim Jobday am letzten Messetag. Dort bekamen Studienabgänger und Young Professionals in Vorträgen Informationen zu beruflichen Perspektiven in der Branche sowie die Gelegenheit, potenzielle Arbeitgeber kennenzulernen.

Die analytica conference verzeichnete dieses Jahr mit 2225 Teilnehmenden



Rund 34 000 Besucher aus 117 Ländern kamen zur analytica 2024. (Alle Fotos: Messe München)

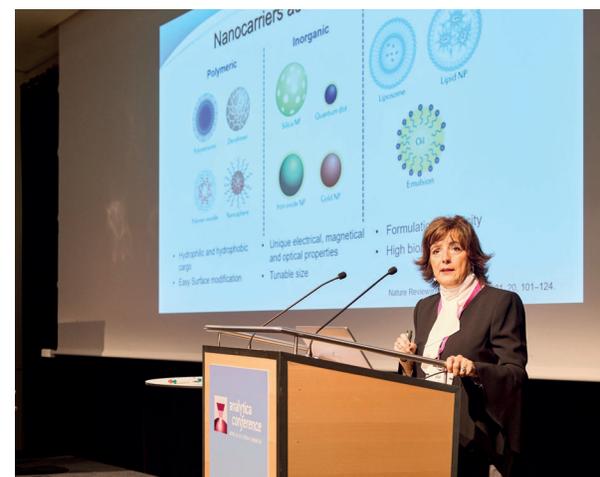
einen neuen Rekord. Besonders voll waren die Zuhörerreihen bei den Sessions zu Nachhaltigkeitsthemen, KI in der Diagnostik und Forensik. „Wie schon in der Vergangenheit zeichnete sich die analytica conference wieder durch über 180 hochkarätige Vorträge und vielfältige analytische Themengebiete aus und bildete so eine optimale Ergänzung zum Ausstellungsbereich“, resümiert Oliver J. Schmitz von der Universität Duisburg-Essen. Neben den Top-Themen der Branche befasste sich das Vortragsprogramm auch mit dem interdisziplinären Potenzial der Analytik, beispielsweise bei der Analyse alter Ölgemälde, in der Archäometrie oder bei der Aufklärung von Kriminalfällen.

1066 Aussteller reisten aus 42 Ländern und Regionen an, 53 Prozent davon aus dem Ausland. Die Top-Ten-Ausstellerländer waren nach Deutschland (in dieser Reihenfolge): China, USA, Italien, Großbritannien und Nordirland, Schweiz, Niederlande, Frankreich, Südkorea, Indien und Österreich. Es kamen rund 34 000 Besucher aus 117 Ländern und Regionen, der Auslandsanteil lag bei etwa 39 Prozent. Die Top-Ten-Besuchlerländer waren nach Deutschland

(in dieser Reihenfolge): Österreich, Schweiz, Italien, Großbritannien und Nordirland, Frankreich, Niederlande, China, Spanien, USA und Polen.

Die nächste analytica findet mit der analytica conference vom 24. bis 27. März 2026 statt.

*Quelle: Messe München*



Bei der analytica conference referierten hochkarätige Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus aller Welt (hier Maria Montes-Bayón) drei Tage lang über die wissenschaftlichen Top-Themen der Branche.

## Sessions auf der analytica conference 2024

### Lebensmittelanalytik

*Novel Threats to Food Safety – Analytical Concepts*

*Chair: Michael Rychlik*

*Foodomics: Omics Approaches for Food Chemistry*

*Chair: Philippe Schmitt-Kopplin*

■ Im ersten Symposiumsteil zur Lebensmittelsicherheit referierten Redner über die Detektion von Mykotoxinen und ihrer Metabolite in Urin (Milena Stranska, University of Chemistry and Technology, Prag, CZ), über die Bestimmung ichtyotoxischer Kontaminanten in Fischen (Elisabeth Varga, University of Veterinary Medicine, Wien, A), über Pyrrolizidinalkaloide und Tropanalkaloide (Florian Kaltner, University of Vienna, Wien, A) und über per- und polyfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS, Mark Bücking, Fraunhofer-Institut für Molekularbiologie und Angewandte Ökologie, IME).

Die Foodomics-Session behandelte die Themen Metabolomics zur Untersuchung der Weinadaptation an den Klimawandel (Régis Gougeon, Université de Bourgogne, F), Lebensmittelintegrität durch moderne Lipidanalyse (Simon Hammann, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg), neuroprotektive Verbindungen aus Lebensmittelabfallströmen (Gerardro Álvarez-Rivera, Spanish National Research Council, E) sowie Biomarker für den Verzehr von Milchprodukten durch Volatilomics (Pascal Fuchsmann, Agroscope Federal Departement of Economic Affairs, Education & Research EAER, CH).

Beide Sessions waren gut besucht und erfreuten sich reger Diskussionen. Hinsichtlich des Zuschauerzuspruchs stach der PFAS-Vortrag von Mark Bücking hervor: Es mussten einige der 70 Zuhörer stehen. Dies lag sicher an den hochaktuellen Diskussionen um das ubiquitäre Vorkommen dieser Stoffklasse und dem derzeit von der Europäischen Chemikalienagentur (ECHA) vorgeschlagenen Produktionsverbot. Mark Bücking beeindruckte das Auditorium

zunächst mit der neuesten Schätzung, dass über 6,3 Millionen Einzelverbindungen existieren, die als PFAS analytisch zu erfassen wären. Dieser Herausforderung begegnet sein Institut mit dem hauseigenen direct total oxidizable precursor (dTOP) assay: Dieser führt PFAS-Vorläuferverbindungen auf die entsprechenden Perfluorcarbonsäuren zurück und kann sie daher einigermaßen miterfassen. Von den Projekten des IME stellte Mark Bücking die Erfassung der PFAS-Belastung am Hotspot Rastatt vor, Untersuchungen aus der am IME angesiedelten Umweltprobenbank und eine Studie zu Polarfüchsen in Island.

*Michael Rychlik,  
Technische Universität München,  
Freising*

### A Dream Comes True: Fantastic News from Analytical Chemistry (Part 1 – 3)

*Chair: Oliver J. Schmitz*

■ Die Session begann mit der Verleihung des Eberhard-Gerstel-Preises an Anish Das von der Universität Leipzig (Seite 32).

Im Anschluss trug Marleen Vetter von Bruker Daltonics über ein neues Flugzeitmassenspektrometer (ecTOF) mit zwei Ionisationsquellen vor, das sowohl Elektronenionisation (EI) als auch chemische Ionisation (CI) quasi gleichzeitig nutzt. Der Vorteil quasi-simultan erzeugter EI- und CI-Massenspektren ist, dass sich Kontaminanten in komplexen Umweltproben (zum Beispiel Abwasser) besser identifizieren lassen. Dabei zeigen sich eine verringerte Falsch-Positiv-Rate und eine höhere Identifizierungsausbeute im Vergleich zu Standard-Chromatographie-Massenspektrometriemethoden (GC-MS).

Juan Liang-Schenkelberg von Agilent Technologies demonstrierte, wie die Feed-Injektion starke Lösungsmittelfeffekte in der LC- oder LC/MS-Analyse

reduzieren kann. Im Vergleich zu den klassischen Maßnahmen (zum Beispiel Verdünnen der Probe, geringeres Injektionsvolumen), die sich auf die Empfindlichkeit auswirken, reduziert die vorgestellte Technik stattdessen den starken Lösungsmittelleffekt automatisiert, indem die Probe kontinuierlich in den Fluss der mobilen Phase injiziert wird. Juan Liang-Schenkelberg demonstrierte die Feed-Injektion anhand von Anwendungsbeispielen aus der Lebensmittelsicherheit (Pestizide in Früchten) und der PFAS-Analyse.

Tim Causon von der BOKU aus Österreich sprach über die nächste Generation der SLIM-basierten Ionenmobilitäts-MS (SLIM-MS), die sich durch eine sehr hohe Auflösung über den ganzen Massenbereich auszeichnet. Er hat Phytosiderophorisomere mit SLIM-MS analysiert und dabei die anspruchsvollen Siderophorisomere wie epi-HDMA-HDMA und epi-HMA-HMA getrennt, was mit zum Beispiel Driftröhren-Ionenmobilitäts-Massenspektrometrie (DTIMS) nicht möglich war.

Frank Steiner von Thermo Fisher berichtete über intelligente Multi-Flow-Path-Lösungen, um Biopharmazeutika zu charakterisieren. Er stellte drei Systeme vor, darunter das Vanquish Tandem LC-System: Mit ihm lässt sich der Probendurchsatz optimieren, indem Spül- und Equilibrierungsschritte zeitgleich zur Messung erfolgen können. Das zweite System namens Transcend VLX-2 ermöglicht gestaffelte Analysen mit bis zu vier Säulen, die an ein einziges Massenspektrometer gekoppelt sind. Das dritte System namens Vanquish Duo UHPLC basiert auf zwei separaten Flusswegen und zwei Detektoren und verdoppelt so den Durchsatz, beschleunigt die Methodenentwicklung und ermöglicht eine gründlichere Probencharakterisierung.

Nach der Mittagspause sprach Thomas Bocklitz von der Universität Jena darüber, wie sich mit maschinellem Lernen (ML) aus Raman-Spektren übergeordnete Informationen wie Analytkonzentrationen oder diagnostische Marker vorhersagen lassen. Dabei stellte er dar, welche Herausforderungen

kleine Probengrößen für solche komplexe Fragestellungen bei Benutzung von ML-Modellen sind, um Daten zu beurteilen.

Luigi Mondello von der Universität Messina in Italien zeigte faszinierende Möglichkeiten der ultraschnellen Gaschromatographie. So ist es insbesondere durch Beibehalten eines hohen Phasenverhältnisses durch Kapillaren mit einem Innendurchmesser von 0,1 mm möglich, Effizienz und Auflösung zu erhalten und dabei die Analysen in weniger als zwei Minuten durchzuführen. Abschließend zeigte er erste Ergebnisse auf Prototypensäulen mit einem Innendurchmesser von 50 µm.

Robert Plumb vom Imperial College in London (UK) sprach über die Entwicklung der Hochdurchsatz-LC-MS, um Studien zur Arzneimittelforschung zu unterstützen. In seinem Vortrag ging er auf die Fortschritte ein, die die miniaturisierte LC und die Hochdurchsatzanalytik in Bezug auf Qualität und Sensitivität für die auf LC-MS basierende Omics- und Arzneimittelforschung sowie -entwicklung gebracht haben. Abschließend zeigte er, wie neue Technologien, zum Beispiel vakuumummantelte Säulen (VJC), das Beste aus beiden Welten – Geschwindigkeit und Leistung – bieten können. Durch die direkte Kopplung der VJC mit der Ionenquelle lassen sich im Vergleich zur konventionellen UHPLC schmalere Peaks und bessere Auflösungen erreichen.

Tobias Werres vom IUTA in Duisburg beschäftigte sich mit dem Fused Layer Modeling (FLM) und der Zwei-Photonen-Polymerisation (2PP). Er stellte Anwendungen des 3-D-Drucks in der analytischen Gerätetechnik vor, bis hin zum weitgehend selbst gedruckten LC-WLD-System. Das ebenfalls vorgestellte „Printlab“ fokussiert sich auf die additive Fertigung von Mikrofluidikchips, die in der Lage sind, verschiedene Grundfunktionen durchzuführen. Werres sprach sich dafür aus, den 3-D-Druck in weiteren Laboren zu etablieren, da er unter geringem Aufwand und Kosten viele Möglichkeiten bietet, hochflexible Lösungen zu realisieren.

Sebastiaan Eeltink von der Freien Universität Brüssel (Belgien) trug über die dreidimensionale Flüssigchromatographie (3D-LC) vor, die ein enormes

Auflösungsvermögen innerhalb sehr kurzer Analysezeit ermöglichen soll. Dabei diskutierte er die komplizierten Designaspekte und das Prototyping integrierter mikrofluidischer Chips für räumliche 3D-LC. Darüber hinaus stellte er einen robotergestützten Ansatz vor, um den Chip mit der massenspektrometrischen Detektion zu verbinden.

Derek Stein von der Brown University (USA) beschrieb eine Nanoporen-Ionenquelle, die Aminosäure- und kurze Peptidionen aus einer wässrigen Lösung direkt in ein Hochvakuum emittiert. Die Nanoporenquelle überträgt Ionen außerordentlich effizient, was die Tür zu Einzelmolekülproteomanalysen einschließlich Sequenzierung öffnen könnte.

Den Abschlussvortrag der Session hielt einer der Begründer der Mikrofluidik, Takehiko Kitamori von der National Tsing Hua University in Taiwan. Er stellte Einsatzmöglichkeiten für Mikro- und Nanofluidikchips vor, um einzelne lebende Zellen zu analysieren, und präsentierte fertige Lösungen für Immunoassays wie ELISA sowie eine Vorrichtung für Single-Cell-Proteomics. Weiterhin präsentierte Kitamori ein Mikrochip-basiertes Reaktionssystem, mit dem sich ein Arzneistoff kontinuierlich synthetisieren lässt. Konkret befindet sich dieses System im Aufbau zur großtechnischen Umsetzung durch ein Numbering-up – im Gegensatz zum Upscaling gibt es hier keine Nachteile in der Reaktortechnik im Stoff- oder Wärmetransport.

In dieser Session wurden tatsächlich wirklich traumhafte Ergebnisse rund um die analytische Chemie gezeigt, die die unglaubliche Vielfalt unseres Fachs widerspiegeln.

*Oliver J. Schmitz,  
Universität Duisburg-Essen*

## Electroanalysis at the Forefront: Emerging Trends and Innovations

*Chair: Frank-Michael Matysik*



*Vortragende nach der Elektroanalytik-Session: Jiri Barek, Kristina Tschulik, Frank-Michael Matysik, Alberto Escarpa (von links) (Foto: T. Herl, Regensburg)*

■ Eine Nachmittagsveranstaltung des ersten Konferenztags war den elektroanalytischen Methoden gewidmet. Die Vortragsbeiträge zeigten die Elektroanalytik als international aktives Forschungsgebiet mit breitem Raum für neue methodische Entwicklungen und Anwendungen.

Im Eröffnungsbeitrag „Novel electrode materials and arrangements for voltammetry and amperometry“ veranschaulichte Jiri Barek (Prag, CZ), dass – aufbauend auf der langen Tradition der Elektroanalytik – neue Elektrodenmaterialien attraktive Möglichkeiten bieten, um voltammetrische Methoden weiterzuentwickeln und anzuwenden. Die Vor- und Nachteile von Amalgamelektroden, poröser Silberelektroden, diverser Kompositelektroden sowie Bor-dotierter Diamantelektroden wurden anhand praxisrelevanter Anwendungen für die Umwelt- und Bioanalytik diskutiert.

Alberto Escarpa (Madrid, E) gab in „Tailored low-cost electrochemical microfluidics for bioanalysis“ einen Einblick in die Entwicklungen kostengünstiger elektroanalytischer Sensorplattformen. Fokus des Vortrags lag auf mikrofluidischen elektrochemischen Systemen,

bei denen komplementäre Techniken wie papierbasierte Mikrofluidik und 3-D-Druck kombiniert werden, um anwenderfreundliche maßgeschneiderte Analysensysteme zu entwickeln.

Kristina Tschulik (Bochum) gab mit „Advanced electrochemical methods to guide the design of electrocatalysts“ einen Überblick über methodische Möglichkeiten, nanostrukturierte Elektrodenmaterialien mit elektrokatalytischen Eigenschaften zu charakterisieren. Sie stellte neue Ansätze elektrochemischer Untersuchungsmethoden für einzelne Nanopartikel vor. Diese neuen analytischen Methoden werden für künftige Entwicklungen katalytisch aktiver Materialien wertvolle Impulse geben.

Im abschließenden Vortrag sollte Soodabeh Hassanpour (Olomouc, CZ) in „Biomedical applications of electrochemical biosensors based on functional (bio) nanomaterials“ die Thematik der Nanomaterialien in der Elektrochemie weiterführen und im Kontext der Biosensorik diskutieren. Leider konnte sie aufgrund von Visaproblemen nicht an der analytica conference teilnehmen.

*Frank-Michael Matysik,  
Universität Regensburg*

## Trends in Analytical & Bioanalytical Chemistry: Towards Self-driving Labs

*Chairs: Detlev Belder und Günter Gauglitz*

■ Die Session thematisierte die fortschreitende Entwicklung und den aktuellen Stand autonom operierender Chemielabore. Dabei beleuchtete sie sowohl mikrochemische Module und Schaltkreise der Lab-on-a-Chip-Technologie als auch die Herausforderung im datenwissenschaftlichen Bereich, wie das Erfüllen der FAIR-Prinzipien.

Detlev Belder (Universität Leipzig) griff in seinem Vortrag den Titel der Session auf und stellte integrierte miniaturisierte Synthese- und Analysensysteme als Schlüsseltechnologie KI-gesteuerter autonomer chemischer Maschinen vor. Hierzu führte er als Beispiel die digitale Mikrofluidik an, bei der flüssige

Reaktanden – in Form von Tropfen durch elektrische Felder bewegt – gemischt und möglicherweise einer massenspektrometrischen Detektion zugeführt werden. Als weitere Möglichkeit zum hochdurchsatzfähigen Screening möglichst vieler individueller Einzelreaktoren stellte er die Tröpfchenmikrofluidik vor. Bei dieser werden beispielsweise Einzelzellen verkapselt und durch Phasengrenzen voneinander abgeschlossen, während sich die in den Tröpfchen ablaufenden Reaktionen in Echtzeit überwachen lassen. Weitere Möglichkeiten der Lab-on-a-Chip-Technik wurden anhand eines Multimikroreaktionssystems mit integrierter Analytik präsentiert, mit einem hohen Maß an Automation und Parallelisierung bei gleichzeitig hoher Kontrolle über die Reaktionsparameter.

Simon Pfeiffer (Agilent Technologies) sprach darüber, wie sich Analytikdaten einer weiteren Nutzung zuführen lassen. Durch den enormen Informationsgehalt von beispielsweise Chromatographie-daten bieten sich diese als praktisches Anwendungsgebiet für eine automatisierte Auswertung jenseits der meist üblichen, überschaubaren Parameter an. Eine Einschränkung ist hierbei bislang die fehlende Kompatibilität – sowohl zwischen proprietären Dateiformaten unterschiedlicher Hersteller als auch zu in Data Science gebräuchlichen Formaten und Arbeitsabläufen. So ist der ETL-Prozess (Extrahieren, Transformieren, Laden) meist mühsam und eine zentrale Verwaltung der so gewonnenen Datensätze in einem Repository bisher wenig verbreitet. Vorgestellt wurden offene Formate, die hier zu einer Lösung beitragen können und die Prozesse effizienter gestalten. Anhand von Beispielen wurden mögliche ETL-Pipelines und deren Herausforderungen dargestellt.

Ein dazu nah verwandtes Thema sprach Thorsten Teutenberg (IUTA Duisburg) an: Die Automation von Laboren erfordert neben der hard- und softwareseitigen Interoperabilität von Systemen auch, dass manuelle Arbeitsschritte möglichst stark reduziert werden, um qualifiziertes Laborpersonal von repetitiven Aufgaben zu entlasten. Das Konzept der flexiblen Laborautomatisierung basiert auf einem intuitiven „No-Code“-Ansatz, der Automations-

Templates nutzt und dadurch auch ohne tiefgreifende Programmierkenntnisse die Automation analytischer Workflows durch einen Domänenexperten ermöglicht. Ergänzt wird dieses Konzept durch Low-Cost-Fertigungsmöglichkeiten wie den 3-D-Druck für die schnelle und effiziente Fertigung von Peripherieteilen im Rahmen des Rapid Prototyping.

Zum Abschluss der Session gab Petra Dittrich (ETH Zürich, Schweiz) einen Überblick über eine weitere Technik zum Hochdurchsatzscreening, welche die Möglichkeiten der Tröpfchenmikrofluidik mit miniaturisierten Multi-Well-Platten kombiniert: Tausende wässrige, typischerweise Pico- bis Nanoliter große Tropfen werden dabei auf einer Glasoberfläche platziert, auf der definierte hydrophobe und hydrophile Zonen existieren. Diese Tropfen lassen sich durch Benetzen mit einem fluoridierten Öl über mehrere Tage stabilisieren, jedoch bei Bedarf auch nachträglich verändern. Durch die massiv erhöhte Dichte solcher Tropfen auf gleicher Grundfläche sowie das Fehlen der Trennwände replizieren diese die Funktionen konventioneller Systeme oder bieten vollkommen neue Funktionalitäten. So ist es in Verbindung mit einem automatisierten Spotting-System beispielsweise möglich, einen chemischen Gradienten aufzutragen, über den sich konzentrationsabhängige Reaktionsverläufe feinstufig überwachen lassen. Angewendet wurde ein solches System beispielsweise in der Proteinanalytik, beim Bestimmen posttranslationaler Modifikationen sowie bei der Überwachung der Biosynthese eines Enzyms, sowohl mit einem fluorogenen Assay als auch mit der Massenspektrometrie.

Die von Detlev Belder und Günter Gauglitz geleitete Reihe machte deutlich, dass visionäre Ideen inzwischen konzeptionell realisiert sind. Miniaturisierung, Parallelisierung, Automation und das Beherrschen großer Datenmengen sind Zukunftsthemen mit mannigfaltigen Herausforderungen. Einen hohen Stellenwert nimmt hierbei die Standardisierung von Datenformaten und Kommunikationsschnittstellen ein, um echte Künstliche Intelligenz im analytischen Labor der Zukunft integrieren zu können.

*Klaus Welters, Universität Leipzig*

## Sessions zur forensischen und toxikologischen Chemie

Das gemeinsame Symposium der Gesellschaft für Toxikologische und Forensische Chemie (GTFCh) und der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) umfasste drei je zweistündige Sessions: „Dried Matrix Spots: Sampling Techniques and Application for Forensic and Clinical Toxicology“, „News on (Phyto-)Cannabinoids“ und „Exceptional and Emerging Compounds in Forensic and Clinical Toxicology“.

Chair: Dirk K. Wissenbach

### Dried Matrix Spots: Sampling Techniques and Application for Forensic and Clinical Toxicology

■ Laura Mercolini (Forschungsgruppe für pharmakologisch-toxikologische Analyse, Universität Bologna, IT) führte mit dem Vortrag „An overview on evolving trends in DMS microsampling technologies“ in Dried Matrix Spots (DMS) und andere Microsampling-Methoden ein. Dabei diskutierte sie die Vor- und Nachteile der Analysemethoden und stellte neue Ansätze für zukünftige Analyseverfahren in der forensischen und klinischen Toxikologie vor. Insbesondere die einfache Handhabung, die Flexibilität, die nicht-invasive / mikroinvasive Probenentnahme und die Umweltfreundlichkeit sprechen Laura Mercolini zufolge für eine aussichtsreiche Zukunft dieser neuen Probennahmetechnik.

Der Vortrag „DMS for detection of ethanol markers such as PEth, EtG and EtS“ von Gisela Skopp (Forensisch-Toxikologisches Centrum, München) legte einen forensischen Fokus auf die Alkoholaufnahmemarker Ethylglucuronid (EtG), Ethylsulfat (EtS) und Phosphatidylethanol (PEth) und arbeitete wichtige Punkte für die Methodvalidierung heraus. Insbesondere wurde auf die unterschiedliche Verteilung von Blut innerhalb eines DMS hingewiesen. Weiterhin stellte Gisela Skopp Ergebnisse vor, um eine PEth-Cut-off-Konzentration von 16:0/18:1 im Blut zu bestimmen.

Lea Wagmann (Institut für experimentelle und klinische Pharmakologie



Laura Mercolini während ihres Vortrags über Dried Matrix Spots und andere Microsampling-Methoden (Fotos: V. C. Stammer)

und Toxikologie, Saarland-Universität Homburg) schlug mit „Closing the gap: dried matrix samples for drug screening“ eine Brücke zur klinischen Toxikologie. Sie beleuchtete in ihrem Vortrag, warum DMS-Methoden für klinische Abstinenz- oder Compliance-Untersuchungen geeignet sind. Dabei ging sie nicht nur auf Dried Blood Spots, sondern auch auf Dried Urine Spots ein.

Als letzter Vortrag der Session stellte Tom D. Schneider (Universität Zürich, CH) Anwendungen der DMS bei der Alterung von Spuren vor: „Time since deposition: utilizing DMS to study aging patterns in the proteomes and metabolomes of biofluids“. Insbesondere bei forensischen Fragen wie der Spurensicherung an Tatorten sind laut Tom D. Schneider möglichst genaue Altersfeststellungen getrockneter Bioflüssigkeiten (time since deposition) hilfreich. In seinem Vortrag zeigte er, wie beispielsweise Umweltfaktoren die analytische Altersbestimmung von DMS erschweren und weshalb sich zum jetzigen Zeitpunkt nur eine eingeschränkte Aussagekraft zur time since deposition erzielen lässt.

### News on (Phyto-)Cannabinoids

■ Rudolf Brenneisen (SGCM-SSCM, Bern, CH) referierte über die Vielfalt der Phytocannabinoiden, anderer Inhaltsstoffe der Cannabispflanze (*C. sativa*) wie Terpene und deren breites Nutzungsspektrum in der Medizin. Er zeigte exemplarisch analytische Verfahren

für Inhaltsstoffe und Cannabisprodukte.

Der Vortrag „Analysis and assessment of THC, CBD and HHC phytocannabinoid containing products“ von Rainer Fritsch (Generalzolldirektion, Zentrum für Bildung und Wissenschaft, München) ging dann näher auf die Phytocannabinoide Cannabidiol (CBD) und  $\Delta^9$ -Tetrahydrocannabinol (THC) ein. Da jedoch auch synthetische oder semisynthetische Cannabinoide wie Hexahydrocannabinol (HHC) längst Einzug auf den Markt gehalten haben, stellte er Analysemethoden für CBD, THC, HHC und andere Cannabinoide vor, welche zukünftige Befunde noch zuverlässiger machen sollen.

Marica Hundertmark (Institut für Rechtsmedizin, Mainz) referierte zu „Potential phytocannabinoid and terpene markers for distinguishing between the use of cannabis-based medicines and recreational use of cannabis“. Sie stellte den Wissens- und Forschungsstand bezüglich der forensischen Frage dar, ob sich anhand typischer Markersubstanzen im Blut der Konsum medizinischen Cannabis vom (mittlerweile legalen) Konsum von Cannabisprodukten unterscheiden lässt. Marica Hundertmark zeigte, warum sich diese Frage noch nicht zuverlässig (genug) beantworten lässt und Gegenstand der Forschung ist.

Der letzte Vortrag „Semisynthetic cannabinoids: analytical detection and pharmacological effects“ von Volker



Vortragende und Organisator der Session „Exceptional and Emerging Compounds in Forensic and Clinical Toxicology“: Gabriela Zurek, Dirk K. Wissenbach, Kristof Maudens und Simon Elliot (von links). Es fehlt Ricarda Kegler.

Auwärter (Institut für Rechtsmedizin, Freiburg) ging nochmals genauer auf das Feld der zuvor bereits angesprochenen semisynthetischen Cannabinoide (SSCs) wie HHC ein. Der Vortrag stellte pharmakologische und pharmakokinetische Eigenschaften, beispielsweise den Metabolismus, sowie Analysemöglichkeiten einiger SSCs dar und präsentierte anschaulich die Ergebnisse von „SSC-Testkäufen“ in diversen Geschäften.

### Exceptional and Emerging Compounds in Forensic and Clinical Toxicology

■ Gabriela Zurek (Medizinisches Labor Bremen) präsentierte in ihrem Vortrag „Analysis of superwarfarin rodenticides in a routine medical lab – a story of cows, humans and rats“ nicht-zielgerichtete und zielgerichtete Analyseworkflows für den Nachweis von Warfarinen der 2. Generation („Superwarfarine“). Sie zeigte, dass sich in den meisten der ihr zugesandten Laborproben Brodifacoum nachweisen ließ.

In „Suicides by sodium azide ingestion: analytical aspects and interpretation“ thematisierte Kristof Maudens (Forensisches Institut der Niederlande, Den Haag, NL) einen neu aufkommenden Trend: Das Konservierungsmittel Natriumazid ( $\text{NaN}_3$ ) wird in suizidaler Absicht eingenommen und sogar in

„Suicide-Kits“ angeboten. Dies stellt die forensische und klinische Analytik vor neue Herausforderungen, da routinemäßige Untersuchungen Azide nicht erfassen und daher gezielte Analysen für einen Nachweis notwendig sind. Kristof Maudens zeigte Ergebnisse diverser Postmortem-Proben, in welchen Natriumazid quantitativ mit GC-MS bestimmt wurde.

Den abschließenden Vortrag hielt Simon Elliot (Toxicology UK, Birmingham) zu „Analytical and interpretative challenges for emerging nitrogen-based poisons“. Er beleuchtete das landesübergreifende Problem des Lachgasmissbrauchs in Großbritannien und stellte analytische Methoden zur forensischen Untersuchung vor. Neben Lachgas ( $\text{N}_2\text{O}$ ) sind auch die leicht zugänglichen Konservierungsmittel Natriumnitrat ( $\text{NaNO}_3$ ) und Natriumnitrit ( $\text{NaNO}_2$ ) eine neue Herausforderung für die Analytik in der klinischen und forensischen Toxikologie, und Simon Elliot stellte auch für diese Stoffe Analysemethoden vor, darunter Chemilumineszenz und Teststreifen.

Der vorgesehene Vortrag „Toxicological analysis of cyanide in human whole blood“ von Ricarda Kegler (Institut für Rechtsmedizin, Rostock) musste kurzfristig abgesagt werden.

Viviane C. Stammer,  
Universitätsklinikum Jena

## Sensors for Water Analysis

Chairs: Günther Proll und Michael Seidel

■ Die Session zu Sensoren in der Wasseranalytik war vom Fachausschuss „Sensoren“ der Wasserchemischen Gesellschaft organisiert worden und behandelte Themen von portabler Massenspektrometrie über Sensorik für Bakterien und Spurenstoffe bis hin zur Routineanwendung von Sensorsystemen in der umweltbezogenen Praxis.

Im ersten Vortrag stellte Matthias Brennwald von der Eawag, Dübendorf, CH das tragbare Massenspektrometer miniRUEDI vor, das mit der Gasgleichgewichtsmembranmassenspektrometrie (GE-MIMS) Gasspezies in gasförmigen oder wässrigen Matrices quantifiziert. Anhand eindrucksvoller Praxisbeispiele erläuterte er die Bedeutung dieser Messmethode in der Umwelanalytik: So lässt sich die Reaktion der Strömungsdynamik und die Wasserqualität in Grundwasserleitern untersuchen sowie der Abfluss von tiefem, salzhaltigem Grundwasser und dessen Auswirkungen auf die Wasserqualität aufklären. In einer Studie wurde der biogeochemische Umsatz im Vergleich zur physikalischen Gasdynamik in einer Uferzone entflechtet und quantifiziert. Da diese Technik kontinuierlich vor Ort einsetzbar ist, eignet sie sich gut in der Trinkwassergewinnung, indem sich der Status von Uferfiltratzonen direkt überwachen lässt.

Wolfgang Vogl von ColiMinder – VWMS, Zwerndorf, A adressierte das Thema mikrobielle Wasserqualität. Dabei stellte er zunächst den Unterschied und die Vorzüge des Messprinzips beim ColiMinder im Vergleich zu manuellen, auf Kultivierung basierenden Methoden heraus. Der zentrale Punkt: Eine Messung mit dem ColiMinder spiegelt die enzymatische Aktivität der Bakterien in einer Wasserprobe wider, die direkt mit der Stoffwechselaktivität von lebenden Indikatororganismen wie *E. coli* korreliert. Wegen der großen Zeitersparnis durch diese Analytik – eine Messung dauert circa 15 min – lassen sich mit hoher Frequenz mikrobiologische Prozesse im Wasser überwachen. Datensätze

aus realen Überwachungsszenarien zeigten eindrucksvoll, wie die Ergebnisse des ColiMinders mit den Referenzmethoden korrelierten, aber sich zusätzlich durch die hohe Zeitauflösung kritische Betriebszustände aufdecken ließen, die sonst unerkannt geblieben wären. Die Messmethode eignet sich deswegen für unterschiedliche Szenarien: von der mikrobiellen Überwachung von hochreinem Wasser in der Pharmaindustrie sowie in der Lebensmittel- und Getränkeindustrie über die Trinkwasserproduktion bis hin zur Überwachung von Oberflächengewässern. Dabei lassen sich verschiedene Krankheitserreger in die vollautomatische Messung der mikrobiellen Wasserqualität einbeziehen.

In einem Beitrag zur immunochemischen Erkennung von Mikroschadstoffen als Marker im Wasserkreislauf stellte Rudolf Schneider von der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) aus Berlin den Stand bei Sensoren vor, die Antikörper für die zielgerichtete Quantifizierung nutzen. Um die Vorteile dieses Ansatzes nutzen zu können, müssen zukünftig Indikatorsubstanzen definiert werden, welche die Verunreinigung mit Mikroschadstoffen zeigen, zum Beispiel mit Arzneimitteln (Carbamazepin, Diclofenac, Cetirizin oder Sulfamethoxazol), psychoaktiven Substanzen wie Koffein und Kokain oder prioritären Schadstoffen wie Bisphenol A und Isolithocholsäure. Neben dem ELISA-Format (enzyme-linked immunosorbent assay) lässt sich diese Analytik auf automatisierten Biosensorsystemen ausführen. Die Testformate sind je nach System beispielsweise mit fluoreszenzbasierter oder elektrochemischer Transduktion kombiniert und erlauben es, einzelne Substanzen zu quantifizieren oder – wie im Falle der „Suspension-Arrays“ – Messungen kleiner Analytpanels durchzuführen, etwa im Zuge eines Monitorings von Oberflächengewässern. Die Schnelligkeit, die geringen Kosten und die Vor-Ort-Fähigkeit dieser Sensorik erlauben es, viele Daten über solche Marker zu sammeln und so ein differenziertes Bild der Kontamination des Wasserkreislaufs zu bekommen.

Frank Honold von der Firma Xylem Analytics Germany aus Weilheim gab im Abschlussvortrag eine Übersicht zu

verfügbaren Sensorsystemen für reale umweltpraktische Einsatzbedingungen. Besonders spannend waren neue Forschungsergebnisse für Sensorkonzepte zur Analytik von Per- und Polyfluoralkylsubstanzen (PFAS), die bisher hauptsächlich im Labor gemessen wurden. Insbesondere die dazu nötigen Erkennungsstrukturen werden für den Erfolg dieser Ansätze entscheidend sein. Als weiteres Zukunftsthema stellte Frank Honold abschließend noch erste Ergebnisse vor, die Sensordaten mit Methoden der Künstlichen Intelligenz verknüpfen, um durch bessere Trendanalysen die Eliminationsleistung einer vierten Reinigungsstufe vorherzusagen und so die Prozesse einer modernen Kläranlage zu optimieren.

*Günther Proll, Hochschule Reutlingen*

*Michael Seidel, TU München*

## **Trends in Analytical & Bioanalytical Chemistry: Miniaturized Biosensors for Clinical Diagnostics**

*Chairs: Günter Gauglitz und Larysa Baraban*

■ Schwerpunkt dieser Session lag auf der Mikro- und Nanoelektronik, insbesondere auf der Rolle winziger Biochips bei der Entwicklung bioanalytischer Geräte und Systeme. Dies ist ein wichtiges Thema in der Biosensorik und Analytik, da solche Geräte potenziell gezielt Moleküle in Flüssigkeiten oder Gasen erkennen können. Diese Spezifität lässt sich durch eine Modifikation der Transduceroberfläche erreichen, um dort die notwendigen Reagenzien zu verankern, zum Beispiel biologische Rezeptoren. Insgesamt machen das Design der elektronischen Biochips, die miniaturisierte Verpackung und der geringe Stromverbrauch diese Biosensorgeräte zu einem potenziellen leistungsstarken Werkzeug für das zukünftige klinische oder industrielle Umfeld.

Wir haben diese Session themenbezogen aufgebaut und berücksichtigten dabei ausgereifte Entwicklungen unter Verwendung des potentiometrischen

Formats für die Multiplex-Bioanalytiken-Erkennung (Luisa Torsi, Universität Bari, IT) sowie Nanomaterialien als Bausteine der Sensorgeräte und chemiresistive Ansätze in der Geruchsstofferkennung (Viktor Bezugly, Smart Nanotubes, Freital). Potentiometrische Sensoren gelten derzeit als vielversprechende Ergänzung zu den bestehenden optischen Sensoransätzen. Darüber hinaus demonstrierte Dimitris Tsiokos (BiaLoom, Nikosia, CY) biophotonische Mikrofluidikchips, die Krankheitserreger erkennen, als mögliches Werkzeug für die klinische Flüssigkeitsanalyse. Schließlich gab Ivan Minev von der TU Dresden einen Überblick über die neuen weichen Materialien (sowie deren Herstellung), die als Bausteine für zukünftige elektronische Analysegeräte in Frage kommen.

Die Session zog mehr als 100 Besucher an und löste während der Frage-Antwort-Runde und in den Kaffeepausen zahlreiche Diskussionen aus.

*Larysa Baraban, Universität Tübingen*

## **Tracking Anthropogenic Emissions: Environmental Analysis of Elements, Organic Trace Chemicals and Isotopes**

*Chairs: Martin Elsner und Björn Meermann*

■ Die Session stellte aktuelle Emerging Contaminants sowie neue analytische Methoden im Umweltmonitoring vor.

Den Auftakt machte Jan Koschorreck (Umweltbundesamt) mit „Journeys through time for chemical safety and environmental protection with the German Environmental Specimen Bank“. Darin stellte er die Umweltprobenbank des Bundes vor, ein Kryoarchiv für Umweltproben, die in den letzten 56 Jahren gesammelt und eingelagert wurden – ein wertvolles „Gedächtnis“ für potenzielle Umweltschadstoffe. Jan Koschorreck gab Beispiele zur Identifizierung von Emerging Pollutants und ging auch auf Herausforderungen der Datenarchivierung von Messdaten im Rahmen der Umweltprobenbank ein. Projekte adressieren

neben Emerging Pollutants wie per- und polyfluorierte Verbindungen (PFAS) auch DNA-Analysen von Spezies zum Abbilden der Biodiversität.

Wolfgang Schulz (Hochschule Aalen) sprach über „Non-target screening – a collective tool of the future for describing trace substance dynamics in the environment“. Er stellte Entwicklungen des Non-Target-Monitoring vor, um noch unbekannte organische Kontaminanten im Wasser zu erfassen. Der Fokus lag auf den Möglichkeiten, die sich durch einen Abgleich von Daten in unterschiedlichen Laboratorien ergeben, aber auch auf den Herausforderungen, Messungen zu vergleichen, für die eine Standardisierung intrinsisch schwierig ist. Der Spurenstoff-Tracker K2I wurde vorgestellt als neues Tool zum Datenabgleich; er ist Resultat einer Initiative von Wasserversorgern und Universitäten im Rahmen der BMBF-Initiative „Digital Green Tech“.

Torsten Schmidt (Universität Duisburg-Essen) widmete sich „New prospects in LC hyphenation of isotope ratio mass spectrometry to trace origin and fate of anthropogenic compounds“. Sein Fokus lag auf der dritten Dimension an Information, welche sich in organischen Spurenstoffen analytisch zugänglich machen lässt. Neben Identifizierung („Was?“) und Quantifizierung („Wie viel?“) lassen sich durch Einzelstoffisotopenanalyse (Compound-specific Isotope Analysis, CSIA) Informationen über Quellenherkunft und das Abbauverhalten ansonsten identischer organischer Umweltchemikalien erhalten. Anhand des Beispiels Sulfamethoxazol beleuchtete Torsten Schmidt, wie CSIA Hinweise auf die Art der Transformationsmechanismen liefern kann, welche bei oxidativen Wasseraufbereitungsverfahren wie der Ozonierung am Werk sind.

Im Abschlussvortrag „The battle between PFAS analysis and legislation: an update from the Belgian frontline“ ging Stefan Voorspoels (Vito, Belgien) auf die Herausforderungen zwischen Gesetzgebung/Regulierung und Analytik/Forschung am Beispiel von PFAS ein. Ein großes Problem ist eine fehlende gemeinsame Sprache zwischen den beiden Seiten – Gesetzgebung/Regulierung ist oftmals nicht durch Wissenschaftler:innen repräsentiert. Ein engerer

Austausch ist hier in Zukunft zu etablieren.

Wir bedanken uns nochmals herzlich bei allen Vortragenden der Session sowie dem gut besuchten Auditorium für die rege Diskussion.

*Martin Elsner, TU München*

*Björn Meerman, BAM*

## Trends in Analytical & Bioanalytical Chemistry: Lateral Flow Chips

*Chairs: Günter Gauglitz und Günther Proll*

Die Session zu den Lateral-Flow-Tests machte klar, dass sich dieses Gebiet keineswegs auf etablierten Lösungen ausruht: Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten hierzu werden weiter intensiv vorangetrieben. Präsentierte Lösungsansätze reichten von einem Aufstockverfahren für quantitative Immunoassays über vollständig integrierte Lateral-Flow-Tests (LFT) und Nanofasern für die Nukleinsäureextraktion bis hin zu multiplexfähigen Membranen.

Günther Proll von der Hochschule Reutlingen stellte zunächst Ergebnisse aus einem therapeutischen Drug-Monitoring mit LFT-basierter Analytik vor. Dabei kommen laserstrukturierte Membranen zum Einsatz, die sich neben einem Multiplexing auch für Gehaltsbestimmungen kleiner Wirkstoffmoleküle in Serum einsetzen lassen. Die eigentliche Herausforderung für solche Immunoassays ist es, quantitative Ergebnisse zu erzielen, da hierfür im Falle von LFT normalerweise zunächst offline eine Kalibrierung erstellt werden muss, bevor sich mit einem Reader die Proben auslesen lassen. Um diese Problematik grundsätzlich anzugehen, beschäftigte sich eine Studie mit dem Aufstockverfahren für Immunoassays. Der mathematische Ansatz zeigte in Simulationen sowie an Realproben in verschiedenen Matrices, wie dieses neue Verfahren helfen kann, Immunoassays zukünftig quantitativ und robust gegenüber Matrixeinflüssen einzusetzen. Insbesondere in Kombination mit multiplex-

fähigen LFT-Membranen eröffnet dieses Aufstockverfahren neue Wege für quantifizierende Lateral-Flow-Assays, ohne dass Kalibrierdaten hinterlegt werden müssen.

Tina Hassberg von Solios Diagnostics aus Tübingen setzte sich zunächst intensiv mit der Präanalytik bei der LFT-basierten Diagnostik auseinander und zeigte eindrucksvoll Fehlerquellen, die durch den Nutzer verursacht zu verfälschten oder ungültigen Testergebnissen führen können. Dabei spielen die Zahl der Testkit-Komponenten und die Umständlichkeit der Arbeitsabläufe eine maßgebliche Rolle. Der Grundgedanke dieses Beitrags war es, alle möglichen Fehlerquellen und Teilschritte einer LFT-Diagnostik zu analysieren und technische Lösungsansätze zu finden, die weitestgehend alle Fehlerquellen von der Präanalytik bis hin zum fertigen Testergebnis eliminiert. Schritt für Schritt wurden die Zuhörer dabei durch die Entwicklungsreise eines vollständig integrierten Lateral-Flow-Geräts mitgenommen, das aufgrund seines Geräte-Designs fehler- und kontaminationsfreie Arbeitsabläufe ermöglicht. Ein entsprechendes Design nahm selbst auf eine Fehlbedienung durch falsche Ausrichtung bei der Testentwicklung über die Kapillarkräfte in der LFT-Membran Rücksicht. Wie einfach der Prototyp zu bedienen ist, verfolgten die Zuhörer an einem Testgerät. Zukünftig soll die Methode der isothermen Amplifikation mit solchen Lateral-Flow-Tests kombiniert werden, um diese molekularbiologischen Diagnostiktests auch für Point-of-Care-Testing (POCT) verfügbar zu machen.

Alissa Wieberneit von der Universität Regensburg präsentierte im Anschluss projektbasierte Forschungsarbeiten zur Nukleinsäureextraktion durch zwitterionische Nanofasern als Bestandteil eines komplexen molekular-diagnostischen LFT-Assays. Hierüber sollen sich zukünftig schnell und sicher Krankheitserreger wie HIV, Malaria und Sars-CoV-2 nachweisen lassen, wobei Identifizierung und Quantifizierung über erregerspezifische Nukleinsäuren stattfindet, analog einer klassischen PCR-basierten Labordiagnostik. Ein wesentlicher Schritt bei diesen papierbasierten Analysegeräten (PADs) ist die

Isolierung des Nukleinsäurematerials aus der Probe. Unter Berücksichtigung einer späteren Massenproduktion sowie leicht abstimmbarer chemischer Eigenschaften wurden Nanofasern als vielversprechender Kandidat für diese Aufgabe identifiziert. Für diesen Zweck wurden elektrogessponnene zwitterionische Nanofasern aus Nylon mit einer ausgeklügelten Dotierung entwickelt. Zusammen mit den nachfolgenden Prozessschritten inklusive einer On-Chip-Amplifikationsstrategie (wie RPA) bestimmter Nukleinsäuresequenzen und anschließender Detektion entsteht so ein integriertes Sample-to-Answer-System. Möglich wird dies durch einfache Übergabepunkte während des Assays, erreicht durch einfaches Falten der Papiertäger durch den Anwender.

Den Abschluss dieser Session gestaltete Judith Witte von Sartorius Stedim Biotech in Göttingen mit ihrem Bericht über eine neue Generation von Unisart-Membranen, die für Multiplexing-Anwendungen entwickelt wurden. Auch wenn Details zur Herstellung dieser Membranen nicht zu erfahren waren, wurden die Einsatzmöglichkeiten anhand diagnostischer Anwendungen demonstriert. Neben hervorragenden Nachweisgrenzen für Multianalytassays lassen sich durch die Micro-Dispensing-Technologie zur Erzeugung der Test- und Kontrollzonen bis zu 95 Prozent der Antikörper einsparen. Es ist zu erwarten, dass basierend auf diesen strukturierten Membranen zukünftig neue leistungsstarke POCT-Diagnostikanwendungen entwickelt werden, die von diesen Multiplex-Möglichkeiten profitieren.

*Günther Proll, Hochschule Reutlingen*

## Towards a More Sustainable Lab

*Chairs: Tom van de Goor und Andreas Otto*

■ Nachhaltigkeit hält in immer größerem Maße Einzug in die analytische Chemie. Dies ließ sich in den letzten Jahren in der Literatur, in Konferenzbeiträgen und in den Vorgaben staatlicher Förderungen und Regelungen beobachten.

Eine Frage ist vielfach, wie Labore sich generell diesen Herausforderungen stellen können und wie sich in eine nachhaltigere analytische Welt starten lässt.

Genau das war Thema der Podiumsdiskussion unter Vorsitz von Tom van de Goor mit Teilnehmenden aus der universitären Forschung (Elia Psillakis, Technical University of Crete, EL), aus der Nachhaltigkeitsberatung (Kerstin Hermuth-Kleinschmidt, NIUB, Freiburg), von einer Nicht-Regierungsorganisation (Raj Patej, MyGreenLab) und mit Vertretern dreier Firmen (Frank Michel, Merck; Andreas König, Eppendorf und Andreas Otto, Agilent).

Impulsvorträge brachten dem Fachpublikum zunächst unterschiedliche Aspekte zur Nachhaltigkeit im analytischen Labor nahe. So wiesen Raj Patej und Kerstin Hermuth-Kleinschmidt auf die besondere Verantwortung analytischer Labore hin, die aufgrund ihres immensen Ressourcenbedarfs gegenüber anderen Arbeitsplätzen in Unternehmen und Universitäten herausstechen. Die Inhaberin der NIUB-Nachhaltigkeitsberatung erklärte dabei globale Zusammenhänge von Klimawandel und der Notwendigkeit des praktischen Handelns; der Vertreter von MyGreenLab, Raj Patej, machte die Vorteile unabhängiger Umweltzertifikate wie dem ACT Label verständlich.

Im Folgenden wurden die Lösungsansätze der anwesenden Hersteller von Laborchemikalien, Verbrauchsmitteln und analytischen Geräten beleuchtet. So führte Frank Michel von Merck Alternativen zu den klassischen Lösungsmitteln in der HPLC auf und zeigte, wie diese helfen, den ökologischen Fußabdruck im Labor zu verringern. Andreas König von Eppendorf legte anhand von Daten dar, wie Verbrauchsmaterialien über 20 Prozent an Kohlenstoffäquivalenten im Fußabdruck einsparen können, alleine über eine andere Bezugsquelle der Grundmaterialien und ohne Einbuße an Qualität sowie Abwandlung von Laborprotokollen (gezeigt am Beispiel von Reaktionsgefäßen). Der Vertreter von Agilent, Andreas Otto, präsentierte anhand praktischer Beispiele, welchen Einfluss Umweltlabel auf die Entwicklung analytischer Geräte haben können und in welchem Maße sich Verbesse-

rungen über Produktgenerationen erreichen lassen.

Abschließend besprach Elia Psillakis als Expertin für ökologisch nachhaltige Probenvorbereitung, wie wichtig es ist, durch Vermeidung im Labor Ressourcen zu schonen. Hierbei wurde auf die gemeinsame Verantwortung aller Interessengruppen in den analytischen Wissenschaften hingewiesen.

Die finale Diskussion fand unter reger Anteilnahme des Publikums statt. Besprochen wurden dabei alternative Geschäftsmodelle, die mögliche Transparenz von Herstellern zum Kunden und die Bewertung analytischer Techniken.

Zusammenfassend war das ein sehr interaktiver Programmpunkt, welcher von der Möglichkeit lebte, Sichtweisen unterschiedlicher Interessengruppen kennenzulernen und direkt zu diskutieren.

*Tom van de Goor und Andreas Otto,  
Agilent*

## Chemometrics

*Chairs: Claudia Beleites und Marcel Dahms*

■ Die Session bot Vorträge rund um das Thema Kalibrationstransfer. Inhalte wurden sowohl aus der Wissenschaft als auch aus der Industrie präsentiert und durch rege Diskussionen der etwa 50 Teilnehmenden ergänzt.

Jean-Michel Roger vom französischen Nationalinstitut für Landwirtschaft, Ernährung und Umwelt (INRAE) präsentierte anschaulich und systematisch die Gründe, warum ein Kalibrationstransfer notwendig ist, etwa zeitlich bedingte Einflüsse auf Geräte und Proben oder veränderte Messbedingungen. Anschließend erörterte Roger die vielen Möglichkeiten des Transfers: robuste Modellierung für unkontrollierbare und/oder unbekannte Einflüsse, Anpassen der Modellvorhersage, Kontrolle der Messbedingungen oder Einbeziehen messbarer, aber nicht kontrollierbarer Einflussgrößen in die Modellbildung sowie Adaption der Messdaten und/oder der Modelle. Anhand einfach verständlicher, grundlegender mathematischer Konzepte führte er das Auditorium

durch die Prinzipien der Orthogonalisierung als zentrales Element des Kalibrierstransfers und veranschaulichte Algorithmen wie Transfer component analysis (TCA), external parameter orthogonalization (EPO) und unsupervised dynamic orthogonal projection (uDOP) mit praktischen Beispielen und Forschungsergebnissen.

Anschließend präsentierte Yulia Monakhova (FH Aachen) ihre Forschungsergebnisse zum Transfer zweidimensionaler Datensätze mittels piecewise direct standardization (PDS). Sie erörterte den Transfer zwischen Gerätetypen am Beispiel verschiedener NMR-Spektrometer. Ein solcher Transfer kann notwendig werden, wenn ein Modell auf einem hochpreisigen, hochauflösenden Gerät etabliert wurde, in Folge aber auf einem kostengünstigeren, oftmals niedriger auflösendem Gerät angewandt werden soll und damit potenziell in mehr Laboratorien verfügbar wird. Abschließend präsentierte Yulia Monakhova Ergebnisse zum Übertrag von Modellen zwischen Analysemethoden. Sie zeigte eindrucksvoll die Übertragbarkeit von Modellen basierend auf MIR-Spektren zu solchen basierend auf NIR-Spektren. Dies eröffnet die Möglichkeit, Spektrendatenbanken ohne großen Mehraufwand beim Wechsel der Analysemethoden zu übertragen.

Pierre Esseiva (Universität Lausanne, CH) präsentierte die Übertragung der Analytik aus dem Labor hin zum Ort des Probenaufkommens, Drogenfunden „von der Straße“. Er zeigte, wie anfänglich aufwendige Laboranalysen mit HPLC und GC sukzessive durch ein NIR-System ersetzt wurden, um Identität und Zusammensetzung von Drogenmischungen zu erkennen. Dazu wurden etwa 40000 Spektren von 5000 Proben aufgenommen. Dieses System wurde anschließend in das Produkt NIRLAB überführt, welches heute die Schweizer Polizei als Analyseninstrument auf der Straße zur Probenidentifikation einsetzt. Esseiva zeigte, dass neben dem Spektrometer und der Modellentwicklung auch die Qualitätssicherung der Instrumente und Messungen entscheidend sind, um die Ergebnisse verwerten zu können, und welche Anstrengungen unternommen worden sind bei der Entwicklung von Software zur Etablierung

von Modellverbesserungen sowie Ergebnisdarstellung und Trenderfassung.

Den Abschluss der Session bildete der Vortrag von Rafael Teixeira Freire (BASF). Er ordnete die Bedeutung der Chemometrie in einem Großkonzern ein und sprach über deren vielfältige Anwendungsmöglichkeit wie Prozessoptimierung und Prozesskontrolle, aber auch Etablierung chemometrischer Modelle zur Vorhersage von Materialeigenschaften; außerdem präsentierte er Anwendungsbeispiele. Mit chemometrischen Methoden ließ sich beispielsweise die Zusammensetzung komplexer Polymermischungen spektroskopisch und damit weniger arbeits- und kostenintensiv bestimmen, um die Qualität von Ausgangsmaterialien für folgende Prozessschritte zu ermitteln. Als Anwendungen der Chemometrie stellte er auch die Dekonvolution von Spektrenpeaks vor, um Prozessnebenprodukte zu bestimmen, und den Übertrag von Modellen von Geräten mit hoher Auflösung zu niedrig aufgelösten Geräten. Abschließend präsentierte Rafael Teixeira Freire die BASF-interne Entwicklung Spectronom, eine integrierte Chemometrieplattform.

*Marcel Dahms, Light:Guard  
Claudia Beleites, Chemometrix*

## Highlights in Separation Sciences

*Chair: Martin Vogel*

■ Michael Lämmerhofer (Universität Tübingen) eröffnete die gut besuchte Session mit seinem Vortrag „Chiral stationary phases for isomer separations in bioanalytical and biopharmaceutical applications“. Dabei ging er auf das Potenzial ein, das chirale Phasen bieten, zum Beispiel in den Metabolomics, den Lipidomics und bei der Analytik therapeutischer Peptide sowie Nukleinsäure-basierter Pharmazeutika. Auch das Potenzial der mehrdimensionalen Flüssigkeitschromatographie, bei der eine der beiden Trenndimensionen eine chirale Trennung durchführt, illustrierte er anschaulich im Hinblick auf die Naturstoffanalytik. Michael Lämmerhofer sprach zudem über die Kopplung

der chiralen Chromatographie mit der Ionenmobilitätsmassenspektrometrie (IM-MS) und den zusätzlichen Informationsgewinn.

Kerstin Vogel (Dow Deutschland Anlagengesellschaft, Stade) präsentierte in „Speciation of polydimethylsiloxanes with SEC coupled to ICP-OES/MS to solve industrial challenges“ die vorteilhafte Kombination von chromatographischer Selektivität und spektroskopischer (ICP-OES) bzw. massenspektrometrischer (ICP-MS) Sensitivität für die industrielle Analytik. Dabei stellte sie die Schritte der Methodentwicklung vor, die für Trennung, Charakterisierung und Quantifizierung von Organosiliciumverbindungen notwendig waren. Sie zeigte eindrucksvoll, dass sich mit der Kopplungsmethode Molekulargewichtsverteilungen auch im Sub-ppb-Bereich bestimmen ließen.

Einen einfachen und kostengünstigen instrumentellen Ansatz stellte Gertrud Morlock (Universität Gießen) vor, in ihrem Vortrag „Sustainable future is now: the first of its kind 2LabsToGo system for everyone, everywhere“. Darin zeigte sie eine für viele Fragestellungen leistungsfähige, einfach zugängliche und – mit ein wenig Anleitung – nachbaubare Kombination aus dünnschichtchromatographischer Trennung und effektbasierter biologischer Detektion. Darüber hinaus beeindruckte sie das Publikum mit den Ergebnissen aus der Untersuchung alltäglicher Artikel wie Gesichtscremes und Parfums mit dem zuvor vorgestellten 2LabsToGo-System.

Den Abschluss der Session bildete Joachim Weiß (Universität Innsbruck, A) mit „Advanced ion chromatography solutions“. Fokus lag dabei auf der Ultrapurenanalytik mit Ionenchromatographie, wie sie zum Beispiel für die Untersuchung hochreinen Wassers notwendig ist. Hervorragende Nachweisgrenzen lassen sich dabei mit reagenzienfreier Ionenchromatographie und elektrolytischer Probenvorbereitung (RFIC-ESP) erreichen. Daneben zeigte er, wie zweidimensionale Ansätze in der Ionenchromatographie (IC x IC) Ionen wie Perchlorat oder Bromat in niedrigen Konzentrationen quantifizieren können. Er demonstrierte auch die Kopplung von Ionenchromatographie

und Massenspektrometrie mit all ihren Möglichkeiten.

Allen Sprecherinnen und Sprechern dieser Session sei noch einmal herzlich für ihre Beiträge gedankt, die allesamt sehr zahlreich Zuhörerinnen und Zuhörer in den Saal lockten – er war fast immer bis auf den letzten Platz belegt.

*Martin Vogel, Universität Münster*

## Research Data Management

*Current State and Practices of Data Management in Modern Analytics I + II Chairs: Robert Heyer und Thilo Muth*

■ Maßnahmen und Software für das Forschungsdatenmanagement zu implementieren, ist eine zentrale Herausforderung in der heutigen Forschungslandschaft. Als Zusammenarbeit der Gesellschaft für Biochemie und Molekularbiologie (GBM) und der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) organisierten wir zwei gemeinsame Sessions zum Stand und den Praktiken des Forschungsdatenmanagements in der modernen Analytik. Die Sessions boten eine wertvolle Gelegenheit für Fachleute aus verschiedenen Disziplinen, sich über Herausforderungen auszutauschen, bewährte Verfahren zu teilen und gemeinsam an Lösungen zu arbeiten, um das volle Potenzial ihrer Forschungsdaten auszuschöpfen.

Die Vorträge umfassten unter anderem Empfehlungen zur praktischen Umsetzung des Forschungsdatenmanagements auf Institutslevel durch Jeanne Wilbrandt. Eine Übersicht über Infrastruktur durch das Netzwerk de.NBI präsentierte Nils-Christian Lübke, und Juan Antonio Vizcaíno erklärte, wie sich Forschungsdaten im öffentlichen Repository PRIDE aus der Proteomik nutzen lassen. Anschließend erläuterte Kevin Maik Jablonka KI-Methoden und Transformer-Modelle in der chemischen Forschung, und Alexander Jarasch sprach über das Implementieren von Wissensgraphen und Sprachmodellen in der Medikamentenforschung. Dies ergänzte ein Vortrag von Simon Stier über

semantische Technologien und eine Webplattform für digitale Labore.

In einer abschließenden Podiumsdiskussion diskutierten die Referenten und die Teilnehmenden die Herausforderungen und Chancen beim Umsetzen eines qualitätsgesicherten Forschungsdatenmanagements. Dabei wurde deutlich, dass eine der wesentlichen Hürden die fehlenden direkten Anreize für Forschende sind. Außerdem wurde die Notwendigkeit einer besseren Ausbildung von Forschenden im Forschungsdatenmanagement herausgestellt sowie die Notwendigkeit einer langfristigen Implementierung auf Institutsebene in Form dauerhafter Stellen mit spezifischen Profilen.

Alle Teilnehmenden waren sich einig, dass eine bessere Verwaltung von Forschungsdaten die Qualität der Forschung erhöht, die Wiederverwendung von Forschungsdaten fördert und somit Kosten bei Forschungsprojekten spart und das geistige Eigentum besser schützt.

*Thilo Muth, RKI Berlin*

*Robert Heyer,*

*ISAS Dortmund/Universität Bielefeld*

## Advancing the Frontiers of Archaeometry: Current Topics and New Methods

*Wie auch in den vergangenen Jahren war die vom Arbeitskreis Archäometrie organisierte Session für die analytische conference etwas exotisch, da sich die Tagung vornehmlich an chemisch-industriellen und chemiewissenschaftlichen Anwendungsfeldern orientierte. Umso erfreulicher war das große Interesse an der Session mit einem Einblick in analytische Methoden aus dem Grenzbereich der Geistes- und Naturwissenschaften.*

*Chair: Anika Retzmann*

■ Die Archäometrie befasst sich mit natur-, technik- und geisteswissenschaftlichen Aspekten bei der Bearbeitung kulturgeschichtlicher Forschungsfragen sowie der Erforschung und Erhaltung von

Kulturgütern. Die vier Vorträge der Session stellten Themen und neue analytische Methoden vor, um vier kulturgeschichtlich interessante Materialien zu untersuchen: Farbe, Glas, Metall und Kunststoff.

Patrick Dietemann vom Doerner-Institut in München eröffnete mit „Bridging the disciplines – studying microstructures in oil paints to understand Old Master paintings“. In der Übergangszeit von Ölfarben auf Temperafarben verwendeten alte Meister wie Sandro Botticelli oder Leonardo da Vinci manchmal beide parallel und auf denselben Gemälden. Dies wirft die Frage auf, wie sich Öl- und Eiweißbindemittel mischen lassen, um so die Eigenschaften der Farben entsprechend den Bedürfnissen der Künstler einzustellen. Wie Dietemann erläuterte, ließ sich mit der Kolloidchemie zeigen, dass mit Öl, Ei und Pigmenten verschiedene Mikrostrukturen gebildet werden können: Neben Öl-in-Wasser-Emulsionen (Fettempere, sogenannte Tempera grassa) lassen sich Kapillarsuspensionen herstellen oder Pigmente vor dem Mischen mit Öl mit Proteinen beschichten – ein Verständnis, das die Erhaltung unschätzbare Kunstwerke verbessern kann.

Susanne Greiff von der Universität Tübingen führte die Vortragsreihe fort mit „More than the sum of its parts – the analytical challenges of ancient opaque glass as complex composite material systems“. Frühes Glas war nur sehr selten das transparente und farblose Material, das wir heute kennen, sondern eine dichte und glänzende Verbindung, die mit lebhaften und brillanten Farben auftrumpft – es wurde schon früh eingesetzt, um undurchsichtige Edelsteine zu imitieren. Auch wurden daraus undurchsichtige Glasperlen und emaillierter Schmuck hergestellt. Greiff erläuterte die Herausforderungen, die mit der Analyse antiker opaker Gläser als komplexem Verbundwerkstoffsystem verbunden sind: Inhomogenitäten, Recycling, Verwendung unreiner Rohmaterialien sowie die mit langfristigem Vergraben einhergehende Korrosion. Es gibt viele analytische Methoden, mit denen sich antike opake Gläser untersuchen lassen, doch kommen aufgrund des kulturellen Werts der Objekte bevorzugt minimalinvasive und zerstörungs-

freie Analyseverfahren zum Einsatz wie mikroskopische Röntgenfluoreszenzanalyse, Raman-Spektroskopie und IR-Spektroskopie.

Michael Brauns sprach über „Provenance analysis of ancient and modern iron using Os isotope and trace element analyses“. Die Innovation der Eisenherstellung wird oft als einer der größten technologischen Fortschritte in der Geschichte der Menschheit angesehen – doch Eisen ist geographisch nicht gleichmäßig verteilt und wurde oft von weit entfernten Orten bezogen. Brauns zeigte, dass der Verarbeitungsprozess von Eisen keinen Einfluss auf die Zusammensetzung der Osmiumisotope einer Probe hat. Folglich ist die Analyse von Osmiumisotopen mit Negativ-Thermoionisationsmassenspektrometrie – in Verbindung mit der Analyse von Spurenelementen mit Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma und Laserablation – eine zuverlässige Methode, um die Herkunft für Eisen zu bestimmen, und von entscheidender Bedeutung, um die wirtschaftlichen, sozialen und geopolitischen Aspekte der Eisenproduktion und -verwendung in der Antike zu rekonstruieren.

Zum Abschluss der Session präsentierte Ester Ferreira die modernste Fragestellung mit „PVC in built heritage – multianalytical approach to understand composition and degradation“. Bisher hat die Forschung zur Charakterisierung, zum Verständnis und zur Erhaltung historischen PVCs im Kontext des baulichen Erbes nur wenig Aufmerksamkeit erhalten – dies ändern die Arbeiten von Ferreira nun, um optimale Erhaltungsstrategien zu entwickeln. Ferreira wendete Methoden der Pyrolysegaschromatographie und Rasterelektronenmikroskopie mit Mikrobereichselementanalyse auf eine Auswahl archiverter, gut datierter und dokumentierter PVC-Proben an und identifizierte die Hauptpolymere und die Co-Polymere sowie Zusatzstoffe wie Weichmacher, Stabilisatoren, Pigmente und Füllstoffe. Wie die ersten Analyseergebnisse zeigten, wurden in den ersten Produktionsjahren von PVC unterschiedliche Strategien angewandt, zum Beispiel wechselte man von internen (Co-Polymerisation von PVC) zu externen Weichmachern, was sich auf die Langzeitstabilität aus-

wirken kann. Auch die Wahl der Additive (Pigmente, Füllstoffe, Stabilisatoren) variiert, was die mechanischen Eigenschaften des PVC beeinflusst.

Für alle, deren Interesse an der Forschung in der Archäometrie geweckt wurde, sei auf die Jahrestagung Archäometrie und Denkmalpflege im März 2025 in Dresden hingewiesen, die federführend vom AK Archäometrie der GDCh organisiert wird.

(<https://archaeometrie-tagung.de>)

Anika Retzmann,  
University of Calgary, Kanada

## Atmospheric Chemistry: Analysis of Complex Molecular Mixtures

Chairs: Hendryk Czech und Ralf Zimmermann

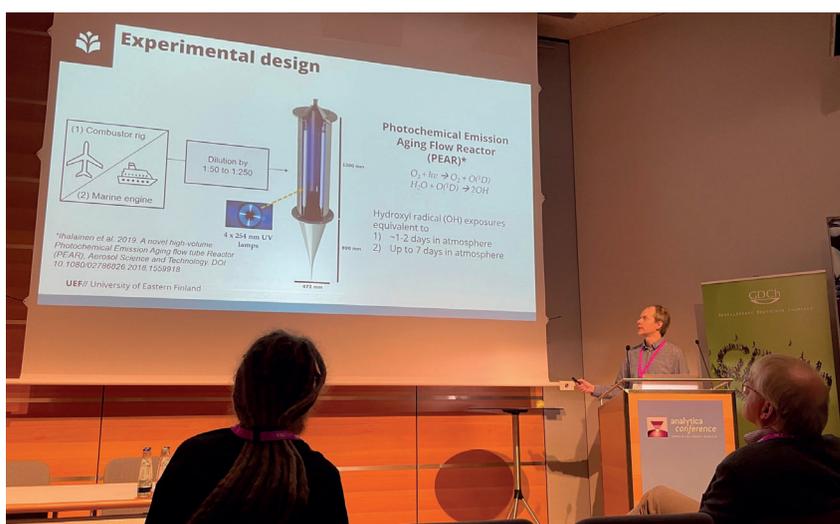
■ High-end analytische Techniken sind notwendig, um die komplexe Zusammensetzung von Umweltaerosolen zu erfassen und atmosphärische Alterung, Verbrennungsprozesse oder das Zusammenwirken von Aerosolbestandteilen zu verstehen, die makroskopische Aerosoleigenschaften und -dynamiken erklären.

Nach einer Einführung in das Thema durch Ralf Zimmermann (Universität Rostock / Helmholtz-Zentrum München) sprach Olli Sippula von der Universität von Ostfinland in Kuopio über

die sekundäre Partikelbildung aus Verbrennungsemissionen eines Schiffsmotors und der Simulation einer Flugzeugturbine. Für beide Quellen wurde nach atmosphärischer Alterung eine Zunahme der Partikelmasse nachgewiesen; dieser Effekt war für die Flugzeugturbine besonders ausgeprägt, sowohl aufgrund niedriger primärer Partikelmasse als auch aufgrund einer hohen Konzentration an Vorläuferverbindungen zur sekundären Aerosolbildung. Außerdem absorbierten die gealterten Emissionen der Flugzeugturbine erhöht im sichtbaren Spektralbereich, was die Strahlungsbilanz der Erde beeinflusst.

Thorsten Hoffmann von der Johannes-Gutenberg-Universität Mainz eruierte den Effekt von Partikelgrößen auf die Aerosolchemie. Oligomerisierung durch Diels-Alder-Reaktionen, heterogene Oxidation und Kondensationsreaktionen wurden untersucht mit UHPLC und GC gekoppelt mit hochauflösender Orbitrap-Massenspektrometrie sowie Orbitrap mit chemischer Ionisierung als Online-Technik. Insbesondere bei Partikeldurchmessern im Bereich 30 bis 100 nm zeigten diese Reaktionen eine verstärkte Größenabhängigkeit – das erweitert unser Verständnis von Partikelwachstum und Wolkenbildung.

Ein schnelles GC-Flugzeitmassenspektrometer mit Einphotonionisierung zur Online-Analytik volatiler organischer Verbindungen (VOCs) stellte Hendryk Czech (Universität Rostock / Helmholtz-Zentrum München) vor. Mit GC-Laufzeiten von 30 s lassen sich isobare VOCs, beispielsweise Monoterpene,



Olli Sippula bei seinem Vortrag über die sekundäre Partikelbildung (Foto: S. Piel)

in ihre Isomere getrennt detektieren. Die Vorteile der Methode gegenüber direkter Massenspektrometrie wurden am Beispiel der Biomasseverbrennung demonstriert. Über eine zur Varianzanalyse (ANOVA) simultane Komponentenanalyse (ASCA) ließen sich die Emissionsprofile von VOCs in Abhängigkeit der verbrannten Biomassen sowie der Verbrennungsgüte einordnen.

Sören Zorn vom Forschungszentrum Jülich präsentierte eine neue Möglichkeit der Aerosolalterung, um Reaktionsmechanismen im Labormaßstab zu untersuchen. SAPHIR-STAR ist ein kontinuierlich betriebener Rührkessel, in dem sich Aerosolvorläuferverbindungen wie Monoterpene oder Monoaromaten unter definierter Generierung von Oxidantien und reaktiver Spurengase wie  $\text{NO}_x$  unter atmosphärisch relevanten Bedingungen photochemisch altern lassen.

Die Brücke von biogenen Aerosolen zu Bioaerosolen, welche Bakterien, Viren, Pilzsporen und Pflanzenteile einschließen, schlug Federico Mazzei von der Universität Genua, Italien. In der Aerosolkammer ChAMBRé (Chamber for Aerosol Modelling and Bio-aerosol Research) untersucht er, wie luftgetragene Bakterien wie *E. coli* oder *B. subtilis* sich über die Zeit gegenüber der Exposition von Spurengasen wie  $\text{NO}_x$  oder UV-Licht verhalten.

Qili Dai von der Nankai-Universität der Volksrepublik China schloss die Session ab. Er untersuchte die Zusammensetzung von Feinstaub aus diversen thermischen und Verbrennungsprozessen (darunter Biomasseverbrennung, Kochen, industrielle Produktion) mit Photoionisierungsmassenspektrometrie (PIMS) gekoppelt an thermooptische Kohlenstoffanalyse (TOCA). Mit Clusteranalyse zeigte er, dass die Spektren der PIMS zwischen verschiedenen Aerosolquellen unterscheiden lassen. PIMS kann damit dazu beitragen, aus Routinemessungen mit TOCA die Beiträge einzelner Emissionsquellen zu bestimmen.

Ralf Zimmermann und Hendryk Czech  
(Universität Rostock /  
Helmholtz-Zentrum München)

## Highlights der Spektroskopie

Die drei Sessions des Deutschen Arbeitskreises für Analytische Spektroskopie (DAAS) fanden am Schlußtag der *analytica conference* statt.

Chairs: Carsten Engelhard und Uwe Karst



Bunsen-Kirchhoff-Preisverleihung an Björn Meermann (z.v.li.) durch Ann-Christin Niehoff (Vorsitzende der Jury), Oliver Klaeffling (Sponsor Analytik Jena) und Carsten Engelhard (Vorsitzender DAAS) (von links) (Foto: Messe München)

■ Zum Auftakt der ersten Session, der Bunsen-Kirchhoff Award Session, stellte Maria Montes-Bayón von der Universität Oviedo in Spanien ihre Ergebnisse zum Einsatz elementanalytischer Methoden, insbesondere der Einzelpartikel-ICP-MS, in der Tumorforschung vor. Hiermit untersuchte sie die Aufnahme von Prodrugs auf Basis vierwertigen Platins im Vergleich zum etablierten Cisplatin. Vielversprechend ist auch der Einsatz dreidimensionaler Zellverbände (Tumorsphäroide), die realistischere Experimente als Einzelzellen ermöglichen; sie stellen aber auch analytisch besondere Herausforderungen.

Anschließend folgte die namensgebende Preisverleihung dieser Session: Björn Meermann von der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) in Berlin wurde für seine Arbeiten in der Analytik per- und polyfluorierter Alkylverbindungen mit dem Bunsen-Kirchhoff-Preis des DAAS ausgezeichnet (Seite 31). Nach der Laudatio durch Ann-Christin Niehoff (Shimadzu Europa, Duisburg) aus dem DAAS-Vorstand nahm Björn Meermann den Preischeck über 3000 Euro von Oliver Klaeffling des Sponsors Analytik Jena entgegen und sprach in seinem Vortrag darüber, wie die Elementanalytik zu einer nachhaltigeren Zukunft beitragen kann.

Carlos Abad, der ebenfalls an der BAM in Berlin forscht, präsentierte einen neuen Ansatz, um mit der hochauflösenden Absorptionsspektrometrie von Molekülen und Elementen in Kombination mit chemometrischen Verfahren Isotopenverhältnisse zu bestimmen. Hierzu werden die Absorptionsspektren zunächst in ihre isotonenabhängigen Bestandteile dekonvolviert. Abschließend gelang die Validierung des Konzepts durch die etablierte ICP-MS.

Zum Abschluss dieser Session sprach Gerrit Renner von der Universität Duisburg-Essen darüber, welches Potenzial die Modellierung und die computergestützte Datenauswertung in Chromatographie, Massenspektrometrie und Spektroskopie bietet. Hierzu entwickelte er ein leistungsstarkes Peakmodell, das bei der Peakextraktion aus großen Datensätzen die wesentlichen Peakinformationen erhält und sich durch eine große Prozessierungsgeschwindigkeit auszeichnet.

Die zweite Session beschäftigte sich mit instrumentellen Entwicklungen und Anwendungen, und die vier Vorträge spannten einen weiten Bogen von der Infrarotspektroskopie über die Röntgenfluoreszenz bis hin zu molekül- und elementselektiver Massenspektrometrie. In seinem sehr lebendigen und anschaulichen Vortrag präsentierte Boris Mizaikoff von der Universität



Sprecher und Chairs der drei DAAS-Sessions (Foto: S. Fingerhut)

Ulm die Möglichkeiten, die Quantenkaskadenlaser in der Infrarotspektroskopie seit einigen Jahren bieten. Er stellte sowohl die technologische Entwicklung als auch neue Entwicklungen aus der infrarotbasierten Sensorik vor. Besonders beeindruckte sein Beispiel, wie sich damit der Zustand von Knorpelgewebe im Knie untersuchen lässt, da hierbei modernste technische Entwicklungen und medizinische Anwendungen kombiniert werden.

Svenja Seifert (BASF, Ludwigshafen) stellte ihre Arbeiten zur Lokalisation metallhaltiger Nanopartikel in tierischen Geweben mit der Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma und Laserablation (LA-ICP-MS) vor: Mit lanthanoidmarkierten Antikörpern erhielt sie Informationen zur Antwort des biologischen Systems auf die Partikelexposition.

Rene Boiteau von der University of Minnesota in Minneapolis, USA, stellte Daten aus der Speziationsanalytik in Proben marinen Ursprungs vor. Durch

die Kombination flüssigchromatographischer Trennungen mit der elementselektiven ICP-MS und der molekülselektiven Elektrospray-Ionisations (ESI)-MS untersuchte er, welche Nährstoffe in den Ozeanen wachstumslimitierend für das Phytoplankton sind und wie diese Organismen durch die Produktion von Siderophoren ihren Spurenelementhaushalt optimieren.

Abgerundet wurde die zweite Session durch Kerstin Leopold von der Universität Ulm, die ihre Strategien zur Lokalisierung und Quantifizierung von Spurenelementen mit Röntgenfluoreszenzspektroskopie vorstellte und hiermit neue Anwendungen in der biomedizinischen Analytik und der Materialwissenschaften aufzeigte.

Mit Highlights aus der Element- und der Molekülspektrometrie beschäftigte sich der dritte Vortragsblock: Es wurden neue analytische Methoden vorgestellt und diskutiert, wie sie zur Lösung wis-

senschaftlicher und gesellschaftlicher Probleme beitragen können. Den Auftakt machte Johanna Irrgeher von der Montana-Universität Leoben in Österreich: Sie zeigte, warum und wie die Isotopenverhältnis-Massenspektrometrie unter Verwendung der (LA-)ICP-MS dazu beitragen kann, relevante Vorgänge beim Übergang zu nachhaltigeren Verfahren in Wissenschaft und Industrie besser zu verstehen.

David Clases von der Universität Graz in Österreich stellte seine Ergebnisse in der Analytik einzelner Partikel vor, wofür er die Raman-Spektroskopie und die Einzelpartikel-ICP-MS kombinierte. Mithilfe eines Flugzeitanalysators lassen sich umfangreiche Daten über die Elementzusammensetzung einzelner Nanopartikel gewinnen, woraus sich vielversprechende Anwendungsperspektiven für die Biomedizin und die Materialwissenschaften ergeben.

Mit der Analytik von Tattooproben, bei denen Komplikationen durch allergische oder entzündliche Prozesse auftreten, präsentierte Carina Wolf von der Universität Münster ein Thema, das im wahrsten Sinne des Wortes unter die Haut geht. Mit Laserdesorptions-/Ionisations-Massenspektrometrie (LDI-MS) identifizierte sie in diesen Proben die Hauptbestandteile der Pigmente, aber auch wichtige Verunreinigungen.

Zuletzt präsentierte Jörg Bettmer von der Universität Oviedo in Spanien, wie er selenhaltige biogene Nanopartikel in Pilzen im Größenbereich zwischen 60 und 250 Nanometern mit der Einzelzell-ICP-MS sowie der Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) nachwies. Im Rahmen dieser Studie führten die Autoren zunächst Inkubationsexperimente von Pilzen mit Selenit durch und charakterisierten anschließend die entstandenen Nanopartikel mit den instrumentell-analytischen Methoden.

Insgesamt zeigen die vielfältigen methodischen Entwicklungen und praktischen Anwendungen, die in den drei Sessions vorgestellt wurden, warum spektroskopische Methoden weiterhin zu den bedeutendsten Werkzeugen für die Lebenswissenschaften und die Materialwissenschaften zählen.

Uwe Karst, Münster  
Carsten Engelhard, Berlin

## 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 03/2024:  
28.06.2024

Beiträge bitte an die Redaktion

### 55. Jahrestagung der DGMS

10.-13. März 2024, Freising



Abb. 1. Kimberly Prather vom Scripps Institute in San Diego beim Wolfgang-Paul-Vortrag über Aerosolanalytik



Abb. 2. Thorsten Benter (rechts) verleiht die Ehrenmitgliedschaft der DGMS an Michael Karas für seine Verdienste in der MALDI- und ESI-MS.

Die 55. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie (DGMS) fand im März auf dem Campus Freising der TU München statt. Die lokale Organisation hatten Bernhard Küster und Corinna Dawid übernommen. Rund 450 Tagungsteilnehmende, 19 ausstellende und 22 sponsorende Firmen trugen zu einem prall gefüllten Tagungsprogramm bei, ebenso wie die sieben Workshops und viele angemeldete Beiträge in Form von Postern und Kurzvorträgen.

#### Wolfgang-Paul-Vortrag

Der Vorsitzende der DGMS, Thorsten Benter (Universität Wuppertal), führte Kimberly Prather (Scripps Institute, San Diego, USA) als Rednerin ein: Sie hielt in diesem Jahr den Wolfgang-Paul-Vortrag, mit dem die DGMS seit 1997 eine Persönlichkeit für ihr prägendes Werk in der Massenspektrometrie würdigt (Abbildung 1). In ihrem Vortrag über Aerosole beleuchtete sie deren enorme Rolle bei der raschen Verbreitung von Substanzen und Mikroorganismen. In zwei Wochen, so Prather, transportiere die Atmosphäre auf diesem Weg Material über den ganzen Globus. Besonders delikat: Luftbläschen durch sich brechende Wellen ebenso wie durch einfließendes Abwasser tragen nahezu alle

erdenklichen (Schad-)Stoffe und Mikroorganismen in die Atmosphäre – von dort kehren diese dann, an Tröpfchen und Partikel gebunden, als Aerosol wieder zu uns zurück.

#### Ehrenmitgliedschaft für Michael Karas

Michael Karas (Goethe-Universität Frankfurt) hat maßgeblich zur Entwicklung, Erforschung und Anwendung der Matrix-unterstützten Laserdesorption/Ionisation (MALDI) und Elektrosprayionisation (ESI) beigetragen. Dafür verlieh ihm nach einer Laudatio der Vorsitzende der DGMS, Thorsten Benter, die

Ehrenmitgliedschaft der Gesellschaft (Abbildung 2). Wie Michael Karas anmerkte, sei die MS jahrzehntelang nicht nur seine Arbeit, sondern auch sein Vergnügen gewesen. Vor ihm hatten bislang nur Curt Brunnée und Franz Hillenkamp die DGMS-Ehrenmitgliedschaft erhalten; beide sind bereits verstorben.

#### Wolfgang-Paul-Studienpreise

Seit 1997 werden die Wolfgang-Paul-Preise für Dissertationen und Masterarbeiten vergeben, die einen deutlichen Beitrag zur Entwicklung der MS leisten. Das Preisgeld von aktuell 5000 Euro für



Abb. 3. Die Wolfgang-Paul-Studienpreise erhielten Kim Greis (Promotionspreis) und Sarah Brandner (Masterpreis). Mit ihnen freuen sich für die Stifterfirma Bruker Daltonics Scarlet Koch (links) sowie der Jury-Vorsitzende Michael Mormann (rechts).

die Promotion und 2500 Euro für die Masterarbeit stiftet seither Bruker Daltonics. Die Wolfgang-Paul-Studienpreise 2024 erhielten Kim Greis (FU Berlin, Promotionspreis) und Sarah Brandner (TU Darmstadt, Masterpreis, Abbildung 3, S. 27). Kim Greis erhielt den Promotionspreis für seine Arbeit „Structural analysis of glycosyl cations and other intermediates using cryogenic infrared spectroscopy“, die er in der Gruppe von Kevin Pagel (FU Berlin) angefertigt hatte. Er präsentierte seine Ergebnisse anschließend in einem Vortrag. Die Masterarbeit von Sarah Brandner, „Influence of metals on the conformation, fragmentation and redox chemistry of peptides and proteins in native mass spectrometry“ bei Frederik Lermyte (TU Darmstadt), wurde auf einem Poster dargestellt.

### MS in den Biowissenschaften

Der Preis für Massenspektrometrie in den Biowissenschaften ist ein Vorschlagspreis, dessen Preisgeld von 5000 Euro in diesem Jahr die DGMS übernahm. Die Jury unter Vorsitz von Kathrin Breuker (Universität Innsbruck, A) hatte Nicola Zamboni (ETH Zürich, CH) für den Preis ausgewählt (Abbildung 4). Zamboni entwickelt und nutzt ausgeklügelte massenspektrometrische Techniken, um den Metabolismus von Bakterien und auch Menschen zu erforschen, im gesunden wie auch im erkrankten Organismus.

### DGMS Young Scientists

Bei ihrem Treffen ermitteln die Mit-

glieder der DGMS-Fachgruppe Young Scientists alljährlich den besten Doktorandenvortrag, der dann auf der nachfolgenden DGMS-Jahrestagung im großen Rahmen präsentiert wird. Er ist zudem mit einem Preisgeld von 500 Euro ausgestattet, gestiftet von Agilent Waldbronn. Maximilian Horstmann aus der Gruppe von Uwe Karst (Universität Münster) zeigte in seinem Vortrag eine Methode, um das rein synthetisch entstehende Isotop  $^{99}\text{Tc}$  ultrasensitiv zu bestimmen; es ist infolge der unterschiedlichsten Nutzung von Radioaktivität überall verbreitet.

### Tagungsprogramm

Mit drei Plenarvorträgen und Keynote-Vorträgen in allen der jeweils drei parallelen thematischen Sessions sowie vielen eingereichten Vorträgen und Postern war das Programm der Tagung

straff getaktet. Auch Workshops waren wieder reichlich um das Tagungsprogramm herum gruppiert. Außerdem schloss sich das Treffen der Fachgruppe LC-MS der Tagung an.

Als Plenarvortragende waren diesmal ausschließlich lokale Forscherkolleg:innen eingeladen, um die Aufwendungen für eingeladene Redner zu minimieren. Am Montagmorgen gab Dirk Haller (TU München) Einblicke in Analyse und Funktion des Mikrobioms im Verdauungstrakt sowie seine Wirkung auf die Gesundheit bzw. das Entstehen von Erkrankungen. Ingrid Kögel-Knabner (TU München) erläuterte die mikroskopische Bodenanalytik mit nanoSIMS. Nicole Strittmatter (TU München) zeigte, dass sich mit MS-Imaging mit Desorption Electrospray Ionisation (DESI) biologische Proben wie Gewebe oder Pflanzenmaterialien charakterisieren lassen.



Abb. 4. Mit dem Preis für Massenspektrometrie in den Biowissenschaften ausgezeichnet wurde Nicola Zamboni von der ETH Zürich (Mitte). Bei der Verleihung dabei waren der Vorsitzende der DGMS, Thorsten Benter (links), und die Jury-Vorsitzende Kathrin Breuker.



Abb. 5. Hamish Stuart von Thermo Fisher in Bremen brennt für Multi-Reflekttron-TOFs.



Abb. 6. Verleihung der Mattauch-Herzog-Preise an Jonas Warneke und Fan Liu durch die Jury-Vorsitzende Andrea Sinz (z.v.l.) und Alexander Harder von der Stifterfirma Thermo Fisher (links)

Was instrumentelle Entwicklungen angeht, stellte der Entwickler Hamish Stewart (Thermo Fisher, Bremen) in seinem Keynote-Vortrag den neuen Multi-reflektron-TOF-Analysator vor, der bereits in einem kommerziellen Gerät verfügbar ist (Abbildung 5, S. 28).

### Konferenzabend bei den Sternen

■ Anstelle eines klassischen Konferenz-Dinners ging es bereits am Montagabend mit Bussen vom Campus Freising zum Planetarium auf dem TUM-Campus Garching. Dort gab es bei Fingerfood und Getränken die Möglichkeit, Vorstellungen des Planetariums zu besuchen und die Ausstellung zu erkunden, die den Bogen von der Sonne über unsere Erde bis in entlegene Galaxien spannt.

### Mattauch-Herzog-Preis

■ Den gewichtigen Mattauch-Herzog-Preis für Nachwuchswissenschaftler:innen bis zum vierzigsten Lebensjahr verliehen die Jury-Vorsitzende Andrea Sinz (Universität Halle) und Alexander Harder von der Stifterfirma (Thermo Fisher, Bremen) am Ende der Tagung an Jonas Warneke (Universität Leipzig) und Fan Liu (Leibniz-Forschungsinstitut für Molekulare Pharmakologie, Berlin, Abbildung 6, S. 28). Das Preisgeld von 12 500 Euro erhielten Fan Liu und Jonas Warneke zu gleichen Teilen. Fan Liu bekam den Preis für ihre Arbeiten zur Entwicklung der Hochdurchsatz-Protein-Crosslinking-Massenspektrometrie, Jonas Warneke für die Entwicklung von Wegen zur Synthese makroskopischer Mengen neuer Substanzen durch die Reaktion massenspektrometrisch deponierter Ionen auf Oberflächen.

### Jahrestagung 2025 in Göttingen

■ Anders als bislang üblich wird die 56. Jahrestagung der DGMS von Dienstag bis Freitag stattfinden, konkret vom 4. bis 7. März 2025, um so die Kollision mit den Fastnachtstagen gering zu halten. Das mehrköpfige Team von MPI und Universität in Göttingen widmet sich schon intensiv den Vorbereitungen.

*Text und Bilder: Jürgen H. Gross,  
Universität Heidelberg*

*Mehr zur DGMS, ihren Tagungen, Fachgruppen  
und Wissenschaftspreisen: [www.dgms.eu](http://www.dgms.eu)*

## 7. Doktorandenseminar des Deutschen Arbeitskreises für Analytische Spektroskopie (DAAS)

15.-17. November 2023, Berlin



*Hands-on-Workshop zur ETV im Labor des Fachbereichs 1.1 (Fotos: BAM)*

■ Im vergangenen November lud das Organisationsteam um Björn Meermann, Leiter des Fachbereichs 1.1 – Anorganische Spurenanalytik, zum siebten Doktorandenseminar des DAAS nach Berlin an die Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM). Die Veranstaltung fand erstmals auf Englisch statt und sprach 55 Teilnehmende aus 5 Ländern an. Neben Doktorandenbeiträgen standen Präsentationen von 11 eingeladenen Gästen auf dem Programm: von Ergebnissen aus der analytischen Forschung über Programmiersprachen zur Datenauswertung, bis hin zu Wissenschaftskommunikation, Metrologie und Gesetzgebung. Getreu dem Motto „von Doktoranden für Doktoranden“ organisierten die Promovierenden Dariya Tukhmetova, Michail Ioannis Chronakis und Vera Scharek die dreitägige Veranstaltung.

In lockerer Atmosphäre präsentierten Promovierende in insgesamt 15 Vorträgen und 11 Posterpräsentationen ihre Ergebnisse. Die Themen reichten von der Charakterisierung von Polymeren über Lithiumionenbatterien bis hin zur Analytik von Nanopartikeln in Lösungsmitteln und Pilzen. Moderiert wurden die Sessions von den PhD-Studierenden des Fachbereichs 1.1 der BAM.

Im Fokus des Seminars stand das Kennenlernen der Promovierenden untereinander und der Austausch von

Ideen. Ein Highlight war das soziale Event am Abend des zweiten Tages, bei dem alle bei Pizza und Getränken zu einem Pub Quiz zusammenkamen. In Teams galt es, Fragen zu Allgemeinwissen und Wissenschaft zu beantworten sowie Audioclips zu identifizieren. Michail Ioannis Chronakis führte durch den Abend.

Bei einem Workshop zur Feststoffanalysetechnik Elektrothermische Verdampfung, kurz ETV, lernten die Teilnehmenden Grundlagen, Anwendungsgebiete sowie neue Entwicklungen kennen. Mit Thomas Vogt von der TU Bergakademie Freiberg, Peter Perzl von Spectral Systems Advanced Technologies und Dirk Wuestkamp von der Firma Spectro beantworteten drei Experten der ETV-Kopplung mit ICP-OES die Fragen der Teilnehmenden. Martín Resano (Universität Saragossa, Spanien)

### Anmerkung des Herausgebers:

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



Teilnehmende des DAAS-Doktorandenseminars

stellte in „Graphite furnace techniques for atomic, molecular and isotopic analysis“ seine langjährige Forschung zu Graphitofentechniken vor. Im Anschluss gab es bei einer Führung durch die Labore des Fachbereichs 1.1 die Möglichkeit, die ETV in einem Hands-on-Workshop in Praxis zu sehen und Fragen direkt an den Gerätehersteller Peter Perzl zu stellen, der mit seiner Firma kommerziell erhältliche ETV-Geräte produziert.

Thibaut Van Acker (Universität Gent, Belgien) trug über die Laserablation-ICP-MS vor und Mario Corte-Rodriguez (Universität Oviedo, Spanien) über Single-particle- und Single-cell-ICP-MS in biomedizinischen Analysen. Heinrich Kipphardt (BAM) führte in die Welt der Metrologie ein und sprach über die Herstellung zertifizierter Referenzmaterialien.

Auch die berufliche Orientierung und weitere im Kontext einer Promotion relevante Aspekte hatten einen wichtigen Stellenwert im Programm. So erklärte Jan Lisec (BAM), wie man schwimmen lernt, wenn man in seinen Daten ertrinkt. Sofia Pazzagli (HU Berlin) zeigte auf unterhaltsame Weise, welche Möglichkeiten es gibt, die eigene Forschung zu kommunizieren, und Lennart Gehrenkemper (UBA) berichtete von seiner Arbeit als analytischer Chemiker in der Politikberatung.

Eine Podiumsdiskussion gab den Teilnehmenden Einblicke in Karrierewege nach der Doktorarbeit. Auf dem Podium saßen Stefanie Fingerhut (Merck), Björn Meermann (BAM), Petra Metz (Leiterin des Förderprogramms

für Frauen in der Wissenschaft der Humboldt-Universität zu Berlin) und Lennart Gehrenkemper vom Umweltbundesamt.

Zum Abschluss freuten sich die Promovierenden mit dem besten Poster bzw. den beiden besten Präsentationsbeiträgen jeweils über einen Springer-Buchgutschein im Wert von 100 Euro, gesponsert von ABC. In der Kategorie „bestes Poster“ stimmten die Teilnehmenden für Amelie Huber von der Universität Ulm mit ihrem Beitrag „Revolutionizing Diclophenac Sodium Salt Quantification: Molecularly Imprinted Polymers for Preconcentration Facilitation On-Line IR-ATR Analysis in Aqueous Matrices“. Die Auszeichnungen für die besten Präsentationen gingen an Teres Pietschner von der TU Bergakademie Freiberg für ihren Vortrag „Investigations of phosphorus release behavior from sewage sludge by ETV-ICP-OES to optimize phosphorus recovery processes“ und an Dominik Wippermann von der Universität Hamburg zu „Using ICP-MS/MS to study the impact of offshore wind farms on the marine environment“.

Das Organisationsteam dankt allen, die zum Erfolg der Veranstaltung beigetragen haben, insbesondere ABC für das Sponsoring der Awards, den Mitarbeitenden des Fachbereichs 1.1 – Anorganische Spurenanalytik sowie allen Vortragenden, die den teilweise weiten Weg auf sich genommen haben.

Vera Scharek und Björn Meermann

## CE-Forum

28.-29. Februar 2024, Aalen

■ Als sich im Juni 2023 ehemalige Doktoranden der Arbeitsgruppe Neusüß von der Hochschule Aalen in den Niederlanden mit Blick auf die Nordsee trafen, kam die Frage auf, warum das CE-Forum eigentlich nicht mehr stattfindet (CE = Capillary Electrophoresis). Wir alle hatten die familiäre Atmosphäre dieser kleinen Konferenz geschätzt, bei der die Elektrophorese ausnahmsweise mal im Mittelpunkt steht. Daher gingen wir nach der Covid-Pause daran, das CE-Forum wiederzubeleben.

Im Gegensatz zu den Vorjahren dehnten wir die Einladungen auf das europäische Ausland und die Industrie aus. Von 2009 bis 2019 hatte das CE-Forum an Universitäten, bei Firmen und in Forschungszentren in Deutschland stattgefunden: in Marburg, Regensburg und Jena, bei Agilent in Waldbronn oder beim Fraunhofer ICT im Pfinztal. Während der Pandemie gab es leider nur einen Versuch, es 2020 online stattfinden zu lassen.

Im Februar versammelten sich dann 65 CE-Interessierte aus Industrie und Wissenschaft an der Hochschule Aalen für anderthalb Tage voller Vorträge, Posterpräsentationen, interaktiven Ausstellungen und Abendessen. Die Konferenz eröffnete eine fesselnde Keynote von Phillippe Schmid-Kopplin. Die folgende Session widmete sich (Glyco-)Proteomics, mit Single-Cell-Analyse (Guinevere Lageveen-Kammeijer, Universität Groningen, NL) bis zur Entschlüsselung der Phosphorylierungsmuster von G-Protein-Rezeptoren (Kevin Jooß, Freie Universität Amsterdam, NL). Die Nachmittags-session befasste sich mit Themen aus der Biopharma; hier präsentierten Firmen wie Solvias und Boehringer Ingelheim Pharma sowie Hersteller wie Agilent, 908devices und Sciex neue Instrumente und Veränderungen der CE in der Pharma- und Biopharmaindustrie. Im Anschluss lebten die Teilnehmenden ihren Entdeckergeist im Experimentemuseum „Explorhino“ aus, bevor sie bei einem 3-Gänge-Menü im Restaurant Eichenhof den Tag Revue passieren ließen.

Der zweite Tag begann mit einer weiteren Biopharma-Session: Es gab unter

anderem Vorträge zur Forschung an pI-Markern für die isoelektrische Fokussierung (Filip Duša, Institute of Analytical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, CZ) sowie zur CE-MS-Untersuchung entzündungshemmender Medikamente (Pavel Jác; Charles University, Faculty of Pharmacy in Hradec Králové, CZ). Eine Session zu „Novel Approaches“ schloss die Veranstaltung ab und gewährte Einblicke in weniger bekannte Anwendungsmöglichkeiten der Elektrophorese, darunter die Aufarbeitung von Batterien (Dominik Müller, ICT Fraunhofer), CE-Ion-Mobility-Kopplungen (Johann Far & Marianne Fillet, Université de Liège, BE) sowie Multidetektionskonzepte (Martin Koall, Universität Regensburg).

Simon Hertweck (Universität Tübingen) und Jordy Kruijswijk (Freie Universität Amsterdam, NL) erhielten jeweils einen Preis für das beste Poster, und



Teilnehmende beim CE-Forum 2024 an der Hochschule Aalen (Foto: J. Meixner)

Guinevere Lageveen-Kammeijer (Universität Groningen, NL) wurde für den besten Vortrag ausgezeichnet.

Ein herzlicher Dank geht an alle Helfer aus der Arbeitsgruppe Neusüß sowie an Sciex, Agilent und den AK Separation Science für die finanzielle Unterstüt-

zung und das Bereitstellen der Reisestipendien. Das nächste CE-Forum wird 2025 voraussichtlich in den Niederlanden stattfinden.

Jens Meixner, Kevin Joß  
und Jennifer Römer

## Preise & Stipendien

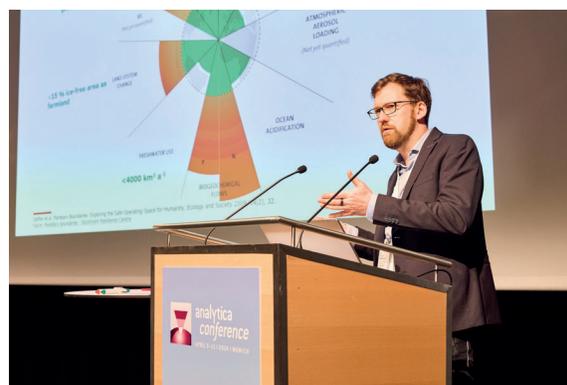
### Bunsen-Kirchhoff-Preis für Björn Meermann

■ Björn Meermann von der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) in Berlin wurde im Rahmen der analytica conference 2024 in München für seine exzellenten Entwicklungen in der Analytik per- und polyfluorierter Alkylverbindungen mit dem Bunsen-Kirchhoff-Preis für Analytische Spektroskopie 2024 ausgezeichnet. Die Ehrung ist mit einem Preisgeld in Höhe von 3000 Euro verbunden, bereitgestellt durch den Sponsor Analytik Jena.

Nach dem Studium der Chemie an der Universität Münster und seiner Promotion in der Arbeitsgruppe von Uwe Karst im Jahr 2009 wechselte Meermann für zwei Jahre als Postdoktorand zu Frank Vanhaecke an die Universität Gent in Belgien, gefördert durch ein Stipendium der Leopoldina. Es folgte ab 2012 eine Anstellung an der Bundesanstalt für Gewässerkunde in Koblenz in der Abteilung von Thomas Ternes; hier begann er, seine eigene Arbeitsgruppe aufzubauen. Seine Arbeiten dort wurden teilweise durch das Programm „eigene Stelle“ der Deutschen Forschungs-

gemeinschaft (DFG) gefördert. Seit Juni 2019 ist Björn Meermann Leiter des Fachbereichs 1.1 (Anorganische Spurenanalytik) an der BAM in Berlin und plant, seine Habilitation an der TU Bergakademie in Freiberg durchzuführen. Auf der ANAKON 2019 wurde Meermann mit dem Fachgruppenpreis der Fachgruppe Analytische Chemie ausgezeichnet.

Die Forschungsschwerpunkte von Björn Meermann umfassen mehrere Themen aus der Elementanalytik an der Grenzfläche zwischen Material und Umwelt, darunter die Charakterisierung einzelner Nanopartikel und einzelner Zellen durch die ICP-MS. Hierzu setzt er verschiedene Strategien zur Vereinzelung der Partikel und Zellen zumeist in Kombination mit einem Flugzeitmassenanalysator ein, der eine simultane Multi-elementanalytik ermöglicht. Ein weiterer wesentlicher Schwerpunkt seiner Arbeiten ist die Untersuchung per- und polyfluorierter Alkylverbindungen (PFAS) mit der hochauflösenden, kontinuierstrahlerbasierten Molekülabsorptionsspektroskopie – Basis für seine Auszeich-

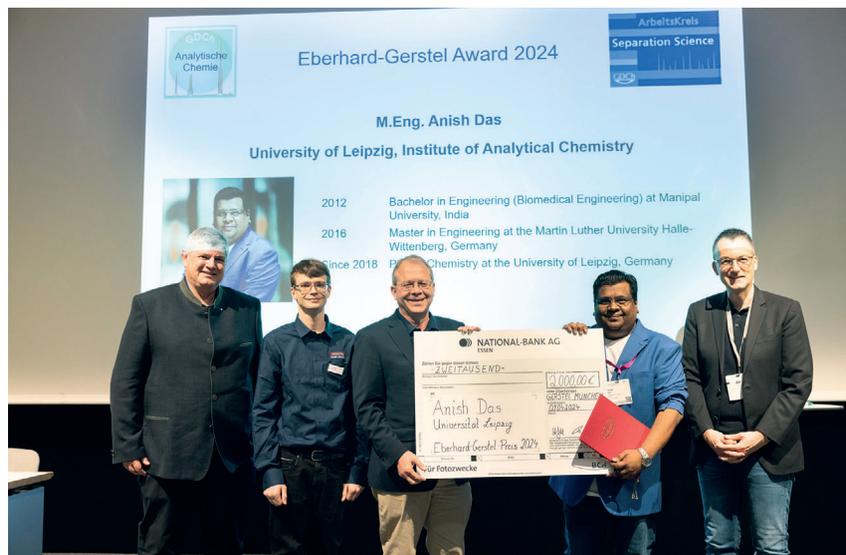


Björn Meermann während seines Preisvortrags in der Bunsen-Kirchhoff Award Session (Foto: Messe München)

nung mit dem Bunsen-Kirchhoff-Preis. Im Namen des Vorstands und der Mitglieder des Deutschen Arbeitskreises für Analytische Spektroskopie (DAAS) gratulieren wir Björn Meermann herzlich zu der Auszeichnung und wünschen ihm für seinen wissenschaftlichen Werdegang weiterhin viel Erfolg!

Uwe Karst, Münster  
Carsten Engelhard, Berlin

## Eberhard-Gerstel-Preis 2024 für Anish Das



Eberhard-Gerstel-Preisträger Anish Das (z.v.r.) nimmt den symbolischen Scheck entgegen. Bei der Übergabe dabei: Peter Wiersdörfer, Florian Gerstel und Holger Gerstel (alle von der Firma Gerstel) sowie Martin Vogel (von links) (Foto: Messe München)

Seit 2010 verleiht der Arbeitskreis Separation Science alle zwei Jahre im Rahmen der analytica conference in München den Eberhard-Gerstel-Preis für eine herausragende Publikation in den analytischen Trenntechniken sowie in der Probenvorbereitung, einschließlich der Miniaturisierung und der Automatisierung. Aus den zahlreichen Nominierungen und Bewerbungen würdigte die Jury in diesem Jahr als beste Arbeit die Publikation „On-the-fly mass spectrometry in digital microfluidics enabled by a microspray hole: Toward multidimensional reaction monitoring in automated synthesis platforms“.<sup>1)</sup> Sie

beschreibt die Kopplung der digitalen Mikrofluidik (DMF) mit der Massenspektrometrie (MS) über eine auf den Chip integrierte Mikrosprayöffnung. Hiermit gelang es zum ersten Mal, kleine Probenvolumina vom Chip zu entnehmen, ohne den mikrofluidischen Prozess zu stören. Das erlaubt zum Beispiel die Analytik chemischer Reaktionen auf einem Chip in Echtzeit.

Erstautor dieser Publikation und Eberhard-Gerstel-Preisträger des Jahres 2024 ist Anish Das von der Universität Leipzig. Die Ko-Autorinnen und Ko-Autoren sind Chris Weise, Matthias Polack, Raphael D. Urban, Benjamin

Krafft, Sadat Hasan, Hannes Westphal, Rico Warias, Simon Schmidt und Tanja Gulder; Korrespondenzautor ist Detlev Belder (alle Universität Leipzig).

Die Verleihung fand am ersten Tag der analytica conference statt. Katja Dettmer-Wilde als Vorsitzende der Auswahljury hielt die Laudatio auf Anish Das. Er erwarb im Jahr 2012 einen Bachelor in Biomedical Engineering an der Manipal University in Indien und machte 2017 seinen Master in Engineering an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg. Seit 2018 fertigt er seine Promotion in der Arbeitsgruppe Belder an der Universität Leipzig an.

Der Preisträger brachte dem Auditorium die Inhalte seiner ausgezeichneten Arbeit näher. Später folgte ein Empfang am Stand der Firma Gerstel in den Messhallen. Der Vorstand des Arbeitskreises gratuliert Anish Das noch einmal herzlich zu seiner Auszeichnung.

Der Preis erinnert an Eberhard Gerstel Senior (1927–2004), der mit der Gründung seiner Firma „Labormechanik Gerstel“ in Mülheim an der Ruhr im Jahr 1967 die Grundlage für das heute national und international bekannte Unternehmen Gerstel gelegt hat. Mit seinem Motto „Innovation beginnt im Kopf“ hat Eberhard Gerstel nicht nur sein unternehmerisches Wirken geprägt, sondern auch das Ziel des heutigen Eberhard-Gerstel-Preises mit vorgegeben: herausragende und innovative Arbeiten von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern zu fördern. Der Preis ist mit 2000 Euro dotiert, gestiftet von der Firma Gerstel. Sowohl Bewerbungen als auch Nominierungen sind möglich. Es werden Arbeiten berücksichtigt, die in den beiden Jahren vor der jeweiligen analytica conference erschienen sind. Über die Verleihung entscheidet eine elfköpfige Jury, die von Katja Dettmer-Wilde koordiniert wird (Universität Regensburg und Mitglied im erweiterten Vorstand des Arbeitskreises Separation Science).

Martin Vogel, Universität Münster



### Literatur

1) *J. Am. Chem. Soc.* 2022, 144, 10353–10360.

### Zum Tode von Herbert Knauer (1931 – 2024)

Am 18. Januar 2024 verstarb im Alter von 92 Jahren Dr.-Ing. Herbert Knauer, einer der Pioniere in der instrumentellen Entwicklung für die Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC). Herbert Knauer war bis zu seinem Lebensende ein kreativer und technisch innovativer Geist und als Wissenschaftler sowie Unternehmer zeitlebens der chromatographischen Community eng verbunden. Die Freude, auch nach der Übergabe des Staffelstabs der „Wissenschaftliche Gerätebau Dr. Ing. Herbert Knauer GmbH“ im Jahr 2000 an die nächste Generation auf Tagungen und Messen noch aktiv dabei zu sein, war ihm stets anzusehen.

Herbert Knauer wurde am 12. September 1931 in Berlin geboren, wo er in den 1950er Jahren an der Technischen Universität Chemie studierte und 1958 seine Promotion abschloss. Dort war er bis zum Beginn der 1960er Jahre als Assistent am Institut für Anorganische Chemie tätig. Seine Leidenschaft für das Tüfteln und Entwickeln von Messgeräten, die sich schon während seiner Doktorandenzeit zeigte, trieb ihn schließlich dazu, im Jahr 1962 gemeinsam mit seiner Frau Roswitha Knauer die Firma zu



Herbert Knauer

gründen, die heute den meisten unter der eingängigen Kurzform „Knauer“ bekannt ist.

Von da an wuchs die Firma stetig, so dass sie im Jahr 1974 ein großes eigenes Firmengebäude bezog, und Arbeiten nicht mehr länger in einer Wohnung oder dem Wohnhaus stattfinden mussten. Während die technischen Ursprünge der Firma anfangs in der Entwicklung und Herstellung von Temperaturmessgeräten und Osmometern lagen, begann man 1973 mit der Geräteentwicklung für die HPLC, die nur wenige Jahre später zum wichtigsten Standbein wurde.

Die Firma Knauer, repräsentiert durch Herbert und Roswitha Knauer, war in jenen Jahren auf Messen und Tagungen sowohl in West als auch in Ost präsent und legte damit bereits den Grundstein für die heute weltweite Bekanntheit des Unternehmens. Es wird inzwischen in zweiter Generation erfolgreich fortgeführt und weiterentwickelt (Mitteilungsblatt 01/2023).

Mit dem Tod von Herbert Knauer hat seine Familie den geliebten Ehemann, Vater und Großvater verloren, die Firma Knauer den inspirierenden Gründer und seine Freunde einen kreativen und geschätzten Menschen. Der Arbeitskreis Separation Science und die analytischen Trenntechniken in Deutschland verlieren mit Herbert Knauer nicht nur einen Pionier in der HPLC-Gerätetechnik, sondern auch einen langjährigen Förderer und Unterstützer des wissenschaftlichen Austausches, sei es in Form von Tagungen oder Doktorandenseminaren. Für seinen Einsatz sind wir ihm zutiefst in Dank verbunden.

*Martin Vogel,*

*Vorsitzender des AK Separation Science,  
Universität Münster*

### Zum 80. Geburtstag von Günter Gauglitz



Am 20.3.2024 feierte Günter Gauglitz von der Universität Tübingen seinen 80. Geburtstag. (Foto: J. Riedt)

**G E B U R T S T A G**  
**>450 P U B L I K A T I O N E N**  
**E D I T O R**  
**B I O S E N S O R E N**  
**S P E K T R O S K O P I E**  
**C H E M O M E T R I E**  
**R E F L E K T O M E T R I E**

**T Ü B I N G E R T A F E L**  
**W A N D E R N**  
**F R E U N D**  
**G U M M I B Ä R C H E N**  
**B A R O L O**  
**A K T I V**  
**M E N T O R**  
**A C H T Z I G**

## Geburtstage

Wir gratulieren unseren Mitgliedern, die im dritten Quartal 2024 einen runden Geburtstag feiern, und wünschen alles Gute:

### Zum 60. Geburtstag

Karin Bischler, Stutensee  
Rainer Brindle, Horb  
Thomas Gude, Rohr, Schweiz  
Jörg Kutter, Værløse, Dänemark  
Frank-Michael Matysik, Regensburg  
Jörg Pietsch, Dresden  
Frank Schael, Darmstadt  
Wolfgang Schrader, Mülheim/Ruhr

### Zum 65. Geburtstag

Frank Bier, Potsdam  
Jutta Funk, Öhringen  
Michael Krausa, Panketal  
Axel Kretschmer, Braine l'Alleud, Belgien  
Andreas Neudeck, Reichenbach  
Johann Oswald, Essenbach  
Jürgen Otte, Waake  
Ulrich W. Scherer, Jülich

### Zum 70. Geburtstag

Karl-Heinz Bauer, Mainz  
Günter Georg Hoffmann, Oberhausen  
Rudolf Kaiser, Rain  
Michael Pfeffer, Berlin  
Werner Schrödl, Amberg  
Henrik Schulz, Berlin

### Zum 75. Geburtstag

Dagmar de Parade, Taucha  
Wolfgang Grünert, Berlin  
Herbert Lepper, Gießen  
Naoum Sistovaris, Frankfurt am Main  
Rudolf Wewer, Neubiberg  
Manfred Wiegand, Ingelheim

### Zum 80. Geburtstag

Josef Tunka, Lingen  
Gernot Wurm, Keutschach, Österreich

### Zum 85. Geburtstag

Siegfried Ganschow, Zahna-Elster  
Bertold Hock, Freising

### Zum 90. Geburtstag

Hans Georg Struppe, Görlitz  
Gunther Themm, Berlin  
Friedrich Zimmermann, Emmendingen

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

---

## GDCh-Fortbildungen

---

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

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

11. September 2024, Frankfurt am Main

**Die Qualitätssysteme GMP (Gute Herstellungspraxis) und GLP (Gute Laborpraxis) im Überblick** – Ein Leitfaden der Guten Praxis, Einzel- oder als Fachprogramm „Geprüfter Qualitätsexperte GxP GDCh (m/w/d)“ buchbar (Kurs-ID: 511/24)

Leitung: Dr.-Ing. Barbara Pohl

16. – 18. September 2024, Köln

**Massenspektrometrische Messmethodik und Dateninterpretation** (Kurs-ID: 319/24)

Leitung: Prof. Dr. Mathias Schäfer

17. – 19. September 2024, Frankfurt am Main

**GLP-Intensivtraining mit QS-Übungsaufgaben: Methodenvalidierung und Gerätequalifizierung unter GLP (Gute Laborpraxis)** – Mit Praxisteil, Einzel- oder als Fachprogramm „Geprüfter Qualitätsexperte GxP GDCh (m/w/d)“ buchbar (Kurs-ID: 536/24)

Leitung: Prof. Dr. Jürgen Pomp

19. – 20. September 2024, Frankfurt am Main

**Innovationsmanagement in der Chemie**, Einzel- oder als Fachprogramm „Geprüfter Wirtschaftskemiker GDCh (m/w/d)“ buchbar (Kurs-ID: 929/24)

Leitung: Prof. Dr. Johann Nils Foege

23. – 26. September 2024, Frankfurt am Main

**NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung**, Fortgeschrittenenkurs (Kurs-ID: 506/24)

Leitung: Prof. Dr. Reinhard Meusinger

24. – 26. September 2024, Mainz

**Grundlagen der praktischen NMR-Spektroskopie für technische Beschäftigte** (Kurs-ID: 334/24)

Leitung: Dr. Johannes C. Liermann

30. September – 1. Oktober 2024, Frankfurt am Main

**GMP-Intensivtraining: Hintergründe und Essentials der GMP (Gute Herstellungspraxis) auf deutscher, europäischer und amerikanischer Ebene** – mit Praxisteil, Einzel- oder als Fachprogramm „Geprüfter Qualitätsexperte GxP GDCh (m/w/d)“ buchbar (Kurs-ID: 535/24)

Leitung: Dipl.-Ing. Jürgen Ortlepp

8. – 10. Oktober 2024, Mainz

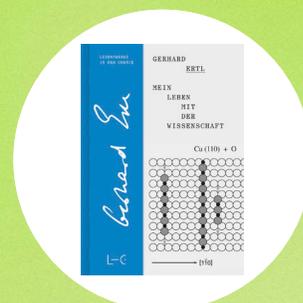
Fortgeschrittene praktische NMR-Spektroskopie für technische Beschäftigte (Kurs-ID: 335/24)

Leitung: Dr. Johannes C. Liermann



# Der neue GDCh-Shop

Bücher, Bekleidung, Fan-Artikel, Spiele und mehr!



[shop.gdch.de](http://shop.gdch.de)

Alle Erlöse aus dem Shop fließen in die Förderung der Chemie!



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

Telefon: +49 (0)69 7917-499

60486 Frankfurt am Main

E-Mail: [c.kniep@gdch.de](mailto:c.kniep@gdch.de)



## TAGUNGEN & VERANSTALTUNGEN

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

## KOOPERATIONEN

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

## MITGLIEDSCHAFT

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

## VORSTAND DER FACHGRUPPE

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

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

**Dr. Catharina Erbacher**, BASF SE, Ludwigshafen

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

**Prof. Dr. Margit Geißler**, Hochschule Bonn-Rhein-Sieg

**Prof. Dr. Kerstin Leopold**, Universität Ulm

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

**Dr. Martin Wende**, BASF SE, Ludwigshafen

[www.gdch.de/analytischechemie](http://www.gdch.de/analytischechemie)