



GDCh

Gesellschaft
Deutscher Chemiker

Fachgruppe
Analytische Chemie

Analytica Sessions

Im Fokus: Analytik Jena

Nachruf Prof. Egert

Mitteilungsblatt
3/2016



¹U ²N ³V ⁴E ⁵R ⁶Z ⁷I ⁸C ⁹H ¹T ²B ³A ⁴R ⁵E
¹B ²A ³U ⁴S ⁵T ⁶E ⁷I ⁸N ⁹E ²I ³H ⁴R ⁵E ⁶R
¹K ²A ³R ⁴R ⁵I ⁶E ⁷R ⁸E



Workshops **Information**

Konzepte **Kolloquien** Netzwerk

Beratung **Perspektiven** Wissen **Impulse** Beratung

Tagungen Konzepte **International** Karriereservice

Kurse Diskussion Beratung **Fortbildung** Jobbörse

Workshops **Kurse** Fortbildung **Forschung** Kolloquien

Netzwerk Tagungen **Beratung** Informationen **Konzepte**

Fortbildung **Jobbörse** Kurse **Wissen**

Diskussion Karriereservice

www.gdch.de



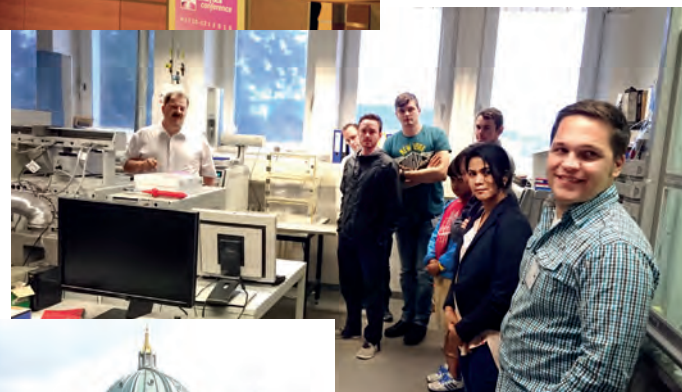
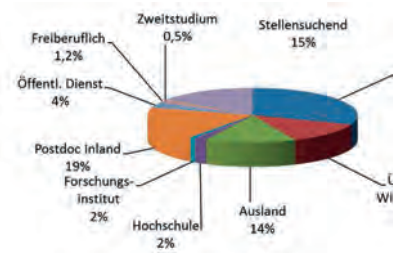
GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V.
 Postfach 90 04 40
 60444 Frankfurt am Main

Telefon: 069 7917-0
 Fax: 069 7917-232
 E-mail: gdch@gdch.de

Inhalt 3/2016

| | |
|---|----|
| Editorial | 4 |
| Analytik in Deutschland | |
| Analytik Jena | 5 |
| Chemie Aktuell | |
| Massennormale für das neue Kilogramm | 7 |
| Steigende Anfängerzahlen in der Chemie | 9 |
| Neue Medien | |
| ABC in Kürze | 10 |
| analytica conference | |
| analytica 2016 | 11 |
| Sessionberichte der analytica conference | 12 |
| Tagungen | |
| Frühjahrsschule in Tübingen | 26 |
| Exkursion der Frühjahrsschule zu Eurofins | 28 |
| Junganalytikertreffen in Duisburg | 29 |
| Mycotoxin Workshop | 30 |
| 3D Cell Culture | 31 |
| Anwendertreffen Plasmaspektroskopie | 31 |
| SETAC 2016 | 32 |
| ISCC 2016 | 32 |
| ASMS 2016 | 33 |
| XVI Chemometrics in Analytical Chemistry | 34 |
| Preise & Stipendien | |
| Gerstel Preis an Beutner | 35 |
| Ausschreibungen | |
| Wolfgang-Paul-Preis | 36 |
| Clemens-Winkler-Medaille | 36 |
| Mattauch-Herzog-Preis | 36 |
| MS in den Biowissenschaften | 38 |
| Agilent MS Research Summer | 38 |
| DAC-EuCheMS-Award und Robert-Kellner-Lecture | 38 |
| Ernst-Bayer-Preis | 39 |
| Bunsen-Kirchhoff-Preis | 39 |
| DAAS-Preis | 39 |
| Gerhard-Hesse-Preis | 40 |
| Personalia | |
| Nachruf Prof. Ernst Egert | 40 |
| Geburtstage | 41 |
| GDCh-Fortbildungen | 42 |
| Tagungskalender | 42 |
| Impressum | 15 |



Editorial

Liebe Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie,



ANAKON 2017: 3.-6. April im schönen Tübingen

■ Analytik mit Tradition - Unter diesem Motto steht die ANAKON 2017, die vom 3. bis 6. April in Tübingen stattfinden wird. Es deutet auf die in Tübingen traditionell starke Analytik hin, heute mit Professuren in der Gas- und Biosensorik, der Umwelt-, Bio- und pharmazeutischen Analytik aber auch der Oberflächenanalytik und Spektroskopie, entwickelt u.a. aus einer langen Tradition in der Chromatographie. Beginnend mit den Ursprüngen der Chromatographie bis hin zu den Tübinger Trennsäulen, die heute die Rosetta-Mission auf der Suche nach dem Ursprung der Chiralität begleiten. Tübingen spiegelt somit im Kleinen die Breite der Analytischen Chemie wider, wie sie für unsere ANAKON wegweisend geworden ist.

Wir laden Sie daher herzlich ein, aktuelle analytische Forschung von instrumentellen Innovationen über Grundlagenforschung und Methodenentwicklung bis hin zu Anwendungen auf der Tübinger ANAKON zu diskutieren. Treffen Sie Kollegen aus Deutschland, Österreich und der Schweiz, aus Hochschulen, Forschungseinrichtungen, Behörden und Industrie und lassen Sie sich durch Gerätehersteller beraten und die neusten Entwicklungen zeigen. Nutzen Sie auch die Gelegenheit, in einer

Jobbörse Arbeitgeber kennenzulernen oder neue Mitarbeiter zu begeistern.

Unsere methodischen Themen umfassen Chemometrie, Diagnostik/POCT, Bildgebende Verfahren, Oberflächenanalytik, Chemo- und Biosensoren, Miniaturisierung, Mikrofluidik, Kopplungstechniken, Massenspektrometrie, Probenvorbereitung und Trenntechniken, Prozessanalytik, Atom- und Molekülspektroskopie. Auch anwendungsorientierte Forschung findet ihren Platz im Bereich Wasser- und Umweltanalytik, Pharmazeutische Analytik, Element- und Speziaanalytik, Nanoanalytik, Bioanalytik sowie klinische und forensische Analytik.

In der Tradition der ANAKON der letzten Jahre laden wir insbesondere auch Nachwuchswissenschaftler und Firmen ein, ihre Ergebnisse in den Vortragssessions und Postern unseren erwarteten 450 Teilnehmern zu präsentieren.

Für 2017 werden wir uns viel Zeit für den Austausch mit Ausstellern und Postern nehmen, was in unserem Hörsaalgebäude auf der Morgenstelle durch eine enge Verzahnung von Hörsälen, Poster- und Ausstellungsfläche gut gelingt.

Die wichtigsten Deadlines:

- Anmeldeschluss für Vorträge und Poster am 15. November 2016
- Anmeldeschluss Last-Minute Poster am 28. Februar 2017 (u.U. keine Berücksichtigung im Kurzprogramm)
- Registrierung (early bird) bis zum 15. November 2016

Weitere Informationen unter www.gdch.de/anakon2017

Die Arbeitskreise DAAS, Separation Science und Chemometrik und Qualitätssicherung laden ihre Mitglieder zur Jahrestagung. Die Junganalytiker der Fachgruppe nutzen die Gelegenheit für ein kleines Treffen. Auf

der ANAKON werden Preise verliehen, für die noch Vorschläge bei Fachgruppe und Arbeitskreisen angenommen werden: Clemens-Winkler Medaille, Fachgruppenpreis der Fachgruppe Analytische Chemie, Bunsen-Kirchhoff-Preis, DAAS-Preis und Gerhard-Hesse-Preis.

Neben dem wissenschaftlichen Programm lockt unser kleines Tübingen mit einem mittelalterlichen Stadtkern, der durch unsere fast 30.000 Studierenden zugleich eine fröhlich-frische Atmosphäre bietet. Die Sammlungen der Universität im Schloss zeigen als Highlight die ältesten Kunstwerke der Menschheit aus den Höhlen der Schwäbischen Alb. Gleich nebenan in der Schlossküche können Sie die Entdeckung der DNA nacherleben oder sich in der Nähe vom Zisterzienserkloster Bebenhausen beeindrucken lassen und eine kleine Wanderung zur Wurmlinger Kapelle genießen, die von den vielen Tübinger Romantikern mehrfach in Gedichten Erwähnung findet. Wenn das Wetter mitspielt, werden Sie die Tagung abends mit einer Stocherkahnfahrt auf dem Neckar ausklingen lassen können.

Get-Together und Gesellschaftsabend werden wir nutzen, Ihnen die Schwäbische Küche mit Maultaschen und Württemberger schmackhaft zu machen.

Viele Gründe also, im April 2017 zu uns nach Tübingen zu kommen, Freunde zu treffen, Ideen zu diskutieren und die Analytische Chemie zu genießen.

Wir freuen uns auf Ihren Besuch!

*Ihre Organisatoren
Carolin Huhn, Michael Lämmerhofer,
Günter Gauglitz, Udo Weimar,
Christian Zwiener*

Analytik Jena: Eine Erfolgsgeschichte „Made in Germany“

■ Klaus Berka hatte einen Traum: ein eigenes Unternehmen, erfolgreich, weltweit anerkannt für Spitzenprodukte, mit der Heimat eng verbunden. Mehr als 25 Jahre ist das nun her. Seine Analytik Jena beschäftigt heute über 1.000 Mitarbeiter und ist als Hersteller von spezialisierten Instrumenten für Analysenmesstechnik und Biotechnologie mit zuletzt erwirtschafteten Umsatzerlösen in Höhe von knapp 128 Millionen Euro im Geschäftsjahr 2015 momentan in über 90 Ländern der Welt unterwegs. Tendenz steigend.

Von Anfang an lag der Fokus der Analytik Jena auf dem, was Berka im Rahmen seiner Ausbildung und seiner langjährigen Tätigkeit bei Zeiss am besten konnte: Analysenmesstechnik „Made in Jena“ herstellen und in die Labore und Industrieunternehmen der Welt verkaufen. Seit mehr als 150 Jahren werden in der Thüringer Universitätsstadt Instrumente für chemisch-physikalische Detektionsverfahren gebaut, eine Tradition, die eng mit den Namen Zeiss und Abbe sowie deren wissenschaftlichen Errungenschaften in der optischen Spektroskopie verbunden ist. Die industrielle Fertigung der weltweit ersten Analysenmessgeräte begann in der optischen Werkstatt von Carl Zeiss, die im Jahr 1846 in Jena gegründet wurde. „Den historischen Leistungen von Ernst Abbe und Carl Zeiss ist die Analytik Jena bis heute auf das Engste verpflichtet“, sagt Berka. „Wir haben die Vision, Instrumente zu entwickeln, die sich durch globale Technologieführerschaft, Innovationen, Präzision, Effizienz und absolute Zuverlässigkeit sowie höchste Ansprüche an den Kundennutzen auszeichnen.“

Das Fundament der heutigen Geschäftsstrategie des Konzerns liegt in der seine unterschiedlichen Technologie-Bereiche vereinenden Kernkompetenz der Optik und Mechanik für den Präzisionsinstrumentenbau „Ma-

de in Germany“ sowie in der Forschung und Entwicklung auf den Gebieten der optischen Spektroskopie und der Detektionsverfahren. Innerhalb von nur 15 Jahren hatte es die Analytik Jena nach ihrer Gründung in diesem Geschäftsbereich geschafft, sich technologisch in der Weltspitze, etwa im Bereich der Atomabsorptionsspektrometrie, einzuordnen. Seinen Ursprung findet ein solcher Erfolg freilich wiederum in der richtigen Idee zur richtigen Zeit.

Bis heute verkauft die Analytik Jena in ihrem Stammgeschäft mit Analysetechnik Produkte im Hochpreissegment und profitiert im Wettbewerbsumfeld mit Großkonzernen, wie PerkinElmer, Thermo Scientific oder Agilent von der Technologieführerschaft im Bereich der Atomabsorptionsspektroskopie, von einem ausgezeichneten internationalen Vertriebs- und Partnernetzwerk, von einem stark kundenorientierten Serviceportfolio sowie von der Fertigungsqualität „Made in Germany“, die der Marke Analytik Jena weltweit zu einer hohen Reputation verhalf. So ist das Unternehmen in wichtigen Märkten, wie China, Russland und Europa sowie in zahlreichen Branchen und Anwendungsbereichen, wie dem Umweltmonitoring, der Bildung und Forschung, der Energiewirtschaft, Medizin, Pharmaindustrie und Petrochemie weltweit gut positioniert.

Beim Innovationsmanagement setzt Analytik Jena auf Kooperationen: neue Produkte und Technologien aus einem Wissensverbund bestehend aus den Konzernunternehmen im Schulterschluss mit Partnern aus Forschungseinrichtungen, Hochschulen und Unternehmen zu entwickeln. Das Unternehmen ist weltweit vernetzt und kooperiert mit einer Vielzahl renommierter Partner und wissenschaftlicher Einrichtungen, wie dem Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften, Dortmund (ISAS), dem



Hauptsitz von Analytik Jena (Foto: Analytik Jena)

Institut für Photonische Technologien, Jena (IPHT), der Friedrich-Schiller-Universität Jena, der Universität Ulm, der Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), Florianópolis, Brasilien, der FU Berlin, der Universität Leipzig und der Ernst-Abbe-Fachhochschule Jena, verschiedenen Fraunhofer-Institute, dem Universitätsklinikum Jena, dem Robert-Koch-Institut Berlin, dem Friedrich-Löffler-Institut, Greifswald und dem Bundesinstitut für Risikobewertung, Berlin.

Life Science: Wachstumssparte mit Potenzial

Analytik Jena setzt bereits seit der Jahrtausendwende auf den Aufbau und Ausbau eines zweiten großen Bereichs: Life Science. Kontinuierlich wurde dessen Entwicklung mit ausgesuchten, strategisch klugen Unternehmenszukaufen sowie Forschungs- und Entwicklungsschwerpunkten in

der Bioanalytik und der molekularen Diagnostik sowie auf dem Gebiet der Automatisierungslösungen forciert.

Das Portfolio umfasst Systeme zur DNA-Aufreinigung, Robotiksysteme, Instrumente zur Durchführung der Polymerase-Kettenreaktion sowie verschiedene Detektionsverfahren bis hin zu Kits für die molekulare Diagnostik in der Lebensmittel- und Wasseranalytik. Weiterhin gehören automatisierte Hochdurchsatz-Screeningsysteme für den Pharmabereich zum umfangreichen Portfolio dieses Segments.

Atomspektrometrie

Im Jahr 2004 brachte Analytik Jena als weltweit erstes und bisher einziges Unternehmen eine neue Gerätegeneration der High-Resolution Continuum Source AAS, die contraAA-Serie an den Markt, welche methodische Lücken zwischen verschiedenen Atomspektrometrierverfahren (vor allem die Atomemissions- und die Atomabsorptionsspektrometrie) schließt. Diese Geräte ermöglichen es erstmals, eine spektrometrische Analyse mit einer Strahlungsquelle für den gesamten Wellenlängenbereich durchzuführen und ferner sowohl eine echte sequenzielle als auch zukünftig eine simultane Multielement-Analytik erlauben. Seit der Markteinführung im Jahr 2004 bis zum heutigen Tage ist die contraAA-Serie das weltweit einzige Atomabsorptionsspektrometer auf Basis einer einzig-

artigen, der sogenannten High-Resolution-Continuum Source-Technologie. Durch die Verwendung einer speziellen Xenon-Kurzbogenlampe als kontinuierliche Strahlungsquelle in Verbindung mit einem hochauflösenden Echelle-Spektrometer wird der für die Atomabsorption relevante Wellenlängenbereich sofort verfügbar.

Seit 2013 bietet die Analytik Jena auch ICP-Technologie im eigenen Portfolio an und ergänzt damit ihr Technologiespektrum in der Elementspurenanalyse um neue Instrumente. Seit ca. 1985 wird die ICP-Technologie routinemäßig in der Industrie angewandt, so beispielsweise in der Umweltanalytik, Materialforschung, Metall- oder Pharmaindustrie. Metalle der Seltenen Erden (REE), wie Cer, Lanthan, Neodym oder Samarium lassen sich mit dem PlasmaQuant® PQ 9000 ELITE auch in silikathaltigen Mineralien sicher analysieren. Mit der Technik des PlasmaQuant® PQ 9000 ELITE stellen die hohen Salzfrachten dieser Mineralien (Silikate) für das Probeneinführungssystem kein Problem dar. Spektrale Störungen die durch die hohen Gehalte dieser Proben von Elementen der Hauptgruppe, wie, Aluminium oder Silizium oder anderen REE's erzeugt werden, lassen sich mit Hilfe der hohen Auflösung erkennen und einfach korrigieren.

Mit der ICP-MS (Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma), die Analytik Jena 2014 von Bruker erwarb, können für viele Elemente sehr niedrige Nachweisgrenzen erreicht werden, weshalb sie u.a. in der Spurenanalytik eingesetzt wird. In der ICP-MS werden die in einer Probe enthaltenen Elemente mittels eines Argon-Plasmas ionisiert. So können innerhalb weniger Minuten die in der Probe vorhandenen Elemente an Hand ihrer Ionen bestimmt werden.

Molekülspektroskopie

Die beiden am häufigsten angetroffenen Arten der Molekülspektroskopie sind die UV-VIS und die IR-Spektroskopie. Die Produktfamilie der Analytik Jena im Bereich Molekül-



Technologieführerschaft ist das erklärte Ziel bei Analytik Jena (Foto: Analytik Jena)

spektroskopie deckt den Bereich der UV-VIS Spektroskopie ab. Ein UV-VIS Spektrometer registriert den durch Moleküle absorbierten Anteil an eingestrahelter Lichtintensität in Abhängigkeit von der Wellenlänge und ordnet dem analysierten Molekül ein spezifisches Absorptionsspektrum zu. Das so erhaltene Spektrum kann beispielsweise zur qualitativen Beurteilung von Molekülstrukturen unbekannter Stoffe herangezogen werden. Die Absorption an einer bestimmten Wellenlänge dient der quantitativen Analyse. In der Praxis werden Einstrahl- und Zweistrahlphotometer unterschieden. Einstrahlphotometer vermessen Referenz und Probe zeitlich nacheinander, während Zweistrahlphotometer beide zeitgleich vermessen können.

Summenparameteranalytik

Die Summenparameteranalytik ist eine Untersuchungs- und Bewertungsmethode zur Analyse ganzer Stoffgruppen mit gleichen Merkmalen. Es werden gemeinsame Eigenschaften mehrerer Einzelstoffe, die durch die Anwesenheit desselben Elements oder von Elementen mit gleichem Reaktionsverhalten bedingt sind, erfasst. Summenparameter sind beispielsweise AOX (Adsorbierbare Organische Halogenverbindungen), EOX (Extrahierbare Organische Halogenverbindungen), TOC (Total Organic Carbon) und POX (Purgable (ausblasbare) Organische Halogenverbindungen). Mit der TOC-Messung, welche der Bestimmung des gesamten organischen Kohlenstoffs von Wasserinhaltsstoffen dient, kann bei-



spielsweise eine Aussage über die Wasserqualität getroffen werden. Organisch gebundene Halogene (AOX) stellen in Gewässern oder Böden ein gesundheitliches Risiko für Tier und Mensch dar. Sie gelangen auf unterschiedliche Weise in die Umwelt, wie bei der Chlorbleiche in der Papierindustrie, der Chlorierung von Trinkwasser oder durch die Anwendung halogenhaltiger Pestizide in der Landwirtschaft.

Elementaranalytik

Die Produktgruppe Elementaranalytik dient der Bestimmung von Schwefel, Stickstoff, Chlor und Kohlenstoff aus festen, flüssigen, pastösen, viskosen und gasförmigen Proben. Haupteinsatzgebiet der Instrumente in diesem Bereich, der sogenannten Elementaranalysatoren, ist die Analyse von petrochemischen und verwandten Proben, wie zum Beispiel der Öl-, Kraftstoff-, Lösemittel-, Gas- und Flüssiggasanalytik. In Bereich der Elementaranalytik bietet die Analytik Jena Geräte an, welche alle der genannten Elemente gleichzeitig analysieren können (Multi EA-Serie).

Polymerase Kettenreaktion (PCR)

Eine wesentliche Weichenstellung im Segment Life Science war der Erwerb der Real-Time PCR-Lizenz im Frühjahr 2010 für die Fertigung und den Verkauf zweier neuer Produkte, dem qTOWER und dem TOptical. In der Molekularbiologie und der klinischen Diagnostik ist die sogenannte quantitative Real-Time PCR ein seit zehn Jahren angewandtes und heute etabliertes und weit verbreitetes Verfahren zur Vervielfältigung bzw. zum Nachweis von DNA und RNA, bei der die Quantifizierung durch ein Fluoreszenzsignal erfolgt. Die signifikanten Entscheidungskriterien für Anwender liegen heute zunehmend in messbaren Zeit- und Kostenersparnissen sowie bei der Frage der Effizienz. Den beiden neuen Real-Time PCR-Geräten kommt damit eine Schlüsselrolle in der Etablierung und Weiterentwicklung des dynamischen Segments Life Science zu.

Heike Gleisner

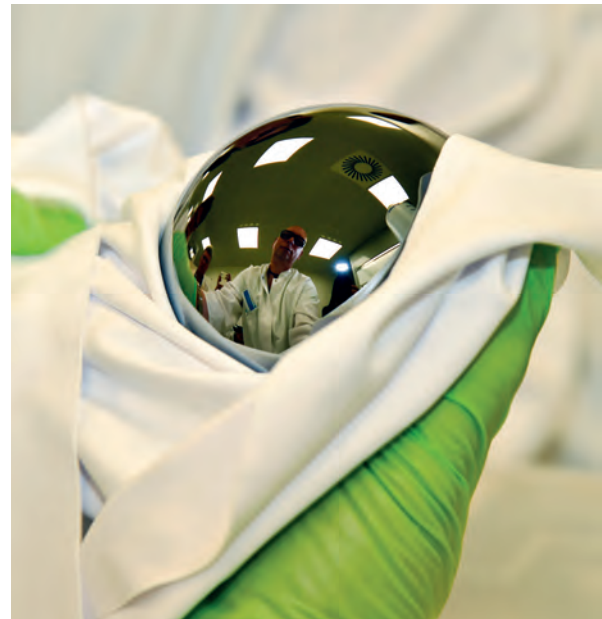
Chemie Aktuell

Massennormale der PTB für das neue Kilogramm sind einsatzbereit

■ Nach fast 130 Jahren wird das internationale Ur-Kilogramm im Herbst 2018 voraussichtlich in den wohlverdienten Ruhestand geschickt. Dann kommt die Welt zu einem metrologischen Gipfeltreffen zusammen, um über die Neudefinition des Kilogramms zu entscheiden. Wie der Meter und die Sekunde soll künftig auch das Kilogramm über unveränderliche Naturkonstanten definiert werden. Dazu zählen Wissenschaftler in der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt (PTB) fleißig Atome in einer ²⁸Si-Silizium-(Si)-Kugel. Je genauer sie das tun, desto genauer können sie letztlich sagen, was ein Silizium-Atom wiegt. Damit ist der Sprung auf die Ebene der Naturkonstanten gelungen. Die Forscher können die Avogadro-Konstante und die Planck-Konstante bestimmen und haben somit das „Rezept“ für ein neues, stabileres Massennormal zur Hand. Bei einem zweitägigen Workshop im Juni informierte die PTB die internationale Fachwelt über den aktuellen Stand ihres Avogadro-Projekts sowie die Handhabung und die Vorteile von Si-Kugeln im Allgemeinen.

Bei dem Workshop konnten sich die 82 Teilnehmer aus 44 Ländern mit den Kugeln vertraut machen – wie sie zu handhaben sind und wie sie als Massennormale fungieren können.

Bei den praktischen Übungen des Workshops ging es um die Reinigung, Lagerung, den Transport sowie das Handling der Kugeln. Angefangen beim richtigen Reinigungsmittel, denn dieses darf die Oberfläche nicht angreifen. Gleiches gilt für Reinigungstücher. Selbst die Behälter für die Reinigungslösung müssen aus einem bestimmten Material sein, damit sich keine Fremdstoffe über die Lösung auf der Kugel ablagern oder die Kugeloberfläche beschädigen. Und auch beim Wiegen darf die Auflage keinen Einfluss auf die Kugel haben. Wer eine Si-Kugel nutzt, braucht Fin-



In der frisch gereinigten Si-Kugel spiegelt sich PTB-Mitarbeiter Volker Görlitz. (Foto: PTB)

gerspitzengefühl. Nur bitte nicht im wahrsten Sinne des Wortes. Ein Fingerabdruck ist nämlich schon deutlich größer als die Genauigkeit, mit der die Masse bestimmt wird. Glücklicherweise hat die PTB das Handling der Kugel über Jahre erprobt und perfektioniert. Ihr Wissen kann sie jetzt an die internationalen Partner weitergeben.

Einige Teilnehmer äußerten im Rahmen des Workshops bereits Interesse an einer Si-Kugel als Massennormal. Wilson Ombati, Metrologe am Kenya Bureau of Standards, war von der einfachen Handhabung der Kugeln begeistert. Da er in Kenia an einem ähnlichen Projekt arbeitet, möchte er gerne eine Kugel erwerben, allerdings vorerst die günstigste Version – um den Umgang zu üben. „Eine Si-Kugel aus der PTB ist für uns besonders interessant, da sie wesentlich günstiger ist als beispielsweise der Aufbau einer Wattwaage“, gibt er zu bedenken. Von dem preiswerten Massennormal ist auch Shih Mean Lee vom National Metrology Centre in Singapur überzeugt. Der Workshop hat sei-

ne Erwartungen noch übertroffen. „Ich war überrascht, dass wir den gesamten Reinigungsvorgang selbst testen durften“, sagt er. Es sei eine gute Idee, das Wissen im Umgang mit den Si-Kugeln mit der Welt zu teilen. „So haben Kollegen aus aller Welt die Chance, hautnah mit den Kugeln zu arbeiten und die damit verbundenen Vorteile kennenzulernen.“ Lob gab es auch von der „Konkurrenz“, die versucht, die Planck-Konstante mittels einer Wattwaage zu bestimmen. Stephan Schlamminger, Leiter des Wattwaagen-Projekts am National Institute of Standards and Technology in den USA, würde sich freuen, eine Si-Kugel mit der Wattwaage zu wiegen. Bei so komplexen Experimenten wie der Wattwaage oder dem Avogadro-Projekt könne man leicht Fehler übersehen, sagt Schlamminger. „So können wir einen Konsistenz-Check für beide Experimente machen.“ Als Konkurrent sieht er sich dabei nicht. „Wir haben alle das gleiche Ziel; nur der Weg ist unterschiedlich.“ Ohnehin wird das Kilogramm nur neu definiert, wenn zwei unterschiedliche Experimente die Planck-Konstante mit ausreichender Genauigkeit bestimmen.

Sind die internationalen Partner im Messwesen von beiden Ansätzen überzeugt, steht der Neudefinition des Kilogramms und der Verbreitung der Si-Kugeln der PTB als Massenormal nichts mehr im Wege. Damit ginge die Ära des Ur-Kilogramm zu Ende. Dieses wird seit der Meterkonvention von 1889 von einem Platin-Iridium-Zylinder verkörpert, der vom Internationalen Büro für Maß und Gewicht (BIPM) in einem Tresor in Sèvres bei Paris aufbewahrt wird. Kopien davon wurden als nationale Kilogramm-Prototypen an die Unterzeichnerstaaten dieses Vertrages verteilt. Doch wie sich über die Jahre zeigte, verliert das Ur-Kilogramm an Masse. Warum das so ist, weiß keiner so genau. „Dieser unbefriedigende Zustand soll durch die Neudefinition beendet werden“, erklärt Härtig. „Hat man die sogenannte Planck-Konstante in Stein gemeißelt, kann jeder das Kilogramm berechnen und bestenfalls nachbauen.“ Auf dem langen

Weg zur Planck-Konstante hat die PTB einen Umweg eingeschlagen – über die Avogadro-Konstante, welche die Anzahl der Atome in einem Mol angibt. Eigentlich würde diese zur Neudefinition des Kilogramms ausreichen. Es könnte als die Masse einer bestimmten Anzahl von Atomen eines bestimmten Isotops definiert werden. Doch die Forscher wollen gleich zwei Fliegen mit einer Klappe schlagen. Die Einheit der Stromstärke, das Ampere, soll künftig ebenfalls über eine Naturkonstante definiert werden – und zwar über die Ladung des Elektrons. Gelingt das, fehlt nur noch die Planck-Konstante, um die Einheiten Spannung und Widerstand daraus herzuleiten. Daher wollen die Masse-Metrologen ihren Kollegen die Planck-Konstante gleich mitliefern. Denn wie es der Zufall will, sind Avogadro- und Planck-Konstante über eine feste physikalische Relation miteinander verknüpft (molare Planck-Konstante). Ist eine Konstante mit ausreichender Genauigkeit bestimmt, lässt sich auch die andere berechnen. Um es einheitlich zu halten, hat man sich daher international auf die Planck-Konstante zur Neudefinition des Kilogramms geeinigt, was dann auch den Metrologen der Stromstärke nützt.

Während Stephan Schlammingers Team in den USA, Wissenschaftler in Kanada und anderen Ländern die Planck-Konstante mithilfe einer Wattwaage ermitteln wollen, gehen die deutschen Wissenschaftler den Weg über die Avogadro-Konstante. Dazu zählen sie die Atome in einer ^{28}Si -Kugel. Jedes Atom einzeln zu zählen, ist jedoch nicht möglich – und auch nicht nötig. Wer würde schon jedes Feld eines Schachbrettes zählen, um auf die Gesamtzahl der Felder zu kommen, wenn einfache Mathematik auch zum Ziel führt? Das geht natürlich auch in drei Dimensionen. Ähnlich gehen die Wissenschaftler der PTB beim Avogadro-Projekt vor. In einem nahezu perfekten Kristall, wie dem aufwendig gezüchteten ^{28}Si -Silizium-Einkristall, aus dem die PTB ihre Si-Kugeln formt, sind die Atome regelmäßig im Kristallgitter angeordnet. Mittels Röntgenstrahlung lässt

sich die Gitterstruktur sichtbar machen und das Atomvolumen bestimmen. In einem weiteren Schritt ermitteln die Wissenschaftler den Kugeldurchmesser. Dazu wird der Durchmesser der Kugel mit einem Kugelin interferometer an ihrer Oberfläche über eine Million Mal bestimmt. So lässt sich der gemittelte Durchmesser bis auf drei Atomdurchmesser genau bestimmen und das Volumen berechnen. Aus dem Verhältnis der beiden Volumina ergibt sich die Atomanzahl in der Kugel. In der PTB kann man das bereits so gut, dass sich die Wissenschaftler nur alle hundertmillionen Atome um ein bis zwei Atome verzählen. Durch all diese Messungen und Berechnungen wissen die Forscher, aus wie viel Mol Silizium ihre Kugel besteht und wie viele Atome in einem Mol stecken. Letzteres entspricht der Avogadro-Konstante.

Dank ihres Know-hows kann die PTB wesentlich stabilere Massenormale als das Ur-Kilogramm anbieten, die zur Not jederzeit neu hergestellt werden können. Neben dem „Rezept“ für ein neues Kilogramm sind dann die ^{28}Si -Kugeln das Maß aller Dinge. Drei qualitativ und preislich unterschiedliche Kugeln sollen künftig von der PTB angeboten werden, die von Metrologieinstituten und Kalibrierlaboratorien erworben werden können: Zum einen die fast isotoopenreinen ^{28}Si -Kugeln und die sogenannten quasi-primären Normale aus Silizium mit natürlicher Isotopenzusammensetzung. Beide kann derzeit nur die PTB anfertigen. Zum anderen eine dritte Variante, ein Sekundärnormal, das kostengünstiger auch von der Industrie hergestellt werden kann. Diese Kugeln wären dann etwas weniger rund. „Auf der Ebene der Atome betrachtet, sind unsere Si-Kugeln fast perfekt; die Sekundärnormale sind im Vergleich eher Kartoffeln“, sagt Frank Härtig. Dennoch sind sie immer noch bestens geeignet, um den Waagen der Zukunft zu sagen, was ein Kilogramm ist.

Quelle: PTB

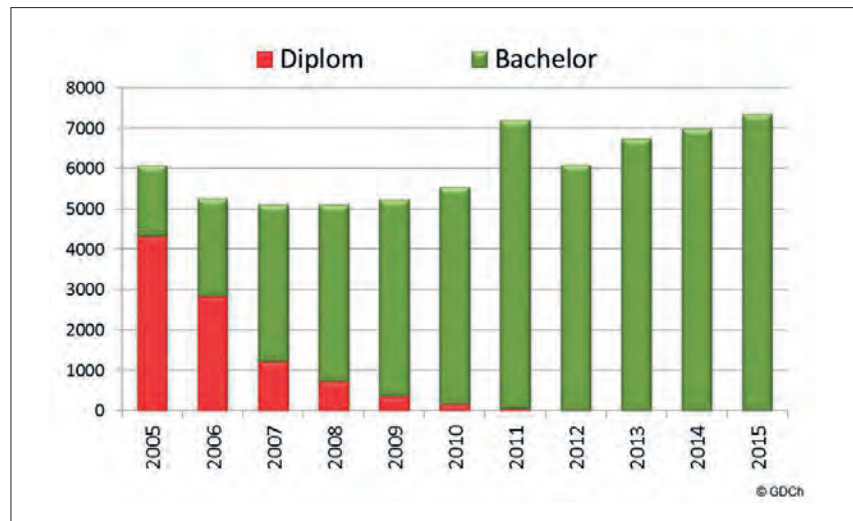
Weiterhin steigende Anfängerzahlen in den Chemiestudiengängen

Wie in den Vorjahren hat die GDCh auch 2016 umfangreiche statistische Daten zu den Chemiestudiengängen erhoben. Abgefragt wurden die Daten des Jahres 2015 in den Studiengängen Chemie, Wirtschaftskemie, Biochemie/Life Sciences, Lebensmittelchemie und in den Chemiestudiengängen an Fachhochschulen. Erfasst wurden die Anfängerzahlen, die Zahl der bestandenen Abschlussprüfungen sowie die jeweiligen Noten und Studiendauern. Außerdem machten viele Hochschulen Angaben zum Berufseinstieg ihrer Absolventen nach Studienabschluss oder Promotion.

Danach sind die Anfängerzahlen in Chemie und Biochemie erneut angestiegen, während sie in Lebensmittelchemie und an Fachhochschulen auf Vorjahresniveau blieben. Die Gesamtzahl der Studienanfänger lag mit 11.586 bereits im fünften Jahr bei über 10.000. Zählt man Master- und Diplom-Abschlüsse zusammen, sind die Absolventenzahlen in Chemie und an Fachhochschulen gegenüber dem Vorjahr gestiegen, in Biochemie und Lebensmittelchemie leicht gesunken.

Fast alle Bachelor-Absolventen an Universitäten schlossen ein Master-Studium an. An den Fachhochschulen lag dieser Anteil bei 63 %. Rund 80 % der Master-Absolventen an Universitäten begannen eine Promotion. Dieser Wert ist geringer als im langjährigen Mittel (90 %), und die nächsten Jahre werden zeigen, ob sich dieses im letzten Jahr erstmals aufgetretene Phänomen verstetigt. Die Zahl der Promotionen hat erneut zugenommen.

In Chemie meldeten die Hochschulen 2.685 Bachelor- und 2.034 Master-Absolventen. 309 Absolventen schlossen ihr Studium in einem der auslaufenden Diplom-Studiengänge ab. 1.901 Personen wurden im Jahr 2015 in Chemie promoviert, darunter 20 % ausländische Chemiker. Die Promotionsdauer erhöhte sich gegenüber dem Vorjahr auf ca. vier Jahre. In der Biochemie wurden 947 Bachelor- und 700 Master-Absolventen gemeldet, dazu 43 Diplomprüfungen und 242 Pro-



Studienanfänger/innen im Diplom- und Bachelor-Studiengang Chemie

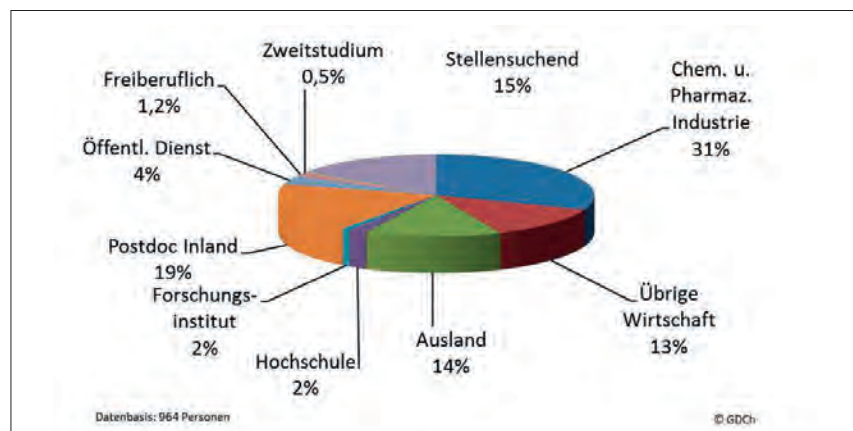
motionen. An Fachhochschulen beendeteten 858 Studierende ihr Bachelor- und 460 ihr Master-Studium. In Lebensmittelchemie absolvierten 274 Personen die Hauptprüfung A oder die Diplomprüfung. 163 Studierende bestanden die Hauptprüfung Teil B. Außerdem meldeten die Universitäten 142 Bachelor- und 50 Master-Abschlüsse sowie 61 Promotionen.

Von 51 % der promovierten Absolventen in Chemie ist der erste Schritt in das Berufsleben bekannt. Danach war der Arbeitsmarkt für diese Berufseinsteiger wie im Vorjahr schwierig. Dies äußerte sich einerseits in der Zunahme der zunächst stellensuchenden Absolventen, außerdem im vergleichsweise hohen Anteil derer, die zunächst nur eine befristete Stelle fanden. Nach Angaben der Hochschulen wurden 31 % der frisch promovierten

Chemiker in der Chemischen und Pharmazeutischen Industrie eingestellt, 13 % traten eine Stelle in der übrigen Wirtschaft an. 14 % gingen nach der Promotion zunächst ins Ausland, in den meisten Fällen zu einem Postdoc-Aufenthalt. 19 % starteten auf einer zunächst befristeten Stelle im Inland (inkl. Postdocs) und drei Prozent auf einer unbefristeten Stelle an einer Hochschule oder Forschungsinstitut. Vier Prozent fanden in anderen Bereichen des Öffentlichen Dienstes eine Anstellung. Vorübergehend stellensuchend waren 15 % – bedingt auch durch den Zeitpunkt der Erhebung.

Die Broschüre „Chemiestudiengänge in Deutschland – Statistische Daten 2015“ (56 Seiten, 21 Graphiken, 36 Tabellen) steht als pdf unter www.gdch.de/statistik zur Verfügung.

Quelle: GDCh



Verbleib der im Jahr 2015 promovierten Chemiker/innen (Studiengang Chemie)

Neue Medien

ABC in Kürze

Neuigkeiten rund um Analytical and Bioanalytical Chemistry

Impact Factor 2015 – erneut viele Zitationen für ABC

Der neue Impact Factor für das Jahr 2015, der sich auf Artikel aus 2013 und 2014 bezieht, wurde von Thomson Reuters Mitte Juni veröffentlicht. Der aktuelle Wert für ABC beträgt 3,125 (Vorjahr 3,436) und ist damit erneut leicht zurückgegangen. Das Impact-Factor-Ranking unter 75 anderen analytischen Journalen ergab nun Platz 15. Die Gesamtzahl der Zitationen von ABC-Artikeln dagegen ist wiederum angestiegen auf jetzt 26662 Zitate (Vorjahr: 25559), damit bleibt die Zeitschrift bei den Zitaten zum dritten Mal in Folge auf Platz 8. Der sogenannte Immediacy Index, der sich auf Artikel aus 2015 bezieht, stieg ebenfalls an und liegt nun bei 0.703 (2014: 0.656). Diese Artikel werden dann den kommenden Impact Factor 2016 positiv beeinflussen.

Neues von ABC ... von Eigentümern und Herausgebern

Anfang Juli, leider erst nach Redaktionsschluss dieser Ausgabe, findet in Heidelberg in den Räumen des Springer-Verlages ein gemeinsames Treffen von Eigentümern und Herausgebern von ABC statt. Das Team der Herausgeber trifft sich dabei das erste Mal in neuer Besetzung: Nachdem Anfang des Jahres die vier neuen Herausgeber

Hua Cui, Emily Hilder, Gérard Hopfgartner und Adam Woolley ihre Tätigkeit aufgenommen haben, verabschiedet sich die Zeitschrift Ende Juni von den langjährigen Herausgebern Klaus Heumann und Kiyokatsu Jinno. Die Redaktion dankt beiden ganz herzlich für die jahrelange, ausgezeichnete Zusammenarbeit und wünscht Ihnen alles Gute! Die Verdienste dieser beiden langjährigen Herausgeber werden in zwei Editorials gewürdigt, die in Kürze in ABC veröffentlicht werden.

ABC ist ... unterwegs

ABC Herausgeber und Redaktion freuen sich darauf, Sie in den kommenden Monaten auf den folgenden Veranstaltungen persönlich zu treffen:

- ISC 2016 – 31st International Symposium on Chromatography in Cork, Irland (28. Aug. – 1. Sept.)
- ECL 2016 – International Meeting on Electrogenenerated Chemiluminescence in Bordeaux, Frankreich (29.-31. August)
- 6th EuChemMS Chemistry Congress in Sevilla, Spanien (11.-15. September)
- SciX 2016 – 43rd Annual North American Meeting of the Federation of Analytical Chemistry and Spectroscopy Societies in Minneapolis, USA (18.-23. September)

- Analytica China in Shanghai, China (10.-12. Oktober)

Im Mai fand in München während der analytica conference die Session „ABC's Spotlight on the Nanoworld“ statt. Verantwortlich für die hervorragend besuchte Session waren der ABC Herausgeber Günter Gauglitz aus Tübingen und Martin Vogel aus Münster. Nähere Informationen finden Sie in einem Editorial von Günter Gauglitz (<http://link.springer.com/article/10.1007/s00216-016-9712-8>).

Neues aus den Rubriken

Kennen Sie schon ABCs interessante Rubrik ABCs of Education and Professional Development in Analytical Science? Dank der Rubrik-Herausgeber John Fetzer, Reiner Salzer, and Tom Wenzel wurden dieses Jahr bereits die folgenden Beiträge publiziert:

- Use of primary literature in the undergraduate analytical class von Michelle L. Kovarik (<http://link.springer.com/article/10.1007/s00216-016-9467-2>)
- Incorporating analytical research experience into the undergraduate curriculum von Kevin B. Thurbide (<http://link.springer.com/article/10.1007/s00216-016-9703-9>)

Alle Beiträge der Rubrik sind unseren Lesern frei zugänglich.

Interessante Themenschwerpunkte im Spät-Sommer

Der Themenschwerpunkt Analytical Electrochemiluminescence, der dank der neuen ABC Herausgeberin Hua Cui sowie Francesco Paolucci, Neso Sojic, and Guobao Xu als Gastherausgeber zustanden kam, wird im September publiziert. Der Oktober beginnt mit zahlreichen kritischen Übersichtsartikeln und im November schließt sich das Thema Process Analytics in Science and Industry an, bei dem Rudolf Kessler von der Hochschule Reutlingen als Gastherausgeber fungierte.



Eröffnet wurde die Session von Steffen Pauly, Editorial Director Chemie, Springer.

Die ABC-Themenschwerpunkte im Überblick:

September

Analytical Electrochemiluminescence; Cui (CN), Paolucci (IT), Xu (CN), Sojic (FR)

Oktober

Trend Artikel und kritische Übersichtsartikel; ABC Herausgeber

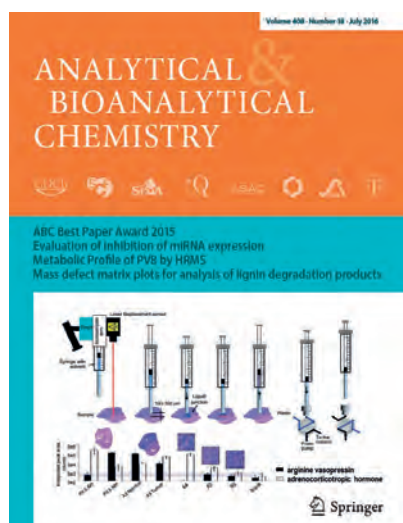
November

Process Analytics in Science and Industry; Kessler (GE)

Alle ABC-Ausgaben und Topical Collections finden Sie online unter link.springer.com/journal/216. Der Klick auf „Browse Volumes & Issues“ führt Sie dabei zur Übersicht über die ABC Hefte („Volumes“), sowie zu den einzelnen Themenschwerpunkten („Topical Collections“). Als Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie können Sie natürlich auch über den Mitgliederbereich MyGDCh auf den gesamten Online-Inhalt von ABC zugreifen.

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

Steffen Pauly,
Editorial Director Chemie, Springer
(ORCID iD 0000-0001-9768-9315)



Das Cover des ABC Heftes 408/18 bezieht sich auf den Artikel des ABC Best Paper Award 2015; ein Interview mit dem Gewinner David Calligaris können Sie in diesem Heft sowie online unter bit.ly/BPA2015_interview lesen.

analytica 2016

Weltweit die wichtigste Messe für die Branche



■ 1.244 Aussteller aus 40 Ländern präsentierten vom 10. bis 13. Mai 2016 den rund 35.000 Fachbesuchern ihre Produktneuheiten auf der analytica, darunter zahlreiche Weltneuheiten. Stark gestiegen ist der Anteil internationaler Aussteller und Besucher. Damit ist die Spitzenposition der weltweit wichtigsten Fachmesse für Labortechnik, Analytik und Biotechnologie unbestritten.

Dr. Reinhard Pfeiffer, stellvertretender Vorsitzender der Geschäftsführung der Messe München, fasst zusammen: „Gerade durch die Präsentation zahlreicher Weltneuheiten hat die analytica gezeigt, dass sie die Nummer 1 und somit der wichtigste Innovationsmotor der Industrie und Forschung ist.“ Siegbert Holtermüller, Fachbeiratsvorsitzender der analytica und Geschäftsführer bei Olympus, bestätigt den Leitcharakter der Messe: „Die Branche braucht die analytica, um ihre Innovationen einem internationalen Publikum vorzustellen und um Diskussionen für Weiterentwicklungen führen zu können.“

Zur euphorischen Stimmung auf der Messe trugen nicht nur die sommerlichen Temperaturen bei, sondern vor allem die vollen Hallen und die stark frequentierten Stände. Das zeigt: Der Branche geht es gut. Wachstumschan-

cen sieht Mathis Kuchejda, Vorsitzender von SPECTARIS-Fachverband Analysen-, Bio- und Labortechnik, vor allem, „in den immer komplexeren regulatorischen Anforderungen sowie in der Vernetzung und Automatisierung von Laborprozessen und der Probenvorbereitung, nicht zuletzt vor dem Hintergrund der weiter zunehmenden Globalisierung, beispielweise im Bereich der Lebensmittelsicherheit.“ Auch neue Entwicklungen im Gesundheitssektor, etwa in der In-Vitro-Diagnostik, sorgen für ein Plus. Für 2016 erwartet der Branchenverband, dass der Inlandsumsatz der deutschen Industrie um 6,5 Prozent auf ca. 3,75 Milliarden Euro zulegen wird.

Internationaler Besucheranteil so hoch wie nie

Rund 35.000 Besucher, davon 40 Prozent aus dem Ausland, nahmen an der analytica 2016 teil. Zu den Top-Ländern zählten (in dieser Reihenfolge) Österreich, Schweiz, Italien, Großbritannien und die USA. Einen signifikanten Anstieg gab es vor allem aus Ländern wie Großbritannien, Iran, Thailand und der Türkei.

Die Besucher waren mit dem Verlauf der Messe sehr zufrieden, wie die Umfrage der Gelszus Messe-Marktforschung bestätigt: 99 Prozent bewerte-

ten die Veranstaltung mit ausgezeichnet bis gut. Knapp 60 Prozent sehen die Bedeutung der analytica zudem wachsen.

Mit 1.244 Unternehmen aus 40 Nationen hat die analytica das Rekordergebnis aus 2014 um 6,5 Prozent übertroffen (Vgl. 2014: 1.168). Das Wachstum generiert sich vor allem aus mehr internationalen Ausstellern. Hier stieg der Anteil um vier Prozent auf 44 Prozent. Neben Deutschland zählen China, die USA und Großbritannien zu den ausstellerstärksten Ländern.

Volle Säle auf der analytica conference

Wissenschaftlicher Höhepunkt war die dreitägige analytica conference. 1.839 Besucher und damit zwölf Prozent mehr als 2014 (Vgl.: 1638) füllten die Reihen des ICM – Internationales Congress Center München bis auf den letzten Platz. Rund 150 namhafte Wissenschaftler aus aller Welt referierten zu den neuesten Erkenntnissen aus den Bereichen der analytischen Chemie und Bioanalytik. Professor Dr. Mario Thevis von der Deutschen Sporthochschule Köln: „Die analytica conference ist sehr wichtig. Hier wird ein internationaler Austausch gepflegt und man trifft die Hersteller der analytischen Geräte, die für unsere Arbeit besonders wichtig sind. Denn nur mit dem Fortschritt in dem Bereich, können wir moderne und adäquate Testmethoden anbieten.“

Weltweit einzigartig

Die Erfolgsgeschichte der analytica Live Labs und der Sonderschau Arbeitsschutz- und Arbeitssicherheit setzte sich in diesem Jahr fort. Bis auf den letzten Platz waren die Reihen belegt. Professor Dr. Markus Fischer, Director Hamburg School of Food Science und Moderator beim Live Lab Lebensmittelanalytik: „Hersteller und Laborexperthen können hier situationsbedingte Herausforderungen und Lösungswege vor Ort diskutieren, dieses Format ist ideal und einzigartig.“

Die nächste analytica findet vom 10. bis 13. April 2018 in München statt.

*Text und Bild:
Messe München GmbH*

analytica conference sessions

High-resolution mass spectrometry

Where do we stand today in clinical and forensic toxicology?

■ The analytica conference took place in conjunction with the analytical fair from May 10 to 12, 2016 in Munich. Since 45 years, the Analytica is a leading trade fair for analytical equipment and solutions, laboratory technology and life science applications.

Since many years, Hans H. Maurer has been regularly invited by the GDCh to organize one of the symposia during the analytica conference on behalf of the German speaking Society of Toxicological and Forensic Chemistry (GTFCh). He could welcome about 100 participants at this year's symposium to see well known international experts speaking on different aspects of high-resolution mass spectrometry, particularly on the pros and cons of Orbitrap and QTOF-based systems.

The first talk was held by Hans Maurer himself and was devoted to the question whether to use ion trap or Q-Orbitrap for a metabolite-based drug screening. As robust LC-MS instruments using TOF or Orbitrap mass analyzers are getting more and

more affordable to laboratories, screening approach using such instruments and high resolution mass spectral libraries are frequently requested. However, also traditional low resolution screening solutions still have their benefits. Hans Maurer highlighted in his talk the pros and cons of both approaches also in the context with other screening approaches and concluded that HRMS strategies will be the future particularly when instruments will get even more cheaper and if software tools will be developed that help users to control the huge amount of HR data.

The presentation by Kara L. Lynch from the University of California (San Francisco, USA) was entitled “QTRAP or QTOF for comprehensive drug screening?”. She developed a broad-spectrum drug screen on a QTOF and compared its performance to a quadrupole linear ion trap (QLIT). Kara found that using targeted data analysis, QLIT was slightly more sensitive than QTOF; however, this difference did not significantly affect compound identification in patient samples.



Speakers from left to right: Anders Helander, Ilkka Ojanperä, Kara Lynch, Hans H. Maurer, and Felix Hernández (Lewis Couchman had to leave earlier) (Photo: H. Maurer).



Interested audience (Photo: H. Maurer)

Overall, QTOF performed similarly to QLIT and could serve as an alternative method for general unknown screening, when using targeted data collection.

Anders Helander from the Karolinska Institutet and Karolinska University Laboratory (Stockholm, Sweden) reported from his experience with the use of a Q Exactive for monitoring new psychoactive substances (NPS) in the Swedish STRIDA project. This project monitors the occurrence and health hazards of NPS, based on samples from acute intoxication cases presenting in emergency departments and intensive care units (> 700 cases per year in 2014–2015). When new drugs appear and reference material is available, they are included in the HRMS method and searched for retrospectively without need to re-run samples. Currently, they are covering more than 250 substances and they analyzed more than 2000 samples since start of the project.

The first talk after the coffee break, which was full of interesting discussions and meeting old friends, was held by Ilkka Ojanperä from Helsinki, Finland. He summarized his experiences with the use of a QTOF for drug screening in postmortem toxicology. Ilkka highlighted the power of HRMS in targeted screening but also the option to do perform untargeted screening, to identify unknowns, and to do retrospective data mining.

Lewis Couchman (King's College Hospital, London, UK) used his talk to provide a comprehensive introduction into the use of Q-Orbitrap for drug quantification. He critically mentioned pros and cons of the

HRMS solution for quantification and found that designing accurate and robust quantitative experiments using HR requires different considerations to typically used triple-quadrupole mass analyzers. Lewis particularly mentioned strategies for maximizing the number of data points to ensure sufficient representation of chromatographic peaks, judicious choice of internal standards when using non-selective MS2 data capture, and more recent approaches for multiplexed drug quantitation using parallel reaction monitoring.

Finally, Felix Hernández (Castellón, Spain) demonstrated the potential of HRMS (QTOF) in wastewater drug testing. He concluded that HRMS can provide valuable structural information for unknowns by obtaining accurate-mass production spectra after performing MS/MS experiments. Also acquiring full scan data at different collision energies (all ion fragmentation) can be advantageous in tentative identifications without the use of standards

After three hours of an exciting symposium, chairman Maurer thanked the speakers and the audience and closed the session inviting everybody to the next analytical conference in 2018. This and the next symposium was and will be accredited by the GTFCh with four credit points for members who are already certified Forensic Toxicologists GTFCh, Forensic Chemists GTFCh, Forensic Clinical Chemists GTFCh, or Clinical Toxicologists GTFCh.

Markus R. Meyer, Heidelberg, Germany

Separation techniques: How many dimensions are enough?

■ Wie in der Chromatographie, gibt es auch in der Kapillarelektrophorese einen Trend zu mehrdimensionalen Trennungen. Prof. Carolin Huhn (Eberhardts Karls University of Tübingen) präsentierte verschiedene 2D-Setups aus diesem anspruchsvollen Bereich. Die erste mehrdimensionale Trennung wurde anhand der Kopplung der Isotachophorese – Kapillarelektrophorese (ITP/CE-MS) demonstriert. Dabei diente die Isotachophorese der Aufkonzentrierung und Matrixabtrennung, während in der zweiten Dimension mittels Kapillarelektrophorese-Massenspektrometrie eine Trennung nach Ladungsdichte und eine Charakterisierung des Analyten erfolgten. Als zweites Anwendungsbeispiel stellte sie die Kopplung der isoelektrischen Fokussierung mit Kapillarelektrophorese-Massenspektrometrie (IEF/CE-MS) vor. In der ersten Dimension wurden Proteine nach ihrem pI-Wert getrennt, fokussiert und konzentriert. Anschließend wurden die störenden Ampholyte in der zweiten Dimension abgetrennt und Signale über Massenspektrometrie identifiziert.

Im Anschluss berichtete Prof. Detlev Belder (Universität Leipzig) über signifikante Fortschritte bei chip-basierten Trenntechniken. Es wurden aktuelle Ergebnisse mikrofluidischer Trennchips und deren Einsatzmöglichkeiten für mehrdimensionale Trennungen vorgestellt. Dabei lag der Fokus auf chip-basierter Flüssigchromatographie gekoppelt mit Massenspektrometrie. Daneben stellte er die faszinierende Zusammenführung sämtlicher Arbeitsschritte eines chemischen Prozesses durch Einsatz mikrofluidischer Reaktoren und Trennfunktionalitäten in einem einzigen Mikrochip vor.

Aus dem Bereich der Gaschromatographie präsentierte Prof. Luigi Mondello (University of Messina, Italien) die Online-Kopplung einer HPLC mit einem GCxGC und einem triple qua-

drupole Massenspektrometer (LC-GCxGC-QqQMS) und somit eine neuartige, leistungsfähige fünfdimensionale Analysenplattform. Die Selektivität der ersten Dimension (HPLC) wurde dabei zur Separation der verschiedenen Substanzklassen herangezogen. Dieser vorgeschaltete Schritt erlaubte eine automatisierte Extraktion der Probe und die Überführung weniger komplexer Fraktionen in die GCxGC.

Im Vortrag von PD Hans-Georg Schmarr wurde die komplexe Matrix Wein behandelt. Die Komplexität ist oftmals so groß, dass koeluiierende Analyten selbst mit selektiven Detektoren, wie einem Massenspektrometer, nicht weiter differenziert werden können. Einen Ausweg würde eine optimierte Probenvorbereitung darstellen. In vielen Fällen reicht dies jedoch nicht aus und die Trennleistung der Systeme muss gesteigert werden. Als einen sinnvollen und effektiven Weg hierfür stellte Herr Schmarr die multidimensionalen Techniken, wie heart-cut GC-GC und comprehensive GCxGC, vor.

Neben der GCxGC wurden auch vier Arbeiten über die comprehensive zweidimensionale Flüssigchromatographie, die momentan ein stark zunehmendes Interesse erfährt, präsentiert. So besprach Prof. Dwight Stoll (Gustavus Adolphus College, Saint Peter, MN, USA) Probleme, die bei Injektionen in die zweite Dimension der LCxLC auftreten können. Dabei ging er speziell auf kleine Säulenvolumen und relativ große Injektionsvolumina ein und verglich theoretische Berechnungen für Druckverluste und Trennleistung mit experimentellen Ergebnissen, um ein Vorhersagemodell zu entwickeln.

Dr. Thorsten Teutenberg (IUTA, Duisburg) verglich anhand einer Mischung aus 42 Substanzen und verschiedene Säulen für ein nano-LC basierendes LCxLC-System literaturbekannte Bestimmungsmöglichkeiten der Orthogonalität (convex hull, Asterisk und bin counting) miteinander. Anschließend widmet er sich der Frage, wie schnell ein LCxLC-System betrieben werden kann und konnte demonstrieren, dass Modulationszeiten

von unter 30 s oftmals zu Wrap-around-Effekten und einer unzureichenden Equilibrierung führen.

Im nachfolgenden Vortrag von Prof. Peter Schoenmakers ging es um die Frage, wie man eine Peakkapazität von 1.000.000 erreichen kann. Nach einer theoretischen Betrachtung des Problems stellte er als Möglichkeit die aktive Modulation – mit Eluentenaustausch und Fokussierung – in Kombination mit der Massenspektrometrie vor.

Prof. Oliver J. Schmitz (Universität Duisburg-Essen) besprach das Problem, dass die Analyse komplexer Proben mit hochauflösender Massenspektrometrie zwar Signale mit exakten Massen liefert, aus denen mögliche Summenformeln generiert werden können, die jedoch immer noch diversen chemischen Strukturen zugeordnet werden können. Er zeigte, dass die Ionenmobilitätsspektrometrie als weitere Trenndimension nicht nur die Trennung von Isobaren, sondern zudem die Bestimmung von CCS-Werten (collision cross section), die die Identifizierung von Substanzen unterstützen, ermöglicht. Die Anwendbarkeit der LC-IM-MS Analyse in Kombination mit einer CCS Datenbank wurde für verschiedene Realproben wie Fruchtsaft, Abwasser und Eigelb gezeigt. Zudem wurde eine Trennung in vier Dimensionen (LC+LC-IM-MS) realisiert und die deutlich höhere Trennleistung demonstriert. Dabei wurde auch ein Ansatz zur Auswertung komplexer Datensätze nach LCxLC-IM-MS Messungen (Demodulation) vorgestellt.

Neben den apparativen Aspekten der mehrdimensionalen Trenntechniken wurden von zwei Rednern auch Applikationen bzw. auftretende Probleme bei komplexen Proben in den Vordergrund gestellt. So spielt Metabolomics in verschiedenen Anwendungen, wie der Analyse von Biomarkern oder der personalisierten Medizin, eine wichtige Rolle. Herausforderungen sind dabei die große Anzahl möglicher Metabolite, von denen viele bisher nicht identifiziert wurden und die sich in ihren chemischen Eigenschaften deutlich unterscheiden,

sowie die großen Konzentrationsunterschiede einzelner Metabolite in einer Probe.

Im Vortrag von Dr. Thomas Moritz (Swedish Metabolomics Center, Umeå, Sweden) wurde gezeigt, dass die Analyse allein mit Massenspektrometrie oft nicht ausreicht, da Isomere auch bei höchstmöglicher Auflösung nicht unterschieden werden können und bei Direktinjektion oftmals Ionensuppressionen zu beobachten sind. Eine Vortrennung ist daher unbedingt erforderlich, wobei die HPLC auch in Kombination mit der Ionenmobilitäts-Massenspektrometrie (IM-MS) angewendet werden kann. Beispielhaft konnte mittels IM-MS Messungen gezeigt werden, dass beim Abbau von all-trans-Retinsäure im UV-Licht verschiedene Isomere entstehen können, weshalb auch die Probenvorbereitung und Probenlagerung sorgfältig erfolgen sollte.

Prof. Mario Thevis (Deutsche Sporthochschule Köln) berichtete hingegen über die analytischen Anforderungen bei Dopingkontrollen, die kostengünstig, schnell und sehr zuverlässig sein müssen. Er konnte zeigen, dass Prüfverfahren für „traditionelle“ Dopingmittel, wie Anabolika, durch die Analyse langlebiger Metabolite ein deutlich größeres zeitliches Detektionsfenster nutzen können. Aufgrund der zunehmenden Anzahl an peptidischen Arzneimitteln müssen zudem ergänzende Tests entwickelt werden, um diese sicher charakterisieren und identifizieren zu können. Eine signifikante Verbesserung dieser Analytik kann – laut Prof. Thevis – beispielsweise mit der Kombination aus nano-HPLC, Ionenmobilität und hochauflösender Massenspektrometrie erzielt werden.

Diese Vortragsreihe gab einen sehr schönen Überblick über den Stand der Technik bei multidimensionalen Trennmethode. Alle Vortragenden waren der Ansicht, dass die Komplexität der Probe die Anzahl an notwendigen Trenndimensionen bestimmt und für viele Proben eine mehrdimensionale Trennung oftmals unumgänglich ist.

Oliver J. Schmitz

Optimal experimental design

■ Die Versuchsplanung hat in den letzten Jahren deutlich an Bedeutung gewonnen, obgleich die ersten Arbeiten hierzu schon vor fast hundert Jahren von Ronald Fisher durchgeführt wurden. Im Unterschied zu einer Versuchsplanung, die ohne Vorwissen über den betrachteten Prozess auskommen muss, wird bei der optimalen Versuchsplanung Vorwissen in Form eines mathematischen Modells vorausgesetzt. In diesen Fällen können gezielt Versuchspläne berechnet werden, die mit geringsten Aufwand zu einem Höchstmaß an Information über den Prozess führen. In der Session „Optimal experimental design“ wurde an unterschiedlichen Beispielen die Vorteile dieser Versuchsplanung aufgezeigt. Für die Entwicklung von chromatographischen Verfahren wurde von Frau Prof. Dr. Cornelissen (Hamburg) dargelegt, dass für die Umsetzung des „quality by design“-Konzepts gezielt optimale Prozessparameter identifiziert werden konnte.

Herr Dr. Holland-Letz (Heidelberg) hat für eine Dosis-Wirkungs-Analyse optimale Versuchspläne für die Log-logistic-, die Log-normal- und die Weibull-Verteilung nach unterschiedlichen Kriterien berechnet. Er diskutierte die Kombination von Kriterien zur Festlegung optimaler Messorte.

Herr Paquet-Durand (Hohenheim, Stuttgart) präsentierte die optimale Versuchsplanung für die Wasseraufnahmekinetik von Weizenkörnern. Er konnte eine halbempirische Formel vorstellen, mit der die optimale Versuchsplanung für sein Modell direkt berechnet werden konnte.

Frau Neddermeyer (Berlin) zeigte für einen Kultivierungsprozess, für den sie unterschiedliche Prozessmodelle vorstellte, dass selbst eine Online-Berechnung der optimalen Versuchsplanung möglich ist. Hierfür wurde der Prozess mehrmals nacheinander durchgeführt, wobei die Eingangsgrößen basierend auf einer online berechneten optimalen Versuchsplanung bestimmt wurden.

Abschließend wurde von Herrn

Illner (Berlin) ein Prozess mit Mikroemulsionen vorgestellt, bei dem der Katalysator zurückgewonnen werden kann. Die Versuchsplanung wurde hier für die Überwachung des Prozesses basierend auf der Raman-Spektroskopie genutzt.

Bernd Hitzmann

Spectroscopic techniques for bioprocess monitoring

■ Spektroskopischen Verfahren zur Überwachung von biotechnischen Prozessen zeichnen sich dadurch aus, dass sie berührungslos und ohne Reaktanden eingesetzt werden können und dass das Analyseergebnis nahezu ohne Zeitverzögerung zur Verfügung steht. Zumeist ist man auf chemometrische Auswertverfahren wie die Hauptkomponentenanalyse angewiesen.

In dem Beitrag von Frau Dr. Solle (Hannover) diskutiert sie die Herausforderungen, Einschränkungen und das Potenzial spektroskopischer Verfahren. Sie ging dabei insbesondere auf die NIR- und Fluoreszenzspektroskopie für unterschiedliche Kultivierungsprozesse ein. Die Bedeutung der Datenvorverarbeitung und die Anzahl notwendiger Kalibrationsdatensätze wurden in ihrem Vortrag hervorgehoben.

Herr Pitter (Ecully) zeigte die Möglichkeiten der Raman-Spektroskopie für die Überwachung von biotechnischen Prozessen auf und legte dar, welche Prozessgrößen gemessen werden können.

Frau Vangenechten (Frankfurt am Main) diskutierte am Beispiel von NIR-Spektren wie die Messdaten, die insbesondere von unterschiedlichen Messgeräten stammen können, für eine Weiterverarbeitung genutzt werden können. Hierfür stellt sie eine Datenbank vor, an die unterschiedliche kommerzielle Tools angeschlossen werden können, um z. B. chemometrische Modelle zu berechnen.

Frau Assawajaruwan (Hohenheim, Stuttgart) zeigte unterschiedliche Methoden auf, um aus Fluoreszenzspektren Wellenlängenkombinationen der Exzitation und Emission für eine Modellbildung zu selektieren. Neben einer Methode, die auf der Analyse von Loadings und dem VIP-Verfahren (variable importance in projection Verfahren) basiert, diskutierte sie ein Verfahren, das die Ameisen-Kolonie-Optimierung nutzt. Modelle, die auf einer geringen Anzahl von selektierten Wellenlängenkombinationen beruhen, zeigen keinen signifikanten Unterschied in der Güte der Vorhersage zu Modellen, die das ganze Spektrum nutzen.

Bernd Hitzmann

Impressum

Herausgeber:
Vorstand der Fachgruppe
Analytische Chemie in der
Gesellschaft Deutscher Chemiker
PO-Box 900440
60444 Frankfurt/Main
fg@gdch.de
Telefon: 069 7917– 499
Telefax: 069 7917– 499
www.gdch.de/analytischechemie

Redaktion (verantwortlich):
Eva Sterzel
Leo-Tolstoj-Str. 3
60437 Frankfurt/Main
mitteilungsblatt@gmx.net
Telefon: 069 50830917

Produktion:
Nachrichten aus der Chemie

Grafik:
Jürgen Bugler

Druck:
Seltersdruck Vertriebs- und Service
GmbH & Co KG, Selters

Bezugspreis im Mitgliedsbeitrag
enthalten

Erscheinungsweise 4 x jährlich

ISSN 0939–0065

Redaktionsschluss:
Mitteilungsblatt 03/16: 01.11.2016

Beiträge bitte an die Redaktion

„New Strategies in modern analytical spectroscopy“ und Verleihung des Bunsen-Kirchhoff-Preises

Überraschende Einblicke in modernste spektroskopische Analysemethoden

Am Donnerstag, dem 12. Mai 2016, fand im Rahmen der *analytica conference* die vom Deutschen Arbeitskreis für Analytische Spektroskopie (DAAS) geleitete Vortragsitzung mit dem Thema „New Strategies in modern analytical spectroscopy – surprising insights“ statt. Moderiert und organisiert wurde die Session von Dr. Wolfgang Buscher (Universität Münster, Vorsitzender des DAAS) und Prof. Dr. Kerstin Leopold (Universität Ulm, Vorstandsmitglied des DAAS und Vorsitzende der Jury des Bunsen-Kirchhoff-Preises). Die über den gesamten Tag sehr gut besuchte Vortragsreihe vermittelte eindrucksvoll die Vielfalt der modernen analytischen Spektroskopie. Alle Beiträge zu hochaktuellen Forschungsthemen wurden ange-regt diskutiert und vertieft.

Eröffnet wurde das Programm von Prof. Dr. Gary Hieftje (Indiana University, Bloomington, USA), der einen Überblick über neuartige Anregungsquellen und Spektrometer zur Atom-, Speziations-, Isotopen- und Metallo-mic-Analyse gab. Eine neue, mit Stickstoff oder Luft betriebene Mikro-wellenplasmafackel (MICAP) reduziert den hohen Argon-Verbrauch bei ICP-OES-Analysen (inductively coupled plasma optical emission spectrometry). Die erreichten Nachweisgrenzen für Multielementstandards sind vergleichbar mit denen eines Ar-Plasma ICP-OES, wenngleich nicht immer für jedes Element dieselben Linien detektiert werden können. Eine Möglichkeit, um Probleme mit Matrixinterferenzen in Plasma-gekoppelten Techniken zu umgehen und insbesondere Alkalimetalle in Lösung ohne Zerstäuber nachzuweisen, stellte Prof. Hieftje mit einer Solution Cathode Glow Discharge vor, bei der die zu analysierende Flüssigkeit selbst eine Elektrode der Messanordnung bildet. Diese Funkenentladung ermöglicht sogar eine direkte Kopplung mit der massenspektrometrischen Detektion.

Ein weiterer Höhepunkt der Sit-

zung war die im Anschluss stattfindende Verleihung des Bunsen-Kirchhoff-Preises 2016 an Dr. Torsten Frosch vom Leibniz-Institut für Photonische Technologien in Jena. Dieser international ausgeschriebene Preis wird seit 1990 regelmäßig zur Auszeichnung hervorragender Leistungen junger Wissenschaftler auf dem Gebiet der analytischen Spektroskopie verliehen und ist mit einem von Perkin Elmer unterstützten Geldpreis verbunden. In ihrer Laudatio würdigte Prof. Dr. Leopold den diesjährigen Preisträger für seine hervorragenden Leistungen auf dem Gebiet der Faser- und Hohlraum unterstützten Raman-spektroskopie. Dr. Frosch leitet die Arbeitsgruppe Faserspektroskopische Sensorik am Leibniz Institut für photonische Technologien. In seinem Vortrag stellte er faseroptische Materialien vor, die als optimierte Küvetten fungieren, welche gleichzeitig Analyt und Raman-Strahlung transportieren. Anwendung findet dies beispielsweise in der Malariaforschung, bei der zur Aufklärung der Wirkmechanismen Antimalaria-Wirkstoffe empfindlich detektiert werden können. Ein weiteres, breites Anwendungsfeld ist die Gassensorik, das von geochemischen Anwendungen, wie der Untersuchung der Denitrifikation durch Bodenorganismen, bis hin zu medizinischen Fragestellungen, wie der Atemgasanalytik, reicht.

Dr. Eva Krupp von der University of Aberdeen, GB, stellte Ergebnisse zur Untersuchung der Bioakkumulation von Quecksilber, Selen und Cadmium in gestrandeten Grindwalen vor. Die Veröffentlichung ihrer Ergebnisse rief dieses Jahr bereits großes Medieninteresse in Schottland und England hervor. 2011 und 2012 strandeten Gruppen von bis zu 20 Tieren dieser Meeressäuger an der schottischen Küste und ermöglichten so den Forschern, die Wale wissenschaftlich zu untersuchen. Die Bestimmung von Hg-, Cd- und Se-Spezies in verschiedenen Or-

ganen dieser Wale zeigte eine Detoxifizierung von hochtoxischem Methylquecksilber in anorganische und bis dato unbekannte Hg-Spezies mit steigendem Alter der Wale. Hierbei fällt der Anteil der unbekanntes Spezies sehr hoch aus. Gleichzeitig konnte ein Abbau von Selenoproteinen in anorganische Se-Spezies mit steigendem Lebensalter gezeigt werden. Laserablationsexperimente wiesen das gleichzeitige Vorhandensein von Hg und Se in Kristalliten bzw. Clustern in Leber- und Gehirngewebe nach. Dies konnte durch hochauflösende EXAFS-/XANES-Untersuchungen (extended X-ray absorption fine structure / X-ray absorption near-edge structure) und XRF-Mapping (X-ray fluorescence) bestätigt werden, wobei ein Trend zur Bildung von heterogen verteilten HgSe-Clustern mit dem steigenden Alter der Wale korreliert. Diese Cluster wurden übrigens auch schon in menschlichem Gehirngewebe bei Patienten gefunden, die verhältnismäßig große Mengen an Quecksilber inkorporiert hatten. Neben Hg und Se wurde auch Cd im Gehirngewebe nachgewiesen, dessen Gehalt mit dem von Hg korreliert. Eine Aussage, in welchem Zusammenhang die Aufnahme dieser Metalle mit den Strandungen der Wale steht, kann jedoch zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht getroffen werden.

Unter dem Titel „Recent Trends and Developments in Mass Spectrometry Imaging“ präsentierte Prof. Dr. Andreas Römpf von der Universität Bayreuth eine bildgebende Methode basierend auf MALDI (matrix assisted laser desorption ionization). Diese molekül-massenspektrometrische Methode ermöglicht eine Ortsauflösung von bis zu 1 μm . Als Beispiel für die HR2MSI (high resolution in mass and space) Methode wurde die Abbildung von Phosphorlipiden in Tumorzellen des Magens mit einer Pixelauflösung von 10 μm gezeigt. Ebenso können mit dieser Methode molekule-



Verleihung des Bunsen-Kirchhoff-Preises auf der DAAS-Session der analytica 2016 in München. (vLnR: Dr. W. Buscher, Vorstandsvorsitzender DAAS; Dr. M. Gerber, Perkin Elmer; Preisträger Dr. T. Frosch, Prof. Dr. K. Leopold, Vorsitzende der Jury) (Foto: Messe München GmbH)

lare Bestandteile, wie Vitamine oder Fettsäuren in biologischen Matrices, z.B. Pflanzensamen, identifiziert und abgebildet werden. Dies ermöglicht beispielsweise das Erkennen von Pilzbefall und das Verfolgen von Reifungsprozessen in Samen. Beispielhaft wurde dies an mit Fusarium befallenen Weizensamen gezeigt. Neben der Vorstellung aktueller Ergebnisse auf dem Gebiet des MS-Imaging war auch die weltweite Vernetzung der Akteure auf diesem Gebiet ein Thema dieses Vortrags. So ermöglicht der Aufbau einer öffentlich zugänglichen Datenbank, die u.a. das standardisierte Datenformat imzML nutzt, die Sammlung umfangreicher Datensätze für z.B. Metaanalysen und das Aufarbeiten bereits abgeschlossener Experimente unter neuen Gesichtspunkten.

Im Anschluss präsentierte PD Dr. Christoph Haisch (Technische Universität München) interessante Ergebnisse zur oberflächenverstärkten Ramanspektroskopie (SERS) in der Mikrobiologie. Hierbei wurde u.a. die direkte Unterscheidung von lebenden und toten Bakterien in wässrigem Medium gezeigt. Durch Mischen der Bakterienkultur mit SERS-aktiven Silbernanopartikeln kann durch die Anlagerung dieser Partikel an Zellwände der Bakterien die veränderte Oberflächenladung im fingerprint-Bereich des Ramanspektrums erfasst werden.

Lebende Bakterien weisen starke SERS Signale auf, tote Bakterien hingegen sehr schwache, was am Beispiel von E. coli gezeigt wurde. Dabei konnte ausgeschlossen werden, dass die Modifizierung mit Silbernanopartikeln einen Einfluss auf die Mortalität der Bakterien für die Dauer des Experiments hat. Mit dieser Methode kann z.B. die Effektivität von Antibiotika untersucht werden. Verschiedene Bakterienstämme in einer Probe können auf Grund der Komplexität der resultierenden Spektren jedoch nicht unterschieden werden. Diese Limitierung kann in Kombination mit Microarrays, der Immobilisierung der Bakterienstämme auf einer Glasoberfläche und multivariater Datenanalyse umgangen werden. Neben der Bestimmung von Bakterien konnte SERS bereits auch zur Diagnose der Apoptose von Zellen erfolgreich angewandt werden.

Prof. Dr. Jörg Feldmann (University of Aberdeen, GB) berichtete unter dem Titel „Arsenic Speciation becomes almost as complex as Carbon Speciation“ von der komplexen Speziationsanalytik von Arsen in Reis und Nahrungsergänzungsmitteln. Detektiert werden die Arsenspezies hierbei mit der Kopplungstechnik HPLC-ICP-MS. Darüber hinaus wurde für die Speziationsanalyse in Reis ein „field-kit“ entwickelt, das nach der Gutzeit-Methode arbeitet. Dieses er-

möglich ohne instrumentellen Einsatz die Bestimmung von anorganischem Arsen und Dimethylarsinsäure vor Ort in weniger als einer Stunde. Bei der Messung in Nahrungsergänzungsmitteln stellen die Vielzahl an Spezies, u.a. Arsenolipide, sowie Matrixunterschiede, die größte Herausforderung in der analytischen Methodenentwicklung dar. Erste Ergebnisse zeigen, dass es sich bei arsenhaltigen Fettsäuren möglicherweise um Abbauprodukte handelt, was bedeutet, dass arsenolipide Strukturen komplexer sind, als bisher angenommen. Dies führt zu neuen Analysekonzepten, die künftig eine Unterscheidung der Arsenolipidklassen ermöglichen. Das ist wichtig, weil diese stark unterschiedliche Toxizitäten aufweisen.

PD Dr. Jörg Bettmer von der Universität Oviedo, Spanien, zeigte, wie es möglich ist, mittels HPLC-ICP-MS Gold- und Silber-Nanopartikel in Zellkulturen und biologischem Gewebe sowohl von gelösten Au- und Ag-Ionen als auch größenspezifisch zu unterscheiden. Weiterhin wurde die sich in biologischer Matrix um die Goldnanopartikel bildende Proteinschicht, die sogenannte „Protein-Corona“, mit ESI-MS (electrospray ionization mass spectrometry) und ICP-MS (inductively coupled plasma mass spectrometry) in Blutserum untersucht. Diese kann wertvolle Informationen zum Verständnis der Wechselwirkung zwischen Nanopartikeln und Zellen liefern. Hierbei wurde sichtbar, dass unter diesen speziellen Bedingungen die Proteinschichten zahlreicher wurden, je kleiner die Goldnanopartikel waren.

Dr. Torsten Vielhaber von der Universität Münster stellte neue Ergebnisse des Arbeitskreises von Prof. Dr. Uwe Karst, Universität Münster, auf dem Gebiet des Nanopartikel-Imaging in biologischen Geweben vor. Die Methoden der Wahl waren hierbei die Laserablations-ICP-MS, μ -XRF und single particle LA-ICP-MS (laser ablation ICP-MS). Im Falle der Massenspektrometrie konnten quantitative Aussagen durch Kalibration mit matrixangepassten Standards getroffen werden. Durch eine Infusion verabreichte oxidische Nanopartikel (Al,

Ti, Zr) konnten in Gewebeproben von Mäusen nachgewiesen werden. Silbrenanopartikel spielen eine wichtige Rolle als antimikrobielle Beschichtung von Prothesen. Der Verbleib und die Verteilung von Ag und anderer Spurenmetallen, die als Kontaminationen zum Teil aus dem Produktionsprozesses der Prothesen stammen, wurden im umliegenden Gewebe der Prothese nach 2-jähriger Verweilzeit des Knochenersatzes in einem Hundemodell visualisiert. Die Kombination des single particle Modus mit der LA-ICP-MS ermöglichte neben der Visualisierung auch eine Bestimmung der Partikelgrößenverteilung in diesen Gewebeproben. Diese Techniken können beispielsweise auch in der Immunhistochemie verwendet werden, um simultan metallhaltige Nanopartikel, die an Fluorophore gebunden sind, zu lokalisieren.

Prof. Dr. Jürgen Popp vom Leibniz Institut für Photonische Technologien aus Jena referierte über das Potenzial der Ramanmikrospektroskopie in der Medizin. Dabei zeigte er, dass die frühe und vor allem schnelle Diagnose von infektiösen Erkrankungen, Krebs und Sepsis entscheidend ist. Eine sinnvolle neue Analytik muss daher direkt vor Ort am Patienten durchführbar sein, was bei der Ramanmikrospektroskopie gegeben ist. Eine interessante Kombination für die Detektion im Bereich der Pathologie ist die Ramanspektroskopie mit der „fluorescence lifetime imaging microscopy“ (FLIM). Hierbei werden neuartige Glasfasersonden eingesetzt, die in vivo-Untersuchungen zur Diagnose von krankhaftem Gewebe oder anderen Erkrankungen, wie z.B. Arteriosklerose von inneren Organen oder der Hauptschlagadern, ermöglichen. Darüber hinaus stellte er eine Kombination aus CARS (coherent anti-Stokes Raman scattering), SHG (second harmonic generation) und TPEF (two-photon excited autofluorescence) vor, die es ermöglicht, die biochemische Architektur und Zusammensetzung von Kryoschnitten verschiedener Gewebeproben zu bestimmen.

Der letzte Vortrag dieser Session, gehalten von Dr. Maria Montes-Bayón (Universität Oviedo, Spanien) befas-

te sich mit der Untersuchung der Aufnahme von Eisenoxidnanopartikeln im Körper. Hierbei wurden sowohl selbstsynthetisierte Nanopartikel als auch das pharmazeutische Präparat Venofer® untersucht. Die Charakterisierung bezüglich Partikelgröße, Dispersivität und Magnetismus wurde u.a. mit TEM und DLS durchgeführt. Des Weiteren wurde die zeitlich abhängige Bioverfügbarkeit des Eisens dieser Nanopartikel mittels HPLC-UV (high performance liquid chromatography with ultra violet detector) und HPLC-ICP-MS untersucht. Es konnte sowohl eine teilweise Freisetzung von Eisenionen, die an Transferrin gebunden werden, als auch eine Einlagerung von Eisen in Zellen beobachtet werden. So wurde festgestellt, dass Eisennanopartikelpräparate wie Venofer® im Vergleich zu Eisenpräparaten, die ionisches Eisen (z.B. FeSO_4) enthalten, deutlich besser geeignet sind, um schnell und effektiv Eisenmangel auszugleichen. Aussagen über die Sicherheit solcher Präparate bei langfristiger Einnahme sind auf Grund fehlender Studien jedoch noch nicht möglich. Vor allem die langfristige Wirkung bzw. der Abbau der Eisennanopartikel im menschlichen Körper muss dazu dringend weiter untersucht werden.

Insgesamt zeigte diese hochkarätige Vortragsreihe eindrucksvoll die Breite der analytischen Spektroskopie, die in der GDCh seit dem Zusammenschluss der Arbeitskreise DASp und AMSEL im Jahr 2014 durch den DAAS vertreten wird. Wir, der Vorstand des DAAS, blicken daher auf einen sehr gelungenen, interessanten und abwechslungsreichen Konferenztag zurück und freuen uns schon heute auf die nächste DAAS-Session bei der analytica 2018.

Katharina Wörle

Angelika Holzinger

Dimitri Rommel

Anja Brandt

Sarah Schilling

Cara Müller

(alle Universität Ulm)

Kerstin Leopold

für den Vorstand des Deutschen Arbeitskreises für Analytische Spektroskopie,

DAAS

Trace analysis of wastewater

■ Zuverlässige und leistungsfähige Analysetechniken zur Bestimmung von organischen Spurenstoffen in Abwasser sind von großer Bedeutung. Gerade für die Bewertung der Leistungsfähigkeit der sogenannten vierten Abwasserreinigungsstufen zur gezielten Spurenstoffentfernung sind entsprechende Analysenverfahren erforderlich. Die Spurenanalytik von Abwasserproben stellt jedoch aufgrund der komplexen Matrix eine besondere Herausforderung dar. Vor diesem Hintergrund wurden in vier Vorträgen wichtige analytische Aspekte der Flüssigkeitschromatographie (LC) gekoppelt mit der Tandem-Massenspektrometrie (LC-MS/MS), die sich als Schlüsseltechnologie für polare Spurenstoffe etabliert hat, vorgestellt. Dazu gehören die Online-Methoden für die Festphasenextraktion (SPE), die Mikro-LC-Methoden sowie die hochauflösende Massenspektrometrie. In einem fünften Vortrag wurde die wirkungsbezogene Analytik als neues Werkzeug zur Untersuchung von Abwasser vorgestellt.

Als Einleitung in das Themenfeld der anthropogenen Spurenstoffe in Abwasser stellte Dr. Steffen Metzger vom Kompetenzzentrum Spurenstoffe BW die derzeit bestehenden und geplanten Arbeiten zur Ausrüstung von Kläranlagen mit einer vierten Reinigungsstufe zur gezielten Spurenstoffelimination vor. In Baden-Württemberg und Nordrhein-Westfalen werden ausgewählte Kläranlagen auf freiwilliger Basis erweitert, in der Schweiz erfolgt dies hingegen aufgrund neuer gesetzlicher Vorgaben für ausgewählte Kläranlagen. Zur Spurenstoffentfernung kommen Aktivkohle, entweder als granuliert Kohle oder in Form von Pulverkohle, bzw. Ozon zum Einsatz. Die Spurenanalytik ist hierbei essenziell für die Zustandsaufnahme vor und nach der Inbetriebnahme der vierten Reinigungsstufe, für die Betriebskontrolle und die Einhaltung gesetzlicher Vorgaben. Gerade für die Betriebskontrolle sind Indikatorsubstanzen mit

regelmäßigem Vorkommen im Zulauf der zu bewertenden Reinigungsstufe, der genauen Kenntnis des Verhaltens und einer Analysierbarkeit mit vertretbarem Aufwand wichtig. Somit stellt die moderne LC-MS/MS-Analytik ein unverzichtbares Instrument zum Vergleich von Technologien zur Abwasserreinigung dar.

Den praktischen Aspekten und Herausforderungen der Target-Analytik von Spurenstoffen in Abwasser mit dem Fokus auf die LC-MS/MS widmete sich Dr. Wolfram Seitz vom Zweckverband Landeswasserversorgung. Grundsätzlich kann es bei der Analyse einer Reihe verschiedener Spurenstoffe aufgrund der unterschiedlichen physikalisch-chemischen Eigenschaften erforderlich sein, mehrere Analyseverfahren anzuwenden. Am Beispiel einer Stoffliste mit 33 Spurenstoffen, die in Baden-Württemberg für die Zustandsaufnahme genutzt wird, wurde erläutert, dass für die Analyse der Stoffe bis zu drei GC-MS-Methoden, acht LC-MS/MS-Methoden ohne Anreicherung und zwei LC-MS/MS-Methoden mit Anreicherung erforderlich sind. Die Konzentrationen der Spurenstoffe im Abwasser variieren häufig über mehrere Größenordnungen. Für die quantitative Bestimmung ist deshalb die Analyse verschiedener Verdünnungsstufen je Probe erforderlich und erhöht somit die benötigte Mess- und Auswertzeit. Zudem ist zur Kontrolle und Kompensation von Matrixeffekten die Aufstockung der Proben oder alternativ eine interne Standardisierung erforderlich. Bei der Bewertung der Messergebnisse müssen weiterhin Transformationsprozesse berücksichtigt werden. Die Rückspaltung von Metaboliten oder die Bildung von Transformationsprodukten können höhere Konzentrationen im Ablauf als im Zulauf verursachen.

Neue Konzepte für die Target-Analytik von organischen Spurenstoffen in wässrigen Umweltproben waren Thema des Vortrags von Claudia vom Eysler vom Institut für Energie- und Umwelttechnik e.V. Vor dem Hintergrund der EU-Beobachtungsliste für Oberflächengewässer werden Analyseverfahren mit niedrigen Bestim-

mungsgrenzen von bspw. 10 ng/L für den Arzneimittelwirkstoff Diclofenac bzw. 0,035 ng/L für das synthetische Hormon 17 α -Ethinylestradiol benötigt. Um diese Bestimmungsgrenzen erreichen zu können, ist i.d.R. ein Anreicherungsschritt mittels SPE erforderlich. Durch die Automatisierung der SPE durch Online-Anreicherung mit Anreicherungsfaktoren von bis zu 200 kann der Analysenablauf schneller und einfacher gestaltet werden. Die vorgestellte Online-Methode für Arzneimittelwirkstoffe zeichnete sich durch hohe Wiederfindungsraten sowie geringe Standardabweichungen aus. Eine weitere Verringerung der gesamten Analysenzeit wurde durch den Parallelbetrieb der Online-Anreicherung und der chromatographischen Analyse erreicht. Daneben kann durch den Einsatz von Mikro-LC-Methoden der Probendurchsatz erhöht werden. Für Arzneimittelwirkstoffe ergaben sich bspw. etwa um zwei Drittel kürzere Analysenzeiten im Vergleich zur konventionellen LC. Bei ein oder zwei Größenordnungen kleineren Flussraten werden deutliche Einsparungen beim Verbrauch von Lösungsmitteln erreicht. Insgesamt waren die Empfindlichkeiten und die Nachweisgrenzen der Mikro-LC-Methoden mit der konventionellen LC vergleichbar.

Im Hinblick auf die Identifikation bisher nicht berücksichtigter Umweltkontaminanten diskutierte Prof. Dr. Juliane Hollender von der Eidgenössischen Anstalt für Wasserversorgung, Abwasserreinigung & Gewässerschutz (Eawag) neue Strategien für die Suspect- und Non-Target-Analytik mittels LC und hochauflösender Massenspektrometrie (HRMS/MS). Von besonderer Bedeutung für die Identifikation neuer Stoffe ist die Priorisierung der aus dem Screening erhaltenen Komponenten für die überaus komplexe Abwasserprobenmatrix. Zunächst sollte stets die Target-Analytik der zu erwartenden Stoffe durchgeführt werden und in die weitere Datenauswertung einfließen. Ein gezieltes Suspect-Screening von erwarteten oder vorhergesagten Verbindungen kann bei der Erkennung von Ausgangs- und Transformationsproduk-

ten helfen. Dazu sind die Kenntnisse über den Verbrauch und Einsatz von Substanzen sowie mögliche Transformationsreaktionen notwendig. Anhand eines ähnlichen Fragmentierungsverhaltens kann in einigen Fällen auf ähnliche Verbindungen geschlossen werden. Ein wichtiger Schritt der Priorisierung bei der Non-Target-Analytik ist die Eingrenzung der Komponenten anhand von empirisch festgelegten Schwellenwerten für die Häufigkeit und Peakintensität. Mit Hilfe multivariater statistischer Methoden wie der Hauptkomponentenanalyse kann der Datensatz weiter eingegrenzt werden. So lassen sich die für Ablaufproben aus Kläranlagen charakteristischen Komponenten ermitteln. Diese Komponenten stellen potenziell die Transformationsprodukte des jeweils betrachteten Prozesses dar, bspw. aus der biologischen Reinigung oder der erweiterten Abwasserreinigung mittels Ozonung. Das gesamte Verfahren wurde anhand der Priorisierung und anschließenden Identifikation von ausgewählten Transformationsprodukten demonstriert.

Als ergänzende Screening-Methode für Abwasserproben präsentierte Dr. Wolfgang Schulz vom Zweckverband Landeswasserversorgung die Wirkungsbezogene Analytik (WBA). Vorgestellt wurde die Kombination der Dünnschichtchromatographie (DC) mit verschiedenen Wirktests. Ein wesentlicher Vorteil der DC-basierten WBA ist der lösungsmittelfreie Transfer der getrennten Substanzen zum Wirktest. Zur Detektion der Wirkung kamen die Bakterientests mit *Aliivibrio fischeri* und *Bacillus subtilis*, der Enzymtest für Neurotoxizität mit Acetylcholinesterase sowie der Yeast Estrogen Screen (YES) für hormonelle Wirkungen zum Einsatz. Anhand von Validierungsdaten konnte eine verhältnismäßig gute Wiederholbarkeit der Messung der Effekte gezeigt werden. Für die halbquantitative Auswertung der WBA-Analysen wurde das Konzept des reziproken Iso-Hemmvolumens vorgestellt. Mit Hilfe dieses Auswerteverfahrens können die Messergebnisse neben dem grafischen Vergleich zudem anhand

von Messwerten für die jeweils aktiven Substanzonen verglichen werden. Anwendungsbeispiele für die WBA waren die Kontrolle der Reinigung von Deponiesickerwasser, von industriellem Abwasser und von kommunalem Abwasser mit einer erweiterten Reinigungsstufe.

*Dr. Wolfgang Schulz, Dr. Wolfram Seitz
Zweckverband Landeswasserversorgung
Betriebs- und Forschungslaboratorium
Langenau*

Lebensmittelanalytik

■ Die Lebensmittelanalytik wurde in zwei Symposien vorgestellt, und zwar 1. Mit „Foodomics – Tools for Comprehensive Food Analysis“ und 2. mit „Emerging Contaminants – Novel analytical concepts“. Das Foodomics-Symposium wurde von Prof. Schmitt-Kopplin (Helmholtz-Zentrum München/TUM-Analytische Lebensmittelchemie) moderiert.

Die Einführung ins Thema erfolgt durch den Erfinder des Begriffs „Foodomics“, Prof. Alejandro Cifuentes aus Madrid. Unter Foodomics kann man alle Methoden verstehen, die zur ganzheitlichen Beschreibung der Lebensmittelqualität beitragen, d.h. Aroma, Geschmack und Nährwert, aber auch Sicherheit, gesundheitlichen Nutzen und Authentizität. Dabei konzentriert sich das „Foodomics“-Labor von Prof. Cifuentes auf die Entdeckung und Aufklärung der Wirkungsweise von antikanzerogenen Verbindungen. Dazu entwickelt seine Gruppe „grüne“ Extraktionstechniken für bioaktive Verbindungen aus verschiedenen natürlichen Quellen wie Algen, Mikroalgen und Pflanzen. Die Aktivität solcher Extrakte wird dann mithilfe von *in vitro* und *in vivo* Modellen für Colonkrebs erfasst. Die chemische Charakterisierung erfolgt dann durch moderne analytische Techniken wie der hochauflösenden LCxLC-/MS/MS. Die betroffenen Gene, Proteine und Metaboliten in Krebszellen werden ebenfalls mit den entsprechenden omics-Techniken er-

mittelt und schließlich verschiedene Algorithmen für die Auswertung der komplexen Datensätze entwickelt.

Den Teilbereich der Genomics stellte Prof. Markus Fischer von der Universität Hamburg vor. Diese Verfahren sind insbesondere dazu geeignet, die Identität von Lebensmittelinhaltsstoffen pflanzlicher oder tierischer Herkunft zu ermitteln. Aufgrund ihrer großen chemischen Stabilität liefert die DNA einen hochauflösenden molekularen Fingerabdruck für jeden Organismus. Kleine, aber detektierbare Unterschiede in den Genomen ermöglichen es nicht nur Spezies, sondern auch Varietäten und sogar Provenienzen zu unterscheiden. Zur Differenzierung können prinzipiell genomische Sequenzen des Zellkerns, aber auch von Mitochondrien oder in Pflanzen von Chloroplasten herangezogen werden. Leider sind bisher nur wenige Sequenzen der Plastid-Genome in Datenbanken hinterlegt. Daher muss in einem ersten Schritt die Sequenz bestimmt werden, bevor spezifische Primer entwickelt werden können. Diese kommen dann bei der sequence specific primer PCR (SSP-PCR) oder der Loop-mediated Isothermal Amplification (LAMP) zum Einsatz. Ein einzelner Nucleotid-Austausch ist dann vorzugsweise durch ligation dependent probe amplification (LPA) oder restriction fragment length polymorphism analysis (PCR-RFLP) bestimmbar. Alternativ dazu können hypothesen-freie DNA-Fingerprinting-Methoden eingesetzt werden.

Einen Bereich der Proteomics trug Dr. Jens Brockmeyer aus Münster vor. Er fokussiert sich auf die Beurteilung der Allergenität von Lebensmitteln durch targeted proteomics von Marker-Peptiden unter Einsatz von high resolution MS (HRMS) or dreidimensionaler MRM (MRM³). Daneben erläuterte er das Potenzial der Proteomics für die Charakterisierung von modifizierten Allergenen in gastro-intestinalen Simulationen, insbesondere um verdauungsresistente allergene Peptidfragmente zu ermitteln.

Das Potenzial der Metabolomics im Bereich der Foodomics wurde von Dr. Chloé Roullier-Gall vom Helmholtz-Zentrum München/TUM-Analytische Lebensmittelchemie vorgestellt. Als

Forschungsobjekt dient ihr Wein, der in seiner chemischen Zusammensetzung von der Umwelt, aber auch von genetischen und anthropogenen Faktoren abhängt. Es zeigte sich, dass in Flaschen gelagerter Wein sogar nach vielen Jahren der Alterung noch ein „chemische Gedächtnis“ aus der Zeit seiner Herstellung besitzt. Targeted und non-targeted Verfahren erfassen eine bisher ungeahnte Vielfalt von Metaboliten, wobei eine Kombination aus der Ion cyclotron resonance-Fourier transform mass spectrometry (FTICR-MS), der ultra-performance liquid chromatography mass spectrometry (LC-MS), der NMR-Spektroskopie und der Excitation Emission Matrix Fluorescence (EEMF) die Vielfalt ganzheitlich wiedergeben. Die Auswertung erfordert leistungsfähige statistische Werkzeuge, um die enormen Datensätze verarbeiten zu können. So konnten Marker der Alterung, von oenologischen Praktiken, der Oxidation und des Terroirs ermittelt werden.

Moderne Verfahren der Metabolomics aus dem Bereich der Pestizidrückstände wurden von Dr. Jens Lütjohann, Hamburg, vorgestellt. Insbesondere von Pflanzen erzeugte Metaboliten von Pestiziden werden bisher nur ansatzweise bei der Definition und Bewertung von Rückständen erfasst. Aufgrund der Beschränkungen der targeted Verfahren in der Routineanalytik bietet hier das Suspect- oder non-target-screening im HR full scan Modus neue Möglichkeiten.

Dieses Verfahren nutzte Dr. Lütjohann in Modellversuchen im Gewächshaus mit Kreuzblütlern, um den Metaboliten-Fingerabdruck von zugelassenen Pflanzenschutzmitteln zu ermitteln. Anschließend wurde eine repräsentative Zahl an kommerziellen Obst- und Gemüseproben auf diese Metaboliten untersucht. Die Analyse erfolgte nach einer Standardextraktion mittels UPLC-HR-Q-ToF MS im full scan Modus. Die Datensätze wurden mit einer neu entwickelten Datenbank auf bekannte und unbekannte Metaboliten durchsucht und unbekannte Substanzen durch Vergleich mit Referenzsubstanzen, die im Rahmen einer Zusammenarbeit mit dem Bundesamt für Verbrau-

cherschutz und Lebensmittelsicherheit (BVL) ausgetauscht wurden, identifiziert. So kann eine unzulässige Anwendung von Pestiziden auf Früchten und Gemüse selbst dann nachgewiesen werden, wenn die aktive Substanz schon abgebaut ist.

Das zweite Symposium widmete sich Kontaminanten, die erst seit kurzem in den Focus der Lebensmittelanalytik geraten sind. Es wurde von Prof. Michael Rychlik von der Technischen Hochschule München (Analytische Lebensmittelchemie) moderiert.

Dr. Silvio Uhlig aus Oslo befasst sich mit Mykotoxinen des Schimmelpilzes *Fusarium avenaceum*, der insbesondere in Skandinavien verbreitet ist. Neben den schon besser bekannten Enniatinen produziert der Pilz das zytotoxische Polyketid 2-Amino-14,16-dimethyloctadecan-3-ol (AOD), das in seiner chemischen Struktur denen der Fumonisine ähnlich ist. Im Gegensatz zu den Fumonisinen hemmt AOD offenbar nicht die Ceramidsynthese, sondern wirkt auf anderer Weise cytotoxisch, wobei der Mechanismus bisher ungeklärt ist.

Andere, ebenfalls bisher kaum bekannte Mykotoxine stellte Dr. Ronald Maul aus Hamburg vor. Sein Vortrag widmete sich den hepatoxischen Phomopsinen, die von *Diaporthe toxica* synthetisiert werden, einem Schimmelpilz, der Lupinensamen und -pflanzen befällt. Vergiftungen sind bisher bei Schafen in Australien und Neuseeland beschreiben. Zur Quantifizierung dieser Kontaminanten setzt Dr. Maul im Rahmen einer Stabilisotopenverdünnungsanalyse (SIVA) ^{15}N -markiertes Phomopsin A als internen Standard für die LC-MS/MS ein, der biosynthetisch von *Diaporthe-toxica*-Kulturen aus ^{15}N -angereicherten Stickstoffquellen hergestellt wurde.

Weitere aktuelle Kontaminanten in Lebensmitteln sind Pyrrolizidin-Alkaloide, die Dr. Barbara Biermeier von der Ludwigs-Maximilian-Universität München vorstellte.

Dabei handelt es sich um eine Gruppe von mehr als 500 Verbindungen, die die Pyrrolizidin-Alkaloide und deren Stickstoff-Oxide (PA/PANO) umfasst. PA/PANO werden von

mehr als 6.000 Pflanzenarten produziert und sind als lebertoxisch und karzinogen beschrieben. Diese Kontaminanten sind vor allem in Honig- und verschiedenen Teesorten nachweisbar. Neue Ansätze zur Analytik und Risikobewertung wurden vorgestellt und das Risiko für Konsumenten von Tees und Honig verdeutlicht.

Ebenfalls in den Fokus des Verbraucherschutzes sind die Polyfluorierten Alkylsubstanzen (PFAS) geraten, die das Forschungsgebiet von PD Thorsten Stahl (Gießen) sind. Per- und polyfluorierte Verbindungen werden für wasserabweisende, atmungsaktive Bekleidung, für schmutz-, öl- und wasserabweisende Papiere, für Verpackungsmaterialien im Lebensmittelbereich, für die Imprägnierung von Möbeln, Teppichen und Schuhen sowie für Beschichtungen von Töpfen und Pfannen und für Feuerlöschschäume eingesetzt. Aufgrund ihrer großen chemischen Inertheit können sie überall in der Natur nachgewiesen werden: im Wasser, im Boden, in Lebensmitteln, und in Tieren. In den menschlichen Körper gelangen PFAS über die Nahrung, inkl. Leitungs- und Mineralwasser. Aus seinen Studien leitet Dr. Stahl die besondere Potenz der länger-kettigen PFAS und insbesondere der Sulfonate zur Bioakkumulation ab und die Notwendigkeit, diese zukünftig genauer zu untersuchen. Omnivore Mitglieder der Nahrungskette, also auch der Mensch, neigen offenbar stärker zur Anreicherung der PFAS, insbesondere in der Leber. So sind z.B. Wildschweine auch geeignete Bioindikatoren für die Umweltbelastung mit PFAS.

Das Symposium wurde abgerundet von Friederike Habedank (Rostock), die die Analytik von Pestizidmetaboliten vorstellte und hierfür ebenfalls wie Dr. Lütjohann Referenzverbindungen aus der Zusammenarbeit mit dem BVL einsetzt. Friederike Habedank konnte die mit einer LC-HRMS Orbitrap QExact im Rahmen der amtlichen Überwachung gemessenen Proben mit den Daten für die neuen Metaboliten reprozessieren und neue Ansätze für die Risikobewertung von Pestiziden entwickeln.

*Michael Rychlik
Technische Universität München*

Die Chemometrik Session auf der analytica conference

Ein schöner Erfolg für den Arbeitskreis

■ Ca. 60 bis 80 Zuhörer folgten mit großem Interesse den Ausführungen der Vortragenden. Gerade in einer Zeit wo versucht wird, auch im analytischen Bereich immer größere Datenmengen zu produzieren, ist es umso wichtiger, diese auch effizient aus- und zu bewerten. Eine Reihe von frei zugänglichen oder auch kommerziellen Programmen stehen den potenziellen Anwendern dafür zur Verfügung. Eine effektive Nutzung ist aber nur dann möglich, wenn die dafür notwendigen theoretischen Kenntnisse vorhanden sind.

Ein Ziel der Session war es deshalb, die Hemmschwelle bei den interessierten Zuhörern herabzusetzen, sich mit den Grundlagen und der Anwendung chemometrischer Methoden zu beschäftigen. Die Vorträge wurden dabei bewusst auf Deutsch gehalten. Eine komplexe und vielen Zuhörern im Detail nicht vertraute Materie ließ sich so am besten vorstellen und erläutern.

Im Einführungsvortrag von Prof. Dr. Lohninger, Uni Wien, wurden den Zuhörenden wesentliche multivariate Methoden anhand von Beispielen im Überblick vorgestellt sowie die Möglichkeiten aber auch die Grenzen der Nutzung kurz erläutert. Mit einer sehr anschaulichen Grafik ging Prof. Dr. Lohninger auf die zunehmende Intensität der Anwendung chemometrischer Methoden, gemessen als Anzahl der wissenschaftlichen Veröffentlichungen, in Verbindung mit der Entwicklung der Computertechnik ein und wies so auf die Perspektiven einer noch intensiveren Nutzung chemometrischer Methoden in der Zukunft der analytischen Chemie hin.

Bei den folgenden Vorträgen wurden einzelne, der im Einführungsvortrag im Überblick vorgestellten chemometrischen Methoden anhand spezieller Beispiele detaillierter erläutert und diskutiert. →

So berichtete PD Dr. Steiner von der TU Dresden in seinem Vortrag zuerst über die Bildanalyse von histologischen Schnitten mit Hilfe der Clusteranalyse. Dabei ging er auch auf den Nutzen als Entscheidungshilfe für Ärzte ein, die Abgrenzung von gesundem und Tumorgewebe schneller und besser zu erkennen. In einem weiteren Beispiel aus seiner anwendungsorientierten Forschung erläuterte er ein Verfahren der chemometrischen Aus- und Bewertung, um im Hühnerfleisch das Geschlecht des sich entwickelnden Küken im Frühstadium zu erkennen. Dies vor dem Hintergrund, eine bisher übliche industrielle Tötung männlicher Küken in Zukunft durch Nichtausbrütung zu vermeiden.

Im Anschluss daran stellte Dr. Armin Auling von der Helmholtz Zentrum Geesthacht (HZG) Möglichkeiten der Modellvalidierung mit chemometrischen Methoden durch Vergleich mit Realmessungen vor. Dies mit dem Wissen, dass die in Ergebnissen von Modellierungen enthaltene Unsicherheit noch nicht immer im ausreichenden Maße Berücksichtigung findet. Hier wird in Zukunft die Zusammenarbeit zwischen dem analytischen Chemiker, der die Messungen an den Realproben durchführt, dem Modellierer, der die Daten zur Modellbildung nutzt und dem Chemometriker mit Kenntnis mathematisch statistischer Verfahren zur Ermittlung der Unsicherheiten der Modellaussagen, noch intensiviert werden.

Leider war Dr. Prikler von der Pfeuffer GmbH kurzfristig erkrankt, so dass der mit Sicherheit spannende Vortrag zu repräsentativen Probenahme leider entfallen musste. Vielleicht ergibt sich aber die Möglichkeit, ihn in zwei Jahren bei der geplanten nächsten Chemometrik-Session auf der *analytica conference* vorzustellen. Zentrales An-

liegen des Vortrages von PD Dr. von Tümpling war der Hinweis, dass im Rahmen von Monitoring Programmen eine Vielzahl von chemisch analytischen Daten erhoben werden, die oftmals zielgerichtet für eine konkrete Fragestellung aus- und bewertet werden. Weitergehende Informationen, die diese Datensätze enthalten, werden oftmals noch nicht genutzt. Anhand von Beispielen aus der Gewässeranalytik zeigte er deshalb welchen Nutzen in Form von zusätzlichen Informationen zur Mustererkennung und Repräsentativität der Probenahme mittels Clusteranalyse in Verbindung mit der mehrdimensionalen Varianz- und Diskriminanzanalyse bzw. der Autokorrelationsfunktion gegeben ist.

Beim abschließenden Vortrag ging Dr. Winterstein von Wesseling Labor GmbH auf die Frage von Bewertungen zur Grenzwertüberschreitungen ein. Dies basierend auf dem Entwurf für die DIN 38402-100:2016-03, um auch in Fällen Aussagen treffen zu können, die bei der Festlegung von Über- bzw. Unterschreitung von Grenzwerten nicht eindeutig geregelt sind.

Konkrete Nachfragen der Zuhörer in der Pause sowie nach dem Ende der Session waren und sind ein Indiz dafür, dass es gelungen ist, ein verstärktes Interesse an der Chemometrie geweckt zu haben.

Bleibt am Ende neben den Vortragenden vor allem auch Frau Kühner und Frau Kirrwald von der GDCh zu danken, die durch die technische und administrative Vorbereitung und Begleitung während der Session den Erfolg möglich gemacht haben.

PD Dr. Wolf von Tümpling, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung – UFZ

PD Dr. Gerald Steiner, TU Dresden

In Funktion für den AK Chemometrie und Qualitätssicherung

ABC Spotlight on the nano world

■ Eine der Sessions auf der *analytica 2016* wurde gemeinsam von der Zeitschrift *Analytical and Bioanalytical Chemistry (ABC)* und der Fachgruppe Analytische Chemie gestaltet. Aufgrund des großen Erfolges vor vier Jahren wurde beschlossen, bei der *analytica conference* Publikationen aufzugreifen, die in neuerer Zeit in der Zeitschrift erschienen sind, um die Autoren über aktuelle und künftige aufkommende Forschungsgebiete berichten zu lassen. Dabei ergab sich die Möglichkeit, durch eine Mischung von Experten und Nachwuchswissenschaftlern unter verschiedenen Gesichtspunkten einen Überblick über ein Forschungsgebiet und auch über aktuelle Arbeiten in diesem zu geben.

Dieses Jahr wurde mit ein Gebiet gewählt, das im Augenblick in der Gesellschaft und auch bei den Analytikern große Bedeutung hat. In vielen Bereichen des täglichen Lebens spielen Nanopartikel eine Rolle, dabei müssen aber deren Vorteile und Nachteile genau diskutiert werden. Voraussetzung sind allerdings, wie immer in solchen Diskussionen, fundierte Kenntnisse in Bezug auf die Eigenschaften dieser Nanopartikel, deren Verhalten in Wechselwirkung mit der Umwelt und nicht zuletzt eine Charakterisierung ihrer Eigenschaften in Abhängigkeit von Größe, Form und Zusammensetzung. Dies sind Kernaufgaben von Analytikern.

Der griechische Begriff *nanos* wurde auf der 14. Konferenz der *Union Internationale de Chimie* im Jahr 1947 als Präfix für die Dimension Nanometer (10⁻⁹ m) eingeführt und hat zu vielen Forschungsbereichen in der Nanotechnologie, in Nanoscience und

Spot your favorite content!



GESELLSCHAFT
DEUTSCHER CHEMIKER



www.ChemistryViews.org

auch in Nanotoxicity geführt, wie verschiedene Zeitschriften und Tagungen beweisen. Die Zeitschrift *Nanoworld* und deren Kongresse wollen die gesamte Bandbreite von Forschung, Anwendung und Bedeutung für die Gesellschaft zusammenfassen sowie gegenwärtige und künftige Perspektiven und insbesondere Anforderungen an Forschung und Entwicklung diskutieren. Dabei sollen die Probleme, die die Welt in den nächsten Jahrzehnten in den Bereichen Energie, Umwelt, Weltraum, Elektronik und auch Lebenswissenschaft und Medizin haben wird, durch eine Verstärkung der weltweiten Zusammenarbeit zwischen Forschung, Entwicklung und Anwendern bis hin zu Politikern diskutiert und angegangen werden. Ziel der Vortragsreihe auf der *analytica* war es, aus diesem breiten Spektrum durch ausgewählte Vorträge die Bedeutung der Analytik als Voraussetzung für die Beurteilung der Vor- und Nachteile von „Nano“ darzustellen und aufzuzeigen, in welcher Weise sich die Zeitschrift, aber auch die Analytiker insgesamt aufstellen können, um sich in diesem in der Zukunft für die Gesellschaft außerordentlich bedeutenden Gebiet einbringen zu können.

Nach einer kurzen Einführung durch Dr. Pauly in die Ziele und Schwerpunkte der Zeitschrift *ABC* und deren Aktivitäten im Bereich „*Nanoworld*“ ging dann einer der Editoren (Günter Gauglitz) auf den Begriff „Nano“ und dessen Bedeutung in „*Nanoworld*“ und in „*Nanotechnologie*“ sowie auf die speziellen Eigenschaften von Nanopartikeln ein. Insbesondere die Änderung des Verhältnisses Oberfläche zu Volumen, die Porosität, die antibakteriellen Eigenschaften und plasmonischen Effekte eröffnen zahlreiche Einsatzmöglichkeiten der Nutzung von Nanopartikeln im Bereich der Nahrungsmittelstabilisierung und -verpackung, als Carrier-Materialien für Arzneimittel, bei der Signalverstärkung, als spezielles Chromatographiematerial und nicht zuletzt im Bereich von Sensoren. Insbesondere Metallnanopartikel liefern spezielle optische Eigenschaften und ermöglichen die Herstellung

von Nanobeads mit speziellen magnetischen Eigenschaften.

Nach diesen Einführungen lagen die Schwerpunkte der nachfolgenden Vorträge auf dem Verstehen der molekularen Wechselwirkungen, der Charakterisierung der Eigenschaften der Nanopartikel und nicht zuletzt der Bestimmung ihrer Größe, Form und Beschichtung. Es wurde mehrfach ausgeführt, dass Analytiker dies als wesentliche Aufgabe sehen und als Beitrag zum Abwägen des sicheren Einsatzes solcher Nanopartikel im Bereich der „*Nanoworld*“ erkennen. Wesentliches Ergebnis ist sinnvolle Anwendung und Reduzieren von Risiko für die Gesellschaft.

Professor Lihua Zhang von der Chinese Academy of Sciences (ebenfalls eine Editorin von *ABC*) begann die Vortragsreihe mit einem Beitrag zur Bedeutung von funktionalisierten Nanopartikeln, um aus biologischen Matrices Zielproteine bzw. Zielpeptide anzureichern. Dies ist von großer Bedeutung in der klinischen Diagnostik von menschlichem Plasma, um Biomarker und Zielwirkstoffe zu screenen. Dabei weist Graphenoxid mit seiner speziellen Struktur, der speziell großen Oberfläche und mit seinen Oxidgruppen eine äußerst hohe Hydrophilie und entsprechend eine entsprechend große Anzahl von Reaktionszentren für Modifikationen auf. Über 2.000 Proteine konnten in 24 µl Plasma identifiziert werden. LC-MS/MS-Kopplung stellen ein hervorragendes Werkzeug für diese Anwendung in der Analytik dar. Die Anreicherung von Glycoproteinen aus komplexen biologischen Matrices spielt eine sehr große Rolle. Dieser Vortrag zeigte die großen Möglichkeiten für die Zukunft in der Proteomprobenvorbereitung durch funktionalisierte Nanomaterialien auf.

Dr. Laura Soriano aus Córdoba aus der Gruppe von Kollege Valcárcel ging in ihrem Vortrag auf Extraktionsverfahren ein. Mit diesen Verfahren können Nanopartikel auch aus komplexen Matrices extrahiert und für den Nachweis vorbereitet werden. Damit ergibt sich ein breiter Anwendungsbereich einerseits für die Analytik, andererseits aber auch für die

Herstellung intelligenter Nanomaterialien als analytische Werkzeuge durch chemische Modifikation ihrer Oberflächen, um gezielt Wechselwirkungen zu verstehen. Frau Soriano ging dabei insbesondere auf Nanozellulose und fluoreszierende kohlenstoffbasierte Quantendots ein. Über die neuen Erkenntnisse bei der Herstellung von Sorptionsmaterialien und Nanosensoren für das Screening von Nanopartikeln in Umwelt und biologischen Proben wurde berichtet.

Sanfte und hochauflösende Trenntechniken von Nanopartikeln in Flüssigkeiten wurden dann anhand von FFF-Methoden (Field-Flow-Fractionation) durch Professor Dr. Catia Contado von der Ferrara Universität in einer Übersicht dargestellt. Die Bedeutung der Flusskanäle mit und ohne Packmaterial und die notwendigen Bedingungen für die angelegten Querfelder wurden diskutiert, wobei Flüssigkeitsströme, Zentrifugalkräfte, Temperaturgradienten oder Schwerkraftfelder eine Rolle spielen können. Solche Methoden sind heutzutage Voraussetzung, um Nanomaterialien zu charakterisieren, insbesondere wie sie heute Endbenutzerprodukten beigefügt werden. Diese FFF-Techniken können online mit ICP-MS oder anderen Methoden kombiniert werden, sodass die grundlegenden Eigenschaften bestimmt werden können, um ihre Auswirkungen auf Gesundheit und Umwelt ermitteln zu können.

Nicht zuletzt sprach im ersten Teil der Vortragsreihe Prof. Luigia Sabbatini von der Bari Universität über die Möglichkeiten, Kupfer- und Zinkoxidnanopartikel zu synthetisieren und zu charakterisieren. Außerdem wurde auch über Silberteflon-Nanokomposita berichtet, die als Stabilisatoren in neuen bioelektronischen Anwendungen und als antimikrobielle Materialien in verschiedenen Anwendungen (beispielsweise beim Verpacken von biomedizinischen Geräten, bei Textilien oder sogar zur Konservierung von Kulturgütern) von Bedeutung sind. Gezielt kann eine langandauernde Biozid-Aktivität erreicht werden, wobei die vollständige Kompatibilität der Beschichtung mit den

Kunstwerken erhalten bleibt. Biozide Produkte verhindern Biofilme und schützen Steinmaterial. Die Charakterisierung dieser Nanokomposite kann über Röntgenphotoelektronenspektroskopie, FT-IR, TEM und AFM vorgenommen werden. Mit ICP-MS wurde die Abnahme der Biozidwirkung kinetisch untersucht. Kombination von klassischen Ansätzen, wie Zellkulturen, und neuen Strategien (Nutzung von AFM, ATR/FTIR) eröffnet Möglichkeiten, die Leistungsfähigkeit solcher Biozide zu untersuchen und ihre dauerhafte Wirkung zu kontrollieren.

Der zweite Teil von „ABC's Spotlight on the Nanoworld“ wurde von David Muddiman (North Carolina State University/USA), seit 2015 Editor bei ABC, eröffnet. In seiner Präsentation ging er auf den Einsatz der bildgebenden Massenspektrometrie zur Untersuchung von Wirkstoffverteilungen in Geweben ein. Sein Fokus war dabei vor allem auf die Anwendung und Entwicklung der IR-MAL-DESI (infrared matrix-assisted laser desorption electrospray ionization)/MS gerichtet. Anwendungen dieser Methode wurden für die forensische Analytik aber auch für die Untersuchung von Gewebeschnitten gezeigt. Neben der Applikationsseite konnte David Muddiman dabei auch die methodischen Herausforderungen eindrucksvoll deutlich machen und das Potenzial für zukünftige Entwicklungen aufzeigen.

Hieran schloss sich der Vortrag von Björn Meermann von der Bundesanstalt für Gewässerkunde in Koblenz an. Thema seiner Präsentation war die Kopplung der asymmetrischen Feldflussfraktionierung (AF4) mit der induktiv gekoppelten Plasma-Massenspektrometrie (ICP-MS). Mit Hilfe dieser Kopplung konnte die Größenverteilung natürlich vorkommender Nanomaterialien ebenso wie die Unterscheidung zwischen synthetischen und natürlichen Nanomaterialien gezeigt werden. Mit Hilfe der Stabilisotopenmarkierung für Tracer-Experimente und der speziespezifischen Isotopenverdünnungsanalyse zur Quantifizierung konnte die Methode für die Bestimmung von Eisenoxidna-

nopartikeln in Sedimentproben angewendet werden. Insbesondere für zukünftige Anwendungen in der Analytik von Umweltproben zeigt diese Methode neue Möglichkeiten.

Im darauf folgenden Vortrag von Hans-Heiner Gorris vom Institut für Analytische Chemie, Chemo- und Biosensoren der Universität Regensburg standen die Nanopartikel wieder selbst als analytisches Tool im Fokus. Photonen aufkonvertierende Nanopartikel (engl. photon-upconverting nanoparticles, UCNPs) zeichnen sich dadurch aus, dass sie im Nahinfrarot (980 nm) angeregt werden können und anschließend sichtbares Licht emittieren, wodurch Hintergrundfluoreszenz und Lichtstreuung minimiert werden können. Die Gelelektrophorese eignet sich dabei insbesondere zur Trennung, Charakterisierung und Detektion oberflächenmodifizierter UCNPs, wie sie in zahlreichen bioanalytischen Anwendungen genutzt werden. Am Beispiel von Diclofenac konnte hier der Einsatz von UCNPs in einem kompetitiven Immunoassay wunderbar gezeigt werden.

Sensorstrategien zur Detektion synthetischer Nanopartikel in komplexen Matrices waren das Thema des anschließenden Vortrags von Günter Proll, der neben seiner Tätigkeit an der Universität Tübingen auch einer der beiden Geschäftsführer der Spin-off-Firma Biometrics in Tübingen ist. Die von Nanopartikeln ausgehenden Gesundheitsrisiken sind zunehmend Inhalt der wissenschaftlichen Diskussion, und so ist es nicht verwunderlich, dass insbesondere Sensorkonzepte bei der Detektion von Nanopartikeln eine wichtige Rolle einnehmen können. Die Ergebnisse verschiedener Kooperationen auf EU-Ebene (z.B. INSTANT, Smart-Nano oder NANODETECTOR), an denen die Tübinger Wissenschaftler beteiligt waren und sind, zeigen, wie breit das analytische Feld hier ist.

Dana Cialla-May vom Institut für Physikalische Chemie und dem Abbe-Zentrum für Photonik in Jena beleuchtete in ihrer Präsentation den Einsatz von Metallnanopartikeln für den Einsatz in der oberflächenver-

stärkten Ramanspektroskopie (engl. surface-enhanced Raman spectroscopy, SERS). Die Kombination aus SERS und mikrofluidischen Systemen eignet sich dabei zur schnellen Analytik großer Probenmengen. Im Rahmen dieser Präsentation wurde eine Tropfen-basierte mikrofluidische Plattform mit SERS für die Bestimmung von Wirkstoffen in Matrices wie künstlichem Urin gezeigt. SERS-aktive Silbernanostrukturen in Kombination mit geeigneten Sensorschichten tragen dazu bei, auch Analyten in Lebensmittel- und Umweltproben.

Den Abschluss der Nachmittags-session bildete Christine Kranz vom Institut für Analytische und Bioanalytische Chemie der Universität Ulm mit ihrem Einblick in das hochauflösende elektrochemische Imaging. Mittels Scanning Electrochemical Microscopy (SECM) können heute zahlreiche Fragestellungen hinsichtlich elektrochemischer Prozesse auf der Mikro- und Nanoskala untersucht werden. Die Kombination mit der AFM erlaubt sowohl die hochauflösende Aufklärung von Topographien als auch das elektrochemische Imaging. Ergänzt wird dies von der Kopplung mit der SICM (scanning ion conductance microscopy). Christine Kranz konnte in ihrer Präsentation eindrucksvoll die Einsatzbereiche dieser Methodenkombinationen aus SICM-SECM und AFM-SECM darstellen.

Allen Vortragenden, die zum guten Gelingen dieses Tages unter der Überschrift „ABC's Spotlight on the Nanoworld“ beigetragen, sei hier herzlich für ihre Beiträge gedankt. Der gute Besuch sowohl der Morgen- als auch der Nachmittags-session hat deutlich gemacht, dass „Analytical & Bioanalytical Chemistry“ nicht nur im Bereich der analytischen wissenschaftlichen Zeitschriften ein hohes Maß an Qualität vertritt sondern auch im Rahmen von Tagungen und Symposien wichtige Impulse liefert und eine Bereicherung für die wissenschaftliche Community ist.

*Günter Gauglitz, Tübingen
Martin Vogel, Münster*

Resource analysis

The constant companion of all activities along the value-added-chain

■ Im Zeichen der gewachsenen Aufmerksamkeit im Umgang mit natürlichen Ressourcen stand eine neue Session im Rahmen der analytica conference, die auf Anregung der GDCh vom Helmholtz-Institut Freiberg für Ressourcentechnologie (HIF) zusammengestellt werden konnte. Die gesamte Wertschöpfungskette zur Verarbeitung primärer und sekundärer Rohstoffe wird in zunehmendem Maße von einer Vielzahl analytischer Verfahren begleitet, die Gegenstand dieser Session waren.

Im Eingangsvortrag ging Dr. Claas Wagner (Hochschule Luzern) anhand sehr eindrucksvoller Beispiele auf die wissenschaftlichen Grundlagen der Beprobung stark heterogener Systeme, wie sie die meisten Rohstoffe darstellen, ein. Die von Pierre Gy entwickelte ‚Theory of Sampling‘ gestattet die komplette Analyse eines Probenahmeprozesses und gewährleistet damit die Repräsentativität genomener Proben auch bei sehr komplexen Probenahmen.

Die auf der Rietveld Analyse beruhende quantitative mineralogische Phasenanalyse stand im Mittelpunkt des Vortrags von Dr. Robert Möckel (HIF, Freiberg). Über den gesamten Verlauf der Wertschöpfungskette bietet sie die Möglichkeit, hochkomplexe Phasengemenge mit teilweise fehlgeordneten Strukturen zu quantifizieren. Neue instrumentelle Möglichkeiten gestatten es, die Nachweisgrenzen bestimmter Phasen in den Bereich von 0,x Masse-% zu bringen.

Dr. Dirk Sandmann (TU Bergakademie Freiberg) fasste die aktuellen Entwicklungen auf dem Gebiet der „Automatisierten Mineralogie“ zusammen. Die breiten Einsatzmöglichkeiten der auf rasterelektronenmikroskopischen Verfahren beruhenden ‚Mineral Liberation Analysis‘ wurden dargestellt und Möglichkeiten, diese Methode noch enger in die technologischen Abläufe des Recyclings zu integrieren, diskutiert.

Die Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) und deren enge Einbindung in industrielle Prozesse waren der Gegenstand des Vortrages von Prof. Johannes Pedarnig (Johannes Kepler Universität Linz). Das breite Spektrum der Anwendbarkeit dieser Methode auf natürliche Rohstoffe und Recyclingmaterialien sowie verschiedene Möglichkeiten der kalibrationsfreien und kalibrierten Quantifizierung von Haupt- und Spurenelementen wurden eindrucksvoll demonstriert.

Einem oftmals unterschätzten strategischen Rohstoff, hochreinem Quarz, wandte sich Prof. Axel Müller (Naturhistorisches Museum Oslo) zu. Zur Sicherung der Rohstoffbasis müssen neue Lagerstätten erkundet und die Eignung der Rohstoffe kontrolliert werden. Dabei kommt eine Kombination aus LA-ICP-MS, Kathodolumineszenz und rasterelektronenmikroskopischen Verfahren zum Einsatz.

In seinem abschließenden Vortrag beschäftigte sich Dr. Michael Maiwald (BAM Berlin) mit der Bedeutung geeigneter Referenzmaterialien für die Ressourcenanalytik. Insbesondere die immer stärkere Integration in die Steuerung technologischer Prozesse sowie die komplexer werdenden Matrices stellen eine große Herausforderung für die Herstellung solcher Referenzmaterialien dar.

Die Diskussionen im Anschluss an die Vorträge aber auch nach Abschluss der Session zeigten sowohl das große Interesse an den präsentierten Einzelthemen als auch an einer engen fachlichen Verknüpfung bei der weiteren Entwicklung ressourcenanalytischer Verfahren.

*Axel Renno
Helmholtz-Institut Freiberg
für Ressourcentechnologie*

Advances in electro-analysis



Eric Bakker stellte in seinem Beitrag neue Möglichkeiten der Ionenbestimmung unter Verwendung dünner Polymerfilme vor (Foto: Universität Regensburg)

■ Eine Nachmittagsveranstaltung des dritten Konferenztages der analytica conference war den elektroanalytischen Methoden gewidmet. Der vom Arbeitskreis Elektrochemische Analysenverfahren (ELACH) organisierte Vortragsblock mit dem Titel „Advances in Electroanalysis“ präsentierte Beiträge aus aktuellen Forschungsfeldern der Elektroanalytik. Die Referenten waren durchweg international besetzt.

Im Eröffnungsbeitrag mit dem Titel „Electroanalysis with carbon nanopores“ veranschaulichte M.V. Mirkin (USA), dass die drastische Miniaturisierung elektrochemischer Systeme eine neue Qualität der Ortsauflösung analytischer Informationen ermöglicht. Am Beispiel von Kohlenstoff-Nanosonden wurden eindrucksvolle Beispiele nachweisstarker Bestimmungen von Neurotransmittern in kleinsten Volumenkompartimenten sowie elektroanalytische Untersuchungen an singulären katalytischen Nanopartikeln illustriert. Eric Bakker (Schweiz) stellte in seinem Beitrag „New opportunities for ion sensing with thin layers“ neue Möglichkeiten der Ionenbestimmung unter Verwendung dünner Polymerfilme vor. Auf der Basis von dünn-schichtvoltammetrischen Messungen an ionenselektiven Membranen wurde ein innovatives Konzept diskutiert, bei

dem die klassischen elektroanalytischen Methoden Potentiometrie und Voltammetrie symbiotisch kombiniert werden. H. Oberacher (Österreich) zeigte in seinem Vortrag „Studying oxidation reactions of nucleic acids with electrochemistry – mass spectrometry“ Trends der instrumentellen Bioanalytik auf, wobei methodisch die Kopplung elektrochemischer Techniken mit der Massenspektrometrie im Mittelpunkt stand. Diese Methodenkombination eröffnet neue Möglichkeiten zur Untersuchung der oxidativen Modifizierung von Nukleinsäuren. Die elektrochemische Systemkomponente des Kopplungsverfahrens ermöglicht einen zuverlässigen experimentellen Ansatz zur Simulation von oxidativem Stress während die Massenspektrometrie ihr großes Potenzial zur Identifizierung komplexer Produktgemische einbringt. V. Vyskocil (Tschechische Republik) führte den Anwendungshintergrund der Bioelektrochemie von Nukleinsäuren weiter und stellte unter dem Thema „Electrochemical DNA biosensors for screening of genotoxic compounds“ Entwicklungen von elektrochemischen DNA-Biosensoren vor. Im Fokus standen hierbei vor allem unterschiedliche Elektrodenmaterialien und Immobilisierungstechniken für die Sensorentwicklung. Im Beitrag von A. Kiss (Ungarn), „High-speed SECM imaging“, wurde der durch Mirkin eröffnete thematische Kreis von Messungen mit hoher Ortsauflösung geschlossen. Der finale Beitrag hatte die elektrochemische Rastermikroskopie (SECM) unter Verwendung potentiometrischer Sonden zum Gegenstand. Es wurden verschiedene experimentelle Strategien und Messverarbeitungsalgorithmen vorgestellt, die zur Steigerung der Scangeschwindigkeit von SECM-Messungen für zuverlässige Bestimmungen von lokalen Ionenkonzentrationen eingesetzt werden können.

Insgesamt dokumentierten die ausgewählten Beiträge, dass die Elektroanalytik ein international aktives Forschungsgebiet mit breitem Raum für neue methodische Entwicklungen darstellt.

Frank-Michael Matysik
Universität Regensburg

Tagungen

Frühjahrsschule Industrielle analytische Chemie

Tübingen, März 2016

■ Was erstmal recht hölzern und unhandlich klang, hatte uns doch alle insoweit fasziniert, dass wir uns beworben hatten. Da waren wir nun, angekommen im mediterranen Hotel und harrten der Dinge, die da kommen mochten. Immerhin begann der nächste Morgen nicht gar so früh, daher blieb abends noch genug Zeit für Pizza und ein wenig die Gegend erkunden, je nachdem wann Zug, Auto oder sonstige Verkehrsmittel einen ans Ziel der Reise gebracht hatten. Beim Frühstück begann man zu raten, wer der Hotelgäste wohl zur Gruppe gehörte, was bei der Größe (Kleine) des Hotels und dem Alter nicht allzu schwer war. Der erste Tag an der Uni präsentierte sich mit Einführung und Vorlesungen und dann war es auch schon Abend. Statt ins Hotel zurück zu kehren hieß es nun Zutaten schneiden für traditionelle schwäbische Gerichte. So kam man an den Tischen bereits miteinander ins Gespräch und meine Bedenken, eine rein-deutsche Frühjahrsschule könnte zu wenig kulturellen Input beinhalten, wurden bereits hier zerstreut, denn bereits die Konfrontation Bayern-Niedersachsen-Nordrhein-westfalen bot so einiges, mit dem

man wirklich nicht gerechnet hatte. Auf einmal war man dankbar, weil man nicht wie an der Uni Regensburg Master-Abschluss-Prüfungen ablegen musste, man stellte fest, dass man wirklich nicht von ‚deutscher‘ Küche sprechen konnte, so sehr wie sich die Regionen unterschieden und auch die erste Sprachhürde wurde mit viel Humor und einigen Wiederholungen genommen. Als dann noch Maultaschen, Linsengemüse und Spätzle fertig waren und Wein oder Bier geöffnet wurden, waren alle zufrieden und fanden, so könne es weitergehen.

Die Tage waren lang. Der gelegentlichen Unterzuckerung während der Tage-füllenden Vorlesungen wurde mit Rittersport und Salzstangen begegnet, für die Ernährungsbewussten gab es zeitweilig auch die Äpfel, so sie denn den Weg aus dem Supermarkt in den Aufenthaltsraum schafften. Dem sich anhäufenden Schlafdefizit wurde mit gesteigertem Kaffee- und schwarzem Tee-Konsum begegnet. Doch sobald es zurück in den Vorlesungsraum ging, waren alle wieder wach. Die Themen waren aber auch einfach zu spannend. Da vorne standen Menschen aus dem wahren Leben, von denen die meisten den El-



Gute Laune vor dem Rathaus in Tübingen (Foto: Beate Scherer)



Vorlesung in der Frühjahrsschule „industrielle analytische Chemie“



Teilnehmer der Frühjahrsschule 2016 (Fotos: Carolin Huhn)

fenbeinturm Universität lange hinter sich gelassen hatten und wussten, wie es dort draußen zuing.

Manch ein Thema klang in der Beschreibung so eintönig und kleinkariert, Qualitätsmanagement, konnte das spannend sein? Doch kaum stand die Dozentin vorne, waren plötzlich alle fasziniert. Es klang auf einmal gar nicht mehr trocken, sondern lebendig und farbenfroh. Bereits nach zwei Tagen ging es auf die erste Exkursion, Institut Jäger (Eurofins) in Tübingen. Ich glaube, wir waren alle begeistert, ich auf jeden Fall war es. Ein hochinnovatives Umfeld, spannende Einblicke und unglaublich flexible Strukturen, ja, auf den Blick, den wir bekamen, schien es, als würde hier wirklich das Bestmögliche aus dem Potenzial herausgeholt, das die Mitarbeiter boten. Und der zweite Vorteil dieser Exkursion... sie ging nur einen halben Tag. So konnten wir den Rest des Tages nutzen, noch ein wenig die Stadt erkunden, das bereits Gehörte ein wenig verarbeiten, denn die stoffliche Fülle war durchaus umfangreich. Und es war gerade mal der dritte Tag. Auch die beiden nächsten Tage vergingen, das Gehirn schien bereits aus allen Nähten zu platzen und das zur Halbzeit. Doch bekanntermaßen ging ja immer noch mehr und nun war erstmal Wochenende. Einige entschieden sich, mit körperlicher Ertüchtigung das Gehirn beim Bouldern durchzulüften, andere fuhrten ins nahegelegene Frankreich und wieder andere entspannten den Tag bei einem Stück Kuchen in einem der niedlichen Cafés von Tübingen. Samstags abends hatten wir uns alle

in einem nahegelegenen Restaurant verabredet. Dort begann der Abend, doch für die meisten ging er noch weiter. Alle von uns, die an einer Großstadtuni studierten, waren doch irgendwie fasziniert, wie kurz die Wege waren und wie schnell man zu Fuß in einer Bar oder Kneipe und wieder zurück am Hotel war, ohne auf öffentliche Verkehrsmittel (die nachts nun mal eher spärlich verfügbar waren) zurückgreifen zu müssen.

Sonntags stand eine Führung auf dem Plan, doch aufgrund eines Missverständnisses standen wir im Regen und das obwohl die Sonne schien. Prompt war Plan B zur Hand, wozu hatten wir Tübinger Studenten mit dabei? Und schon hatten die das Heft in der Hand. So ging dann auch der Sonntag vorbei. Mit einem Mal fanden wir uns bereits in der zweiten Woche wieder. Der Kaffeekonsum wurde noch mal verdoppelt, das Fensteröffnen in den Pausen intensiviert. Mittwochs ging es dann zum zweiten Mal zu einer Exkursion, diesmal zu Merck nach Darmstadt. Das Schlafdefizit glichen die meisten auf der langen Busfahrt wieder aus, sodass alle frisch im riesigen Werk standen. Verschiedene Vorträge und Führungen durch die Labortrakte der unterschiedlichen Analytikabteilungen wurden von einer Mittagspause unterbrochen, in der wir die Möglichkeit hatten, den jeweiligen mit uns am Tisch sitzenden Laborleiter rund um die Firma Merck, die beruflichen Perspektiven dort und auch allgemein zu ihrer beruflichen Laufbahn zu befragen. Da war es dann auch keine Überraschung, dass nach so

viel Input auch auf der Rückfahrt die Mehrheit von uns die Augen geschlossen hatte. Doch beim Abendessen in der ‚Wurststube‘ hatten wir alle genug Zeit, das Gehörte zu verarbeiten und zu diskutieren und auch die erschöpften Energiereserven waren mit Spätzle, Maultaschen und Bier schnell wieder gefüllt.

Die letzte Vorlesung Donnerstagmorgen zum Thema Bewerbung (wir alle lauschten noch einmal ganz aufmerksam den sehr praktischen Tipps) ging schnell vorbei und dann hieß es nur noch Klausurvorbereitung. Wenig überraschend raste der Donnerstag vorbei und nach der Klausur am nächsten Morgen und einer Abschlussbesprechung hieß es dann auch schon Abschied nehmen, von den anderen und von Tübingen. Waren das wirklich schon zwei Wochen gewesen?

Fazit: Eine intensive Zeit, mit so viel Input, dass sich Gedanken und Anstöße noch durch die nächsten Wochen zogen, viele spannende Einblicke in die verschiedenen Tätigkeitsfelder der Analytik in der Industrie, unsagbar viele Eindrücke und damit auf jeden Fall eine prägende Zeit, die zumindest meine, mit Sicherheit aber auch die Zukunft der meisten anderen nachhaltig beeinflusst hat.

Im Namen der Teilnehmer bedanken wir uns bei den Organisatoren des Industrieforums und der Universität Tübingen sowie bei allen Dozenten und ihren Firmen.

Anna Behmer,
Universität Duisburg-Essen

Exkursion zu Eurofins Institut Jäger GmbH

Frühjahrsschule Industrielle Analytische Chemie

■ Im Rahmen der 6. Frühjahrsschule „Industrielle Analytische Chemie“ in Tübingen fand eine Exkursion zu dem dort ansässigen Labor der Eurofins Institut Jäger GmbH statt. Die 28 Studenten von verschiedenen Universitäten aus ganz Deutschland wurden von den zwei mitwirkenden Chemieprofessoren der Universität Tübingen, Prof. Dr. Carolin Huhn und Prof. Dr. Günther Gauglitz, begleitet. Begrüßt wurden die Teilnehmer durch den Geschäftsführer Matthias Hamann. Nach einer kurzen Einführung sowohl über Eurofins als einem der weltweit führenden Analytikdienstleister mit über 225 Laboren in 39 Ländern als auch über die Eurofins Institut Jäger GmbH, die als Trinkwasser- und Sonderanalytik-Kompetenzcenter in der Eurofins Umwelt Deutschland Gruppe gilt, folgten weitere kurze Vorträge aus verschiedenen Bereichen des Unternehmens. Es referierten der Junior Manager Dr. Matthias Kleih über Führungskräfteentwicklung bei Eurofins, die Qualitätsmanagementbeauftragte Verena Krasz bezüglich der Akkreditierung als Grundlage der Arbeit in Prüf- und Kalibrierlaboratorien und letztlich

gab der Leiter der Chromatographieabteilung Dr. Jan-Niklas Fricke einen kurzen Abriss über organische Sonderanalytik in einem Prüflaboratorium. Nach einer gemütlichen Pause bei Kaffee, Tee und Brezeln fand eine ausführliche Laborbesichtigung in mehreren Gruppen statt. Dabei wurde den Teilnehmern der typische Gang einer zu analysierenden Probe durch die Einrichtung näher gebracht.

Beim überwiegenden Teil der Analysen am Standort Tübingen handelt es sich um Wasserproben in verschiedenster Form. Den Großteil davon machen Trink-, Bade- und Abwasserproben aus, aber auch Grund- und Mineralwässer werden untersucht. Die Probenahme ist hierbei oft einer der komplexeren Arbeitsschritte, bei dem viele verschiedene Einflussgrößen berücksichtigt werden müssen. Daher legt die Eurofins Institut Jäger GmbH großen Wert darauf, dafür fachlich hoch qualifiziertes Personal einzusetzen. Im Anschluss gelangen die Proben direkt zum Probeneingang und werden hier registriert und für die entsprechenden Labore gekennzeichnet und sortiert. Die eigentliche Laborführung begann im Trink- und Abwasserlabor und wurde, vorbei an der Mikrobiologie, durch die Räumlichkeiten der Chromatographieabteilung fortgesetzt. Eine beeindruckende Vielfalt an chromatographischen Analysegeräten wurde hierbei von Dr. Jan-Niklas Fricke vorgestellt. Das Re-

pertoire umfasst mehrere LC/MS-MS, HPLC-MS und GC-MS-Geräte mit Direktinjektion bzw. SPE oder LLE zur Probenvorbereitung und den entsprechenden Detektoren um eine große Bandbreite der im Wasser befindlichen Analyten abzudecken.

Nach kurzen Erklärungen zur Klärschlamm, bzw. Bodenprobenanalyse und TOC Bestimmung wurden als nächstes die Labore der Probenaufbereitung für die Proben der LC/GC-Abteilung besichtigt. SPE dient hierbei häufig als Standardmethode zur Aufreinigung und Aufkonzentration der Proben. Im Labor gegenüber ist die Metallanalytik beheimatet. Auch hier stehen neueste Geräte, u.a. zwei ICP-MS, zur Probenanalyse zur Verfügung.

Sein Ende fand der Rundgang durch das Institut im Büro der Analytical Service Managers, die für die Kundenbetreuung, die Prüflaufleitung, also das Plausibilisieren der Messwerte und Erstellen der Prüfberichte und letztendlich die Rechnungsstellung verantwortlich sind.

Abschließend standen die Mitarbeiter des Institutes noch für Fragen zur Verfügung und die Studenten konnten ihre neu gewonnenen Eindrücke als Feedback kundtun. Es lässt sich sagen, dass die Eurofins Institut Jäger GmbH ein aufstrebendes Unternehmen mit einem äußerst angenehm wirkenden Arbeitsklima zu sein scheint, welches für junge, engagierte Arbeitskräfte eine geeignete Plattform für den Berufseinstieg bietet.

Im Namen der Frühjahrsschule möchten wir uns recht herzlich bei den Mitarbeitern der Eurofins Instituts Jäger GmbH für die Zeit bedanken, welche sie sich für die interessante Präsentation des Unternehmens und die Beantwortung aller Fragen genommen haben.

Unser Dank gilt natürlich auch den Organisatoren Prof. Dr. Carolin Huhn und Prof. Dr. Günther Gauglitz für die gelungene Exkursion.

*Pierre Pütz, Milena Schenck,
Simone Ruckdäschel
Universität Regensburg*



In den Laboratorien bei Eurofins (Foto: Tanja Melzer)

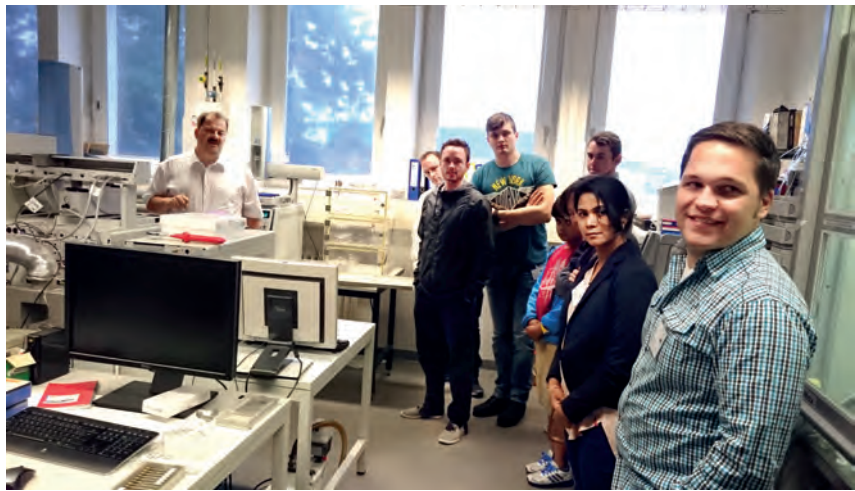
Junganalytikertreffen

Institut für Energie- und Umwelttechnik e.V. (IUTA) in Duisburg

Am 27. Juli 2015 luden Stephanie Jäger und Carolin Huhn zum regelmäßig stattfindenden Junganalytikertreffen ein. Gastgeber war in diesem Jahr das Institut für Energie- und Umwelttechnik e.V. (IUTA) in Duisburg mit Hauptorganisator Dr. Tjorben Posch, der hier im Bereich Forschungsanalytik/Umwelthygiene & Spurenstoffe tätig ist. Das IUTA ist eines der größten verfahrenstechnischen Institute in Deutschland und Mitglied der 2014 gegründeten Johannes-Rau-Forschungsgemeinschaft.

Auch dieses Mal nahmen einige Junganalytiker am Vorabend der Veranstaltung die Möglichkeit wahr, beim gemeinsamen Abendessen im Bolero im Innenhafen von Duisburg alte Bekannte wiederzutreffen und neue Kontakte zu knüpfen. Am Montagmorgen begann der Tag nach der Vorstellung aller 19 Teilnehmer mit interessanten Fakten und Informationen über das IUTA, präsentiert durch dessen Geschäftsführer Dr.-Ing. Stefan Haep. Eine Vorstellung der Schwerpunktthemen Aerosole und Feinstaub, nachhaltige Nanotechnologie, funktionale Oberflächen, zukünftige Energieversorgung und hochtoxische Substanzen ermöglichte es dem interessierten Zuhörer, sich ein detailliertes Bild der Forschung auf dem Gelände des ehemaligen Krupp-Stahlwerks zu machen. Dr. Tjorben Posch vertiefte diese Ausführungen durch eine tiefer gehende Vorstellung des Bereichs Forschungsanalytik/Umwelthygiene & Spurenstoffe mit Schwerpunkten auf der Hochtemperatur-Flüssigchromatographie, Abwasserbehandlungstechniken und Spurenstoffen in der Umwelt.

Führungen durch die verschiedenen Abteilungen des IUTA e.V. füllten die Theorie mit Bildern. So entfachte im Bereich für Gasprozesse eine intensive Diskussion über die Zukunft unserer Energieproduktion und die CO₂-Problematik. Mehrstöckig angeordnete Gasphasenreaktoren für die Nanopartikelsynthese zum Anfassen



Führungen durch die verschiedenen Abteilungen des IUTA e.V. (Foto: Tjorben Posch)

ließen den Alltag beim Arbeiten in größerem Maßstab, als es die meisten Teilnehmenden aus dem Laboralltag gewohnt waren, durchscheinen. Dr.-Ing Stefan Haep veranschaulichte eindrucksvoll, dass Forschung zu Upscaling Phänomene hervorbringt, die im Labormaßstab nie erkannt werden könnten. Des Weiteren wurde den Junganalytikern ein Einblick in Filtertests beispielsweise für Reinräume und Membranuntersuchungen von Membranen auf Polyamidbasis in Bezug auf Fouling und anorganische Rückstände geboten.

Abgerundet wurde der Tag durch einen aktiven Teil, bei dem die Teilnehmer an drei Stationen zum einen von Claudia vom Eysler die Techniken hinter einer Oberflächenuntersuchungen auf hochtoxische Zytostatika lernen konnten, zum anderen einen Einblick in die verwendeten Methoden in der Umweltanalytik am IUTA geboten wurde. Hierbei beeindruckte eine mikro-LC-TripleQuad-MS Kopplung von Terence Hetzel für die Routineanalytik, die 300 Injektionen pro Nacht schafft und ein On-line 2D-LC Aufbau von Juri Leonhardt, der auf einer Kombination von nano- und mikro-LC beruht. Bei der dritten Station wurde die wirkungsbezogene Analytik von Linda Gehrman vorgestellt, die unter Verwendung von Hegezellenassays die Bestimmung von Hormonen im Abwasser sensitiver als jede instrumentelle Analytik (ca. 12 pg/L) ermöglicht. Bei der abschließenden Diskussions- und Feedbackrunde zeigte sich ein durchweg posi-

tiver Eindruck der Veranstaltung.

Ein herzlicher Dank gilt Carolin Huhn und Tjorben Posch für die gelungene Organisation dieses lehrreichen und informativen Tages, der dem Begriff Analytik mit Upscaling ein Gesicht gegeben hat. Weiterhin sei allen Referenten und Helfern für ihre Zeit und Mühe gedankt. Abschließend ein Dank an die Fachgruppe Analytische Chemie der GDCh für die Übernahme der Reisekosten, die vielen Junganalytikern die Teilnahme erst ermöglichte.

Maria Viehoff

Für Neugierige:
Der GDCh-Newsletter

Nützliche Informationen aktuell im 2-Wochen-Rhythmus.

Lesen und bestellen Sie den Newsletter hier:
www.gdch.de/newsletter

Foto: kids-pictures - Fotolia

38. Mycotoxin Workshop

■ Im Zeitraum vom 02.-04.05.2016 lud die Gesellschaft für Mykotoxinforschung e.V. (www.mykotoxin.de) zu ihrem alljährlich stattfindenden Kongress ein, zu dem wieder mehr als 200 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus aller Welt angereist waren. Neben zahlreichen Besuchern aus Deutschland und dem europäischen Ausland waren ebenso Teilnehmer aus Afrika, Süd- und Ostasien sowie den Vereinigten Staaten anwesend. Der Mykotoxin-Workshop wird jedes Jahr in einer anderen Stadt abgehalten und fand dieses Mal in den Gebäuden des Bundesinstituts für Risikobewertung (BfR) in Berlin statt.

Nach der Begrüßung durch den Präsidenten der Gesellschaft, Prof. Dr. Dr. habil. Manfred Gareis, wurde nach Themenblöcken gegliedert über Neuigkeiten aus den einzelnen Teilgebieten der Mykotoxinforschung referiert. Das Vortragsprogramm umfasste insgesamt 36 Präsentationen aus den Gebieten Analytik, Vorkommen und Verbreitung, Detoxifizierung, inhalationsbedingte Belastung sowie Toxizitäts- und Gesundheitsaspekte bei Mensch und Tier. Die sehr interessanten und vielfältigen Vorträge brachten die Teilnehmer in den jeweiligen Gebieten auf den neusten Stand in Sachen Forschung, Überwachung und Gesundheit. In den anschließenden Diskussionen wurden verbliebene offene Fragen geklärt, die präsentierten Inhalte vertieft oder neue Im-



Der Mykotoxin-Workshop fand in diesem Jahr in den Gebäuden des Bundesinstituts für Risikobewertung in Berlin statt

pulse für Referenten und Zuhörer gegeben. Neben den Vorträgen wurde das wissenschaftliche Programm durch mehr als 90 wissenschaftliche Poster zu verschiedensten Themen rund um Mykotoxine abgerundet. Am letzten Konferenztag wurden die beiden inhaltlich und didaktisch besten Poster mit einem Preis in Form eines Buch-Gutscheins gewürdigt.

Zu einer gelungenen Tagung trug ein abwechslungsreiches Rahmenprogramm ebenfalls in großem Maße bei. Für das leibliche Wohl der Teilnehmer wurde stets gesorgt und neben dem unverzichtbaren Kaffee abwechslungsreiche Mittagessen und Snacks serviert. Am Abend des ersten Konferenztages wurde bei schönstem Wetter auf dem Gelände des BfR gegrillt, um

den Tag in geselliger Runde ausklingen zu lassen. Durch die ungezwungene Atmosphäre wurden schnell neue Kontakte geknüpft und bestehende Verbindungen aufgefrischt. Ein Highlight am zweiten Nachmittag der Tagung war eine Schiffahrt auf der Spree. Bei Sonnenschein, Kaffee und Kuchen erlebten die Teilnehmer Berlin mit vielen seiner Sehenswürdigkeiten von einer ganz neuen Seite. Die Fahrt endete schließlich am Spreespeicher in Ostberlin, in welchem bei einem hervorragenden Abendbuffet der renommierte und mit 10.000 Euro dotierte Brigitte-Gedek-Wissenschaftspreis für Mykotoxinforschung verliehen wurde.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der Mykotoxin-Workshop 2016 in Berlin eine insgesamt sehr gelungene und gut organisierte Fachveranstaltung mit vielen interessanten Vorträgen und Postern rund um Mykotoxine war. Das unterhaltsame und gesellige Rahmenprogramm verbunden mit den überaus freundlichen Teilnehmern bot die Möglichkeit zu unkompliziertem Kennenlernen und Austausch mit angesehenen Fachkollegen. Der alljährliche Workshop, der nächstes Jahr vom 19.-21.06.2017 in Bydgoszcz (Polen) stattfinden wird, sei somit allen im Bereich der Mykotoxine forschenden Kollegen wärmstens empfohlen.

Florian Kaltner



Schiffahrt auf der Spree

3D Cell Culture 2016

19.-21. April in Freiburg

■ Gemäß dem Titel „3D Cell Culture – how close to in vivo can we get?“ wurden Forschungsbeiträge zu aktuellen Themen der 3D Zellkultur vorgestellt. Diese umfassten Themen wie Bioprinting von einzelnen Zellen oder komplexen Gewebestrukturen, sowie Screening-Strategien für High-Throughput-Anwendungen und Kultivierung von Geweben und Zellen in Mikrofluidiksystemen. Auch neue Strategien für die Entwicklung von Organoiden und 3D Modellgeweben wie Haut, Knochen oder Gehirn zum Testen von Wirkstoffen und tieferem Verständnis von Krankheitsverläufen wurden behandelt. Neben zahlreichen Vorträgen aus der Forschung waren auch zahlreiche Aussteller aus der Biotech-Branche vertreten, die neue Produkte und Assays für das immer weiter wachsende Feld der 3D Zellkultur vorstellten.

Eine ausgedehnte Postersession und das festliche Konferenzdinner im Kaisersaal des Historischen Kaufhauses in der Freiburger Innenstadt ermöglichten einen regen Austausch von Forschungsergebnissen und das Knüpfen neuer Kontakte zwischen den Konferenzteilnehmern – natürlich begleitet von badischem Wein und lokalen Spezialitäten.

Ich bedanke mich recht herzlich für das Tagungsstipendium der GDCh, das mir die Teilnahme an der „3D Cell Culture 2016“ ermöglicht hat.

*Carina Schmittlein,
Universität Regensburg*

Anwendertreffen Plasmaspektrometrie

■ In Zusammenarbeit mit dem Deutschen Arbeitskreis für Analytische Spektroskopie (DAAS) fand am 22. Februar 2016 in der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) in Adlershof Berlin, das Anwendertreffen zum Thema „Atom-spektrometrie mit Plasmen (ICP-OES, ICP-MS, Mikrowellenplasmen)“ statt. Schirmherr dieses Treffens war Prof. Dr. N. Jakubowski, der die Veranstal-

tung auch eröffnete. Anschließend übernahm Frau Richter die Sitzungsleitung für die erste Session, welche durch Dr. Joachim Franze vom ISAS e.V. aus Dortmund mit einem spannenden Vortrag zur „Dielektrischen Barrieren Entladung – Übergang von weicher Ionisierung zum dissoziativen Plasma“ eröffnet wurde. Gefolgt wurde dieser Vortrag von einer ausführlichen Vorstellung der beiden neuen Spektrometer der Firma Analytik Jena. Dr. Heike Gleisner präsentierte hier Ergebnisse zur Analytik von Seltenen Erden unter Verwendung des ICP-MS, dem HR-ICP-OES PlasmaQuant® MS Elite und dem PlasmaQuant® PQ 90000 Elite. In diesem Vortrag ging Frau Dr. Gleisner vor allem auf die Probleme der Analyse von Seltenen Erden, welche bevorzugt durch einen Schmelzaufschluss unter Zusatz von Natriumperoxid zugänglich werden, und die daraus folgende Matrixlast ein. Beendet wurde die erste Session durch einen Vortrag von Carina Stöbeier von der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung. In ihrem Vortrag stellte sie ihre neuesten Forschungsergebnisse zum Thema „Applikation der ICP-MS im Single Particle Mode und Isotopenverdünnungsanalyse am Beispiel von Silbernanopartikel“ vor. Anschließend gab es einen regen Diskussionsaustausch in der 30 minütigen Kaffeepause, in der für das leibliche Wohl der Teilnehmer bestens gesorgt war.

In der zweiten Session dieses Anwendertreffens übernahm Prof. Nicolas H. Bings die Sitzungsleitung und leitete den Vortrag von Dr. Thomas Lostak von der Thyssenkrupp Steel Europe AG aus Duisburg zum Thema „Einsatz der Online-Elektrolyse zur Probenvorbereitung metallischer Proben für die ICP-OES“ ein. In diesem Beitrag zeigte Herr Lostak die Vorteile der Online-Elektrolyse, welche nur ca. 4 Minuten benötigt, sowie deren Aufbau auf. Gefolgt wurde dieser Beitrag von einem sehr spannenden Vortrag von Herrn Dr. Maxim Voronov, Universität Münster, welcher zum Thema „Comparison of ICP modeling results and measured plasma properties“ refe-

rierte. In diesem ausführlichen Beitrag stellte Herr Voronov seine Modellierungsergebnisse zur Fassel- und Ship Torch vor und zeigte Vor- und Nachteile der beiden Torch auf, welche sich aus seinen verwendeten Modellen ergeben. Der dritte Vortrag in dieser Session kam von Dr. Björn Meermann von der Bundesanstalt für Gewässerkunde in Koblenz mit dem Titel „AF4/ICP-MS and stable isotope labeling as powerful tools for engineered nanoparticle analysis in environmental matrices“. In diesem Beitrag lag vor allem der Fokus auf der Asymmetrischen-Fluss-Feld-Fluss-Fraktionierung von Eisen-Nanopartikeln. In der Mittagspause konnten alle Teilnehmer nach einer kleinen Stärkung, welche von der BAM finanziert wurde, an einer Laborführung durch die Analytiklabore der BAM teilnehmen. In dieser Führung wurden den Teilnehmern nicht nur die Labore gezeigt, sondern auch die betreffenden Projekte vorgestellt, in die ICP-OES- und MS-Methoden eingebunden sind.

Anschließend wurde die dritte Session des Anwendertreffens Plasmaspektrometrie unter der Sitzungsleitung von Prof. Dr. José A.C. Broekaert eröffnet. Dr. Bodo Hattendorf von der ETH Zürich berichtete in seinem spannenden Vortrag mit dem Titel „Assessing variations of rare earth elements in stalagmites in sub-ppm levels by LA-CP-MS“ über die Vorteile der LA-ICP-MS für die Bewertung der Konzentrationsvariationen von Seltenen Erden in Stalagmiten. Hierzu verwendete er einen Geolas C Laser mit einer Wellenlänge von 193 nm. Gefolgt wurde dieser Vortrag von Lyndsey Hendriks, ebenfalls von der ETH Zürich. Frau Hendriks sprach zum Thema Analyt-Response einer benutzerdefinierten ICP-Torch-Konfiguration mit vier Gasströmen. Bei dieser Konfiguration wurde ein zusätzliches Sheathgas zwischen das Hilfs- und Zerstäubergas hinzugefügt. Als Probenzuführung wurde in der von Frau Hendriks vorgestellten Arbeit ein Micro-Droplet-Generator, welcher Tropfen mit einem Durchmesser von 20–40 µm generiert, vorgestellt. An-

schließlich hielt Dorothee Iffland von der Johannes Gutenberg-Universität Mainz einen Vortrag mit dem Titel „Quantifizierung von Bor in biologischen Proben für die Bor-Neutronen-Einfang-Therapie (BNCT)“. In diesem Beitrag stellte Frau Iffland die Vor- und Nachteile der Online-Standard-addition und Online-externen Kalibrierung für die Quantifizierung von Bor in Vollblut vor. Bei diesen Kalibriermethoden entfällt die Proben-vorbereitung vollständig, wodurch nur ca. 12 Minuten (Online-Standard-addition) bzw. 4 Minuten (Online-externe Kalibrierung) zwischen Probenahme und Analyseergebnis liegen. Abgeschlossen wurde die dritte Session durch einen Vortrag von Lisa Frensemeier von der Universität Münster zum Thema „Speciation analysis of the arsenic containing drug roxarson and its electrochemically generated transformation products“. Durch ihre Forschung konnte sie zeigen, dass der Metabolismus von Roxarson ein zweistufiger Prozess ist. In der ersten Phase finden hauptsächlich oxidative Prozesse und in der zweiten Phase die Konjugationen statt.

Nach einer weiteren Kaffeepause, welche von allen Teilnehmern für regen Austausch genutzt wurde, übernahm Dr. Wolfgang Buscher den Sitzungsvorsitz der vierten und letzten Session dieses Anwendertreffens. Prof. José A.C. Broekaert von der Universität Hamburg berichtete von der „Winter Conference on Plasma Spectrochemistry 2016“ welche dieses Jahr vom 10.-16. Januar in Tucson, Arizona (USA) stattfand. Im Anschluss dieses sehr ausführlichen Berichtes hielt Mandy Großgarten von der Universität Münster einen Vortrag mit dem Titel „Quantitative Bioimaging by means of LA-ICP-MS reveals Silver Migration from Silver-Coated Mega-Endoprothese into the Patients Brain“. Frau Großgarten konnte im Rahmen ihrer Forschung zeigen, dass sich im Falle der Patienten, welche Prothesen aus einer Silber-Titan-Aluminium-Legierung erhielten, mehr Silber im Gehirn dieser Menschen anreicherte, als bei einer entsprechenden Kontrollgruppe. Im Anschluss an diesen Beitrag berichtete Oliver Hachmöller, ebenfalls von der

Universität Münster, zum Thema „Elemental bioimaging for the diagnosis of Wilson’s disease by means of LA-ICP-MS“. Herr Hachmöller konnte anhand seiner Forschung Kriterien herausfinden, welche die Diagnose Morbus Wilson bestätigen. Das Anwendertreffen Plasmaspektrometrie in Berlin wurde beendet mit einem spannenden Vortrag mit dem Titel „An Insight into Metal Oxide NPs using Combined Microdroplet Generator – Single Particle Mode ICP-MS“. Hier berichtete Benita Schmidt von der BAM über die ICP-MS-Analyse von Nanopartikeln unter Einsatz eines Mikro-Tropfen-Generators, welcher Tropfen vom Durchmesser von ca. 60 µm bzw. 113 pL generiert.

Am gleichen Abend konnten sich die Teilnehmer des Anwendertreffens bei einem gemeinsamen Abendessen in gemütlicher Runde austauschen.

*Dorothee Iffland,
Johannes Gutenberg-Universität Mainz*

SETAC 2016

■ Die diesjährige Tagung der Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC) stand unter dem Thema “Environmental contaminants from land to sea: continuities and interface in environmental toxicology and chemistry”. Besonderer Wert wurde auf Wechselwirkungen, Transport und Verbleib neu aufkommender Umweltkontaminanten in der Umwelt gelegt. Weitere wichtige Themengebiete waren Nachhaltigkeit und Risikobewertung.

Bei Ankunft im Kongresszentrum in Nantes wurde schnell klar, dass die Dimensionen der SETAC nicht mit der kürzlich besuchten Tagung der Wasserchemischen Gesellschaft zu vergleichen war. Über 1000 Poster und neun parallele Vortragssessions verteilt über vier Tage ermöglichten sowohl eine Weiterbildung auf dem eigenen Themengebiet als auch einen interessanten Einblick in angrenzende Forschungsgebiete.

Besonders hilfreich war für mich (Sven Huppertsberg) die eineinhalbtä-

gige Microplastic-Session, die viele neue Informationen bereithielt und einen tiefer in die Materie eintauchen lies als einfache Literaturrecherche. Am eigenen Poster kam man mit Kollegen mit ähnlichem oder gänzlich anderem Hintergrund ins Gespräch und konnte die vorgestellten Ergebnisse diskutieren. Auch die Beiträge anderer konnten kontrovers diskutiert werden und haben zu einigen Anregungen und Ideen für die eigene Arbeit geführt.

Sowohl ein Vortrag als auch ein Poster gaben mir (Daniel Zahn) viel Gelegenheit zum fachlichen Austausch mit Mitarbeitern anderer Forschungseinrichtungen und Industrievertretern, was nicht nur förderlich für die Entwicklung neuer Ideen für das weitere Vorgehen während der eigenen Forschung war sondern auch einen Blick auf das Themengebiet aus Sicht der Industrie ermöglichte. Die Anwesenheit vieler Kollegen aus dem eigenen internationalen Forschungsprojekt bot gleichzeitig die Gelegenheit zum regen Austausch die während nationalen Tagungen so nicht gegeben ist.

Abschließend kann man sagen, dass der persönliche und fachliche Gewinn durch die Tagungsteilnahme an der SETAC die durch Streik in Frankreich erschwerte Anreise mehr als ausgeglichen hat. Die aktive Teilnahme an der SETAC 2016 war für uns beide ein positives Erlebnis.

*Daniel Zahn,
Sven Huppertsberg*

40th International Symposium on Capillary Chromatography and 13th GC×GC Symposium

■ Das „40th International Symposium on Capillary Chromatography and 13th GC × GC Symposium“ fand vom 29. Mai bis 03. Juni 2016 in Riva del Garda, Italien, statt. Thema der Konferenz waren innovative Entwicklungen und Anwendungsgebiete rund um das Thema der analytischen Trenntechnik. Ein besonderer Schwerpunkt der Konferenz lag dabei

auf der Kopplung ein- und multidimensionaler Kapillarchromatographie mit der Massenspektrometrie. International renommierte Wissenschaftler wie auch aufstrebende Nachwuchsforscher aus aller Welt präsentierten in mehr als 200 Vorträgen sowie über 340 Posterbeiträgen den aktuellen Stand zur Theorie und Technik der chromatographischen Analytik. Zudem wurden zahlreiche Anwendungen aus dem Bereich der Lebensmittel- und Aromanalytik, der Forensik, Petrochemie oder Bioanalytik vorgestellt.

Die Fachgruppe Analytische Chemie der Gesellschaft Deutscher Chemiker unterstützte mit einem allgemeinen Tagungsstipendium die Konferenzteilnahmen der beiden Autoren, die mit dem Posterbeitrag „Alterations of papaya (*Carica papaya* L. cv. ‚Solo‘) volatiles during purée processing“ aktiv präsent waren. Im Beitrag wurden die mittels HS-SPME-GCMS gewonnenen Aromaprofile frischer Papayafrüchte und verarbeitetem Püree gegenübergestellt. Die Gesamtkonzentrationen der einzelnen Verbindungsklassen wie Terpenen, Estern oder Säuren blieb nahezu unverändert. Jedoch konnten mittels Hauptkomponentenanalyse (PCA) einzelne charakteristische Verbindungen herausgearbeitet werden, die verarbeitungsbedingten Veränderungen unterlagen. Während in der Frischfrucht erhöhte Konzentrationen an Terpenen wie beispielsweise Linalool sowie γ - und δ -Lactonen nachweisbar waren, zeichnete sich das Püree durch kurzkettige Ester wie Ethylbutanoat, verschiedene Alkohole, Aldehyde und Ketone aus.

Zudem waren die Stipendiaten durch ihre aktive Mitarbeit als Co-Autoren an dem Vortrag „Volatiles of Costa Rican papaya (*Carica papaya* L.) fruit purées analyzed by multidimensional GC methods“ von Priv.-Doz. Dr. habil. Hans-Georg Schmarr und einem weiteren Posterbeitrag von Ann-Katrin Walther (beide DLR Rheinpfalz, Neustadt/Weinstraße) beteiligt.

Die Konferenzteilnahme bot zahlreiche Möglichkeiten bestehende nationale und internationale Kontakte

zu pflegen und eine Vielzahl neuer zu knüpfen. Gleichzeitig konnten zahlreiche Inspirationen gesammelt und wissenschaftliche Aspekte mit anerkannten Experten diskutiert werden. Abschließend sei an dieser Stelle der Fachgruppe Analytische Chemie für die großzügige finanzielle Unterstützung gedankt, ohne die eine erfolgreiche Konferenzteilnahme nicht möglich gewesen wäre.

*Veronika M. Lieb,
Christof B. Steingaß
Universität Hohenheim*

ASMS 2016

■ Die jährliche Konferenz der American Society for Mass Spectrometry (ASMS) ist eine der wichtigsten und mit über 6000 Teilnehmern eine der größten Konferenzen im Bereich der Massenspektrometrie. Die diesjährige „64th Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics“ fand vom 5. bis zum 9. Juni 2016 in San Antonio (TX, USA) statt. Bereits vor der offiziellen Eröffnung fanden Short Courses zu den verschiedensten Bereichen der Massenspektrometrie wie z.B. „LC-MS: Techniques of Electrospray, APCI and APPI [...]“ von Robert D. Voyksner (LCMS Limited) sowie zwei lehrreiche Tutorial Lectures mit den Titeln „Forensic Mass Spectrometry #TellMeSomethingIDontKnow“ (Facundo Fernandez, Georgia Institute of Technology, GA, USA; Glen Jackson, West Virginia University, WV, USA) und „An Analyte’s Journey from Solution into the Gas Phase“ (Lars Kormann, University of Western Ontario, Canada) statt. Zur Eröffnung der Konferenz hielt Erica Ollmann Saphire (Scripps Research Institute, USA) einen spannenden Plenarvortrag mit dem Titel „A Molecular Arsenal Against Ebola Virus“ in dem unter anderem der Aufbau und die Strategien des Ebola-Virus sowie die Entwicklung von Therapien thematisiert wurden. Im Bereich der Therapie wurde deutlich, dass vor allem der Austausch und die Zusammenarbeit mit anderen Forschern und Forschungsgruppen einen sehr großen Stellenwert haben. Zum Abschluss

der Eröffnung wurde zu einem Willkommensempfang in die Ausstellungshalle geladen, in der neben den Firmenständen auch täglich über 600 Poster präsentiert wurden. Die Konferenztage Montag bis Donnerstag waren in zwei Vortragsblöcke mit je 8 Parallelsessions, die von 10 bis 14 Uhr von einer Postersession unterbrochen wurden, eingeteilt. Nach den Parallelsessions folgten ein Plenarvortrag sowie am Abend Workshops zu verschiedenen Bereichen der Massenspektrometrie. Während der abendlichen Plenarvorträge am Montag und Dienstag wurden Preise für herausragende Forschung vergeben. Scott A. McLuckey (Purdue University, IN, USA) erhielt den „ASMS Award for a Distinguished Contribution in Mass Spectrometry“ für seine Arbeiten auf dem Gebiet der Gasphasen Ionen/Ionen Reaktionen polyatomarer Moleküle und ihrer Anwendungen in der Analytischen Chemie. Kristina Håkansson (University of Michigan, MI, USA) wurde die „Biemann Medal“ für ihre Arbeiten an Elektronen basierten Aktivierungsmethoden verliehen.

Neben dem wissenschaftlichen Programm sorgten viele Hersteller mit abendlichen Hospitality Suites für ein vielfältiges Rahmenprogramm. Außerdem bestand die Möglichkeit, Geräte, Techniken und Neuheiten kennenzulernen. Ihren wissenschaftlichen Abschluss fand die Tagung am Donnerstagabend mit einem Plenarvortrag von William Bialek (Princeton University, NJ, USA) mit dem Titel: „More than the Sum of its Parts: Collective Phenomena in Living Systems, from Single Molecules to Flocks of Birds“. Mit einer Abschlussveranstaltung im Briscoe Western Art Museum endete am späten Donnerstagabend auch der nichtwissenschaftliche Teil der Konferenz. Die nächste und damit „65th Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics“ der ASMS wird vom 4. bis 8. Juli 2017 in Indianapolis (IN, USA) stattfinden. Rückblickend auf die diesjährige Konferenz werden mir die vielen interessanten Vorträge und Gespräche in Erinnerung bleiben. Die gut besuchten Postersessions boten den idealen Rahmen über die eigene und fremde

Forschung zu diskutieren, neue Ideen zu sammeln, sowie über den Tellerand des eigenen Themenbereichs hinaus zu schauen. Bedanken möchte ich mich bei der Fachgruppe Analytische Chemie der GDCh für ein Tagungsstipendium zur Unterstützung meiner Teilnahme an der ASMS 2016.

*Sebastian Hagenhoff,
Westfälische Wilhelms-Universität
Münster*

XVI Chemometrics in Analytical Chemistry

■ Vom 6. bis zum 10. Juni 2016 fand bereits die 16. Veranstaltung „Chemometrics in Analytical Chemistry“ (CAC) statt. Nach dem anfänglich vierjährigen und zuletzt zweijährigen Turnus folgte somit 2014, 2015 und 2016 jährlich eine Fachtagung. Das war aber sicherlich eine Ausnahme auf Grund des Gastspiels in China im letzten Jahr. Gastgeber 2016 war Barcelona/Spanien. Insgesamt 319 Teilnehmer aus 43 Ländern durften sich auf ein umfangreiches und gewohnt anspruchsvolles Programm bestehend aus 5 Plenarvorträgen (Paul Eilers, Marcel Maeder, Alejandro Olivieri, Beata Walczak und Peter Wentzell), 7 Keynote Lectures sowie weiteren 56 Vorträgen freuen. Daneben waren 212 Poster zu sehen und zu diskutieren.

Wie bereits in den vergangenen Jahren begann die CAC allerdings wieder mit der Möglichkeit, sich praktische Erfahrungen und detaillierteres Wissen anzueignen. Acht Chemometrikurse wurden am Montag im Institut d'Estudis Catalans angeboten zu den Themen ASCA und MSCA, MSPC, MCR, Datenvorbehandlung, DOE, Multiblock-Analyse, Klassifikation sowie MIA. 117 Teilnehmer, also mehr als ein Drittel, nahmen dieses Angebot war. Die Kombination aus vortraglastiger Konferenz und Vorkursen kommt also weiterhin sehr gut an und wird sicherlich bei den nächsten Tagungen fortgeführt werden. Der Montagabend schloss mit der Eröffnung durch Romà Tauler und einem Vortrag von Marcel Maeder sowie der



Blick von der Baustelle der Sagrada Família auf Barcelona

sich anschließenden Willkommensparty.

Ab Dienstag war die Konferenz dann im World Trade Center am Hafen Barcelonas zuhause. Die ersten Sessions standen unter dem Thema „Theory and method development“, das am Donnerstag wieder aufgegriffen wurde. Am Nachmittag ging es weiter mit Vorträgen zu „DOE, SPC and PAT“. Am Mittwoch standen „Omics and forensics“ und „Spectroscopic and image analysis“ im Vordergrund und am Donnerstag zunächst „Environmental and separation“. Der Freitag schloss mit Vorträgen zu „Food and sensory analysis“. Besonders gelungen war während dieser Tage die Mischung aus jungen Vortragenden und erfahrenen Forschern. Auch bei den angeregten Diskussionen kamen nicht nur die Honoratioren sondern auch jüngere Zuhörer zu Wort, woran man merkte dass die Vorträge echtes Interesse hervorriefen.

Vor den Pausen/Postersessions wurden die Themen von insgesamt 17 Postern in Flash-Präsentationen vorgestellt. Diese sich zwar inzwischen vielfach eingebürgerte Art des Vortrags ist auf Grund der knappen Zeit von ca. zwei Minuten je Vortrag immer noch sehr spannend.

Als Sponsoren der Fachtagung standen Elsevier, Eigenvector Research, Waters, Agilent und Ondalys sowie die Catalan Chemistry Society zur Verfügung. Elsevier beschränkte sich dabei nicht nur auf ein stummes Sponsoring, sondern bot durch R. G. Newell auch einen interessanten Vor-

trag zum Thema Publikationen. Angesprochen wurden wichtige Themen wie die sinnvolle Zahl an Autoren (man sollte sich auf die wirklich wesentlichen beschränken), die Wahl eines sinnvollen und ansprechenden Titels sowie die Wahl eines geeigneten Journals (Auswahl nach Thema und Zielgruppe, nicht nach Impact Factor). Außerdem erfuhren die Zuhörer, dass man auch eigene frühere Arbeiten ordentlich zitieren muss, damit kein Plagiat entsteht.

Anders als teilweise bei früheren Konferenzen gab es in Barcelona keine Parallelsessions. Das ermöglichte zum einen alle der durchweg guten Vorträge zu besuchen. Andererseits ergaben sich aber auch sehr lange und inhaltlich geballte Tage im sonnigen Spanien. Zum Glück ergab sich auf Grund der drei durch einen großen Innenhof getrennten Räumlichkeiten für Vorträge, Poster und das Mittagessen immer wieder die Möglichkeit, den strahlend blauen Himmel zu genießen und den Neid der Kollegen in Deutschland zu erzeu-



Gefüllter Vortragsraum in World Trade Center in Barcelona während des Vortrags von Beata Walczak (Fotos: Prikler)

gen. Das ging natürlich auch beim sozialen Rahmenprogramm, das unter anderem aus einer Bootsrundfahrt im Hafen Barcelonas und dem Konferenzdinner im Restaurant La Gavina mit Blick aufs Meer bestand.

Am Mittwoch wurden zum Abschluss des wissenschaftlichen Programms bereits zwei Preise verliehen. Den „Best Young Chemometrician Award“, der Forschern unter 40 Jahren verliehen wird, erhielt Jeroen Jansen (Radboud-Universität in Nijmegen/Niederlande) der seine Promotionszeit bei Age Smilde verbracht hatte. Der „Distinguished Award“ ging an Professor Yizeng Liang (Central South University in Changsha/China). Die Preisträger sollen in einer Hall of Fame auch bei den Internetauftritten der zukünftigen Veranstaltungen zu finden sein. Am Freitag wurden dann auch die besten Poster aus drei verschiedenen Sessions gekürt. Die Preise gingen hier an Alberto Ferrer aus Valencia/Spanien, Francesc Puig-Castellví aus Barcelona/Spanien sowie Shuxia Guo von der Friedrich-Schiller-Universität in Jena/Deutschland.

Sowohl an der Zahl der Poster als auch der Teilnehmer und der Mitglieder des Organisationskomitees konnte man erkennen, dass Chemometrie in Spanien einen sehr hohen Stellenwert hat. Es gibt junge aktive Gruppen in verschiedenen Städten des Landes und spanische Forscher sind inzwischen in verschiedenen Ländern Europas gelandet. Es war deswegen eine besondere Freude, 2016 in Barcelona zu Gast gewesen zu sein. Ein großer Dank gebührt dem hochkarätigen Organisationskomitee um Romà Tauler und Joaquim Jaumot (IDAEA-CSCI, Barcelona), Ricard Boqué und Joan Ferré (Universität Rovira i Virgili, Tarragona) sowie Anna de Juan (Universität Barcelona). Natürlich sollen auch die vielen Helfer nicht unerwähnt bleiben, die zu einem entspannten und reibungslosen Ablauf beigetragen haben.

Die nächste Tagung wird in zwei Jahren stattfinden, vom 25. bis zum 29. Juni 2018 in Halifax (Nova Scotia)/Kanada, der Heimat von Peter Wentzell.

Simon Prikler

Preise & Stipendien

Andrea Beutner mit dem Eberhard-Gerstel-Preis 2016 ausgezeichnet



Die Preisträgerin Andrea Beutner mit (von links) Dr. Martin Vogel, Vorsitzender des AK Separation Science, Prof. Dr. Werner Engewald, Vorsitzender des Preiskomitees, Eberhard und Holger Gerstel; Geschäftsführer der Gerstel GmbH & Co. KG (Foto: Messe München GmbH)

■ Auf der analytica conference 2016 in München wurde im Rahmen der vom Arbeitskreis Separation Science gestalteten Sektion „Separation Techniques: How Many Dimensions Are Enough?“ (Chair: Prof. Dr. O. J. Schmitz) am 10. Mai zum vierten Mal der Eberhard-Gerstel-Preis für eine herausragende Publikation auf dem Gebiet der Analytischen Trenntechniken verliehen. Dieser nach dem Firmengründer Eberhard Gerstel benannte und von der Firma GERSTEL GmbH & Co. KG gesponserte Preis wird vom AK Separation Science alle zwei Jahre vergeben. Aus mehreren erstklassigen Bewerbungen wählte die neunköpfige Jury unter Vorsitz von Prof. Dr. Werner Engewald die von Andrea Beutner als Erstautorin eingereichte Publikation „Two-Dimensional Separation of Ionic Species by Hyphenation of Capillary Ion Chromatography × Capillary Electrophoresis-Mass Spectrometry“ von Andrea Beutner, Sven Kochmann, Jonas Josef Peter Mark und Frank-Michael Matysik, *Analytical Chemistry*, 2015, 87 (6), 3134 – 3138, für den Preis aus.

Die Preisverleihung erfolgte gemeinsam durch den Vorsitzenden des Arbeitskreises Dr. Martin Vogel sowie den Geschäftsführern der GERSTEL GmbH & Co. KG Eberhard und Holger Gerstel. Die Preisträgerin Andrea Beutner hat an der Universität Regensburg ein Bachelor- und Masterstudium Chemie inklusive eines Semesters an der University of Aberdeen, Schottland absolviert. Im Vorjahr erhielt sie den Masterpreis

der Fachgruppe Analytische Chemie. Seit November 2014 arbeitet sie an ihrer Promotion bei Prof. Dr. F.-M. Matysik im Institut für Analytische Chemie, Chemo- und Biosensorik über zweidimensionale Trennungen ionischer Spezies. Obwohl erst im zweiten Doktorandenjahr hat Frau Beutner bereits fünf wissenschaftliche Publikationen und Patente vorzuweisen, davon drei mit Erstautorschaft. In der preisgekrönten Arbeit wird eine instrumentelle Innovation vorgestellt, welche die beiden orthogonalen Trennmethode zur Ionentrennung – Ionenchromatographie (IC) und Kapillarelektrophorese (CE) – zu einem zweidimensionalen Trennsystem zusammenführt. Wichtige Voraussetzungen für diese Entwicklung waren die instrumentelle Realisierung von sehr schnellen CE-Trennungen (als 2. Trenndimension) sowie die Annäherung der Volumengeschwindigkeit der ionenchromatographischen Trennung an CE-Verhältnisse, was durch den Einsatz der Kapillar-IC (als 1. Trenndimension) gelang. Zusätzlich konnte die Ankopplung des 2D-Trennsystems an ein Flugzeit-Massenspektrometer realisiert werden.

Auf dem anschließenden Preisträgervortrag stellte die Preisträgerin den entwickelten Modulator vor und demonstrierte anhand der Trennung eines Modellgemisches aus Nucleotiden und cyclischen Nucleotiden die Funktionstüchtigkeit und Leistungsfähigkeit dieser Kopplung.

Werner Engewald, Taucha

*Ausschreibung***Wolfgang-Paul-Studienpreise 2017**

■ Die Deutsche Gesellschaft für Massenspektrometrie (DGMS) vergibt jährlich den Wolfgang-Paul-Studienpreis für die besten Master- und Doktorarbeiten auf dem Gebiet der Massenspektrometrie. Dieser Preis wurde 1997 durch die Fa. Bruker-Daltonik GmbH, Leipzig, gestiftet. Er ist mit insgesamt 12.500 Euro ausgeschrieben. Der Preis kann geteilt werden, wobei Masterarbeiten jeweils mit 2.500 Euro und Doktorarbeiten jeweils mit 5.000 Euro ausgezeichnet werden.

Der Preis erinnert an Prof. Dr. Wolfgang Paul, der für seine grundlegenden Arbeiten zur Ionenfalle und zu ionenoptischen Geräten 1989 den Nobelpreis für Physik erhielt. Prof. Paul war langjähriger Präsident der Alexander von Humboldt-Stiftung. Der Preis wird jährlich anlässlich der Jahrestagung der DGMS durch eine Jury vergeben. Vorsitzender der Jury ist derzeit Dr. Michael Mormann, Universität Münster.

Die Preisverleihung erfolgt auf der 50. Jahrestagung der DGMS, die vom 05.–08. März 2017 in Kiel stattfinden wird, wobei die Preisträger für die Doktorarbeiten einen Kurzvortrag, für die Masterarbeiten ein Poster präsentieren sollen.

Bewerben können sich für 2017 alle Absolventen einer deutschen Universität oder Fachhochschule, die bei Bewerbung eine entsprechende Arbeit abgeschlossen haben und bei denen das Prüfungsverfahren beendet wurde. Deutsche Absolventen ausländischer Universitäten können sich ebenfalls bewerben.

Eingereichte Arbeiten können aus allen Fachrichtungen kommen, in denen die Massenspektrometrie als Methode von Bedeutung ist. Entscheidendes Kriterium für die Auswahl der Preisträger ist, dass die entsprechende Arbeit deutlich innovative Aspekte für den Bereich der Massenspektrometrie enthält.

Bewerbungen für die Wolfgang-Paul-Studienpreise 2017 können jederzeit eingereicht werden. Eine An-

leitung zur Bewerbung können Sie der Homepage der DGMS (www.dgms.eu) entnehmen. Bitte senden Sie die zu beurteilende Master- oder Doktorarbeit sowie alle weiteren Unterlagen in doppelter Ausfertigung ein. Außerdem sind Lebenslauf und Zusammenfassung der Arbeit sowie die Arbeit selbst zusätzlich in elektronischer Form erbeten.

Ihre Bewerbung richten Sie bis spätestens zum **1. November 2016** an den Vorsitzenden der Jury:

Dr. Michael Mormann
Universität Münster
Institut für Hygiene
Biomedizinische Massenspektrometrie,
Robert-Koch-Str. 41, 48149 Münster
E-Mail: mmormann@uni-muenster.de

*Ausschreibung***Clemens-Winkler-Medaille**

■ Der Vorstand der Fachgruppe Analytische Chemie schreibt für 2016 die Clemens-Winkler-Medaille zur Auszeichnung auf der ANAKON, die vom 03. bis 06. April 2017 in Tübingen stattfindet, aus. Mit der Auszeichnung verbunden sind eine Medaille und eine Urkunde.

Die Medaille ist zur Verleihung an solche Einzelpersonlichkeiten vorgesehen, die sich durch ihren jahrelangen persönlichen Einsatz besondere Verdienste um die wissenschaftliche Entwicklung und um die Förderung und Anerkennung der Analytischen Chemie gemacht haben. Vorschlagsberechtigt sind alle Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie. Es muss ein begründeter Vorschlag eingereicht werden, aus dem klar ersichtlich sein soll, worin die besonderen Leistungen und Verdienste des Vorgeschlagenen bestehen. Selbstbewerbungen sind nicht möglich. Richtlinien und bisherige Preisträger sind unter www.gdch.de/analytischechemie einsehbar.

Vorschläge werden bis **15. Oktober 2016** in elektronischer Form an den Vorsitzenden der Fachgruppe Analytische Chemie, Dr. Joachim Richert, BASF SE, joachim.richert@basf.com, erbeten.

*Ausschreibung***Mattauch-Herzog-Förderpreis 2017**

■ Die Deutsche Gesellschaft für Massenspektrometrie (DGMS) vergibt den Mattauch-Herzog Förderpreis, gestiftet von der Firma Thermo Fisher Scientific. Der Preis steht unter der Schirmherrschaft der DGMS und wird seit 1988 in der Regel jährlich an jüngere Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler für hervorragende Arbeiten auf dem Gebiet der Massenspektrometrie vergeben. Er ist einer der höchst angesehenen und höchst dotierten Auszeichnungen in den analytischen Wissenschaften.

Der Mattauch-Herzog Preis ist nach Josef Mattauch und Richard Herzog benannt, die Grundlagen der massenspektroskopischen Ionenoptik erarbeiteten und 1934 ein neuartiges Massenspektrometer vorgestellt haben, dessen Ionenoptik unter dem Namen Mattauch-Herzog-System weltweit bekannt wurde.

Der Mattauch-Herzog-Preis ist ein Wettbewerbspreis. Er wird vergeben für hervorragende wissenschaftliche Leistungen auf einem der beiden großen Anwendungsgebiete der modernen Massenspektrometrie, der organisch/biochemischen Analytik einerseits und der Element- und Isotopenanalytik andererseits. Im Rahmen der beiden großen Anwendungsgebiete sind der Thematik einer preiswürdigen Arbeit keine Grenzen gesetzt, solange sie entweder eine wichtige und neue Anwendung der Massenspektrometrie oder einen bedeutenden Fortschritt in der Methodik oder Instrumentierung darstellt.

Die Preissumme beträgt 12.500 Euro. Sie kann in Ausnahmefällen auf zwei Preisträger aufgeteilt werden. Über die Preisvergabe entscheidet eine unabhängige Jury. Die Preisverleihung erfolgt auf der 50. Jahrestagung der DGMS, die vom 5.–8. März 2017 in Kiel stattfinden wird.

Bewerben kann sich jeder Wissenschaftler, der seine Arbeiten in einem europäischen Land durchgeführt hat. Die Sprache für die Bewerbung und

Ausschreibung der GDCh-Preise und Auszeichnungen

Die Gesellschaft Deutscher Chemiker
vergibt im Jahre 2017 die folgenden
Preise:

Adolf-von-Baeyer-Denk Münze (Medaille in Gold)

Wird an Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen verliehen, die sich durch hervorragende Arbeiten auf dem Gebiet der organischen Chemie besondere Verdienste erworben haben. Der Preis ist mit € 7.500 dotiert.

Joseph-König-Gedenkmünze (Medaille in Bronze)

Wird an Persönlichkeiten verliehen, die sich besondere Verdienste um die wissenschaftliche Entwicklung und um die Förderung und Anerkennung der Lebensmittelchemie erworben haben. Der Preis ist mit € 7.500 dotiert.

Wilhelm-Klemm-Preis (Medaille in Gold)

Wird an Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen verliehen, die sich durch hervorragende Arbeiten auf dem Gebiet der anorganischen Chemie besondere Verdienste erworben haben. Der Preis ist mit € 7.500 dotiert.

Carl-Duisberg-Gedächtnispreis

Dieser Preis dient der Förderung des in den chemischen Wissenschaften tätigen akademischen Nachwuchses und ist mit insgesamt € 7.500 dotiert, wovon € 5.000 für den Preisträger oder die Preisträgerin und € 2.500 für dessen oder deren Arbeitsgruppe bestimmt sind. Er wird an Persönlichkeiten verliehen, die an einer deutschen Hochschule oder als Deutsche an einer ausländischen Hochschule tätig sind, noch keine C4/W3 oder vergleichbare Stelle bekleiden und das 40. Lebensjahr nicht überschritten haben.

Horst-Pracejus-Preis

Gewürdigt werden herausragende Arbeiten auf dem Gebiet der Enantioselektivität oder Chiralität. Der Preis ist mit € 7.500 dotiert.

Carl-Roth-Förderpreis

Dieser Preis wird von der Carl Roth GmbH & Co. KG finanziert und wendet sich an den wissenschaftlich-chemischen Nachwuchs. Der Studienabschluß (Diplom bzw. Master) darf am Stichtag 29. September 2016 nicht länger als 5 Jahre zurückliegen. Er wird für Ressourcen schonende Synthesewege oder innovative Anwendungen von Chemikalien vergeben. Der Preis ist mit € 5.000 dotiert. Darüber hinaus erhält der Arbeitskreis, aus dem die Preisträgerin oder der Preisträger stammt, einen Gutschein von € 3.000 für Produkte aus dem Carl Roth Katalog. Auch Eigenbewerbungen sind zulässig.

Heinz-Schmidkunz-Preis

Der Preis wird an Persönlichkeiten verliehen, die sich besondere Verdienste um die chemiedidaktische Forschung, um die Ausbildung von Chemielehrerinnen und -lehrern sowie um den Chemieunterricht an Schulen erworben haben. Der Preis ist mit € 7.500 dotiert.

Fresenius-Preis (Medaille in Gold)

Der Preis wird an Persönlichkeiten verliehen, die sich besondere Verdienste um die wissenschaftliche Entwicklung und um die Förderung der analytischen Chemie erworben haben. Der Preis ist mit € 7.500 dotiert.

Wöhler-Preis für Nachhaltige Chemie

Der Preis wird vergeben für wegweisende und herausragende Beiträge zur Entwicklung und Umsetzung einer Nachhaltigen Chemie. Preiswürdige Arbeiten tragen dazu bei, dass innovative Methoden aus allen Bereichen der Chemie zu verbesserten umweltverträglichen Prozessen führen. Der Preis ist mit € 7.500,- dotiert.

Preisvergabe

Der GDCh-Vorstand hat für jede Auszeichnung eine Kommission eingesetzt, die aus den eingereichten Vorschlägen einen Kandidaten bzw. eine Kandidatin auswählt und dem Vorstand der GDCh zur endgültigen Entscheidung vorlegt. Der Rechtsweg ist ausgeschlossen. Die Preise werden 2017 u.a. auf der Chemiedozententagung in Marburg und beim GDCh-Wissenschaftsforum Chemie in Berlin verliehen.

Schlagen Sie jemanden vor!

Reichen Sie eine knappe Begründung Ihres Vorschlages ein und geben darin auch den Link zur homepage der von Ihnen vorgeschlagenen Person an. Fügen Sie Ihrer Begründung Lebenslauf und Publikationsliste hinzu. Reichen Sie Ihre Unterlagen per E-Mail in einer pdf-Datei oder per Post bei der GDCh ein. Jede und Jeder ist vorschlagsberechtigt; Eigenbewerbungen werden – mit Ausnahme des Carl-Roth-Förderpreises – nicht berücksichtigt. Ausschreibungen zu den Auszeichnungen der bei der GDCh eingerichteten Stiftungen erfolgen gesondert.



Prof. Dr. Thisbe Lindhorst
GDCh-Präsidentin

Senden Sie Ihre Vorschläge bitte bis zum
29. September 2016 an:

Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V.
Preise und Auszeichnungen
Postfach 90 04 40
60444 Frankfurt am Main

Tel.: +49 (0)69 7917-323
Fax: +49 (0)69 7917-1323
E-Mail: b.koehler@gdch.de

für die eingereichten Arbeiten ist Deutsch oder Englisch. Die Bewerbung ist nicht an eine formale wissenschaftliche Qualifikation gebunden, sondern dient der Auszeichnung eines jüngeren Forschers. Deshalb sollten die Bewerber in der Regel im Bewerbungsjahr das vierzigste Lebensjahr nicht überschritten haben.

Weitere Einzelheiten über die Bewerbung und die Vergabe des Matthauch-Herzog-Förderpreises sowie die Namen der bisherigen Preisträgerinnen und Preisträger können Sie auf der Homepage der DGMS (www.dgms.eu) finden. Alle relevanten Unterlagen sollen schriftlich in doppelter Ausfertigung oder aber bevorzugt elektronisch eingesandt werden.

Ihre Bewerbung richten Sie bitte bis spätestens zum 1. November 2016 an den Vorsitzenden der Jury:

Prof. Dr. M. Linscheid
Department of Chemistry
Humboldt-Universität zu Berlin
Brook-Taylor-Str. 2
D-12489 Berlin-Adlershof
E-Mail: analytik@chemie.hu-berlin.de

Ausschreibung

Massenspektrometrie in den Biowissenschaften

Die DGMS schreibt einen Wissenschaftspreis für eine herausragende wissenschaftliche Leistung in der Massenspektrometrie im Bereich der Biowissenschaften aus. Der Preis wird durch die DGMS vergeben und zeichnet wissenschaftliche Arbeiten zu Methodenentwicklungen und Anwendungen der Massenspektrometrie in den Biowissenschaften aus. Der Preis ist mit 5.000 Euro dotiert. Der Preis wird zusammen mit einer Urkunde jeweils bei der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie überreicht. In Ausnahmefällen kann der Preis zu gleichen Teilen an zwei Personen vergeben werden. Die Vergabe des Preises erfolgt ausgehend von Nominierungsvorschlägen. Vorschlagsberechtigt ist jedes Mitglied der DGMS, wobei Selbstnominierungen ausgeschlossen sind. Die Auswahl erfolgt durch eine vom Vorstand der DGMS einberufene Jury.

Die nächste Preisverleihung erfolgt auf der 50. Jahrestagung der DGMS, die vom 5.–8. März 2017 in Kiel stattfinden wird.

Eine Nominierung zur aktuellen Runde der Preisvergabe ist zusammen mit einer Begründung der Preiswürdigkeit der wissenschaftlichen Leistung bis zum 1. November 2016 (Poststempel) einzureichen, entweder an den Vorsitzenden der DGMS oder an den Vorsitzenden der Jury ‚Massenspektrometrie in den Biowissenschaften‘:

Prof. Dr. Wolf-Dieter Lehmann
Biochemie-Zentrum der Universität Heidelberg
69120 Heidelberg
E-Mail: w.d.lehmann@alumni.uni-heidelberg.de

Ausschreibung

Agilent Mass Spec Research Summer 2017

Seit 2010 sponsort die Firma Agilent einen neuartigen Forschungspreis, der von der DGMS vergeben wird. Dieser Preis wendet sich an Promovierende, deren Arbeit auf dem Gebiet der Massenspektrometrie oder angrenzenden Bereichen liegt, in denen massenspektrometrische Daten einen zielführenden Beitrag liefern können. Der Gewinner/die Gewinnerin des Preises erhält die Möglichkeit, in einem Zeitraum von zwei Monaten im Applikations- und Demolabor der Fa. Agilent in Waldbronn Messungen zur massenspektrometrischen Forschungsarbeit an allen im Labor vorhandenen Geräten durchzuführen. Zudem übernimmt die Fa. Agilent die Hotelkosten sowie das Mittagessen über den Zeitraum des Forschungsaufenthalts, der zwischen Juli und September des Jahres liegen soll.

Zur Bewerbung reichen Sie bitte folgende Unterlagen ein:

- Ausgefülltes Formblatt von Homepage der DGMS (www.dgms.eu)
- Einseitiger Forschungsplan, mit einer Stellungnahme, welche Agilent Massenspektrometer zur Messung verwandt werden sollen
- Lebenslauf, Zeugniskopien

- Stellungnahme des/der Promotionsbetreuers(in)

Ihre Bewerbung richten Sie bitte bis zum 31. Januar 2017 an den Vorsitzenden der Jury, Prof. Dr. Mario Thevis. Alle Bewerbungen werden von einer Jury begutachtet. Der Gewinner/die Gewinnerin verpflichtet sich, auf der darauffolgenden DGMS Tagung über die erzielten Ergebnisse im Rahmen eines Vortrages zu berichten.

Univ.-Prof. Dr. Mario Thevis
Institut für Biochemie / Zentrum für Präventive Dopingforschung
Deutsche Sporthochschule Köln
Am Sportpark Müngersdorf 6
50933 Köln
E-Mail: thevis@dshs-koeln.de

Ausschreibung

“DAC-EuCheMS Award” und “Robert-Kellner-Lecture”

Die Division of Analytical Chemistry (DAC) hat erneut den „DAC-EuCheMS Award“, gesponsort vom Springer Verlag, für nachhaltige Beiträge in der Analytischen Chemie in Europa ausgeschrieben. Als Preisträger/in wird eine herausragende, europäische Persönlichkeit gesucht, die maßgebliche und nachhaltige Leistungen in der Analytischen Chemie in den Bereichen Forschung oder Lehre gezeigt hat. Der/die Preisträger/in wird eingeladen, einen Vortrag auf der EUROANALYSIS Conference 2017 in Stockholm zu halten.

Die „Robert-Kellner-Lecture“, ebenfalls vom Springer Verlag gesponsort, wurde in Erinnerung an Prof. Dr. Robert Kellner, TU Wien, ausgeschrieben in Erinnerung an seine Bemühungen und Errungenschaften zur Stärkung der Analytischen Chemie in Europa. Der Preisträger soll eine europäische Persönlichkeit sein, die in den letzten fünf Jahren einen substanziellen Beitrag für den Fortschritt der Analytischen Chemie in Forschung oder Lehre geleistet hat. Die Robert-Kellner-Lecture ist als prominenter Vortrag auf der EUROANALYSIS Conference 2017 in Stockholm vorgesehen.

Kandidaten für den DAC-EuCheMS Award oder die Robert-Kellner-Lecture

können von einer der europäischen Chemischen Gesellschaften, anderen wissenschaftlichen Einrichtungen sowie Wissenschaftlern eingereicht werden. Selbstnominierungen sind ausgeschlossen. Die Nominierung muss ein Schreiben mit den zu würdigenden Leistungen des Kandidaten enthalten sowie dessen Lebenslauf und die Adresse. Bitte senden Sie die Bewertung bis spätestens 31.10.2016 an den Secretary of DAC-EuCheMS, wolfgang.buchberger@jku.at.

Details (inklusive der Liste früherer Preisträger) finden Sie im Bereich „DAC Procedures and Practices“ auf der DAC-EuCheMS-Website (<http://www.euchems.eu/divisions/analytical-chemistry/>).

Ausschreibung

Ernst-Bayer-Preis 2016

■ Der Arbeitskreis Separation Science der Fachgruppe Analytische Chemie schreibt erneut den Ernst-Bayer-Preis für eine herausragende Publikation auf dem Gebiet der analytischen Trenntechniken für junge Nachwuchswissenschaftler aus. Der mit 1000 Euro dotierte Preis wird auf dem 27. Doktorandenseminar des Arbeitskreises, das vom 8. bis 10. Januar 2017 in Hohenroda stattfindet, vergeben. Der Preisträger stellt seine ausgezeichnete Arbeit im Rahmen des Doktorandenseminars vor.

Die Bewerber sind Erstautor einer 2015/2016 erschienenen beziehungsweise akzeptierten Publikation in einer internationalen wissenschaftlichen Zeitschrift mit Gutachtersystem und sollten ein Alter von 30 Jahren nicht überschritten haben. Entscheidendes Auswahlkriterium für die Vergabe des Preises ist die wissenschaftliche Qualität der eingereichten Arbeit im Bereich der analytischen Trenntechniken. Sowohl Eigenbewerbungen als auch Vorschläge für diese Auszeichnung sind möglich. Über die Preisvergabe entscheidet ein vom Vorstand des AK Separation Science benanntes Gutachtergremium.

Die Vorschläge bzw. Bewerbungen müssen die für die Auszeichnung vorgeschlagene Publikation des Kan-

didaten, den Lebenslauf sowie eine Empfehlung oder Begründung enthalten. Diese Unterlagen sind als Datei im pdf-Format mit maximal 8 MB bis zum 31. Oktober 2016 an den Vorsitzenden des Arbeitskreises Separation Science zu senden:

Dr. Martin Vogel
Universität Münster
E-Mail:
martin.vogel@uni-muenster.de

Ausschreibung

Bunsen-Kirchhoff-Preis 2017

■ Der Deutsche Arbeitskreis für Analytische Spektroskopie (DAAS) der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie schreibt für das Jahr 2017 wieder den Bunsen-Kirchhoff-Preis für analytische Spektroskopie aus, um herausragende Leistungen vor allem jüngerer Wissenschaftler aus Universitäten, Forschungsinstituten oder der Industrie in der analytischen Spektroskopie auszuzeichnen. Besonders erwünscht ist ein Oeuvre in neuen Gebieten wie Spektroskopie im Nanobereich, Spektroskopie an Biomolekülen usw. Der von der Firma Perkin Elmer mit 2500,- Euro ausgestattete Preis soll anlässlich der ANAKON, die vom 3. bis 6. April 2017 in Tübingen stattfindet, übergeben werden. Der DAAS-Vorstand bittet um Vorschläge für geeignete Kandidaten.

Eine Nominierung soll eine Begründung des Vorschlages, herausragende deutsch- oder englischsprachige Publikationen oder andere relevante Unterlagen (z.B. Patentschriften), einen kurzen Lebenslauf mit Publikationsliste und die Kontaktdaten (Postadresse/E-Mail/Telefon/Fax) des Nominierten enthalten.

Nominieren können Mitglieder des DAAS, wobei jeder Wissenschaftler, der die Bedingungen erfüllt, nominiert werden kann. Eine Eigenbewerbung ist ausgeschlossen. Die Entscheidung zur Verleihung trifft der amtierende Vorstand des DAAS.

Ihren Vorschlag senden Sie bitte in elektronischer Form bis zum 15. De-

zember 2016 an die Vorsitzende der Jury für den Bunsen-Kirchhoff-Preis:

Prof. Dr. Kerstin Leopold
Universität Ulm
Institut für Analytische und Bioanalytische Chemie
E-Mail: kerstin.leopold@uni-ulm.de.

Ausschreibung

DAAS-Preis 2016

■ Der Deutsche Arbeitskreis für Analytische Spektroskopie der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie schreibt den von der Merck KGaA gestifteten und mit 1.500 Euro dotierten DAAS-Preis 2016 aus.

Dieser Preis ist nach der Vereinigung der Arbeitskreise DASp und A.M.S.El. aus dem ehemaligen A.M.S.El.-Preis hervorgegangen und dient der Auszeichnung hervorragender wissenschaftlicher Arbeiten auf dem Gebiet der Mikro- und Spurenanalyse der Elemente und Elementspezies.

Der DAAS-Preis wird zur Anerkennung und Förderung herausragender junger Wissenschaftler verliehen. Die Mitglieder des DAAS werden gebeten, geeignete Kandidaten bis 15. Oktober 2016 vorzuschlagen. Die Vorschläge sind möglichst in elektronischer Form unter Angabe des Namens, der Anschrift und des Alters des Kandidaten zusammen mit der auszuzeichnenden Arbeit als pdf-Datei in deutscher oder englischer Sprache einzureichen. Bei diesen Arbeiten kann es sich um Doktorarbeiten, in Ausnahmefällen aber auch um besonders hochkarätige Publikationen handeln. Weiterhin ist in den Vorschlägen der fachlichen Lebenslauf beizufügen.

Die Vorschläge sind an das DAAS-Vorstandsmitglied Dr. Wolfgang Buscher, Universität Münster, zu senden:

Dr. Wolfgang Buscher
Universität Münster
Institut für Anorganische und Analytische Chemie, AK Analytische Chemie/AG Angewandte Atomspektroskopie
Corrensstraße 28–30
48149 Münster
E-Mail: wolfgang.buscher@uni-muenster.de

Ausschreibung

**Gerhard-Hesse-Preis
2016**

■ In Würdigung des Lebenswerkes von Professor Gerhard Hesse, dem Gründungsvorsitzenden des damaligen Arbeitskreises Chromatographie, schreibt der Arbeitskreis Separation Science der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie den Gerhard-Hesse-Preis für das Jahr 2016 aus. Der Preis ist mit 3000 Euro dotiert und wird im Rahmen der ANAKON 2017, die vom 3. bis 6. April 2017 in Tübingen stattfindet, verliehen.

Der Gerhard-Hesse-Preis wird auf Vorschlag an Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler verliehen, die herausragende Leistungen auf dem Gebiet der analytischen Trenntechniken erbracht und sich besondere Verdienste um diese Wissenschaftsdisziplin erworben haben. Vorschlagsberechtigt sind alle Mitglieder des Arbeitskreises Separation Science. Die vorgeschlagenen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler sollen das 50. Lebensjahr nicht überschritten haben. Eigenbewerbungen sind nicht möglich. Über die Vergabe entscheidet der erweiterte Vorstand des Arbeitskreises.

Bitte richten Sie Ihre Vorschläge mit aussagekräftigen Unterlagen in einem pdf-Dokument (maximale Dateigröße 8 MB) bis zum **15. Dezember 2016** an den Vorsitzende des Arbeitskreises Separation Science:

Dr. Martin Vogel
Westfälische Wilhelms-Universität
Münster
Institut für Anorganische und Analytische Chemie
Corrensstr. 30
48149 Münster
E-Mail:
martin.vogel@uni-muenster.de

Personalia**Professor Dr. Ernst Egert verstorben**

■ Mit dem Tod von Professor Dr. Ernst Egert verliert die Kristallographie in Deutschland einen geschätzten Kollegen und engagierten Lehrer. Ernst Egert wurde am 29. Oktober 1949 in Wixhausen bei Darmstadt geboren. Sein Studium der Chemie absolvierte er von 1968 bis 1975 an der TH Darmstadt. Mit der anschließenden Dissertation zum Thema „Der Einfluss von Substituenten in 5-Stellung auf die Struktur modifizierter Uridine und deren Funktion im Anticodon von Transfer-Ribonukleinsäuren“ unter der Anleitung von Hans Jörg Lindner wurde er 1979 an der TH Darmstadt auch promoviert. Erste Kontakte zur Kristallographie entstanden bereits in dieser Zeit. Von Darmstadt aus wechselte er für einen Post-Doc Aufenthalt zu Olga Kennard nach Cambridge. Nach zwei Jahren in England kehrte er zurück nach Deutschland und ging an das Institut für Anorganische Chemie der Georg-August Universität Göttingen. Im Umfeld von George Sheldrick widmete er sich dem Problem der Strukturaufklärung organischer Moleküle aus Einkristallröntgenbeugungsdaten. Zum damaligen Zeitpunkt war die Lösung von Leichtatomstrukturen insbesondere in nicht-zentrosymmetrischen Raumgruppen und außerdem in den Fällen in denen Z' , also die Anzahl der symmetrieunabhängigen Moleküle, größer eins ist keinesfalls trivial. Ernst Egert konzentrierte sich erfolgreich auf die Analyse der Pattersonfunktion mittels Vektorsuchmethoden, um diese Problemstrukturen zu bearbeiten. Mit dem von ihm geschriebenen Programm PATSEE konnten zahlreiche Kristallstrukturen aufgeklärt werden, die mit den direkten Methoden der damaligen Zeit nicht zu lösen waren. Für seine Habilitationsschrift, die den Titel „PATSEE – Eine „chemische“ Methode zur Aufklärung schwieriger Kristallstrukturen“ trägt, erhielt er 1988 die *venia legendi* im Fach Strukturchemie. Es folgte 1989 das Dozentenstipendium des Fonds der Chemischen Indus-



Professor Ernst Egert

trie und kurz darauf ein Ruf auf eine Professur für organische Chemie an die Johann-Wolfgang-von-Goethe Universität Frankfurt.

In der darauffolgenden Zeit kombinierte Ernst Egert sein Interesse an der Struktur organischer Moleküle und seine Erfahrung auf dem Gebiet der Programmierung wissenschaftlicher Software bei der Entwicklung des Molecular Modelling Programms MOMO. Dieses Kraftfeldprogramm trug insbesondere Wasserstoffbrücken und anderen elektrostatischen Einflüssen Rechnung und erwies sich als gute Ergänzung bei der Ermittlung von Suchfragmenten für die Patterson-Funktion.

Neben seiner erfolgreichen Forschung und umfangreichen Lehre engagierte sich Ernst Egert in der akademischen Selbstverwaltung und in außeruniversitären Gremien, wann immer er darum gebeten wurde. Im Fachbereich Chemie war er für viele Jahre Vorsitzender des Diplomprüfungsausschusses und koordinierte die Akkreditierung des Studienganges Chemie in Frankfurt. Diese zusätzlichen Aufgaben nahm er mit großem Verantwortungsbewusstsein und Engagement wahr. In der Fachgruppe Analytische Chemie der GDCh übernahm Professor Egert 2001 den Vorsitz des Arbeitskreises ChemKrist, den er bis 2008 innehatte. In dieser Zeit wurde die Doktorandensommerschule „Grundlagen der

Einkristallstrukturanalyse“ im Kloster Hardehausen zu einer deutschlandweit nachgefragten Institution. Er bemühte sich darüber hinaus um enge Kontakte zur Deutschen Gesellschaft für Kristallographie und dem dort beheimateten Arbeitskreis „Molekülverbindungen“ und initiierte gemeinsame Veranstaltungen. Den Arbeitskreis ChemKrist leitete er stets kollegial und vertrat die Interessen dieses kleineren Arbeitskreises mit viel Fingerspitzengefühl innerhalb der Fachgruppe. Soweit erforderlich konnte er bei aller sonst geübten Diplomatie auch deutliche Worte finden, wenn er davon überzeugt war, dass sich falsche Entwicklungen ergeben. Es entsprach seinem Selbstverständnis des Amtes und der Aufgabe, dass er nach seiner Amtszeit dem nachfolgenden, unterzeichnenden Vorstand mit Rat und Tat zur Seite stand, ohne die Öffentlichkeit zu suchen.

Im Frühjahr 2013 erlitt er einen Schlaganfall, der ihn für längere Zeit vom aktiven Forschungsalltag fernhielt, dessen Folgen er aber weitgehend überwinden konnte. Am Ende des Wintersemesters 2014/15 wurde Ernst Egert von seinen Lehrverpflichtungen entbunden. Obwohl ihn kurz darauf ein weiterer gesundheitlicher Schicksalsschlag traf, blieb er dem Fachbereich Chemie der Universität Frankfurt als Seniorprofessor aktiv verbunden und betreute bis unmittelbar vor seinem Tod weiterhin Doktoranden. Den Kampf gegen die Erkrankung verlor Ernst Egert in seinem 67. Lebensjahr am 10. Juni 2016. Die chemischen Kristallographen werden Ernst Egert in dauerhafter Erinnerung behalten.


*Ulli Englert
Christian Lehmann*

Geburtstage

■ Wir gratulieren unseren Mitgliedern, die im vierten Quartal 2016 einen runden Geburtstag feiern und wünschen alles Gute:

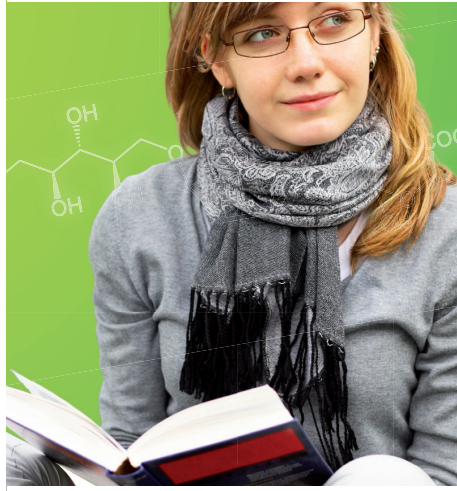
**DAS
KARRIERE
PORTAL**

**für Chemie
und Life Sciences**



**Unser Netzwerk unterstützt
Sie bei der Rekrutierung**


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



Von Chemikern für Chemiker!

www.gdch.de/karriere

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



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

GDCh-Fortbildungen

Nähere Informationen stehen Ihnen unter www.gdch.de/fortbildung zur Verfügung. Gerne können Sie sich direkt an das GDCh-Fortbildungsteam (fb@gdch.de, Tel.: 069 7917–364) wenden.

13. – 14. September 2016, Rheinbach (bei Bonn)

Einsatz der Pyrolyse-GC/MS und 2D-Pyrolyse-GC/MS zur Charakterisierung von Kunststoffen, Praxisorientierter Kurs für Einsteiger (Kurs 353/16) *Leitung: Prof. Dr. Margit Geißler*

21. – 23. September 2016, Offenburg in der Ortenau

Moderne Dünnschichtchromatographie für Anwender, IX. Offenburger DC-Kurs (Kurs 374/16) *Leitung: Prof. Dr. Bernd Spangenberg*

26. – 27. September 2016, Frankfurt am Main

Chromatographie und Spektroskopie von Polymeren im Überblick (Kurs 507/16) *Leitung: Prof. Dr. Reinhard Meusinger*

28. – 29. September 2016, Frankfurt am Main

SOP Intensivtraining und QS Dokumentation, Für den Durchblick im QM-Dschungel, Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP Plus (GDCh) (Kurs 529/16) *Leitung: Dipl.-LMChem. Stephan Walch*

29. – 30. September 2016, Frankfurt am Main

Qualitätsmanagement im analytischen Labor, Richtlinienkonformität und Kompetenzerhalt: technische Grundlagen qualitätsgerechter Laborarbeit (gemeinsam veranstaltet mit EUROLAB/Deutschland) (Kurs 517/16) *Leitung: Dr. Martina Hedrich*

4. – 7. Oktober 2016, Frankfurt am Main

NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung, Fortgeschrittenenkurs (Kurs 506/16) *Leitung: Prof. Dr. Reinhard Meusinger*

4. – 6. Oktober 2016, Essen

Schwingungsspektroskopie für die chemische Qualitäts- und Prozesskontrolle, Theorie, Instrumentation und Applikationen der Raman-, Mittel-Infrarot- und Nah-Infrarot-Spektroskopie (Kurs 503/16) *Leitung: Prof. Dr. Sebastian Schlücker*

26. – 27. Oktober 2016, Frankfurt am Main

Validierung computergestützter Analysensysteme (CSV), Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP Plus (GDCh) (Kurs 530/16) *Leitung: Carsten Buschmann*

9. November 2016, Frankfurt am Main

Gute Vertriebspraxis – Good Distribution Practice (GDP), Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP Plus (GDCh) (Kurs 527/16) *Leitung: Dr.-Ing. Barbara Pohl*

10. – 11. November 2016, Leipzig

Theorie und Praxis der UHPLC (Kurs 355/16) *Leitung: Prof. Dr. Thomas Welsch*

16. November 2016, Gießen

Hyphenations in der HPTLC, HPTLC und Kopplungen (in Zusammenarbeit mit der JLU Gießen) (Kurs 335/16) *Leitung: Prof. Dr. Gertrud Morlock*

17. November 2016, Gießen

Wirkungsbezogene Analytik mit HPTLC-Bioassay-HRMS, (in Zusammenarbeit mit der JLU Gießen) (Kurs 338/16) *Leitung: Prof. Dr. Gertrud Morlock*

Tagungen

2016

11.-14.09.2016, Dresden/D: **20th European Symposium on Polymer Spectroscopy (ESOPS20)**, Kontakt: www.ipfdd.de/esops20

12.-15.09.2016, Siegen/D: **25. ICP-MS Anwendertreffen und 12. Symposium Massenspektrometrische Verfahren der Elementspurenanalyse**

19.-23.09.2016, Hardehausen/D: **Intensivkurs zu den Grundlagen der Einkristallstrukturanalyse**

26.-28.09.2016, Goslar/D: **Electrochemistry 2016**, Kontakt: <http://www.gdch.de/electrochemistry2016>

27.9.-01.10.2016, Göttingen/D: **Jahrestagung Archäometrie**, Kontakt: <http://archaeometrie-tagung.gzg.geo.uni-goettingen.de/>

04.-05.10.2016, Regensburg/D: **CE-Forum 2016**, Kontakt: <http://www.ur.de/ce-forum>

2017

19.-24.02.2017, St. Anton/AT: **2017 European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry**, Kontakt: www.ewcps2017.at

03.-06.04.2017, Tübingen/D: **ANAKON 2017**, Kontakt: www.gdch.de

Fortbildung



**Unverzichtbare
Bausteine
Ihrer Karriere**



Ihre Vorteile bei GDCh-Fortbildungskursen sind

- kompetente Referenten aus Industrie, Hochschule oder Forschungsinstituten
- Einblicke in neueste Forschungsergebnisse sowie in moderne Methoden und Verfahren
- Foren für Informations- und Erfahrungsaustausch auf hohem fachlichen Niveau
- limitierte Teilnehmerzahlen als Garant für effektive Schulungen
- GDCh-Zertifikat nach erfolgreichem Abschluss

Nutzen Sie unser Know-how und gestalten Sie aktiv Ihre berufliche Zukunft!

Wir stehen Ihnen ebenfalls als erfahrener Anbieter von Inhouse-Kursen zur Seite.

Sprechen Sie uns an!

Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V. • Fortbildung
Postfach 90 04 40 • 60444 Frankfurt am Main
Telefon: +49 69 7917-364 • E-mail: fb@gdch.de

www.gdch.de/fortbildung