



AG Stabilisotopenanalytik Jahresbericht 2014

Obmann: Prof. Dr. Philipp Weller, Mannheim

Die Arbeitsgruppe Stabilisotopenanalytik hatte 2014 einen Mitgliederstand von 15 aktiven und 11 korrespondierenden Mitgliedern. Im Berichtsjahr 2014 und den Sitzungen der Arbeitsgruppe, die gemäß eines gemeinsamen Beschlusses erstmalig zwei Mal im Jahr am 4.6.14 und am 9.12.14 stattfanden, wurden folgende Schwerpunktthemen diskutiert und bearbeitet:

Weiterführung regelmäßiger "kleiner" Proficiency Tests: Die im Jahr 2012 begonnenen „Kleinen Proficiency Tests (KPTs) waren auch 2014 ein wichtiges Thema der Diskussionen innerhalb der AG. Die KPTs sollen langfristig zur Verbesserung der Vergleichbarkeit der Isotopenmessungen dienen, insbesondere der deutschen Isotopenlabore; derzeit beteiligen sich 10 Labore an diesem Projekt. Die KPTs werden kostenfrei durchgeführt und die Mitwirkung ist jederzeit freiwillig. In Fortführung der Jahre 2012/2013 wurden 2014 weitere Matrices diskutiert und definiert: u.a. Weinwasser für $\delta^{18}\text{O}$ -Wert und Caseine für $\delta^{13}\text{C}$ -, $\delta^{15}\text{N}$ - und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte. Hierzu werden den teilnehmenden Labors entsprechende Proben zur Analyse verschickt, analog zum bisherigen Verfahren.

Als wichtiger Aspekt der Vergleichbarkeit wurde die Probenaufarbeitung diskutiert, da diese einen erheblichen Einfluss auf die Isotopenwerte haben kann und somit zu nicht vergleichbaren Werten führen kann. Dies soll an verschiedenen, gängigen Matrices untersucht werden. Als erste Prozedur soll die Entfettung untersucht werden, da hierbei signifikante Einflüsse auf den $\delta^{13}\text{C}$ -Wert zu beobachten sind. Hierzu soll Maismehl als erste Versuchsmatrix dienen.

Die bisher durchgeführten KPTs zeigen nach wie vor eine relativ gute Vergleichbarkeit der einzelnen Labors, allerdings machen sie auch deutlich, wie wichtig eine möglichst gleiche Aufarbeitung und Probenvorbereitung für die Isotopenwerte ist.

Aufbau einer onlineverfügbaren Datenbank für Stabilisotopenwerte von Inhaltsstoffen verschiedener Lebensmittel: Eine im Jahre 2013 gestartete Excel-basierte Datenbanklösung soll als Interimslösung dienen, bis geklärt werden kann, wie und wo eine SQL-basierte Datenbank gehostet werden kann. Grundsätzlich ist dies zwar unter der Stamm-Domäne der GDCh/LChG möglich, allerdings ist bislang noch nicht abschließend geklärt, wie die Frage der Zugriffsrechte zufriedenstellend beantwortet werden kann. Auch die Frage nach der Administration muss noch geklärt werden.

Die Excel-Zwischenlösung sollte weiterhin das Eingabeverhalten und vor allem die Nutzbarkeit der eingegebenen Daten (z.B. Aufbau von Statistiken) evaluieren.

Die Lebensmittel bzw. Matrices, welche hierzu für eine Machbarkeitsstudie definiert wurden, waren zunächst:

- Tomaten
- Erdbeeren
- Karotten
- Spirituosen
- Schweinefleisch
- Säfte
- Eier

Das derzeitige System arbeitet aufgrund seiner Struktur noch dezentral, was Schwierigkeiten für eine gemeinsame Nutzung mit sich bringt (v.a. die Konsistenz der zentral abgelegten Kopie der Excel-Datenbank ist kritisch). Dies macht umso mehr deutlich, dass eine zentrale SQL-Lösung der zukünftige Weg sein muss. Die Eingabe der Daten bereitet derzeit noch Schwierigkeiten, was im Wesentlichen an der unterschiedlichen Arbeitsstruktur der Labore liegt

(Aufarbeitung, Messung der Proben, Dokumentation etc.). Die LIMS-Systeme der mitwirkenden Labore erlauben oft keinen für die Datenbank nutzbaren Datenexport, d.h. die Dateneingabe muss dann zeitaufwändig von Hand erfolgen. Weiterhin zeigte sich, dass auch die Auswertung und Nutzung der Daten (z.B. statistische Auswertung) noch Potential zur Verbesserung aufweist. Grund hierfür sind u.a. die fehlenden Tools für multivariate Statistik in Excel, die nötig sind um beispielsweise eine Hauptkomponentenanalyse durchzuführen.

Nichtsdestotrotz ist aber klar erkennbar, dass der Bedarf für eine derartige Datenbank gegeben ist. Die AG diskutiert derzeit über die Möglichkeiten, eine SQL-basierte Datenbank mit einem webbasierten Frontend und statistischen Tools aufzubauen, die die Probleme der Excel-basierten Lösung nicht mehr aufweisen wird.

Einsatz stabiler Isotope zur Differenzierung von konventionellem und ökologischer Anbau/Lebensmittelproduktion: Die Nachfrage nach biologisch erzeugten Produkten ist nach wie vor ungebrochen und hat damit zu einer drastischen Zunahme des Handels mit Bioprodukten geführt. Die analytische Differenzierung zwischen konventioneller und biologisch produzierter Ware ist nach wie vor komplex und nicht grundsätzlich möglich.

Eine prinzipielle Möglichkeit der Differenzierung zwischen konventioneller und ökologischer Herstellung von Lebensmitteln ist die Bestimmung des $\delta^{15}\text{N}$ -Wertes. Die-se beruht darauf, dass das Verbot der Verwendung von Mineraldünger ein Kriterium für ökologischen Anbau ist.

Es kann allerdings zu Überschneidungen kommen, weil die Selektivität der Isotopenanalytik nicht in allen Fällen hoch genug ist. Beispielsweise kann der Fall, dass im konventionellen Anbau nicht zwingend synthetisch gedüngt wird, unter Umständen zu einer Falschpositivbewertung führen.

Es besteht dann die Möglichkeit, dass das konventionelle Produkt fälschlicherweise als Bioprodukt klassifiziert wird.

Auch die multivariate Kombination mehrerer Elemente simultan (C, O, S) Verrechnung führt nicht immer zum Ziel, weswegen in zwei Machbarkeitsstudien des CVUA Freiburg Möglichkeiten der Kombination von Isotopendaten und orthogonalen Daten aus anderen Analyseverfahren evaluiert wurden.

Erste Untersuchungsergebnisse zur Differenzierung von Bio- und konventionellen Tomaten-Referenzproben aus Deutschland und Spanien machten deutlich, dass der $\delta^{15}\text{N}$ -Wert oft allein nicht zur optimalen Differenzierung beiträgt. Als vielversprechender erweist sich dessen Kombination mit weiteren Analysenparametern wie z.B. Elementanalytik (Cd, Pb) oder ^1H -NMR-Daten.

Ein weiteres Projekt des CVUA Freiburg zur Differenzierung von Biomilch und konventioneller Milch untersuchte die Anwendbarkeit der komponentenspezifischen Isotopenanalyse der $\delta^{13}\text{C}$ -Werte der Milch-Fettsäuren. Die Ergebnisse zeigen, dass alle Fettsäuren gleichermaßen vom $\delta^{13}\text{C}$ -Wert des Futters beeinflusst werden und dass eine höhere Aussagesicherheit zur Authentizität der Milchproben durch die komponentenspezifische Analyse erreicht wird.

Für das Jahr 2015 sind weitere dieser Machbarkeitsstudien im Gespräch, bei denen auch Metabolomic-Techniken (non-targeted-NMR, -MS) zum Einsatz kommen sollen. Dies soll bei der Bewertung helfen, ob zusätzliche Analysetechniken grundsätzlich oder nur in speziellen Fällen einen Vorteil bringen können.