



**Gesellschaft
Deutscher Chemiker**

**Fachgruppe
Analytische Chemie**

Metrologie in der PTB

Sessions auf der ANAKON 2019

DGMS-Jahrestagung

**Mitteilungsblatt
2/2019**





GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER



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

Vorsitzender
Prof. Dr. Ulrich W. Scherer
Mannheim
u.scherer@hs-mannheim.de

**Arbeitskreis
Archäometrie**

Vorsitzender
Dr. Stefan Röhrs
Berlin
s.roehrs@smb.spk-berlin.de

**Arbeitskreis
Chemische Kristallographie**

Vorsitzende
Prof. Dr. Iris Oppel
Aachen
iris.oppel@ac.rwth-aachen.de

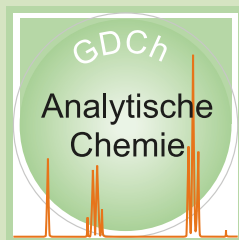
**Arbeitskreis
Chemometrik und
Qualitätssicherung**

Vorsitzender
Dr. Wolf von Tümpling
Magdeburg
wolf.vontuempling@ufz.de

**Arbeitskreis
Chemo- und Biosensoren**

Vorsitzender
Dr. Michael Steinwand
Owingen
msteinwand@innovendia.de

**Fachgruppe
Analytische Chemie**



Vorstand

Vorsitzender
Dr. Joachim R. Richert
joachim.richert@basf.com

Stellvertretende Vorsitzende
Prof. Dr. Carolin Huhn

Vertreter für die Hochschulen
Prof. Dr. Detlev Belder
Prof. Dr. Uwe Karst

Vertreter für die Industrie
Dr. Ulrich Engel
Dr. Heike Gleisner

Vertreter für die Junganalytiker
Dr. Mikheil Gogiashvili
Dr. Maria Viehoff

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

Vorsitzender
Dr. Martin Wende
Ludwigshafen
martin.wende@basf.com

**Arbeitskreis
Elektrochemische
Analysenmethoden (ELACH)**

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

**Arbeitskreis
Prozessanalytik**

Vorsitzender
Prof. Dr. Christoph Herwig
Wien
ak-prozessanalytik@gdch.de

**Arbeitskreis
Separation Science**

Vorsitzender
Dr. Martin Vogel
Münster
martin.vogel@uni-muenster.de

Industrieforum Analytik

Vorsitzender
Dr. Michael Arlt
Michael.Arlt@merckgroup.com

Mitglieder

Inhalt 2/2019

Editorial	4
Analytik in Deutschland	
Metrologie in der Chemie: die PTB	5
Chemie Aktuell	
Schnüffeln mit Licht	8
Kohlenstoffdioxid als Geothermometer	9
An der Grenze der Nachweisbarkeit	10
Aufbaustudium Analytik & Spektroskopie	11
Medien	
ABC in Kürze	12
Rezensionen	13
Erstes maschinengeneriertes Chemie-Buch publiziert	14
ANAKON 2019 Session	
Analytische Trenntechniken I & II	15
Chemo- und Biosensorik	16
Chemometrie und Datenauswertung/ Prozessanalytik	17
Elektroanalytik	18
Materialanalytik I	19
Nanoanalytik II	19
Umweltanalytik	20
Tagungen	
52. DGMS-Jahrestagung	21
EWCPs in Frankreich	24
SAAGAS 27	25
Preise & Stipendien	
Preisverleihungen auf der ANAKON	26
Preisverleihungen a.d. Chemiedozententagung	28
Ausschreibungen	29
Personalien	
Geburtstage	29
Tagungskalender	30
GDCh-Fortbildungen	31
Impressum	28



Editorial

Liebe Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie,

viele unter uns sind der Schlagworte Digitalisierung und Industrie 4.0 schon müde, weil in unserem täglichen Leben einfach noch nicht viel Dingliches angekommen ist. Dennoch ist die digitale Transformation unserer Gesellschaft real. Es geht einfach langsamer, als so mancher es sich erträumt. Viel hängt an fehlender Infrastruktur und den komplexen Prozessen, die erst einmal miteinander in Beziehung gebracht werden müssen. Begreiflicherweise kann man keine Internet-of-Things-Lösungen in einem Betrieb realisieren oder Mitarbeitern eines Instituts mobiles Arbeiten ermöglichen, wenn keine schnelle Internetverbindung zur Verfügung steht. Hier müssen Politik und Gesellschaft endlich in die notwendige Infrastruktur investieren – gemeinsam und nutzbringend für alle.

Vergleichbares spielt sich gerade in unserer Laborwelt ab. Labore stehen als Zentren unserer Innovationskraft im Fokus des digitalen Wandels. Entwicklungszeiten neuer Produkte werden verkürzt, indem wir durch modellgestützte Simulation und statistische Versuchsplanung weniger, aber zielführendere Experimente durchführen. Echtzeitdaten aus Online-Analytik und In-Prozess-Kontrolle in der chemischen Produktion und Lieferkette erlauben bereits eine ressourcenschonendere Steuerung von Stoffströmen, deren Qualität und Verfügbarkeit. Mit Big-Data- oder besser Big-Analysis-Ansätzen entwickeln wir unsere Verfahren und Prozesse kontinuierlich weiter.

Analytik besetzt eine zentrale Rolle in dieser Entwicklung. Sie macht schlussendlich aus Daten Information und aus Information Wissen.

Für uns Analytiker bedeutet Labor 4.0, mit intelligenten, vernetzten Labor- und Analysengeräten Innovationszyklen zu beschleunigen. Leider stoßen wir allzu oft an Grenzen,



Joachim Richert

wenn proprietäre Schnittstellen und Datenformate der Analysengeräte deren Steuerung oder den effizienten Datenaustausch erschweren. Auch fehlen offene Kommunikationsprotokolle, die Analysen- und Laborgeräte untereinander oder mit Robotersystemen intelligent zusammenarbeiten lassen.

Ohne eine rigorose Standardisierung der Dateninfrastruktur ist die digitale Transformation unserer Labore nicht möglich. Am Rande der Tagung „Lab.Vision 2019“ (www.spectarislavision.net) traf sich Anfang Mai eine Gruppe von Herstellern von Analysen-, Bio- und Labortechnik, die es sich zum Ziel gesetzt hat, zusammen mit Nutzern an neuen, offenen Daten- und Kommunikationsformaten für Laborgeräte zu arbeiten. Für diese richtungsweisende Initiative bin ich sehr dankbar und möchte an die gesamte Analytik-Community appellieren, sich in die Diskussion einzubringen und diesen Standard aktiv mitzugestalten. Vielleicht können wir alle von der Prozesstechnik-Community etwas lernen, die seit fast sieben Jahrzehnten im Rahmen der NAMUR die Standardisierung der Automationstechnik in ihrem Bereich vorantreibt – gemeinsam und nutzbringend für alle.

Was tut sich sonst noch in den nächsten Wochen in der Fachgruppe?

Im Oktober werden wir unseren Fachgruppenvorstand neu wählen. Detlev Belder, Ulrich Engel und ich stehen nach zwei Amtsperioden nicht mehr zur Wiederwahl. Ich freue mich sehr, dass wir auch diesmal wieder eine „richtige Wahl“ haben, das heißt, mit deutlich mehr Kandidaten und Kandidatinnen als Sitze im Vorstand, was nicht nur die Wahl spannend macht, sondern auch wichtige Impulse bei den Themen und Zielen der Vorstandsarbeit gewährleistet.

Wie im letzten Mitteilungsblatt angekündigt, wird das WiFo vom 15. bis 18. September in Aachen ein Highlight für die Fachgruppe. Im Rahmen der Eröffnungsveranstaltung am Sonntag, den 15.09. wird die GDCh zusammen mit der FG Analytische Chemie den Fresenius-Preis ausnahmsweise an zwei statt nur einen hochkarätigen Wissenschaftler verleihen. Am 16.09. werden wir in Zusammenarbeit mit den Fachgruppen Umweltchemie & Ökotoxikologie, Makromolekulare Chemie, Nachhaltige Chemie sowie der Wasserchemischen Gesellschaft ein internationales Symposium zu „Plastik in der Umwelt – Optionen für die Chemie“ gestalten und am 17.09. eine mit vielen Preisträgern der Fachgruppe hochkarätig besetzte Session zu „Elemente der Analytik“ ausrichten. Es wird also superspannend!

Ich freue mich darauf, Sie in Aachen zu sehen.

Herzliche Grüße,
Ihr Joachim Richert

Vorsitzender der Fachgruppe
Analytische Chemie

Vom genauen Messen: Metrologie in der Chemie

■ Die Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB) ist das deutsche Metrologieinstitut, als gesetzliche Hüterin der Einheiten die oberste Instanz für genaues Messen in Deutschland (Mess- und Eichgesetz). Die PTB ist eine Ressortforschungseinrichtung im Geschäftsbereich des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie. Gegründet 1887 als Physikalisch-Technische Reichsanstalt ist sie das älteste und nach dem National Institute of Standards and Technology (NIST) in den USA das größte Metrologieinstitut der Welt. Zu den gesetzlichen Aufgaben der PTB gehört unter anderem die Darstellung, Bewahrung und Weitergabe der Einheiten, was auch die Kooperation mit der Deutschen Akkreditierungsstelle (DAKKS) beinhaltet, zum Beispiel bei der Begutachtung von Kalibrierlaboratorien.

Aus historischen Gründen wird die PTB eher mit physikalischen Größen wie Zeit, Länge und Masse in Verbindung gebracht. Hier hält sie sogenannte Primärnormale für die damit verbundenen Einheiten bereit, zum

Beispiel Atomuhren, die die exakte Zeit bestimmen; von hier wird unter anderem die Umstellung zwischen Sommer- und Winterzeit gesendet. Doch auch in der Chemie ist genaues Messen essenziell und bestimmt unseren Alltag in vielen Bereichen. Wichtige Themenfelder sind der Umweltschutz, die Klimaforschung, die Nahrungsmittelanalytik und die Medizin: Kommt der Biowein wirklich aus Kalifornien? Woher stammt das CO₂ in unserer Atmosphäre? Und: Sind die Ergebnisse meiner Blutanalyse wirklich richtig?

Um die Rückführbarkeit auf das Internationale Einheitensystem (SI) von Messungen in der Chemie kümmert sich in der PTB die Abteilung „Chemische Physik und Explosionsschutz“. Zusammen in einem Netzwerk mit anderen, designierten Institutionen wie der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), dem Umweltbundesamt (UBA), dem Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit (BVL) und weiteren Partnern auf nationaler und internationaler

Ebene entwickelt sie Messmethoden für diese Anwendungen. Ziel sind international vergleichbare Messergebnisse mit möglichst geringer Unsicherheit und oft auch niedrigen Nachweisgrenzen. Ganz besonders weit trieben das PTB-Forscher für die exakte Bestimmung der Avogadro-Konstanten, die zur Neudefinition der SI-Einheiten, besonders von Mol und Kilogramm benötigt wird (siehe unten).

Metrologie in der Chemie betreibt die PTB hauptsächlich in vier Fachbereichen. Schwerpunkte in der „Allgemeinen und Anorganischen Chemie“ sind die anorganische Analytik und Elektrochemie. Dort werden Referenzmethoden für die Umweltanalytik wie Schwermetalle in Wasser und für die Reinheit von Pharmaprodukten bereitgehalten, ebenso für die Klimaforschung, etwa Salinitäts- und Isotopenverhältnismessungen. Daneben gibt es nationale Normale für elektrolytische Leitfähigkeitssensoren, zum Beispiel für die Untersuchung von Reinstwasser für die Pharmaindustrie sowie einen Referenzmessplatz für den Gesundheitszustand von Li-Ionenbatterien.

Der Fachbereich „Biochemie“ beschäftigt sich vorwiegend mit analytischen Fragestellungen rund um klinische Chemie in enger Abstimmung mit der Bundesärztekammer und den Laboratorien der Referenzinstitutionen der Bundesärztekammer bei der Deutschen Gesellschaft für klinische Chemie und Laboratoriumsmedizin (DGKL) und Instand.

Der Bereich „Chemische Analytik der Gasphase“ kümmert sich um metrologische Referenzpunkte für die Atmosphärenanalytik, etwa für die Klimaforschung, aber auch für die Abgasanalytik.

In der „Physikalischen Chemie“ geht es unter anderem um die Eigenschaften von regenerativen und effizienten Brennstoffen.



Rückführungskette für Messungen in Routinelaboratorien auf Reinstoffe und damit auf das Internationale Einheitensystem (SI). Der rote Strich trennt Verantwortungsbereich der Metrologieinstitute von dem der Laboratorien. (Abbildungen: PTB)

Reinheitsuntersuchungen und Avogadro-Konstante

■ Jeder analytische Chemiker, der jemals Elementkonzentrationen bestimmen musste, kennt sie: die Elementkalibrierlösungen. Sie finden sich in nahezu jedem analytischen Labor und sollen sicherstellen, dass die Ergebnisse zuverlässig und vergleichbar sind. Hier sind Referenzlösungen mit höchster Genauigkeit gefragt. Die PTB hält deshalb gemeinsam mit der BAM in Berlin ein Rückführungssystem für die Elementanalytik bereit.¹⁾ Aus den Reinstoffen – Metalle bzw. Salze für die Alkali- und Erdalkali-Elemente – stellen BAM und PTB primäre Elementlösungen höchster Genauigkeit her. Sie stellen das nationale Normal für Elementlösungen dar und ermöglichen somit den Anschluss an das SI. Mit diesen primären Elementlösungen schließt die PTB über ein primäres Messverfahren und ein Präzisionsmessverfahren basierend auf optischer Emissionsspektrometrie (ICP-OES), das einen größeren Probendurchsatz erlaubt, Transferlösungen für die Weitergabe an.

Reinheitsuntersuchungen sind aber nicht nur nötig, um Elementkalibrierlösungen herzustellen, sondern auch, um viel fundamentalere Fragen zu beantworten. Am 16. November 2018 beschlossen die Mitgliedsstaaten der Meterkonvention die Neudefinition des SI. Diese sind nun frei von Artefakten wie dem Kilogramm-Prototyp und basieren auf Naturkonstanten. Im Fall der Einheit Kilogramm ist dies die Planck-Konstante, im Fall des Mols die Avogadro-Konstante. Da diese beiden Konstanten in einem direkten mathematischen Zusammenhang stehen, entstand die Idee, diese mit einer höchst genauen, kombinierten Messung aus dem mikroskopischen Kristallgitterparameter und der makroskopischen Dimension fast perfekter Siliciumeinkristalle in Form nahezu perfekter Kugeln zu bestimmen. Aus der genauen Kenntnis des Volumens der Kugel und der Kristallgitterparameter lässt sich die Zahl der Atome in der Kugel berechnen. Voraussetzung dafür ist aber die höchst genaue Kenntnis



Höchstpräzise Si-Einkristallkugel zur Neubestimmung der Avogadro-Konstante

nis der Massenanteile der beteiligten Si-Isotope in der Siliciumkugel, um die molare Masse des verwendeten Siliciums präzise zu bestimmen. Um die erforderliche, relative Genauigkeit von $< 10^{-8}$ zu erreichen, wurden die einkristallinen Kugeln aus hochangereichertem ^{28}Si (99,99 %) hergestellt und die relativen Anteile an ^{28}Si , ^{29}Si und ^{30}Si gemessen. Die jetzt sehr kleinen Anteile der Isotope ^{29}Si und ^{30}Si mit der erforderlichen Genauigkeit zu bestimmen, erwies sich als messtechnisch sehr schwierige Hürde, die sich nur mit einem Trick überwinden ließ: Die Isotope ^{29}Si und ^{30}Si wurden als „virtuelles Element“ in einer Matrix aus ^{28}Si betrachtet. Durch Vergleichsmessungen mit genau bekannten, mit unterschiedlichen Si-Isotopen angereicherten Referenzproben und den darin gemessenen Isotopenverhältnissen von ^{29}Si und ^{30}Si ließen sich die Stoffmengenanteile aller drei Si-Isotope bestimmen, und damit auch die molare Masse des Siliciums mit der erforderlichen Genauigkeit.²⁾

Warum Rückführung in der Labordiagnostik wichtig ist

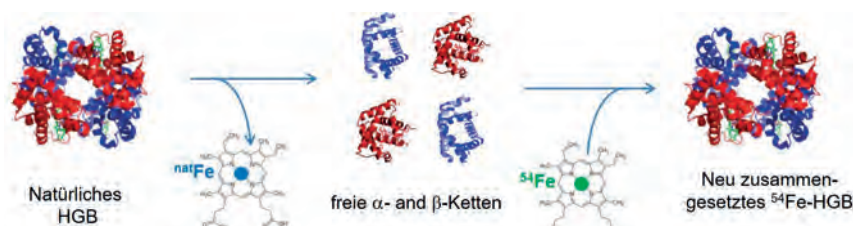
■ Labordiagnostik wird bei der Behandlung von Patienten immer wichtiger. So stützen sich heute 60 bis 70 Prozent aller Diagnosen auf

irgendeine Form der klinisch-chemischen Analytik.³⁾ Doch wie gut oder schlecht sind die Ergebnisse, auf deren Basis der Arzt seine Entscheidungen fällt? Das können die Ärzte selbst oft schlecht abschätzen. Bei den Ergebnissen wird keine Messunsicherheit angegeben, und häufig ist die Vergleichbarkeit der Resultate zwischen klinischen Laboren nicht ausreichend. Dies zeigt sich bei den obligatorischen Ringvergleichen, an denen klinische Labore in Deutschland regelmäßig teilnehmen müssen. Da diese oftmals unterschiedliche, auf Immunoassays basierende Verfahren („Test-Kits“) einsetzen, kann es passieren, dass für die gleiche Testprobe Standardabweichungen des Mittelwerts von 33 % für Insulin (HP 4/18 RfB) oder gar 56 % für Troponin I (CM4/18 RfB) auftreten, einem der wichtigsten Marker für Herzinfarkt.^{4,5)}

Um diese Situation zu verbessern, entwickelt die PTB Referenzmessmethoden für klinische Marker. Das beginnt mit „einfachen“ Markern wie Elektrolyte über Proteine und Metallproteine bis hin zur Identifizierung und Quantifizierung von bestimmten Isoformen der Proteine oder sogar Virusfragmenten. Hierfür eingesetzt werden Ver-

fahren wie molekulare Massenspektrometrie (ESI-MS/MS, hochauflösende MS), anorganische Massenspektrometrie (ICP-MS) oder auch Raman-Spektrometrie. Zur Elektrolytbestimmung kommen auch ionenselektive Elektroden, Ionenchromatographie und ICP-OES zum Einsatz. Wo immer möglich, wird auf Isotopenverdünnungsanalyse (ID) zurückgegriffen; hierbei wird der Probelösung ein isotopenmarkierter Standard des Analyten zugesetzt. Optimalerweise müssen die zu untersuchenden Biomarker mit verändertem Isotopenmuster das gleiche physiologische Verhalten aufweisen. Über das gemessene Isotopenverhältnis wird dann die Konzentration des Biomarkers in der ursprünglichen Probe bestimmt. Gerade im Fall der Proteine sind isotopenmarkierte Verbindungen häufig nicht kommerziell erhältlich und müssen synthetisiert werden. Im Fall von Metallproteinen lassen sich die Metall-Cofaktoren oder die das Metall tragenden prosthetischen Gruppen direkt gegen isotopenangereicherte austauschen.

Andernfalls sind die beispielsweise mit ^{15}N , ^{13}C oder ^{34}S markierten, isotopenangereicherten Proteine rekombinant herzustellen. Nur so ist gewährleistet, dass sich der Analyt und die isotopenangereicherte Verbindung während der Probenvorbereitung, Trennung und Detektion gleich verhalten. Da nur das Isotopenverhältnis bestimmt wird, wirken sich eventuelle Umwandlungen oder Verluste des Analyten (Wiederfindungsrate) nicht auf das Ergebnis aus. Oft ist eine vollständige Charakterisierung des isotopenangereicherten Biomarkers sehr schwierig, gerade hinsichtlich der genauen Bestimmung aller Isotopenverhältnisse. Deshalb setzt die PTB meist die Double-ID ein: Dabei wird das Ergebnis der Probenmessung mit der einer genau bekannten, gravimetrisch hergestellten Referenzlösung verglichen. Hierfür ist eine genau charakterisierte Referenz notwendig: Dies kann entweder ein In-House charakterisiertes reines Protein oder



Herstellung von ^{54}Fe -markiertem Hämoglobin (HGB) durch Austausch der Hämgruppe mit natürlichem Eisen gegen eine Hämgruppe, die ein isotopenangereichertes Eisen trägt.⁶⁾

ein zertifiziertes Referenzmaterial sein. Dieses dient dann als Referenzpunkt und erlaubt die SI-Rückführung auf die reine Verbindung.

Die anschließende Bestimmung erfolgt entweder durch Trennung des Analyten von der Matrix mit Chromatographie und Detektion anhand des Metallgehaltes oder nach enzymatischer Spaltung über die Quantifizierung spezifischer Peptide. Ein Beispiel für das erste Verfahren ist die Bestimmung von Hämoglobin über das Eisen in der Hämgruppe. Auch andere Metallproteine wie Superoxiddismutase, Transferrin, Ferritin und Ceruloplasmin ließen sich so bestimmen (Projekte im Rahmen der European-Metrology-Programme EMRP und EMPiR.⁷⁾ Als Beispiel für die zweite Herangehensweise entwickelte die PTB ein Verfahren, um humanes Wachstumshormon in Serum zu bestimmen.⁸⁾ Eine besondere Herausforderung ist dessen sehr niedrige Konzentration in den Proben.

Ein anderer Ansatz ist die Detektion mit Raman-Spektrometrie. Hierbei nutzt man die durch Isotopenanreicherung hervorgerufene spektrale Verschiebung einer oder mehrerer spezifischer, molekularer Schwingungsbanden. Nach Kalibrierung und Kreuzvalidierung lässt sich für jeden Analyten ein Modell aufstellen, mit dem dann vom gemessenen Verhältnis in der Probe auf eine Analytkonzentration geschlossen werden kann.⁹⁾

Zusammenfassend lässt sich sagen: Genaue Messungen sind essenziell in vielen Bereichen des täglichen Lebens. Chemiker in der PTB liefern dafür höchstgenaue, SI-rückführbare und international anerkannte

Referenzpunkte – sei es bei der Neudefinition der SI-Einheiten, in der Umweltanalytik, Klimaforschung oder der Labordiagnostik.

Claudia Swart

Physikalisch-Technische Bundesanstalt
Braunschweig, Fachbereich Biochemie

Literatur

- 1) O. Rienitz, R. Jähring, D. Schiel, R. Matschat, H. Kipphardt, W. Gernand, D. Oeter, „Rückführung in der Elementanalytik“, PTB-Mitteilungen 2005, 115, 295–299.
- 2) A. Pramann, O. Rienitz, D. Schiel, J. Schlote, B. Güttler, S. Valkiers, „Molar mass of silicon highly enriched in ^{28}Si determined by IDMS“, Metrologia 2011, 48, S20-S25.
- 3) <https://www.sulm.ch/d/labormedizin/was-ist-labormedizin>
- 4) <https://www.rfb.bio/cgi/surveys>
- 5) C. Swart, „Metrology for metalloproteins – where are we now, where are we heading?“ Anal. Bioanal. Chem. 2013, 405, 5697–5723.
- 6) C. Brauckmann, C. Frank, D. Schulze, P. Kaiser, R. Stosch, C. Swart, „Preparation and characterisation of an ^{57}Fe enriched haemoglobin spike material for species-specific isotope dilution mass spectrometry“, J. Anal. Atomic Spectrom. 2016, 31, 9, 1846–1857.
- 7) <https://www.euramet.org/research-innovation>
- 8) C. Pritchard, K.J. Groves, S. Biesenbruch, G. O'Connor, A.E. Ashcroft, C.G. Arsene, D. Schulze, M. Quaglia, „The quantification of human growth hormone in serum with a labeled protein as an internal standard: essential considerations“, Anal. Chem. 2014, 86, 6525–6532.
- 9) S. Zake, S. Wundrack, G. O'Connor, B. Güttler, R. Stosch, „Validation of isotope dilution surface-enhanced Raman scattering (IDSERS) as a higher order reference method for clinical measurands employing international comparison schemes“, J. Raman Spectrosc. 2013, 44, 1246–1252.

Chemie Aktuell

Schnüffeln mit Licht

Geringste Mengen an Gas zuverlässig analysieren

■ Es ist eine recht ungewöhnliche Methode, mit der man an der TU Wien nun geringste Mengen unterschiedlicher Moleküle in der Luft nachweisen kann: Man heizt die gesuchte Substanz punktuell mit einem speziellen Laser auf, dadurch ändert sich der Brechungsindex des Gases, und diesen Effekt wiederum kann man mit einem zweiten Laser nachweisen. Das neue Analysegerät ist nicht nur hochempfindlich, es lässt sich auch extrem kompakt bauen und kommt mit viel kleineren Probenmengen aus als andere Geräte.

Ausgezeichnet

■ Johannes Paul Waclawek, der im Rahmen seiner Dissertation bei Bernhard Lendl am Institut für Chemische Technologien und Analytik der TU Wien an der neuen Messtechnik forschte und diese dort nun als Postdoc weiter verbessert, wurde für die Entwicklung der neuen Methode zunächst mit dem Prozessanalytik-Award 2017 ausgezeichnet. Dieser Preis wird jährlich vom Arbeitskreis Prozessanalytik der Fachgruppe Analytische Chemie der Gesellschaft Deutscher Chemiker für die beste Dissertation auf dem Gebiet der Prozess-

analytik für das zurückliegende Jahr vergeben. Nun wurden Johannes Paul Waclawek und Bernhard Lendl im Februar 2019 auch mit dem erstmals vergebenen und insgesamt mit 20.000 Euro dotierten Anton-Paar-Forschungspreis für Instrumentelle Analytik & Charakterisierung ausgezeichnet. Dieser Preis prämiiert Forschungsleistungen, welche ein hohes Maß an Innovation sowie ein großes Potenzial auf eine erfolgreiche Umsetzung im Markt aufweisen. Die Forscher der TU Wien konnten sich hier gegenüber 69 Einreichungen aus 19 Ländern erfolgreich durchsetzen.

Moleküle, die Laserlicht schlucken

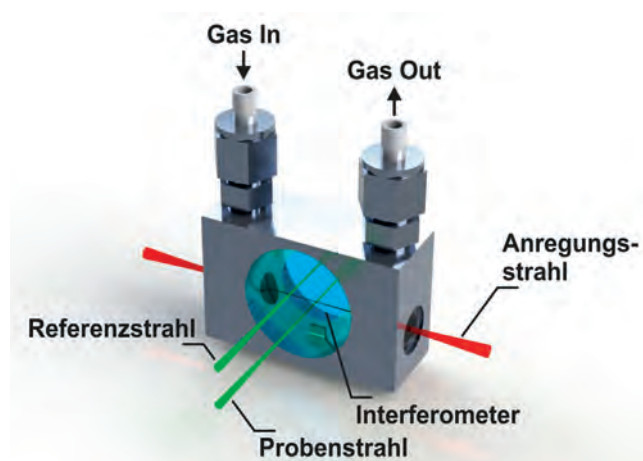
■ Laser zum Aufspüren bestimmter Moleküle zu verwenden, ist keine neue Idee. Die Methode der Laser-Absorptionsspektroskopie setzt man in der Spurenanalytik schon länger ein. Dabei macht man sich zu Nutze, dass unterschiedliche Moleküle unterschiedliche Lichtfarben absorbieren: Je nach Wellenlänge wird ein bestimmter Laserstrahl von bestimmten Molekülen absorbiert und von anderen ungehindert durchgelassen. So kann man verschiedene Substanzen mit großer Präzision nachweisen und voneinander unterscheiden.

Normalerweise misst man einfach, wie stark ein Laserstrahl von einem Gas abgeschwächt wird. Je weniger Licht des Lasers an einem Lichtdetektor ankommt, umso mehr Moleküle muss der Laserstrahl unterwegs getroffen haben, die einen Teil des Lichts absorbieren konnten. „Wir haben einen ganz anderen Ansatz gewählt“, berichtet Johannes Waclawek. „Wir messen nicht die Abschwächung der Intensität eines Laserstrahls. Stattdessen messen wir mithilfe einer optischen Kavität die Brechungsindexänderung des Gases, welche durch die Absorption der Laserstrahlung von Molekülen hervorgerufen wird.“

Erhitzte Moleküle – veränderte Lichtbrechung

■ Wenn die gesuchten Moleküle das Laserlicht aufnehmen, heizen sie sich nämlich auf. Dadurch verändert sich auch der optische Brechungsindex des Gases. Das Phänomen kennt man vom Flimmern der heißen Luft über einem brennenden Feuer: Heiße Luft hat eine geringere Dichte und das wirkt sich auf die Brechung des Lichts aus.

Den veränderten Brechungsindex kann man sehr präzise messen: „Wir schicken einen zweiten Laserstrahl



Eine schematische Darstellung der Messzelle, entwickelt an der TU Wien



Johannes Paul Waclawek (l.) und Bernhard Lendl mit dem Anton-Paar-Forschungspreis (Fotos: TU Wien)

durch ein System aus zwei teildurchlässigen Spiegeln, das nur Licht einer ganz bestimmten Wellenlänge optimal durchlässt“, erklärt Bernhard Lendl. „Wenn Spuren des gesuchten Gases vorhanden sind und sich erwärmen, ändert sich der optische Brechungsindex des Gases und somit die Wellenlänge, welche zwischen die beiden Spiegel passt. Genau darauf reagiert das Messsystem dann extrem empfindlich.“

Bereits mit dem Prototypen, den Johannes Paul Waclawek entwickelte, lassen sich winzige Spuren von Schwefeldioxid in der Luft nachweisen: Konzentrationen im einstelligen Milliardenbereich können gemessen werden. Weitere Verbesserungen sollen die erreichbaren Nachweisgrenzen noch deutlich nach unten drücken.

Ein wesentlicher Vorteil der neuen Messtechnik ist ihre Miniaturisierbarkeit: Bei der klassischen Absorptionsspektroskopie muss man den Laserstrahl möglichst lange durch das zu untersuchende Gas lenken – oft über Dutzende Meter, bis der Absorptionsprozess stark genug ist, um den Laserstrahl ausreichend abzuschwächen. Misst man allerdings statt der Lichtabschwächung die Änderung des optischen Brechungsindex, ist eine Messung auf extrem kleinen Raum möglich und selbst kleine Mengen an Gas können zuverlässig analysiert werden. Im Prinzip könnte man die Messtechnik auf einem Chip integrieren und kleine tragbare Messgeräte bauen, die eine Vielzahl unterschiedlicher Substanzen „erschnüffeln“ können.

Einsatzmöglichkeiten für die neue Messtechnik gibt es viele – in der Umweltanalytik, wenn es darum geht, gefährliche Abgase nachzuweisen, in der Medizin, beispielsweise zur Analyse der Atemluft, oder auch in der Industrie, in der Qualitätssicherung beim Überwachen von Produktionsprozessen. Mit Unterstützung des Forschungs- und Transfersupports der TU Wien wurde die neue Messtechnik bereits zum Patent angemeldet.

Originalveröffentlichung:

J. P. Waclawek et al., „Balanced-detection interferometric cavity-assisted photothermal spectroscopy“, *Optics Express* 2019, 27, 9, 12183–12195.

Quelle: Technische Universität Wien

Neues Messinstrument: Kohlenstoffdioxid als Geothermometer

Forscher quantifizieren mit Laserspektroskopie seltene CO₂-Varianten

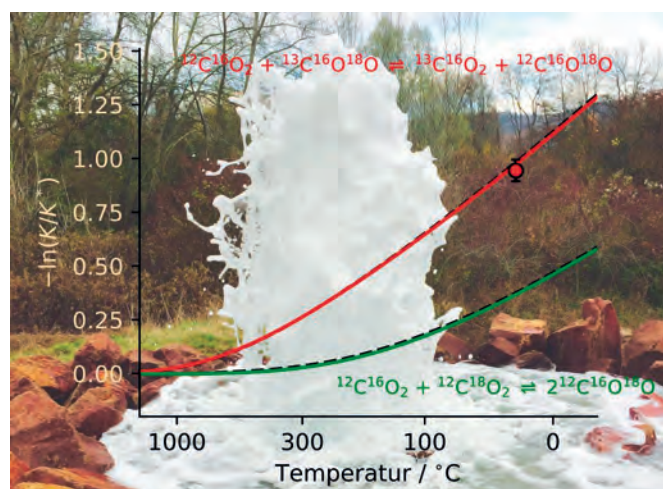
■ Mit einem neuartigen Laserinstrument ist es erstmals möglich, vier seltene Molekülvarianten des Kohlendioxids gleichzeitig und mit höchster Genauigkeit zu messen. Auf diese Weise kann die Temperatur bei der Bildung von CO₂-bindenden Karbonaten und karbonatischen Fossilien völlig unabhängig von anderen Parametern bestimmt werden. Als eine neue Art von Geothermometer ist das auf Laserspektroskopie basierende Messinstrument von Bedeutung für Wissenschaftsdisziplinen, die sich zum Beispiel mit klimatischen Verhältnissen in der erdgeschichtlichen Vergangenheit beschäftigen. Entwickelt wurde es von einem deutsch-französischen Forscherteam. Maßgeblich daran beteiligt waren Umweltphysiker der Universität Heidelberg.

Die Wissenschaft untersucht die Verteilung der atomaren Bausteine von Kohlendioxid, um wichtige geochemische und biogeochemische Zyklen sowie klimatische Prozesse auf unserem Planeten zu ergründen. Das Wissen über Eis- und Warmzeitphasen der Erdgeschichte beruht zu einem wesentlichen Teil auf dieser Methodik. Genutzt wird die Analyse der isotopischen Verteilung des Kohlenstoffdi-

oxids auch für Karbonate, in denen CO₂ mineralisiert wird. Ein neuartiger Ansatz beschäftigt sich mit der Isotopenverteilung zwischen verschiedenen Varianten desselben Moleküls, insbesondere seltenen Molekülvarianten.

Erst seit wenigen Jahren ist es möglich, die atomare Zusammensetzung von CO₂ und Karbonat mittels hochpräziser Massenspektrometrie zu bestimmen – und zwar so, dass aus der relativen Häufigkeit, mit der mehrere Varianten eines Moleküls auftreten, direkt auf die Bildungstemperatur des Karbonats geschlossen werden kann. Im thermodynamischen Gleichgewicht hängt die Verteilung der Isotope zwischen den verschiedenen Varianten nur von der Temperatur ab und wird nicht von anderen Parametern beeinflusst. „Damit hat sich diese Bestimmungsmethode als ein besonders robustes und einzigartiges physikalisches Thermometer in der Geophysik und der Klimaforschung erwiesen“, sagt Tobias Kluge, der am Institut für Umweltphysik der Universität Heidelberg zur Physik der Isotopologen forscht.

Um die seltenen CO₂-Varianten mit höchster Genauigkeit – genauer als



Temperaturabhängige Änderung der CO₂-Isotopologenverteilung: Bei niedrigen Temperaturen tritt deutlich häufiger ein Molekül mit seltenen Isotopen auf. Das Foto zeigt den Austritt von Kohlendioxid aus einem hydrothermalen System, dem Geysir Andernach. (Abbildung: I. Prokhorov)

1 in 20.000 – zu quantifizieren, nutzt das deutsch-französische Team nun erstmals Infrarotlaser, was nach den Worten von Kluge einen grundlegenden technischen Durchbruch darstellt. Im Rahmen einer Pilotstudie mit verschiedenen hydrothermalen Systemen des Oberrheingrabens ist es den Wissenschaftlern gelungen, anhand von CO₂ mit ihrem neuen Laserinstrument Temperaturen zu bestimmen, die im Allgemeinen denen des lokalen Grundwassers entsprachen. „Die Temperaturmessungen stimmten dabei auch mit den Ergebnissen der gleichzeitig durchgeführten massenspektrometrischen Analysen überein“, erklärt Ivan Prokhorov, der Erstautor der Studie, der an der Heidelberger Graduiertenschule für Fundamentale Physik der Ruperto promoviert wurde und nun an der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt in Braunschweig tätig ist.

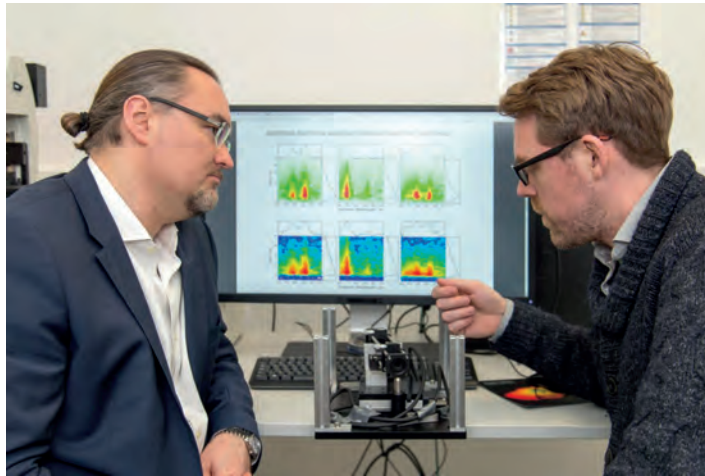
Nach Angaben von Christof Janssen vom Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) in Paris könnte die Weiterentwicklung der Technik schnell die Genauigkeit der Massenspektrometrie überschreiten und zusätzlich eine drastische Verkürzung der Messzeiten ermöglichen. Damit sollen künftig auch Feldmessungen möglich sein. Ein besonderer Vorteil des Laserinstruments ist sein direkter Zugriff auf die Messvariable Temperatur, wie Kluge erläutert. Allein durch den Vergleich, wie häufig die untersuchten Molekülvarianten auftreten, lässt sich die Temperatur von CO₂ unzweideutig bestimmen, während bei der Massenspektrometrie immer Kalibrationen und regelmäßig Standardmessungen erforderlich sind. „Wir blicken bereits in die Zukunft und arbeiten daran, die Möglichkeiten zur Messung von noch selteneren und bislang unerreichbaren Isotopenvarianten umzusetzen. Damit lassen sich dann auch noch komplexere biogeochemische Prozesse quantitativ auswerten“, sagt der Heidelberger Wissenschaftler.

Originalveröffentlichung:
I. Prokhorov, T. Kluge, C. Janssen, „Optical clumped isotope thermometry of carbon dioxide“, *Scientific Reports* 2019, 9, 4765.

Quelle: Ruprecht-Karls-Universität
Heidelberg

An der Grenze der Nachweisbarkeit

Neue Methode erlaubt Spektroskopie an einzelnen Molekülen



Jürgen Hauer (li.) und Erstautor Erling Thyrrhaug mit ihrem Messinstrument. Im Hintergrund Spektren, die damit aufgenommen wurden. (Foto: Andreas Battenberg / TUM)

■ Während spektroskopische Messungen normalerweise über viele Moleküle mitteln, liefert eine an der Technischen Universität München (TUM) entwickelte, neue Methode präzise Aussagen über die Wechselwirkung genau eines Moleküls mit seiner Umgebung. Damit lassen sich beispielsweise schneller effiziente Moleküle für zukünftige Technologien in der Photovoltaik finden.

Einem internationalen Team um den TUM-Chemiker Jürgen Hauer ist es nun gelungen, die spektralen Eigenschaften einzelner Moleküle zu bestimmen. Die Forscher konnten Absorptions- und Emissionsspektren der untersuchten Moleküle über einen breiten Spektralbereich in einer einzigen Messung erfassen und so exakt bestimmen, wie ein Molekül mit seiner Umgebung interagiert, wie es Energie aufnimmt und wieder abgibt.

Normalerweise wird bei solchen Messungen über tausende, manchmal Millionen von Molekülen gemittelt, dadurch gehen wichtige Detailinformationen verloren. „Bisher ließen sich Emissionsspektren routinemäßig erfassen, Absorptionsmessungen an Einzelmolekülen waren jedoch extrem aufwendig“, erklärt Hauer. „Wir sind damit an der ultimativen Grenze der Nachweisbarkeit angelangt.“

Kompaktes Gerät, schnelle Messung

■ Die neue Methode basiert auf einem kompakten, nur DIN-A4-großen Instrument, das die Münchner Chemiker in Zusammenarbeit mit den Kollegen am Politecnico di Milano entwickelten.

Der Trick dabei: Es erzeugt einen doppelten Laserimpuls mit kontrollierter Verzögerung zwischen den Anregungen. Der zweite Puls moduliert das Emissionsspektrum auf eine spezifische Art, die ihrerseits Informationen über das Absorptionsspektrum enthält. Diese Informationen lassen sich dann über eine Fourier-Transformation auswerten.

„Der Hauptvorteil ist, dass wir einen herkömmlichen Messaufbau zur Erfassung von Emissionsspektren mit nur wenig Aufwand in ein Gerät zu Messung von Emissions- und Absorptionsspektren verwandeln können“, sagt Hauer. Die Messung selbst ist relativ einfach. „Um neun Uhr morgens haben wir das Gerät in den Aufbau an der Universität Kopenhagen eingebaut“, erzählt Hauer. „Schon um halb zwölf gab es erste brauchbare Messdaten.“

Der Photosynthese auf der Spur

■ Mit Hilfe der neuen Spektroskopiemethode wollen die Chemiker nun

einzelne Moleküle studieren, etwa den Energiefluss in metallorganischen Verbindungen oder physikalische Effekte bei Molekülen, wenn sie mit Wasser oder einem anderen Lösungsmittel in Kontakt kommen.

Der Einfluss eines Lösungsmittels ist auf Einzelmolekülebene noch wenig erforscht. Die Chemiker wollen den Energiefluss auch zeitlich aufgelöst darstellen und so verstehen, warum er in bestimmten Molekülen schneller und effizienter stattfindet als in anderen. „Konkret interessieren wir uns für den Energietransfer in biologischen Molekülverbänden, in denen Photosynthese stattfindet“ sagt Hauer.

Das Ziel: Organische Solarzellen

■ Besonders im Fokus hinsichtlich späterer Anwendungen steht der Lichtsammelkomplex LH2. „Wenn wir natürliche Lichtsammelkomplexe verstanden haben, können wir über künstliche Systeme nachdenken, wie sie in der Photovoltaik zum Einsatz kommen“, sagt Hauer. Die Erkenntnisse könnten die Grundlage für zukünftige Technologien in der Photovoltaik sein. Ziel ist die Entwicklung einer neuartigen organischen Solarzelle.

Originalveröffentlichung:

E. Thyrgaug, S. Krause, A. Perri, G. Cerullo, D. Polli, T. Vösch, J. Hauer, „Single-molecule excitation–emission spectroscopy“, PNAS 2019.

Quelle: TU München

Aufbaustudium Analytik & Spektroskopie beginnt wieder

■ Das Aufbaustudium „Analytik & Spektroskopie“ an der Fakultät für Chemie und Mineralogie der Universität Leipzig existiert seit über 40 Jahren und hat bereits über tausend Absolventen. Am 7. Oktober beginnt ein neuer Zyklus des Aufbaustudiums, in Form von acht einwöchigen Kursen innerhalb eines Zeitraums von zwei Jahren. Dieses anspruchsvolle Studium bietet einen umfassenden Überblick über das gesamte Feld der klassischen Methoden sowie vertiefende Einblicke in die aktuelle Forschung.

Voraussetzungen

■ Das Aufbaustudium ist für Teilnehmer mit einem Hoch- oder Fachhochschulabschluss in Chemie konzipiert. Absolventen einer anderen naturwissenschaftlich-technischen Fachrichtung können jedoch ebenfalls teilnehmen. Voraussetzung ist ein Jahr Berufserfahrung.

Abschluss

■ Nach erfolgreicher Absolvierung des gesamten Aufbaustudienganges sind Teilnehmer mit einem Hoch- oder Fachhochschulabschluss in Chemie berechtigt, zur Berufsbezeichnung den Zusatz Fachchemiker (Fachingenieur) für Analytik und Spektroskopie zu führen. Die anderen Teilnehmer erhalten ein Abschlusszertifikat.

Zeitplan

Immatrikulationsjahr 2019:

- 1. Kurs: 7. bis 11.10.2019
- 2. Kurs: 10. bis 14.02.2020
- 3. Kurs: 30.03. bis 03.04.2020
- 4. Kurs: 20. bis 24.07.2020
- 5. bis 8. Kurs: Termine werden noch bekannt gegeben

Kosten pro Semester: 300,00 Euro
Studiengebühren zuzüglich Semesterbeitrag (z. Zt. 210,00 Euro)

Ermäßigungen können gewährt werden, bitte informieren Sie sich unter: www.test.de/thema/weiterbildungsfoerderung/

Bewerbungsverfahren

■ Die Bewerbung für das Aufbaustudium findet online statt:

<https://almaweb.uni-leipzig.de/>
(bis 15.09.2019)

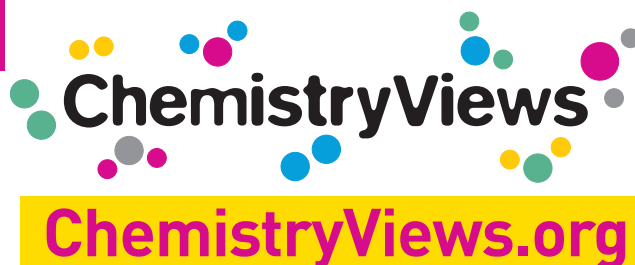
Auskünfte erteilen

Prof. Dr. Jörg Matysik
Institut für Analytische Chemie
Linnéstr. 3, 04103 Leipzig
Tel.: 0341 9736112
Fax: 0341 9736115
E-mail: joerg.matysik@uni-leipzig.de

Dr. Sina Gruschinski
Fakultät für Chemie und Mineralogie
Johannisallee 29, 04103 Leipzig
Tel.: 0341 9736002
Fax: 0341 9736099
E-mail: sina.gruschinski@uni-leipzig.de

Weitere Informationen: <http://analytik.chemie.uni-leipzig.de/aufbau-studium>

Spot your favorite content!



Medien

ABC in Kürze

Neuigkeiten rund um Analytical and Bioanalytical Chemistry

Neues von Springer Nature

Springer Nature Journals mit vereinheitlichten Richtlinien zur Nutzung von Preprint-Servern

■ Gute Nachrichten auch für ABC-Autoren: Springer Nature Journals vereinheitlichen ihre Richtlinien zum Umgang mit Preprint-Servern wie ChemRxiv und begrüßen ausdrücklich das sogenannte preprint sharing von Daten. Autoren sind dabei frei in der Wahl der Preprint-Lizenz, einschließlich der Creative Commons Licences. Die neue Richtlinie enthält nicht nur die Ermutigung an Autoren, Daten via Preprint-Server mit der Community zu teilen, sondern auch Details zum Umgang mit den Lizenzen, Zitationen und Kommunikation mit den Medien.

ResearchGate und Springer Nature starten Pilotprojekt für reibungslosen Zugriff auf wissenschaftliche Inhalte

■ ResearchGate und Springer Nature arbeiten gemeinsam an der Entwicklung von Zugangsmodellen für wissenschaftliche Inhalte. Volltextversionen von Artikeln, die seit November 2017 in ausgewählten Nature-Titeln veröffentlicht wurden, stehen zum Lesen und als Download über die Profile von ResearchGate zur Verfügung. Der Startschuss erfolgte bereits im März, sämtliche Texte des Pilotprojekts sind seit dem 7. März verfügbar. Dass dies unabhängig vom Standort des jeweiligen Nutzers möglich ist, sehen ResearchGate und Springer Nature als Teil des übergeordneten Ziels, den Zugang zu wissenschaftlichen Ergebnissen für alle zu verbessern. Darüber hinaus soll das Pilotprojekt Autoren darin unterstützen, die Möglichkeiten des Netzwerks zu nutzen, um die Sichtbarkeit und Auffindbarkeit ihrer Arbeit zu erhöhen und um den Impact ihrer Forschung plattformübergreifend zu messen.

Im April 2018 hatte ResearchGate mit mehreren Verlagen, unter ihnen auch Springer Nature, eine Kooperati-

onsvereinbarung geschlossen, die das Teilen von Artikeln unterstützt. Der Start des neuen Pilotprojekts von ResearchGate und Springer Nature ist ein wichtiger nächster Schritt, um die wissenschaftliche Gemeinschaft besser zu unterstützen.

Neuigkeiten aus dem Team der ABC-Herausgeber

■ Nach einzelnen Treffen auf Konferenzen im ersten Quartal des Jahres steht nun im Sommer das alljährliche Herausgebertreffen in Heidelberg an. Dabei wird unter anderem die Zusammensetzung des International Advisory Boards für die kommenden drei Jahre (2020–2022) besprochen. Erstmals nehmen auch die im letzten Jahr neu gewählten Herausgeber teil, ein Editorial stellt sie Ihnen vor: „Introducing three new ABC Editors“ (http://bit.ly/ABC_newEds)

ABC ... unterwegs

■ In den Sommermonaten freuen sich Herausgeber und Redaktion von ABC wieder auf persönliche Gespräche und lebhaftes Diskussionen mit

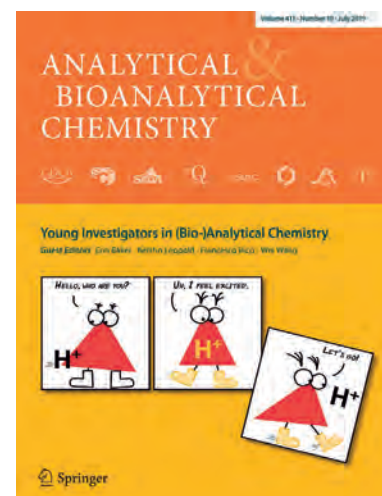
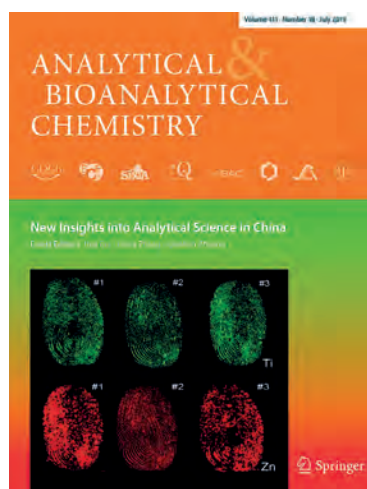
Ihnen. Sie können uns auf den folgenden Veranstaltungen treffen:

- COLACRO XVII in Aracaju, Brasilien (14.-19. Juli)
- SEQA 2019 (XXII Reunión de la Sociedad Española de Química Analítica) in Valladolid, Spanien (17.-19. Juli)
- 17th ISEAC & 3rd ECL (Int. Symp. on Electroanalytical Chemistry & Int. Meeting on Electr. Chemiluminescence) in Changchun, China (22.-25. August)
- 258th ACS National Meeting in San Diego, USA (25.-29. August)
- Euroanalysis 2019 in Istanbul, Türkei (1.-5. September)
- AOAC International in Denver, USA (8.-11. September)
- SCI 2019 (XXVIII Congresso della Divisione di Chimica Analitica della Società Chimica Italiana) in Bari, Italien (22.-26. September)

ABC sponsert auch dort wieder zahlreiche Posterpreise und wünscht allen Teilnehmern viel Glück!

Neues aus den Rubriken

■ Das neue Jahr beginnt mit einem neuen Rätsel aus der Reihe der Analy-



Links: das Cover des Heftes 411/18, „New Insights into Analytical Science in China“. Die Graphik gehört zu dem Artikel von Ling-Na Zheng et al. desselben Hefts (doi:10.1007/s00216-019-01718-0). Rechts das Cover zu Heft 411/19, „Young Investigators in (Bio-)Analytical Chemistry“. Der Beitrag aus der Gruppe von Kevin Pagel stiftete diesen Hingucker für das Cover (doi: 10.1007/s00216-019-01657-w).

tical Challenges. Dieses Mal ist Ihr chemisches Wissen um die quantitative Analyse von Blei gefragt; Einreichungsdatum für die Lösung war der 1. Juli: „Lead quantitation challenge“ von Enea Pagliano

(<https://link.springer.com/article/10.1007/s00216-019-01592-w>)

Darüber hinaus fasst das folgende Editorial alles Wichtige zu ABCs außergewöhnlichen Rubriken zusammen, informieren Sie sich über die Geschichte und die jetzigen Columns Editors: http://bit.ly/ABC_Columns

Alle Beiträge der Rubrik sowie alle Editorials sind unseren Lesern frei zugänglich.

Themenschwerpunkte zum Jahresanfang bei ABC

■ Im Juli gewährt ein ganzes ABC-Heft Ihnen „New Insights into Analytical Science in China“. Dank der Gastherausgeber Lihua Zhang, Hua Cui und Qiankun Zhuang präsentiert Ihnen ABC insgesamt 30 Artikel, die neueste Forschungsergebnisse chinesischer Wissenschaftler vorstellen. Das dazugehörige Cover zeigt die Abbildung, zusammen mit dem von unserer Young-Investigators-Ausgabe 2019. Letztere hat es mit insgesamt 66 Beiträgen auf einen absoluten Spitzenwert gebracht. Aber nicht nur die Zahl ist Spitze, auch die Qualität der einzelnen Beiträge (bit.ly/Young_Inv_2019). Lesen Sie außerdem ein Interview mit den Gastherausgebern Erin Baker, Kerstin Leopold, Francesco Ricci und Wei Wang: http://bit.ly/Young_Editors2019

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

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

Rezension: Massenspektrometrie – Spektroskopiekurs kompakt

Von Jürgen H. Gross

Springer Spektrum, Berlin, 2019,
131 Seiten

1. Auflage

ISBN: 9783662586341

Taschenbuch 19,99 EUR

■ Für Studierende in Bachelorstudiengängen wie Chemie und Biochemie sind Kenntnisse massenspektrometrischer Grundlagen und insbesondere deren Anwendung zur Strukturaufklärung unerlässlich. Diese werden häufig zusammen mit anderen spektroskopischen Techniken in methodisch orientierten Lehrveranstaltungen vermittelt. Hier setzt Jürgen Gross mit seinem neuen Lehrbuch „Massenspektrometrie. Spektroskopiekurs kompakt“ an: Es dient hinsichtlich Aufbau und Umfang als begleitendes Material zu diesen einführenden Kursen und unterscheidet sich dabei bewusst von umfangreicheren und detaillierteren Werken.

Einen Schwerpunkt bilden die wichtigsten Ionisierungstechniken von Molekülen, deren Auswahl im Hinblick auf die Struktur der Verbindungen und die analytische Fragestellung essenziell und bereits frühzeitig im Studium relevant ist. Dies gelingt sehr anschaulich und gut verständlich; auf den Mechanismus der insbesondere bioanalytisch weit verbreiteten matrixunterstützten Laserdesorption/Ionisation ließe sich allerdings etwas detaillierter eingehen.

Ebenso legt das Buch großen Wert auf die Interpretation von Massenspektren und die Informationsgewinnung aus Isotopenmustern und Molekülfragmentierungen. Die wichtigsten Fragmentierungsreaktionen der Massenspektrometrie werden anschaulich präsentiert und charakteristische Fragment-Ionen und Neutralverluste auch tabellarisch aufgeführt. Außerdem wird der Beitrag exakter Ionenmassen aus hochaufgelösten Massenspektren erläutert.



Konsequenterweise sind die physikalischen Prinzipien der Massenanalyse stark reduziert dargestellt und lediglich an ausgewählten Beispielen der in der Praxis am weitesten verbreiteten Massenanalysatoren (Time-of-Flight und Quadrupol) exemplarisch besprochen. Darauf folgt die Tandem-Massenspektrometrie, die insbesondere aufgrund ihrer schonenden und dadurch fragmentarmen Ionisierungstechniken weiter an Bedeutung für Strukturuntersuchungen, aber auch für die Spurenanalytik gewinnt.

Die Kopplung der Massenspektrometrie mit chromatographischen Methoden vorzustellen würde ein eigenes kompaktes Einführungsbuch rechtfertigen und muss in dem ihr gewidmeten Kapitel daher unvollständig bleiben. Das Kapitel präsentiert stattdessen kurz ausgewählte Anwendungen wie die Pestizidanalytik und die Sequenzierung von Peptiden, die einen kleinen Ausblick auf die vielfältigen Einsatzmöglichkeiten der Massenspektrometrie geben.

Klar strukturiert, kompakt sowohl im Aufbau als auch im Format und zu einem günstigen Preis angeboten, eignet sich dieses Buch sehr gut als Skript in der Vorlesung, zur Prüfungsvorbereitung und unterstützend zur Interpretation von Massenspektren im Laboralltag.

Holm Frauendorf, Göttingen

Erstes maschinengeneriertes Chemie-Buch publiziert

Angewandte Computerlinguistik der Goethe-Universität kooperiert mit Springer Nature

■ Das erste maschinengenerierte Buch, das bei Springer Nature erscheint, entstand mithilfe eines Algorithmus, der von Wissenschaftlern der Goethe-Universität entwickelt wurde. Obwohl schon lange zu diesem Thema geforscht wird, betreten der Verlag und die Informatiker damit Neuland, denn es ist zuvor noch kein maschinengeneriertes Buch von einem Wissenschaftsverlag veröffentlicht worden.

Das Buch bietet einen Überblick über die neuesten Forschungspublikationen zum Thema Lithium-Ionen-Batterien – eine strukturierte, automatisch generierte Zusammenfassung einer großen Anzahl aktueller Forschungsartikel. Forscher erhalten hierdurch die Möglichkeit, das schnell wachsende Informationsaufkommen auf diesem Gebiet effizient zu überschauen.

Der unter Leitung von Juniorprofessor Christian Chiarcos an der Angewandten Computerlinguistik an der Goethe-Universität entwickelte Beta Writer basiert auf Verfahren, die Textinhalte mithilfe von Computern

analysieren, so dass sie relevante Publikationen automatisch auswählen und verarbeiten, die zuvor auf der Plattform SpringerLink veröffentlicht wurden. Diese wissenschaftlich begutachteten Veröffentlichungen von Springer Nature werden von dem Algorithmus einem ähnlichkeitsbasierten Clustering unterzogen, um die Quelldokumente in zusammenhängende Kapitel und Abschnitte zu gliedern.

In diese Kapitelstruktur werden prägnante Zusammenfassungen der publizierten Artikel eingefügt und

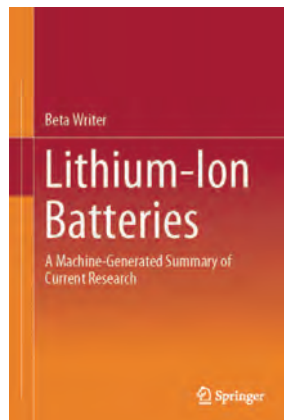
miteinander verflochten. Die extrahierten Textpassagen sind mit Hyperlinks versehen, so dass der Leser eindeutige Verweise auf die Quelldokumente erhält. Automatisch erstellte Inhaltsverzeichnisse und Referenzen erleichtern die Orientierung innerhalb des Buchprototypen.

„Mit dieser Publikation wollen wir zeigen, zu welchem Grad die Herausforderungen der maschinengenerierten Publikation inzwischen gelöst werden können, wenn Fachleute aus wissenschaftlichen Verlagen mit Computerlinguisten zusammenarbeiten“, erklärt Juniorprofessor Christian Chiarcos. „Wir haben bei diesem Projekt auch besser verstanden, welche Erwartungen es auf Seiten der Autoren, Herausgeber, Verlage und Käufer gibt. Und zwar sowohl in Bezug auf die wissenschaftlichen als auch die wirtschaftlichen Anforderungen.“

Henning Schoenenberger, Director Product Data & Metadata Management bei Springer Nature, fügt hinzu: „Während Forschungsartikel und -bücher, die von Wissenschaftlern und Autoren geschrieben werden, auch weiterhin eine entscheidende Rolle im wissenschaftlichen Publizieren spielen werden, erwarten wir zukünftig eine Vielzahl an verschiedenen Inhaltstypen: von vollständig von Menschen erstellten Inhalten über verschiedene Blended-Man-Machine-Textgenerierungen hin zu vollständig maschinengenerierten Texten. Unser Prototyp ist ein erster wichtiger Meilenstein auf diesem Weg. Wir hoffen, dass wir als Verlag dazu beitragen, eine öffentliche Debatte über die Chancen, Auswirkungen, Herausforderungen und potenziellen Risiken von maschinengenerierten Inhalten im wissenschaftlichen Umfeld anzustoßen.“

Originalveröffentlichung:
Beta Writer, „Lithium-Ion Batteries – A Machine-Generated Summary of Current Research“, Springer Nature
Kostenloser Download unter:
<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-16800-1#about>

Quelle: Universität Frankfurt (Main)



Das Karriereportal für Chemie und Life Sciences

Von Chemikern für Chemiker
Nutzen Sie das Netzwerk der GDCh:

- ▶ Stellenmarkt – Online und in den *Nachrichten aus der Chemie*
- ▶ Mentoring-Programm
- ▶ Publikationen rund um die Karriere
- ▶ Bewerbungseminare und –workshops
- ▶ Jobbörsen und Vorträge
- ▶ Gehaltsumfrage und Rechtsberatung

www.gdch.de/karriere • twitter.com/GDCh_Karriere

Analytische Trenntechniken I

■ Die Session Analytische Trenntechniken im großen Hörsaal der Chemischen Institute war sehr gut besucht. Den Besuchern des ersten Teils am Dienstagvormittag bot sich ein abwechslungsreiches Programm, sowohl zu Techniken (HPLC, GC, mehrdimensionale Chromatographie, Multiplexing) als auch zu Anwendungsfeldern (Mykotoxin-Biomonitoring, Polymer-Analytik, Identifizierung komplexer Lipide).

Ein Keynote-Vortrag von Hans-Ulrich Humpf von der Universität Münster eröffnete die Session. Er gab spannende Einblicke in humane Biomonitoringmethoden zur Expositionsabschätzung von Mykotoxinen mit LC-MS/MS-Methoden. Mykotoxine sind sekundäre Metabolite niedriger Pilze (*Ascomyceten*); sie können bei Mensch und Tier zu toxischen Wirkungen, Erkrankungen und bei hinreichend hoher Exposition auch zum Tod führen. Schimmelpilzgifte gelangen als Primär- oder Sekundärkontamination und über „carry-over“ in die Nahrungskette. Zur Expositionsabschätzung kombiniert man bislang vornehmlich die in bestimmten Produktgruppen gemessenen Gehalte der Kontaminanten mit Daten zum Verzehr dieser Produkte in der Bevölkerung. Jedoch lässt sich so keine individuelle Belastung betrachten. Die vorgestellten Humanbiomonitoring-Methoden zur Messung von Mykotoxinen und ihren Metaboliten in Körperflüssigkeiten sind ein wertvolles Werkzeug, um interne Belastungen zu ermitteln, die aus allen externen Expositionen resultieren. Hans-Ulrich Humpf stellte unter anderem eine elegante Methode vor, um sensitiv und selektiv 27 Mykotoxine und Metabolite aus Mikroblutproben (dried blood spots) nach Extraktion mit LC-MS/MS zu quantifizieren.

Dem Keynote-Vortrag folgten vier Diskussionsvorträge aus Academia und Industrie. Bernhard Durner aus dem Arbeitskreis von Frank-Michael

Matysik (Universität Regensburg) zeigte sehr anschaulich, wie leistungsfähig ein periodischer Sägezahngradient in der Polymer-HPLC ist. Die Entwicklung und Optimierung des neuen Konzepts des periodischen Sägezahngradienten gab tiefere Informationen über die (Mikro-)Struktur der untersuchten Polymere; dies zeigte er am Beispiel von Polystyrol, Polyvinylchlorid, Polydimethylsiloxan, Polymethylmethacrylat bzw. Polypropylenglykol. Die hohe Trennleistung des Sägezahngradienten schreibt man im Wesentlichen der periodischen Veränderung der Anteile an adsorptions- und desorptionsförderndem Lösungsmittel in der mobilen Phase zu. Durch Auswertung der Peaks in der Polymer-HPLC ließ sich jeder Retentionszeit im Chromatogramm eine Molmasse zuordnen und dadurch eine molmasseabhängige Kalibrierung entwickeln, deren Auflösung im Vergleich zur Größenausschlusschromatographie deutlich erhöht ist.

Patrick Olaf Helmer aus der Arbeitsgruppe von Heiko Hayen (Universität Münster) stellte einen Ansatz basierend auf einer Heart-Cut-HPLC-Methode vor, um Cardiolipine und deren Oxidationsprodukte mit LC-MS zu identifizieren. Cardiolipine sind eine besondere Klasse der Phospholipide und liegen in eukaryotischen Zellen ausschließlich in den Mitochondrien vor. Dort sind sie essenziell für den Energiestoffwechsel und die Zellatmung. Mit der Hydrophilen Interaktionsflüssigchromatographie (HILIC) in der ersten Dimension ließen sich störende Phospholipidklassen sowie Cholesterol und Triglyceride effizient abtrennen. Außerdem wurden die Cardiolipine anhand ihrer Kettenlänge und ihres Sättigungsgrads in der zweiten Dimension auf einer phenylbasierten Umkehrphase getrennt.

Hochkomplexe Proben standen auch im Fokus des Vortrages von Matthias Pursch von Dow in Stade.

Die Zusammensetzung von beispielsweise ethoxylatbasierten Proben klärte im Detail eine elegante Kombination aus einer Multi-Heart-Cut-HPLC-Methode und der hochauflösenden MS auf. Neben den Herausforderungen bei der Durchführung von 2D-LC-Analysen stellte er Lösungsansätze vor, welche die teilweise unzureichende Kompatibilität der mobilen Phasen beim Transfer von der ersten auf die zweite Dimension adressieren. Eine aktive Lösungsmittelmodulation in einem speziell konzipierten Schaltventil steigerte die chromatographische Auflösung in der zweiten Dimension signifikant und demonstrierte damit das große Potenzial dieser Methode.

Vor der Mittagspause und den Vendor-Seminaren rundete Maria Antoniadou aus der Arbeitsgruppe von Erwin Rosenberg (Technische Universität Wien) die Session mit einem Vortrag zur Hochdurchsatz-Gaschromatographie ab. Sie diskutierte die Vorzüge der „barrier ionization detecton“ (BID) und stellte das Multiplexing zur Erhöhung des Probendurchsatzes vor. In der Multiplexing-Chromatographie wird die Probe durch einen speziell konfigurierten Injektor auf die Trennphase überführt. Die Analyten werden durch eine Pulsfolge kontinuierlich auf die Trennsäule injiziert. Die zur Modulation verwendete Pseudozufallssequenz ist aus einer Hadamard-Matrix hergeleitet. Das erhaltene Chromatogramm ist hochkomplex und ist eine Überlagerung von Einzel-Chromatogrammen, die sich mit Hadamard-Transformation und der bekannten Pseudozufallssequenz in ein konventionelles Chromatogramm transformieren lässt. Multiplexing kann den Probendurchsatz deutlich erhöhen.

Heiko Hayen
Westfälische Wilhelms-Universität
Münster

Analytische Trenntechniken II

■ Blumenerde – Bier – Schweröl – Rhabarber. Diese Liste ist nicht etwa ein kurioser Einkaufszettel, sondern war unter anderem Inhalt der Nachmittagssession auf der ANAKON 2019. Die genannten Substanzen stellen analytische Chemiker vor Probleme: Die komplexen Matrices dieser Proben und unzählige denkbare Verschmutzungen verlangen nach kreativen Ideen für eine aussagekräftige analytische Erfassung. Vier Vortragende zeigten in anschaulichen Präsentationen ausgeklügelte Ansätze für die Analyse dieser komplexen, anspruchsvollen Proben.

Den Start machte als Keynote-Redner Oliver J. Schmitz von der Universität Duisburg-Essen. In seinem Vortrag beleuchtete er die Kombination von Flüssigchromatographie und Ionenmobilitäts-Massenspektrometrie (LC-IMS-qTOF-MS). Der Arbeitskreis Schmitz bedient sich nicht nur der hohen Trennleistung mehrdimensionaler Techniken wie der kontinuierlichen multi-heartcutting (LC + LC) und der komprehensiven (LCxLC) zweidimensionalen Flüssigchromatographie, sondern auch der Ionenmobilitätsspektrometrie als Extra-Trenndimension (und gleichzeitig als Detektionstechnik). Eine zusätzliche „at-column-dilution“ verbessert zweidimensionale Trennungen, etwa in der LC + LC oder LCxLC, signifikant. Somit wird selbst bei hochkomplexen Proben wie bei Blumenerde eine Basislinientrennung erreicht. Weitere komplexe Proben, zum Beispiel diverse Kräuter der traditionellen chinesischen Medizin, lassen sich damit schnell erfassen und charakterisieren.

Zweite Referentin war Gerta Morlock von der Justus-Liebig-Universität Gießen. Sie zeigte eindrucksvoll das Potential der Planarchromatographie in Kopplung mit diversen Detektionstechniken. Besonders für die wirkungsbezogene Analytik ist dieses Vorgehen vielversprechend. Mit der Hochleistungsdünnschichtchromatographie (HPTLC) lassen sich beispielsweise Estrogen-effektive

Substanzen unterschiedlicher Mengen in 50 deutschen Bieren mit Biosays nachweisen. Doch es gibt augenzwinkernde Entwarnung für alle Bierliebhaber: Wechselt man seine Biere stetig, ist alles im grünen Bereich.

Thomas Gröger vom Helmholtz-Zentrum München (Cooperation Group of Comprehensive Molecular Analytics) zeigte, wie sich verschiedene gaschromatographische- und thermische Probenaufgaben integrativ anwenden lassen, um flüchtige und nicht-flüchtige Bestandteile von Schweröl massenspektrometrisch zu charakterisieren. Da ab 2020 der Schwefelgehalt von Schweröltreibstoff im Schiffsverkehr gesetzlich beschränkt ist, ist es nötig, leistungsstarke und robuste Analysemethoden zu entwickeln. Hierfür wurde ein Ansatz gewählt, der verschiedene thermische Probenaufgaben mit und ohne anschließender gaschromatographischer Trennung an einem TOF-MS integriert. Die flüchtigen Stoffe des Schweröls werden vor der massenspektrometrischen Identifizierung gaschromatographisch getrennt; der schwerflüchtige Teil wird durch Pyrolyse der Rückstände direkt in die Ionenquelle injiziert. Mit statistischen Methoden lassen sich auch charakteristische chemische Muster verschiedener Schweröle erkennen.

Silvia Ballert vom Arbeitskreis um Ingo Schellenberg vom Institute of Bioanalytical Sciences der Hochschule Anhalt präsentierte in ihrem Vortrag die Isolierung antifungaler Substanzen aus Knöterichgewächsen (zum Beispiel Rhabarber oder Ampfer). Aufgrund der Komplexität der Knöterichextrakte verknüpfte sie verschiedene Chromatographieverfahren mit orthogonalem Trennverhalten. Durch Kombination von Speed Centrifugal Partition Chromatography (SCPC), automatisierter Flüssig-Flüssig-Chromatographie und Hochleistungsflüssigchromatographie (HPLC) lassen sich Reinsubstanzen gewinnen, um deren Wirkung in antifungalen Screenings zu testen. Als Schnellmethode zur Festlegung von Fraktionsgrenzen für die zweite Dimension diente die HPTLC. Durch Optimie-

rung von Extraktionsmodi der SCPC lassen sich Substanzen untereinander isolieren, die bei alleiniger Beschränkung auf die HPLC nur schwer oder nicht voneinander trennbar wären.

*Konstantin Wink und Raphael Urban
AK Belder, Uni Leipzig*

Chemo- und Biosensorik

■ Da so viele Beiträge eingereicht worden waren, wurde die Chemo- und Biosensorik auf zwei Sessions verteilt.

In einem Keynote-Vortrag ging Antje Bäumner aus Regensburg auf miniaturisierte Biosensoren ein, die durch ausgewählte Nanomaterialien und einen Elektrochemolumineszenz-Ansatz eine hohe Empfindlichkeit mit sehr niedrigen Nachweisgrenzen erreichen. Ihre Darstellung basierte auf den Erfahrungen ihrer Arbeitsgruppe mit Mikrofluidik, Lab-on-Chip und Lateral-Flow-Assays für die Detektion von lebensfähigen Organismen, Toxinen und klinisch relevanten Markern. Sie gab eine gute Übersicht über das Gebiet und zeigte Möglichkeiten, um Signalverstärkung durch in Liposome eingeschlossene Luminolmarker zu erreichen: Sie weisen durch Elektrochemolumineszenz 150-mal niedrigere Nachweisgrenzen auf als einfache Fluoreszenzsysteme. Dabei diskutierte sie auch die Schwierigkeiten der Diffusionsbegrenzung an heterogenen Assays, die durch magnetische Liposome Signalverstärkung als spezielle Erkennungsstrukturen liefern. Vorgestellt wurden verschiedene Ansätze zu Transducer-Materialien, speziell zu Elektrodenmaterial, bei dem sich durch Laserprozesse Graphenelektroden für elektroanalytische Anwendungen optimieren lassen. Deutlich wurde, dass bei der Sensoroptimierung sowohl großer Wert auf die Charakterisierung des Transducer-Materials als auch auf die Erkennungsstrukturen zu legen ist. Wie der Vortrag außerordentlich gut herausarbeitete, ist es notwendig, Systeme wie Nanopartikel, Nanovesikel, Nanofasern und insgesamt Nanostrukturmaterialien zu optimie-

ren sowie die Wechselwirkungsprozesse zu verstehen, um Sensorsysteme zu verbessern.

Wie bedeutend Nanomaterialien für Biosensoren auf Fluoreszenzbasis sind, machte auch der Vortrag von Sebastian Kruss aus Göttingen deutlich. Er stellte die Fluoreszenz im nahen Infrarotbereich von einwandigen Kohlenstoffnanoröhren für den Nachweis von Bioanalyten vor und wie sich ein solcher Ansatz für ein Sensordesign für kleine Moleküle wie Dopamin oder Serotonin nutzen lässt. So lassen sich biologisch-relevante Moleküle sowohl beim Imaging als auch in der Diagnostik nachweisen.

Auch im dritten Vortrag von Claudia Pacholski aus Potsdam standen Miniaturisierung, Multiplexing und Imaging im Vordergrund. Sie griff die Idee von kleinen Löchern in einem opaken Metallfilm auf, die im Durchmesser kleiner sind als die Wellenlänge des einfallenden Lichts. Angeregte Polaritonen der Oberflächenplasmonen eröffnen neue Möglichkeiten, insbesondere wenn man diese Metallstrukturen mit einer Schicht von Hydrogelen bedeckt. Solche Hybridbiosensoren mit einer Array-ähnlichen Anordnung von Löchern in einem Metallfilm, die mit goldenthaltenden Hydrogelkolloiden beschichtet sind, zeigen wirkungsbezogene Effekte. Dabei gehen sowohl Änderungen des Brechungsindex als auch das Quellen der Hydrogelschichten ein und reagieren außerordentlich empfindlich auf Umwelteinflüsse.

Benedikt Heller von der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) stellte eine Möglichkeit vor, Cyanid mit hoher Selektivität und niedriger Nachweisgrenze nachzuweisen. Dies geschieht durch eine „Turn-on-Fluoreszenz“: Durch eine chemische Reaktion des Indikatorfarbstoffes mit dem Cyanid wird die Fluoreszenz „eingeschaltet“.

Ein Vortrag von Lukas Zeininger aus dem Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung in Potsdam, der über seine Arbeiten am Massachusetts Institute of Technology in Cambridge, USA, berichtete, schloss die Sitzung ab. Multiphasen komplexer Emulsionen mit Janus-Charakter bilden als neue Materialien eine ein-

zigartige Plattform für chemische Sensoren. Kontrollierte Mischbarkeit von Fluorkohlenwasserstoffen und Kohlenwasserstoffen ermöglicht durch laserinduzierte Phasentrennung strukturierte Emulsionstropfen. Durch externe Stimulierung können sie selektiv ihre Morphologie verändern, beispielsweise durch pH-Änderungen, sichtbares Licht, Elektro- oder Magnetfelder. Sie beeinflussen, wie sich die Strahlen innerhalb des Tropfens ausbreiten; diese Änderung erlaubt einen schnellen und empfindlichen Nachweis verschiedener chemischer und biologischer Analyte. Der Vortrag zeigte das anhand der Problematik, Salmonellen als Verursacher von Lebensmittelvergiftungen nachzuweisen.

Insgesamt stellte diese erste Session neue Nachweismethoden vor und zeigte, wie stark ein Verständnis der Wechselwirkung, der Erkennungsstrukturen und der Nachweisprinzipien die Sensorentwicklung beeinflussen können.

Die zweite Session umfasste drei Vorträge. Im ersten Vortrag stellte Siegfried Hohmann aus Eggenstein-Leopoldshafen einen Biosensor auf Basis von Quarzkristall-Mikrowaagen vor. Durch das neue Design des Systems, welches mit 3D-Druck in einen Prototyp umgesetzt wurde, ist es möglich, parallel zu messen. 3D-gedruckte Ventile steuern den Probenfluss zu unterschiedlich modifizierten Sensoren, deren Signale sich so kombinieren lassen, dass die Identifizierung besser und das Analytspektrum mit einer Messung umfassender wird. Regulierung und Kontrolle der Temperatur stellten auch in Langzeitmessungen eine hohe Präzision sicher.

Dass sich Proteinreaktionen mit einem Quantenkaskadenlaser unter Nutzung von zwei Frequenzkämmen charakterisieren lassen, stellte Florian Eigenmann von der Firma IRSweep aus Stäfa, Schweiz, vor. Das von ihm vorgestellte Gerät zeichnet im Sub-Mikrosekundenbereich Spektren im mittleren Infrarotbereich auf. Durch diese hohe Zeitauflösung gelang es, die Kinetik der Lichtaktivierung des Proteins Bacteriorhodopsin zu messen. Durch Auswertung der Messdaten aus diesem Dual-Kamm-Ansatz ließen

sich parallel mehrere Wellenlängen analysieren.

Im finalen Vortrag der Chemo- und Biosensorikssessions präsentierte Axel Dürkop aus Regensburg Anwendungen von Dipstick-Teststreifen durch Implementierung neuer Materialien und Strategien. Durch Elektrosponnen aufgebraute Nanofasern verbessern den Nachweis biogener Amine in Lebensmitteln. Durch Einbettung lumineszenter Farbstoffe wurde ein Sensor entwickelt, der sich auf verschiedene Weisen auswerten ließ (Farbumschlag, Fluoreszenz oder Reflexion). Sind Enzyme auf den Dipsticks immobilisiert, kann ein hoch selektiver Sensor entstehen. Mit einer Dehalogenase ließ sich der Sensor zur Detektion von Senfgas nutzen. Ein weiteres Beispiel in dem breiten Anwendungsfeld war der Nachweis von Kupferionen in Wasser mittels eines Cuprizon-Komplexes.

Die regen Diskussionen der Beiträge zeigten, wie bedeutend und komplex die Verfahren und Methoden sind und dass diese Techniken noch ein wesentlich höheres Potential haben.

*Torsten Vielhaber, Universität Münster
Günter Gauglitz, Universität Tübingen*

Chemometrie und Datenauswertung/ Prozessanalytik

■ Ulrich Panne machte klar, welche Herausforderungen die Digitalisierung an die analytische Chemie stellt und welche neuen Anforderungen sich daraus ergeben. Insbesondere gilt dies für Unternehmen der Prozessindustrie, die neue Pfade beschreiten müssen, um in einem veränderten Industrie-4.0-Umfeld erfolgreich zu bestehen. Die Session „Prozessanalytik“ am Mittwoch griff mit vier Vorträgen dieses wichtige Thema auf.

So zeichnete Michael Maiwald im gut besuchten Keynote-Vortrag den Zuhörern eine Landkarte zur „Digitalisierung der Prozessindustrie“. Intensivierte, kontinuierliche Produktionsan-

lagen werden künftig auch den Umgang mit schwierig zu handhabenden Substanzen erlauben. Mit flexiblen, modularen chemischen Vielzweck-Produktionsanlagen werden sich häufig wechselnde Produkte mit kürzeren Vorlauf- und Stillstandzeiten zwischen den Kampagnen und dennoch hoher Qualität realisieren lassen.

Aufgabe der analytischen Chemie ist eine kostengünstige Qualitätssicherung und optimale Prozesssteuerung. Monika Wortberg vertiefte die Diskussion mit ihrem Beitrag zur Online-Abwasserüberwachung am BASF-Standort Ludwigshafen als Beispiel für Analytik 4.0. Nicht Menschen untersuchen hier mit Hilfe von Geräten Proben, sondern die Geräte arbeiten selbstständig. Nach automatischer Chromatogrammauswertung werden die quantitativen Ergebnisse an das Prozessleitsystem der Umweltzentrale übertragen und dort alle Maßnahmen zur Emissionsvermeidung ergriffen. Insgesamt werden so jährlich ca. zehn Millionen quantitative Analysenergebnisse generiert – ein Vielfaches von dem, was konventionell mit derselben Anzahl Mitarbeiter möglich wäre.

Die Session ging auch auf neue Entwicklungen bei Sensoren und Analysatoren ein. Bei aller Digitalisierung darf das richtige Messen nicht vergessen werden. Um die kurzen Rüstzeiten einer immer größeren Zahl an zu erwartenden Sensoren zu unterstützen, sind direkte Messverfahren (auf Grundlage physikalischer Zusammenhänge) besonders interessant. Anne Hartwig von der Universität Potsdam stellte eine Prozessüberwachung und Partikelgrößenbestimmung mit Photonendichtewellenspektroskopie in der Lebensmittelindustrie vor. Basierend auf der Mie-Theorie und der Theorie der abhängigen Lichtstreuung lässt sich mit diesem direkten Verfahren ein mittlerer Partikeldurchmesser über einen großen Arbeitsbereich online bestimmen. Lukas Wander von der BAM in Berlin stellte eine Online-Referenzanalytik mit Niederfeld-NMR-Spektroskopie vor, am Beispiel einer industriellen Pilotanlage im Rahmen des EU-Projekts CONSENS. Untersuchungsgegenstand war die kontinuierliche Synthese

eines Ausgangsstoffs für die pharmazeutische Industrie mit schwierig zu handhabenden und zu analysierenden metallorganischen Verbindungen. Die NMR-Spektroskopie bietet den Vorteil der hohen Linearität – und damit äußerst kurze Kalibrier- und Rüstzeiten; so ließ sich diese intermediär auftretende Spezies erstmal quantitativ bestimmen und die Daten nutzen, um ein konventionelles NIR-Spektrometer zu kalibrieren.

Die Session „Chemometrie und Datenauswertung“ am Donnerstag war mit drei Vorträgen zu diesem äußerst wichtigen Thema zwar sehr kurz, jedoch ein fachliches Highlight. Alle drei Vorträge beschäftigten sich mit der Bioinformatik.

Der erste Vortrag von Yasin El Abiead von der TU Wien stellte Softwarelösungen für die Untargeted Metabolomics (UM) vor, die in den letzten Jahren stark erweitert wurden. Die Leistungsfähigkeit der Softwarelösung hängt dabei stark von der Qualität der Dateninterpretation der zugrundeliegenden analytischen Methoden ab. Dies wurde an konkreten Beispielen erläutert.

Für Robin Schmid und Ansgar Korf von der Universität Münster war die ANAKON ein Heimspiel.

Robin Schmid zeigte in seinem Vortrag anhand von Datenanalyse-Workflows, wie sich die ungeheure Datenmenge zugrundeliegender Rohdaten aus Hochleistungs-Flüssigchromatographie (HPLC) und hochauflösender Massenspektrometrie (HRMS) anhand von Deskriptoren für vergleichbare Analyten bündeln und reduzieren lässt. So lassen sich korrelierte Signale auch für verschiedene Isotopologe, Addukte, Cluster oder Ladungszustände automatisch erkennen. Er zeigte eindrucksvoll, wie er die Lipididentifizierung auf Doppelbindungslevel auf Basis von Flüssigchromatographie (LC) und hochauflösender Massenspektrometrie (HRMS) mit einem selbst entwickelten Auswertungstools auf Basis der Software MZmine 2 innerhalb sehr kurzer Analysezeiten realisierte.

Michael Maiwald
BAM

Elektroanalytik

■ Eine der vier Vormittagssessions des dritten Kongresstags war den elektrochemischen Analysenverfahren gewidmet.

Im Eröffnungsbeitrag „Generation of forced convection in the context of scanning electrochemical microscopy“ gab Timo Raith, Regensburg, einen Überblick über Entwicklungen in der elektrochemischen Rastermikroskopie (SECM). Besondere Beachtung fanden methodische Entwicklungen, die mit der Einkopplung von Konvektion in die SECM-Messzelle verbunden sind. SECM-Untersuchungen mit forcierter Konvektion greifen auf die lange Tradition der hydrodynamischen Elektroanalytik zurück und eröffnen neue Messmöglichkeiten, vor allem im Generator-Kollektor-Modus. Diese Technik macht es möglich, auch großflächige elektrochemische Untersuchungsobjekte unter konstanten Diffusionsschichtdicken zu charakterisieren.

Die drei nachfolgenden Beiträge widmeten sich dem Themenkomplex „Kopplung von Elektrochemie-Massenspektrometrie (EC-MS)“. Jens Fangmeyer aus Münster sprach über „Trapped ion mobility spectrometry (TIMS) as a valuable separation tool for electrochemically generated metabolite isomers“. Er zeigte die neuen Möglichkeiten, die TIMS-Messungen für die Untersuchung elektrochemisch generierter Metabolite mit kurzer Lebensdauer eröffnen. Die methodischen Aspekte diskutierte er am Beispiel der Modellverbindung Metoprolol und verglich sie mit konventionellen HPLC-basierten Experimenten.

Thomas Herl aus Regensburg stellte elektrochemische Fließzellkonfigurationen und Elektrochemie-Kapillarelektrophorese-Massenspektrometrie-Systeme mit Implementierung von Siebdruckelektroden vor. An Beispielen der elektrochemischen Oxidation von Thymin und Cytosin zeigte er, dass sich die Kapillarelektrophorese zur Trennung von ionischen Produktspezies anbietet.

Abgerundet wurde die EC-MS-Kopplung durch Lisa Kotthoff aus



Posterpräsentation (Foto: T. Raith)

Berlin; sie untersuchte mit der EC-MS die Bildung von Transformationsprodukten der veterinärmedizinisch häufig eingesetzten Substanz Monensin. Das elektrochemisch generierte Produktspektrum charakterisierte sie mit LC-HRMS und verglich es mit Ergebnissen von anderen Transformationsprotokollen auf Basis der Fenton-Reaktion und photochemischen Reaktionen.

Den abschließenden Vortrag „Polydopamine (PDA)-modified microelectrodes for bio-relevant applications“ hielt Sven Daboss aus Ulm; er schloss damit den von Timo Raith im Keynote-Vortrag eröffneten Kreis der orts aufgelösten Elektrochemie mit miniaturisierten Sensoren. Die PDA-modifizierten Elektroden wurden zur Detektion von ATP in der Umgebung lebender Zellen eingesetzt. Die miniaturisierten amperometrischen Biosensoren bieten sich als Sonden für kombinierte AFM-SECM-Messungen an.

Die Elektroanalytiksession fand großen Zuspruch und zog phasenweise über 80 Teilnehmer in den Hörsaal. Die elektroanalytischen Vorträge wurden durch Posterpräsentationen vertieft und erweitert. Erfreulicherweise sah das Programm genügend Zeit für Posterdiskussionen vor, auch wurden die Poster während der gesamten Tagungsdauer präsentiert.

Frank-Michael Matysik
Universität Regensburg

Materialanalytik I

■ Die Session umfasste fünf Vorträge, die ein breites Spektrum aktueller Fragestellungen zur Charakterisierung von Materialien abdeckten. Sie beleuchteten das Degradationsverhalten von Kunststoffen, die Analyse von Bindungsverhältnissen im Festkörper, die Bestimmung von Ätzraten in optischen Halbleitern sowie im Keynote-Vortrag die Analytik von Ober- und Grenzflächen. Die Session zeigte, wie umfangreich das Methodenportfolio in der Materialanalytik inzwischen ist: Die untersuchten Werkstoffe reichten von Polymeren über Halbleiter bis hin zu Metallen und Keramik, auch war das elektromagnetische Spektrum durch die dabei verwendeten Geräte beinahe vollständig abgedeckt.

Birgit Hagenhoff von Tascon in Münster stellte in ihrem Keynote-Vortrag den Stand der Technik und die neuesten Trends bei der Oberflächen- und Grenzflächenanalytik vor. Insbesondere bei der Masseauflösung bei ToF-SIMS-Verfahren gibt es durch den Einsatz hochauflösender Massenspektrometer interessante Entwicklungen. Dasselbe gilt für elastische Rückstreuungsexperimente an Oberflächen (LEIS), die umfangreiche Einblicke in die chemische Zusammensetzung von Festkörperoberflächen erlauben.

Wellenlängendispersive Methoden für die Analytik von Röntgenstrahlung gelten als außerordentlich zeitaufwendig, da das zu erfassende Spektrum abzurastern ist. Jedoch liefert die Analyse der Absorptionskante des Röntgenspektrums Einblicke in die Elektronenhülle der Elemente und damit direkt Aussagen zu deren Bindungszuständen. Anicó Kulow von der Bundesanstalt für Materialforschung stellte in ihrem Vortrag eine Methode vor, die mit einem gebogenen Silicium-Einkristall polydispersive Röntgenspektroskopie ermöglicht. So erreicht sie Messzeiten von etwa einer Sekunde für ein Spektrum und macht kinetische Messungen mit der Röntgenspektroskopie zugänglich.

Die Degradation von Kunststoffen stellt nicht nur ein Problem in den Ökosystemen dar, wo sie oft zu schwach ausgeprägt ist. Bei den bil-

denden Künsten kann sie in einem unerwünschten Ausmaß auftreten und so den Erhalt von Kulturgütern erschweren. Lukas Brunnbauer von der TU Wien stellte vor, wie sich mit LIBS und einer anschließenden Hauptkomponentenanalyse (PCA) erste Einsichten in diese Vorgänge gewinnen lassen und wie das gegebenenfalls dabei helfen kann, Kunstobjekte zu bewahren.

In einem weiteren Beitrag aus der Bundesanstalt für Materialforschung stellte Philipp Scholz das Abbauverhalten von Polyurethanen unter unterschiedlichen Umgebungsbedingungen (Atmosphäre, Temperatur, Bestrahlung, etc.) vor. Mit Größenausschlusschromatographie wies er Einflüsse auf die Quervernetzung und die Molekülmasse der Polymere nach. Er stellte fest, dass sich Luftsauerstoff auf die Polymere deutlich weniger auswirkt als beispielsweise UV-Strahlung.

Markus Tautz, Doktorand bei Osram Opto Semiconductors, präsentierte im abschließenden Vortrag der Session, wie er mit ICP-OES das komplexe Ätzverhalten von Galliumnitrid analysiert und kontrolliert. Dieser für die Optoelektronikfertigung essenzielle Vorgang war bisher nur unzureichend beschrieben und ist für die Produktion von elektrolumineszenten Halbleitern wesentlich.

Jörg Meyer
Hochschule Hamm-Lippstadt

Nanoanalytik II

■ Diese Nanoanalytik-Session moderierte Kerstin Leopold. Die Vortragsreihe war sehr gut besucht und stellte sowohl neue Methoden zur Analyse von Nanomaterialien vor als auch die Nutzung von Nanomaterialien in der Analytik. Keynote-Sprecher war Carsten Engelhard von der Universität Siegen. In seinem Vortrag „New Tools for Chemical Measurement and Characterization of Nanoparticles“ gab er eine kurze Einführung zur Messung von Nanopartikeln mit ICP-MS im single-particle mode (spICP-MS). Eine Verkürzung der Messzeit von Milli- auf Mikrosekunden verbessert die größenbezogene Nachweisgrenze und sorgt

dafür, dass sich kleinere Nanopartikel besser von der ionischen Form unterscheiden lassen. Eine Kopplung der spICP-MS an Trenntechniken wie der Kapillarelektrophorese steigert die Leistungsfähigkeit der Methode weiter.

Im Folgenden stellte Joshua Fuchs von der Universität Münster den Einfluss der Nanopartikelgröße auf die im Plasma entstehende Ionenwolke bei der spICP-MS vor. Die Arbeiten dazu verbessern das Verständnis der Prozesse bei der spICP-MS und helfen dabei, die Methodenparameter zur Bestimmung der Nanopartikelanzahl und -größe zu optimieren.

Im Anschluss berichtete Hans-Heiner Gorris von der Universität Regensburg über die analytische Nutzung von „Upconversion nanoparticles (UCNPs)“ in Immunoassays. UCNPs lassen sich als lumineszierende Marker in Einzelmolekül-Immunoassays einsetzen und bieten den Vorteil, dass keine Autofluoreszenz auftritt. Die neu entwickelten upconversion-linked immunoassays (ULISAs) sind mit einer Nachweisgrenze von 0,02 pg/mL empfindlicher als die kommerziell erhältlichen ELISAs und scheinen somit eine vielversprechende Alternative zur Detektion von Krebsmarkern.

Im vierten Vortrag dieser Session berichtete Georg Ramer von der TU Wien über den Einsatz von gepulsten Lasern und modifizierten Rasterkraftmikroskop(AFM)-Spitzen, um die Struktur von Proteinen aufzuklären. Es ist möglich, die Sekundärstruktur von Proteinen mit Totalreflexion-IR-Nanoskopie in Wasser zu analysieren, da die Amid-I-Bande, die zur Auswertung herangezogen wird, nur schwach mit der Wasserbande interferiert. Auch das Signal-zu-Rausch-Verhältnis ist in Wasser vergleichbar mit dem in Luft.

Im letzten Vortrag der Session berichtete Jan-Fedja Wendisch von der Universität Salzburg über Möglichkeiten, mit elektrochemischen Verfahren Metallringe auf stäbchenförmigen Silika-Nanostrukturen abzuscheiden. Dabei lassen sich auf einem Silikastäbchen mehrere Ringe mit einem Abstand von wenigen Nanometern produzieren. Diese nanostrukturierten Substrate lassen

sich unter anderem in der oberflächenverstärkten Raman-Spektroskopie verwenden.

Wir möchten an dieser Stelle nochmals den Organisatoren der ANAKON für die gelungene Auswahl an Themen und Vorträgen in dieser Reihe danken.

*Vivian Stock, Andreas Gruber,
Anja Brandt
Universität Ulm*

Umweltanalytik

■ Im Slot zur Wasser- und Umweltanalytik am Dienstagvormittag gab es fünf Beiträge.

In der Keynote Lecture berichtete Thorsten Reemtsma vom UFZ Leipzig über neue Entwicklungen in der überkritischen Fluidchromatographie (SFC) und deren Anwendungen für die Analytik hochpolarer Stoffe in Wasser. Diese Stoffe werden aufgrund ihrer geringen Retention mit den üblichen Verfahren der Umkehrphasen-LC kaum erfasst. Hier sind die anderen Retentionsmechanismen in der SFC, die immer noch nicht völlig verstanden sind, eine sehr interessante Ergänzung, zumal die instrumentellen Systeme mittlerweile sehr robust geworden sind.

Es folgte ein Beitrag von Christian Piechotta von der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) über das Auswaschen von bromierten Flammenschutzmitteln (BFS) aus Polymeren in verschiedenen Alterungsszenarien. Die Materialien wurden vor allem über Laserablations-ICP-MS und Röntgenfluoreszenzanalyse anhand des Br-Gehalts charakterisiert; in Boden und Wasser wurden die Flammenschutzmittel BDE209 und HBCD mit GC- bzw. LC-MS erfasst. Verwitterungsexperimente fanden in Klimakammern, im Freiland und im sogenannten Schwammkeller an der BAM statt. Im Laufe der zum Teil mehrwöchigen Experimente zeigten mehrere Methoden eine Verarmung der Polymere an BFS, summarisch und in Tiefenprofilen.

Jochen Türk vom Institut für Energie- und Umwelttechnik in Duisburg zeigte am Beispiel der Kläranlage Warburg umfassende analytische Untersu-

chungen bei der Einführung der erweiterten Abwasserbehandlung mit Ozon und nachfolgender biologischer Behandlung in einem Wirbelbettreaktor. Dabei wurden Bildung und nachfolgender Abbau von Transformationsprodukten mit LC-HRMS untersucht, Veränderungen der hormonellen Aktivität in den Proben mit hefezellenbasierten toxischologischen Tests überprüft und die Nutzung des Summenparameters „Assimilierbarer organischer Kohlenstoff“ (AOC) im Abwasser beschrieben. Der AOC wurde bisher vor allem bei Trinkwasser eingesetzt, hat aber auch für Abwasseruntersuchungen viel Potenzial.

Eine weitere Möglichkeit, um hochpolare Stoffe zu untersuchen, neben der SFC, präsentierte Oliver Happel vom Technologiezentrum Wasser in Karlsruhe in seinem Beitrag zur Bestimmung von Phosphonaten mittels Kopplung von Ionenchromatographie mit Massenspektrometrie. Obwohl diese Verbindungsklasse mengenmäßig stark eingesetzt wird, liegen bisher nur relativ wenige Daten zu ihren Umweltkonzentrationen vor, da die Analytik sehr aufwendig und mit klassischer RP-LC-MS nicht sehr erfolgreich ist. Mit dem neuen Verfahren ließen sich Konzentrationen in Kläranlagenablauf, Oberflächenwasser und Sedimenten bestimmen. Es zeigte sich, dass ein großer Teil der Phosphonate an Schwebstoffe und Sediment gebunden vorliegt und die Konzentrationen frei gelöster Verbindungen im unteren µg/L-Bereich liegen.

Im abschließenden Vortrag zeigte Sebastian Böttger von der TU Clausthal neue Wege, um Luftproben in Museen und Archiven auf Quecksilber zu untersuchen; das geschieht durch Amalgamierung mit Silbernano-partikeln und Totalreflektions-Röntgenfluoreszenzanalyse (TRFA). Quecksilberchlorid wurde früher zur Konservierung von Artefakten eingesetzt und wird mit der Zeit teilweise zu Hg(0) reduziert. Um Mitarbeiter vor der Exposition mit giftigem Hg(0) zu schützen, bedarf es einer empfindlichen und schnellen Methode zur Vorortanalytik; das soll mit das neue Verfahren erreichen.

*Torsten C. Schmidt
Universität Duisburg-Essen*

Tagungen

52. DGMS-Jahrestagung & DPG-Frühjahrstagung

10. bis 13. März 2019 in Rostock

■ Die Deutsche Gesellschaft für Massenspektrometrie (DGMS) pflegt – der physikalischen Natur der Massenspektrometrie entsprechend – eine gute Beziehung zur Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG), was unter anderem darin zum Ausdruck kommt, dass die DGMS einen Vertreter der DPG in ihrem erweiterten Vorstand hat. Daher lag es nahe, auch einmal eine DGMS-Jahrestagung zusammen mit einer DPG-Frühjahrstagung zu veranstalten.

So tagten vom 10. bis 13. März die Teilnehmer der DPG-Frühjahrstagung der Sektion Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen (SAMOP) gemeinsam mit der DGMS an der Universität Rostock. Im neuen Auditorium Maximum wurden alle Hauptvorträge gemeinschaftlich veranstaltet, während thematisch speziellere Sessions getrennt stattfanden. In die Ostsee-Hansestadt waren seitens der DGMS rund 350 Teilnehmer mit über 60 Vorträgen und fast 130 Postern angereist. Dazu stellten 19 Hersteller von Massenspektrometern, Zubehör und Software an ihren Ständen und in acht Firmensessions ihre Entwicklungen vor.

Eröffnet wurde die Tagung von DGMS-Vorsitzender Andrea Sinz von



Vicki Wysocki von der Ohio State University in Columbus, USA, beim Wolfgang-Paul-Vortrag

der Universität Halle-Wittenberg, von Michael Block, Helmholtz-Institut Mainz, Sprecher der Sektion Massenspektrometrie der DPG, und durch die lokalen Organisatoren der DGMS, Michael Glocker und Ralf Zimmermann (beide Universität Rostock). Die Veranstaltung bildete auch den Auftakt zum 600-jährigen Jubiläum der Universität Rostock, was Rektor Wolfgang Schareck zum Anlass nahm, die Geschichte seiner traditionsreichen Universität vorzustellen.

Wolfgang-Paul-Vortrag

■ Zur Tagungseröffnung erinnert die DGMS seit 1997 an Nobelpreis-Träger Wolfgang Paul, den Entwickler von linearen Quadrupol-Analysatoren und Quadrupol-Ionenfallen. Die Ehre, den Wolfgang-Paul-Vortrag 2019 zu halten, wurde Vicki Wysocki von der Ohio State University, Columbus, zuteil. Sie beschrieb in ihrem Vortrag „Native MS: A Structural Biology Tool“, wie man mit Surface-Induced Dissociation (SID) mehr Strukturinformation aus Protein-Ionen erhält, als das mit den verbreiteten Methoden CID, ECD und ETD gelingt. Das liegt laut Wysocki daran, dass Stöße mit einer Oberfläche weit mehr Ener-

gie auf die schweren Protein-Ionen übertragen als Stöße mit Gasatomen. Wysocki untersucht mit SID beispielsweise die Bindung von RNA an Proteine sowie Homo- und Heterodimere von Proteinen. Im Anschluss überreichte die DGMS-Vorsitzende Andrea Sinz Vicki Wysocki die Urkunde für den Wolfgang-Paul-Vortrag.

Tagungsort(e)

■ Die Plenarvorträge wurden im modernen Auditorium Maximum auf dem Campus Ulmenstraße gehalten, welches eine Seite einer Grünfläche, umgeben von altherwürdigen Backsteinbauten, abschließt. Auf diese Backsteingebäude verteilt fanden die thematischen Sessions statt. Die Kapazitäten der Hörsäle hielten manchmal leider nicht mit dem Andrang der Teilnehmer mit. Die Kooperation mit der zahlenmäßig mehrfach größeren DPG erforderte es außerdem, die Stände der ausstellenden Firmen und die Poster in einem großen Festzelt auf einer Wiese des Campus unterzubringen. Damit konnte die DGMS-Tagung anders als die Veranstaltungen der DPG auf einem Campusbereich abgehalten werden, was Busfahrten zwischen den Sessions ersparte.

Nach dem Tagungsaufakt lud die Stadt Rostock am Sonntagabend zum



Auf dem Campus Ulmenstraße in Rostock steht das neue Hörsaalgebäude zwischen hanseatischen Backsteinbauten.

Anmerkung des Herausgebers:

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



Sein Thema sind Energiespeicher und erneuerbare Energien: Ferdi Schüth vom MPI für Kohlenforschung in Mülheim/Ruhr.



Ulrich Boesl von der TU München forscht an Zirkulardichroismus und der Unterscheidung von Enantiomeren mit Laserionisation durch polarisiertes Licht.

Empfang ins historische Rathaus. Danach konnte man noch an einer spätabendlichen Führung durch die Marienkirche teilnehmen. Für das Konferenzdinner am Dienstagabend war die zum Veranstaltungsort umgewandelte Nikolaikirche gewählt worden. Wer mochte, konnte noch an einer Führung auf den Turm der Petrikirche am Alten Markt teilnehmen und Rostocks nächtliche Altstadt von oben bewundern. Während des Konferenzdinner wurden der Mattauch-Herzog-Förderpreis und die Wolfgang-Paul-Preise verliehen. Die Vorträge der Preisträger folgten am Mittwochvormittag in einer eigenen Session.

Workshops

■ Kompakte Workshops am Sonntagnachmittag unmittelbar vor der DGMS-Tagung haben sich gut etabliert, und so wurden auch in Rostock vier Workshops angeboten. Die Ausrichter waren die Fachgruppe (FG) LC-MS (Marcel Kwiatkowski, Universität Groningen, NL) zu "Two dimensional liquid chromatography in LC-MS applications", die FG Core-facilities (Sabine Metzger, Universität Köln), die sich den besonderen Belangen von Service-Laboren widmet, die FG Lipidomics (Robert Ahrends, ISAS Dortmund) und die Steinbeis-Gruppe Affinitätsmassenspektrometrie (Michael Przybylski, Steinbeis-Zentrum Rüsselsheim, und Michael Glocker, Universität Rostock).

Plenarvorträge

■ Zusätzlich zum Wolfgang-Paul-Vortrag fanden acht Plenarvorträge statt, von denen ein Teil die DPG, ein anderer die DGMS auswählte. In der Reihenfolge der Tagung waren die Hauptvortragenden:

- Christine Silberhorn (Uni Paderborn): „Quantum optics and information science in multi-dimensional photonics networks“
- Anton Wallner (Australian National University, Canberra): „Interstellar radionuclides identified in deep-sea archives“
- Joseph A. Loo (University of California at Los Angeles, UCLA): „Application of Mass Spectrometry for Detecting and Finding Cures to Brain Disorders“
- Klaus D. A. Wendt (Universität Mainz): „Exploring Exotic El-

ements – all about Astatine and Actinides as accessible from Laser Mass Spectrometry“

- Angel Rubio (MPSD Hamburg): „Light and cavity induced new states of matter: Quantum Electrodynamical Density Functional Theory (QEDFT)“
- Ulrich Boesl (TU München): „Circular Dichroism and Mass Spectrometry: An Unusual Liaison“
- Silke Merchel (Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf): „Chemistry first, Accelerator Mass Spectrometry (AMS) second“
- William D. Phillips (NIST): „The future of time: prospects for a redefinition of the SI second“
- Ferdi Schüth (Max-Planck-Institut für Kohlenforschung): „Chemical Energy Storage: a Key Element for a Sustainable Energy Future“

Mattauch-Herzog-Förderpreis

■ Den Mattauch-Herzog-Förderpreis vergibt die DGMS an Wissenschaftler unter 40 Jahren, die mit eigenen Arbeiten signifikante Beiträge zur Entwicklung der Massenspektrometrie leisten. Der Preis ist von Thermo Fisher Scientific mit 12.500 Euro dotiert. Preisträger 2019 ist Jürgen Hartler von der TU Graz in Österreich. Michael Linscheid von der Humboldt-Universität Berlin würdigte als Jury-Vorsitzender den Preisträger. Hartler, der derzeit einen Forschungsaufenthalt in San Diego absolviert, erhielt den Preis für seine in der Bioinforma-



Verleihung des Mattauch-Herzog-Preises in der Nikolaikirche. Von links: Thomas Möhring (Thermo Fisher Scientific), DGMS-Vorsitzende Andrea Sinz (Universität Halle-Wittenberg), Preisträger Jürgen Hartler (TU Graz, A) und Jury-Vorsitzender Michel Linscheid (HU Berlin)



Verleihung des Preises für Massenspektrometrie in den Biowissenschaften. Von links: DGMS-Vorsitzende Andrea Sinz (Universität Halle-Wittenberg), Preisträger Bernhard Küster (TUM), Jury-Vorsitzende Kathrin Breuker (Universität Innsbruck, A) und Michael Desor (Waters Eschborn)

tik angesiedelte Arbeit, die er in seinem Vortrag „High-Throughput Identification of Lipids in Biological Material Using Software-Aided Analysis of LC-MS/MS Data“ vorstellte. Schwerpunkt der Softwareentwicklung sind die Dekonvolution von überlappenden Peaks in der LC-MS und die eindeutige Zuordnung von Doppelbindungspositionen aller Fettsäuren in Tandem-Massenspektren von Lipiden. Die Software berücksichtigt dafür auch die deutlich geräteabhängigen Fragmentierungen der Lipide und erreicht somit plattformübergreifend eine hohe Zuverlässigkeit.

Preis für Massenspektrometrie in den Biowissenschaften

■ Bernhard Küster von der TU München wurde mit dem „Preis für Massenspektrometrie in den Biowissenschaften“ ausgezeichnet, den die DGMS mit 5000 Euro dotiert, von denen Waters 3000 Euro beiträgt. Es handelt sich um einen Vorschlagspreis. Die Jury-Vorsitzende Kathrin Breuker (Universität Innsbruck, A) wies bei der Preisverleihung darauf hin, dass alle DGMS-Mitglieder vorschlagsberechtigt sind und man sich über fundierte Vorschläge freue. Bernhard Küster, eigens für die Preisverleihung von seinem Sabbatical in Kalifornien angereist, arbeitet an der vollumfänglichen Charakterisierung des menschlichen Proteoms. Sein Ansatz basiert auf der Auswertung der Tandem-Massenspektren von inzwischen 1,3 Millionen synthetischen Pep-

tiden. Dabei kommt der Bioinformatik eine große Bedeutung zu. Man weiß heute, dass die meisten Proteine überall im Körper vorkommen, doch abhängig von Ort und aktueller Funktion der Zelle in enorm unterschiedlichen Konzentrationen. Kleine Unterschiede, aber auch Marker zu erkennen, sei immens wichtig, um beispielsweise die Wirkung zwischen Kinase-Inhibitoren und ihren Targetproteinen zu verstehen; das entscheide bei bestimmten Medikationen über das Auftreten oder Ausbleiben tödlicher Nebenwirkungen.

Wolfgang-Paul-Preise

■ In diesem Jahr gingen die Wolfgang-Paul-Preise für Dissertationen an Mario Kompauer (Promotion bei Bernhard Spengler, Universität Gie-

ßen) für seine Arbeit „Development of autofocusing and subcellularly resolving mass spectrometry imaging and its application to biological questions“ und an Florian Meier (Promotion bei Matthias Mann, LMU München und MPI Martinsried) zu „Data Acquisition Methods for Next-Generation Mass Spectrometry-Based Proteomics.“ Den Masterpreis erhielt Maike Lettow (FU Berlin, Masterarbeit bei Kevin Pagel) für ihre Arbeit „Investigation of the Gas-Phase Structures of Fucosylated Glycans Employing Cold-Ion Infrared Spectroscopy.“ Mario Kompauer arbeitete an der Verbesserung der Ortsauflösung von MALDI-Imaging, die nun dank xyzbeweglicher Probenbühne mit optimalem Laserfokus unter einem Mikrometer beträgt. Florian Meier trug maßgeblich zur Entwicklung von PASEF bei, was letztlich die Empfindlichkeit kommerzieller Ionenmobilitäts-Q-TOF-Geräte steigert.

Die Wolfgang-Paul-Preise werden für Dissertationen und Masterarbeiten vergeben, die einen deutlichen Beitrag zur Entwicklung der MS leisten. Dafür stiftet Bruker Daltonik jährlich 12.500 Euro Preisgeld, das zu je 5000 Euro für die Promotionen und 2500 Euro für die Masterarbeit aufgeteilt wird. Den Preisträgern gratulierten Jochen Boosfeld (Bruker Daltonik, Bremen) und der Jury-Vorsitzende Michael Mormann (Universität Münster). Die beiden Promotionspreisträger stellten ihre Arbeiten in einer Ses-



Verleihung der Wolfgang-Paul-Preise in der Nikolaikirche: Andrea Sinz, Maike Lettow, Mario Kompauer, Florian Meier, Michael Mormann und Jochen Boosfeld (v.l.)

sion am Mittwochvormittag in Kurzvorträgen vor, die Masterarbeit wurde auf einem Poster präsentiert.

Agilent Research Summer

■ Zum letzten Mal verliehen wurde dieses Jahr der Agilent Research Summer, der es Doktoranden während eines rund zweimonatigen Aufenthalts in den Applikationslaboren in Waldbronn ermöglicht, Massenspektrometer zu nutzen, zu denen sie am eigenen Institut keinen Zugang haben. Den Preis 2019 stellte Christoph Müller von Agilent Waldbronn vor und verlieh ihn an André Knoop (Gruppe von Mario Thevis, Deutsche Sporthochschule Köln). Knoop hat nun im Sommer die Möglichkeit, ICP-MS von Agilent für die Kobaltanalytik bei Sportlern zu nutzen. Ziel dieser Arbeit ist, nicht nur die Menge an Kobalt zu bestimmen, sondern möglichst auch zu unterscheiden zwischen Kobalt aus Vitamin-B₁₂ (für Sportler legal) und als CoCl₂ zugeführtem Kobalt. Letzteres wird gegen Blutarmut verabreicht und gilt als Doping. Künftig wird Agilent sein Engagement auf die neu gegründete DGMS-Fachgruppe Young Scientists verlagern und deren besten Doktorandenvortrag mit 500 Euro Preisgeld unterstützen.

53. DGMS-Jahrestagung 2020

■ Die 53. DGMS-Jahrestagung wird vom 1. bis 4. März 2020 im westfälischen Münster stattfinden, gemeinsam mit dem ICP-MS-Anwendertreffen der DGMS-Fachgruppe Element-MS. Damit sollen die unterschiedlichen Interessensgebiete innerhalb der MS wieder näher zusammenrücken. Als lokale Organisatoren haben sich Heiko Hayen, Martin Vogel und Uwe Karst (alle Universität Münster) bereitgefunden. Uwe Karst lud zur 53. DGMS-Tagung 2020 in die Heimat von Professor Boerne und Kommissar Thiel ein.

Mehr Informationen zur DGMS, zu ihren Tagungen und Fachgruppenveranstaltungen sowie Stellenangebote im Bereich der MS auf der Website der DGMS: www.dgms.eu

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

European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry

3. bis 8. Februar 2019 in Pau, Frankreich

■ Der diesjährige Gastgeber der alle zwei Jahre stattfindenden European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry (EWPCS) war die Forschungsgruppe um Ryszard Lobinski an der Universität Pau in Südfrankreich. Mit über 500 Teilnehmern in diesem Jahr zählt die EWPCS zu einer der bedeutendsten Konferenzen in der Plasmaspektrochemie und den damit verbundenen massen- und emissionspektrometrischen Techniken und Grundlagen, sowie von Instrumentierung, Probeneintragsmethoden, Glimmentladungen, Laserablation, Isotopenanalyse, Speziation, Metallomics, Qualitätskontrolle und industriellen Anwendungen. Neben herausragenden Plenar-, Keynote- und Heritage-Vorträgen gab es mehr als 70 eingereichte Vorträge und 300 Posterbeiträge sowie viele Aussteller, mit denen man in ungezwungener Atmosphäre in der großen Ausstellerrhalle jederzeit in Kontakt treten konnte.

Bereits vor der offiziellen Eröffnung am Sonntagabend bestand die Möglichkeit, einen der sieben Short Courses zu besuchen, die in zwei Blöcken über den Tag verteilt angeboten wurden. Die Eröffnungszereemonie wurde durch traditionelle Musik aus der Region Béarn untermalt. Danach fand die gut besuchte Get-together-Party in der Ausstellerrhalle statt, mit Häppchen aus der französischen Küche. An den weiteren Konferenztagen folgte jeweils auf eine einleitende Plenarsitzung das wissenschaftliche Programm, unterteilt in zwei parallele Vortragsblöcke. Über Mittag konnten die häufig sehr informativen und anwendungsorientierten Lunchseminare der Sponsoren besucht werden. Im Anschluss an das Mittagessen fanden in der geräumigen und lichtdurchfluteten „salle des ambassadeurs“ die Postersessions statt, bevor es mit den Vortragsblöcken weiterging. Den Ausklang des wissenschaftlichen Programms bildeten die stets sehr unter-



*Historisches Schloss von Pau
(Foto: V. Brückel)*

haltsamen Heritage Lectures von bedeutenden Wissenschaftlern der Szene, die großen Anklang fanden.

Am Donnerstag wurden im Rahmen der morgendlichen Plenarsitzung vier Wissenschaftler ausgezeichnet. José Ignacio Garcia Alonso und Magdalena Matczuk erhielten den „2019 European Award for Plasma Spectrochemistry“ bzw. den „Rising Star Award for Plasma Spectrochemistry“, gesponsert durch Agilent Technologies. Die Auszeichnungen „Emerging Leader in Atomic Spectroscopy Awardee“ und „JAAS Emerging Investigator Lecturer“ gingen an Dominic Hare bzw. Marcia Foster Mesko. Ein interessanter Programmpunkt für Nachwuchswissenschaftler war der Young Scientists Career Event am Donnerstagabend.

Auch das soziale Programm war abwechslungsreich. Neben einer Führung durch das historische Schloss von Pau gab es eine „Hot Plasma Party“ im ländlich gelegenen Weingut Domain Cinquau und ein Galadinner am Donnerstagabend. Zudem boten einige Aussteller gesellige Company Nights in besonderen Locations an. Am Freitagmittag ging die Konferenz mit der Closing Ceremony und der Einladung zur nächsten EWPCS, 2021 in Lubljana, Slovenien, zu Ende.

Der Besuch der EWCPs war sowohl wissenschaftlich als auch persönlich eine sehr bereichernde Erfahrung. Ich bedanke mich hiermit bei der Fachgruppe Analytische Chemie der GDCh für die großzügige finanzielle Unterstützung in Form eines Teilstipendiums, die den Besuch der Konferenz für mich erst möglich gemacht hat.

Valérie Brückel
Westfälische Wilhelms-Universität
Münster



Vergabe des Best Young Speaker Awards: Markus Trunk, Thomas Mittersteiner, Dorian Zok, Lukas Werner und Ulrich W. Scherer (Hochschule Mannheim und Vorstand des AK ARH) (von links) (Foto: Wenzel Schürmann, TUM)

SAAGAS 27

24. bis 27. Februar 2019
in Garching

Der Arbeitskreis Analytik mit Radionukliden und Hochleistungsstrahlenquellen (ARH) veranstaltete zusammen mit dem lokalen Team der TU München die 27. Auflage des Seminars Aktivierungsanalyse und Gammaskpektrometrie (SAAGAS 27) in den TU-Räumlichkeiten in Garching.

Forschende, Studierende und Doktoranden aller Fachrichtungen, die sich mit nuklearanalytischen Aspekten beschäftigen, auch über Neutronenaktivierungsanalyse und Gammaskpektrometrie hinausgehend, waren eingeladen, am Seminar teilzunehmen und sich einzubringen. Mit knapp 40 Vorträgen in

vorwiegend englischer Sprache und über 10 Postern bei etwa 70 Teilnehmenden aus über 10 Ländern herrschte eine rege Beteiligung. Dabei wurden sowohl Bachelor- und Masterarbeiten vorgestellt als auch Doktorarbeiten und Forschungsprojekte zu vielen weitgestreuten Feldern der modernen Analytik. Wie immer machte die SAAGAS ihrem Ruf alle Ehre, eine hervorragende Plattform für den wissenschaftlichen Nachwuchs zu sein, um eigene Arbeiten in familiärer Atmosphäre vorzustellen. Umfassend vorgestellt und diskutiert wurden Themen aus der Umweltanalytik, Radioanalytik, Neutronenaktivierungsanalyse und der Entsorgung radioaktiven Abfalls. Aus den vielen sehr guten Vorträgen wurden letztlich vier Vortragende mit dem „Best Young Speaker

Award“ ausgezeichnet und erhielten eine Urkunde und einen Geldbetrag. Die Preisträger sind Markus Trunk, Thomas Mittersteiner, Dorian Zok und Lukas Werner.

Am 25. Februar stand ein Besuch im neuen ESO Supernova Planetarium & Besucherzentrum in Garching an. In dem Neubau gab es eine beeindruckende Planetarium-Show; auch wurden aktuelle Aufnahmen der Europäischen Südsternwarte gezeigt. Am 26. Februar zeigte sich mit dem Besuch des Lokals „Zum Franziskaner“ Bayern von seiner kulinarischen Seite, die durch eine Live-Band zunächst musikalisch untermalt wurde, bis Henning von Philipsborn seiner Begeisterung für die Radiometrie beim Abendvortrag freien Lauf ließ. Am letzten Nachmittag bot eine Besichtigung des Forschungsreaktors oder des Beschleunigerlabors einen tieferen Einblick in die Möglichkeiten des Forschungsstandorts Garching für die moderne analytische Chemie und Physik.

Die vielen Firmen-Repräsentanten (Mirion Technologies (Canberra), AMETEK-ORTEC, ISuS/Snakedance Scientific, AiNT, CAEN, ITM) stellten einen sehr guten Verknüpfungspunkt zur Industrie her. Neben den hervorragenden lokalen Veranstaltungen in Garching ist der Fachgruppe Analytische Chemie für das Tagungsstipendium in Höhe von 250 Euro zu danken.

Dorian Zok und Rebecca Querfeld
IRS Hannover



Teilnehmer der SAAGAS 27 (Foto: Wenzel Schürmann, TUM)

Preise & Stipendien

Preisverleihungen auf der ANAKON im März 2019

Clemens-Winkler-Medaille

■ Die Fachgruppe Analytische Chemie verleiht anlässlich der ANAKON Reinhard Nießner aus München die Clemens-Winkler-Medaille des Jahres 2019.

Reinhard Nießner gehört zu den erfolgreichsten und engagiertesten Vertretern der analytischen Chemie in Deutschland. Von 1986 bis 1989 forschte und lehrte er mit einer C2-Professur an der Universität Dortmund und von 1989 bis zu seiner Emeritierung im Jahre 2017 mit einer C4-Professur an der TU München. In dieser Zeit hielt er auch Gastprofessuren in Österreich, Japan, Singapur und Hong Kong. Mit seinen Arbeiten zu Aerosol- und Abgasanalytik, Photoakustik und Micro-Array-Chip-basierten Testsystemen, einschließlich ihrer praxistauglichen Umsetzung, hat er weltweit maßgebliche Impulse gesetzt. Mit über 200 Diplom- und Masterarbeiten, über 160 begleiteten Dissertationen und Unterstützung von 6 Habilitanden ist er Mitbegründer einer „Münchner Schule der Analytischen Chemie“.

Durch sein wissenschaftliches Werk, das weit über 600 Publikationen und über 30 Patentanmeldungen umfasst, gehört Reinhard Nießner zu den produktivsten Analytikern weltweit. Mit seinem sachlichen und profunden Wissen war er stets ein gesuchter Experte, auch von Politik und medialer Öffentlichkeit. Reinhard Nießner ist u.a. Preisträger des Heinrich-Emmanuel-Merck-Preises, des Smoluchowski-Preises für Aerosol-Forschung, der Fritz-Pregl-Medaille der Österreichischen Gesellschaft für Analytische Chemie, des Fresenius-Preises für Analytische Chemie der GDCh und des Hanns Malissa Lecture Awards.

Als erster europäischer Associate Editor der Zeitschrift *Analytical Chemistry* hat er die analytische Chemie in Deutschland in vielfältiger Weise



Reinhard Nießner (rechts) erhält die Clemens-Winkler-Medaille. Bei der Verleihung dabei: Joachim Richert.

vorangebracht. Darüber hinaus ist er ein engagiertes Mitglied der Fachgruppe seit 1984 und langjähriger Autor der Trendberichte Analytische Chemie in den *Nachrichten aus der Chemie*.

Mit der Verleihung der Clemens-Winkler-Medaille an Reinhard Nießner würdigt die Fachgruppe Analytische Chemie neben seinen herausragenden wissenschaftlichen Leistungen insbesondere sein leidenschaftliches Engagement für das Fachgebiet der analytischen Chemie.

Fachgruppenpreis

■ Die Fachgruppe Analytische Chemie verleiht Björn Meermann von der Bundesanstalt für Gewässerkunde in Koblenz und vom Fachbereich Chemie der Universität Koblenz-Landau den Fachgruppenpreis 2019 für seine methodischen und angewandten Arbeiten zur Analytik von Nanopartikeln in Umweltproben, iodhaltigen Kontrastmitteln sowie anderen Elementspezies in Umwelt- und biologischen Proben.

Nach seiner Promotion an der Universität Münster im Arbeitskreis von Uwe Karst in der Elementspeziesanalytik wechselte Björn Meermann für



Joachim Richert (links) überreicht Björn Meermann den Fachgruppenpreis. (Fotos: Universität Münster)

einen zweijährigen Aufenthalt als Postdoktorand in die Gruppe von Frank Vanhaecke an der Universität Gent in Belgien. Dort arbeitete er in der Isotopenverhältnis-Massenspektrometrie und forschte an einem pharmazeutisch-analytischen Thema. Mit dem Wechsel an die Bundesanstalt für Gewässerkunde wandte sich Björn Meermann der Umweltanalytik zu. Seine zukünftige berufliche Bleibe ist die Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung in Berlin.

Meermanns Publikationsliste weist zwischenzeitlich 25 Publikationen in Peer-reviewed Journalen auf. In den letzten zwei Jahren warb Björn Meermann außerdem mit großem Erfolg mehrere Drittmittelprojekte ein, darunter zwei Projekte im Normalverfahren der DFG und zwei durch das Umweltbundesamt geförderte Projekte, womit er seine Arbeitsgruppe mit mehreren Doktoranden ausbauen konnte. Er engagiert sich außerdem in zahlreichen Aktivitäten wie der Mitorganisation des jährlichen FFF-MS-Workshops, als Gastherausgeber eines JAAS-Sonderbandes zur Analytik von Nanomaterialien und als regelmäßiger Herausgeber der Chemienotizen für die analytische Chemie in den *Nachrichten aus der Chemie*.



Stefan Lamotte (re.) erhält den Gerhard-Hesse-Preis. Es gratuliert Martin Vogel vom AK Separation Science.



Darya Mozhayeva (li.) erhält den DAAS-Preis, übergeben von Peter Leonhard von Merck.

Gerhard-Hesse-Preis

■ Der Arbeitskreis Separation Science verleiht anlässlich der ANAKON 2019 in Münster Stefan Lamotte (BASF SE, Ludwigshafen am Rhein) den Gerhard-Hesse-Preis 2019 für herausragende Leistungen auf dem Gebiet der analytischen Trenntechniken in Anerkennung seiner wissenschaftlichen Leistungen bei der Entwicklung und Anwendung flüssigchromatographischer Methoden und neuer stationärer Phasen.

Mit seinen Arbeiten hat er die moderne Flüssigchromatographie durch eine Vielzahl stationärer Phasen und Phasenkombinationen bereichert und damit neue Trennmöglichkeiten, insbesondere in der Umkehrphasenchromatographie, geschaffen. Seine methodischen Arbeiten in der Phasenselektion, der Gradienten- und der Auflösungsoptimierung, um nur einige zu nennen, bestechen durch ihr grundlegendes Verständnis und ihren kreativen Umgang mit den theoreti-

schen Grundlagen der Flüssigchromatographie.

Die Arbeiten von Stefan Lamotte zeichnen sich durch eine große Liebe zur Anwendung der HPLC in der Praxis aus, um eine analytische Fragestellung zu bearbeiten. Er ist dabei stets auch ein begeisterter und begeisternder Lehrer der Chromatographie, der sich um die analytischen Trenntechniken verdient gemacht hat.

DAAS-Preis

■ Im Rahmen der ANAKON-Konferenz in Münster verlieh der Deutsche Arbeitskreis für Analytische Spektroskopie (DAAS) am 27. März den DAAS-Preis 2018 an Darya Mozhayeva für ihre hervorragenden Leistungen in der Nanopartikelanalytik mit induktiv gekoppelter Plasma-Massenspektrometrie (ICP-MS).

Darya Mozhayeva ist Doktorandin an der Universität Siegen im Arbeitskreis von Carsten Engelhard und be-

schäftigt sich unter anderem mit der Trennung von Nanopartikeln mit verschiedenen Beschichtungen mittels Kapillarelektrophorese, gekoppelt an ICP-MS im Einzelpartikel-Modus (CE-SP-ICP-MS).

In ihrem Preisvortrag berichtete sie über Entwicklungen in der CE-SP-ICP-MS und SP-ICP-MS mit Mikrosekundenzeitauflösung. Der Vortrag fand große Resonanz.

Der DAAS-Preis dient der Auszeichnung hervorragender Arbeiten junger Wissenschaftler in der Mikro- und Spurenanalyse der Elemente und Elementspezies. Er wird von der Firma Merck gestiftet und ist mit 1500 Euro dotiert.

Carsten Engelhard

Posterpreise

■ Den Preis für das beste Konferenz-Poster, den Renishaw-Preis, gewann Christian Schwaferts, Technische Universität München, mit dem Poster: „Detektion und Identifizierung



Verleihung der Posterpreise auf der ANAKON. Von links: Micha Kölbach von der finanzierenden Firma Renishaw, Heiko Hayen, Natalia P. Ivleva, Konstantin Wink, Valérie A. Brückel, Anja Brandt, Tanja Bien.

von Submikrometer-Plastikpartikeln mittels Raman-Mikroskopie und Rasterelektronenmikroskopie.“ Natalia P. Ivleva, Technische Universität München, nahm stellvertretend den Preis entgegen.

Weitere 6 gleichwertige Posterpreise (pro Tag je 3) wurden vergeben an folgende Preisträger:

- Tanja Bien, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, mit dem Poster: „MALDI-2-mass spectrometry and multimodal imaging of globotriaosylceramide (Gb3Cer) and further lipids in human colorectal cancer tissue“
- Anja Brandt, Universität Ulm, mit dem Poster: „Investigation of the atomization mechanism of gold nanoparticles in graphite furnace atomic absorption spectrometry“
- Valérie A. Brückel, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, mit dem Poster: „Analysis of Organoiodine Compounds by means of HPLC-MS with Flowing Atmospheric Pressure Afterglow Ionization“
- Konstantin Wink, Universität Leipzig, mit dem Poster: „Integrated micro-laboratories: Combining droplet-based microfluidics and ESI-MS“
- Márkó Grabarics, Freie Universität Berlin, mit dem Poster: „The potential of ion mobility-mass spectrometry and cold-ion IR spectroscopy for the sequencing of glycosaminoglycans“

- Cui Wang, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berlin, mit dem Poster: „Luminescent TOP Nanosensors for Simultaneously Measuring Temperature, Oxygen, and pH at a Single Excitation Wavelength“

Verliehen wurden die Posterpreise von Heiko Hayen, Westfälische Wilhelms-Universität Münster.

Preisverleihung auf der Chemiedozententagung in Koblenz

Am 18. März verlieh die GDCh François Diederich, ETH Zürich, CH, im Rahmen einer Festsitzung ihre höchste Auszeichnung – die Ehrenmitgliedschaft. Damit würdigt sie sowohl Diederichs Einsatz für die Chemie im Allgemeinen als auch sein Engagement für die GDCh im Besonderen. Als langjähriges Mitglied (seit 1974) diente er der GDCh in ihrem Vorstand (2008–2015) sowie als stellvertretender Präsident (2011/12). Außerdem vertrat er die GDCh in verschiedenen Funktionen, unter anderem als Vorsitzender der Bewertungsgruppe des Forschungsrats, als Vorsitzender des Kuratoriums der GDCh-Zeitschrift *Angewandte Chemie* und als Vorsitzender der Präsidenten-Kommission „Perspektiven der Chemie“.

Ebenfalls im Rahmen der Festsitzung erhält Albrecht Berkessel, Universität zu Köln, den Horst-Pracejus-Preis. Die Auszeichnung wird an Wissenschaftler für herausragende Arbeiten in der Enantioselektivität verliehen. Berkessel wird als einer der international renommiertesten deutschen Chemiker gewürdigt, wozu neben seinen herausragenden Originalpublikationen auch seine Monographie „Asymmetric Organocatalysis“ beiträgt. Als „spektakulär“ bezeichnet die Auswahlkommission seine Entdeckung einer Titan-katalysierten hohenantioselektiven Epoxidierung terminaler Olefine sowie seine Beschreibung des sogenannten Breslow-Intermediates.

Den Carl-Duisberg-Gedächtnispreis erhält Sandra Luber, Universität Zürich, Schweiz. Mit dem Preis, der mit 7500 Euro dotiert ist, wird der akademische Nachwuchs in der Chemie gefördert. Die 37-jährige Chemikerin erhält die Auszeichnung für ihre Arbeiten in der theoretischen Spektroskopie, und zwar sowohl in der Methodenentwicklung als auch der wissenschaftlich relevanten Anwendung. Mit ihren Arbeiten zeigt die Preisträgerin beispielhaft, wie moderne theoretische Chemie zur Aufklärung komplexer chemischer Phänomene beitragen kann.

Darüber hinaus zeichnet die ADUC drei Nachwuchswissenschaftler aus verschiedenen Gebieten der Chemie für die Etablierung eines eigenständigen Forschungsgebietes aus: Lutz Greb, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, erhält einen ADUC-Preis für seine kreativen und ungewöhnlichen Beiträge zur Chemie der Siliciumverbindungen in gewöhnlichen Valenzzuständen. Thomas-Christian Jagau, Ludwig-Maximilians-Universität, wird für die Entwicklung von Coupled-Cluster-Methoden zur Berechnung elektronischer Resonanzzustände und der Starkfeldionisation ausgezeichnet. Und Manuel van Gemmeren, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, erhält den Preis für sein brillantes Ligandendesign für die nicht-dirigierte C-H-Olefinierung von Arenen.

Quelle: GDCh

Impressum

Herausgeber:
Vorstand der Fachgruppe
Analytische Chemie in der
Gesellschaft Deutscher Chemiker
PO-Box 900440
60444 Frankfurt/Main
c.kniep@gdch.de
Telefon: 069 7917– 1499
Telefax: 069 7917– 1499
www.gdch.de/de/analytischechemie

Redaktion:
Brigitte Osterath
Am Kalkofen 2
53347 Alfter
mitteilungsblatt@gmx.net

Grafik: Jürgen Bugler

Druck:
Seltersdruck & Verlag Lehn GmbH &
Co. KG, Selters

Bezugspreis im Mitgliedsbeitrag
enthalten

Erscheinungsweise 4 x jährlich

ISSN 0939–0065

Redaktionsschluss Heft 03/2019:
31.08.2019
Beiträge bitte an die Redaktion

Prozessanalytik-Award 2019 für die beste Abschlussarbeit

■ Sie haben im Jahr 2018 eine Masterarbeit oder Dissertation betreut, die sich mit der Prozessanalytik beschäftigt? Wenn Sie finden, diese Abschlussarbeit hätte eine Auszeichnung verdient, dann sind Sie bei uns richtig.

Der Prozessanalytik-Award wird jährlich vom Arbeitskreis Prozessanalytik für die beste Qualifizierungsarbeit (Masterarbeit und/oder Dissertation) auf dem Gebiet der Prozessanalytik im deutschsprachigen Raum (DACH) für das jeweils vergangene Jahr vergeben. Aus den Einreichungen wählt eine Jury, bestehend aus Mitgliedern des erweiterten Vorstandes des Arbeitskreises, die Preisträger aus. Die Gewinner dürfen sich über ein Preisgeld in der Höhe von 1000 Euro sowie eine kostenlose zweijährige Mitgliedschaft in der GDCh oder der DECHEMA freuen. Offiziell übergeben wird der Prozessanalytik-Award 2019 diesmal auf dem 15. Herbstkolloquium des Arbeitskreises vom 25. bis 27. November 2019 in Marl.

Vorschläge für den Prozessanalytik-Award können bis zum 20.09.2019 entgegengenommen werden und sind von den Betreuern der Qualifizierungsarbeiten bitte direkt an den Vorstand des Arbeitskreises Prozessanalytik zu richten: vorstand@arbeitskreis-prozessanalytik.de

Einzureichende Unterlagen:

- kurze Begründung des Betreuers
- Abstract und Kopie der Abschlussarbeit

Bitte verwenden Sie oben genannte E-Mail-Adresse auch gern für etwaige Rückfragen.

Es können nur Einreichungen durch den Betreuer akzeptiert werden. Die Unterlagen können auf Deutsch oder Englisch eingereicht werden.

Der Vorstand hat sich darauf verständigt, nur Arbeiten zu berücksichtigen, die nicht an Körperschaften entstanden sind, mit denen die Mitglieder der Jury direkt in Verbindung stehen.

European Chemistry Gold Medal

■ Every two years, the exceptional achievements of one scientist working in the field of chemistry in Europe are rewarded. The winner is awarded a gold medal and the opportunity to give the opening lecture at the next EuChemS ChemistryCongress (ECC). The call for nominations was opened on 1 March and will be open until 30 September 2019. All submissions are to be made through the online form: <https://www.euchems.eu/awards/european-chemistry-gold-medal/>

The first European Chemistry Gold Medal was awarded to Professor Bernard L. Feringa, Nobel Prize winner for Chemistry in 2016. Ben Feringa was awarded the Gold Medal at the 7th EuChemS Chemistry Congress in Liverpool, UK. The ceremony took place during the opening session and was presented by Herman Overkleeft, Chair of the International Award Committee for the European Chemistry Gold Medal (IACM).

The guidelines for submitting are available here:

<https://www.euchems.eu/wp-content/uploads/2019/03/P-010-European-Chemistry-Gold-medal-ver.2019.pdf>

There is no requirement for the nominator or supporters to be members of EuChemS member organisation. Self-nominations are not accepted. Nominators should take diversity in all its forms into consideration when making the nomination as well as parental leave or other relevant career breaks.

An international selection committee of five members will evaluate the nominees and advise the EuChemS Executive Board, which will decide to whom the European Chemistry Gold Medal will be awarded.

Personalia

Geburtstage

Wir gratulieren unseren Mitgliedern, die im dritten Quartal 2019 einen runden Geburtstag feiern und wünschen alles Gute:

Zum 60. Geburtstag

Jörg Ingo Baumbach, Reutlingen
Frank Bier, Potsdam
Jürgen Otte, Göttingen
Michael Krausa, Berlin
Axel Kretschmer, Seneffe, Belgien
Andreas Neudeck, Dresden
Jutta Fink, Öhringen
Johann Oswald, Essenbach

Zum 65. Geburtstag

Thomas Chassé, Tübingen
Michael Pfeffer, Berlin
Günter Georg Hoffmann, Essen
Sibylle Künkel, Eberswalde
Claus-Dieter Meinecke, Leipzig
Werner Schrödl, Amberg
Rudolf Kaiser, Mertingen
Henrik Schulz, Hildesheim
Karl-Heinz Bauer, Darmstadt
Heinrich Prüfer, Norderstedt

Zum 70. Geburtstag

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

Zum 75. Geburtstag

Josef Tunka, Lingen
Gernot Wurm, Keutschach

Zum 80. Geburtstag

Siegfried Ganschow, Zahna-Elstar
Bertold Hock, Freising

Zum 85. Geburtstag

Friedrich Zimmermann, Emmendingen
Peter Tschöpel, Schwerte
Hans-Georg Struppe, Leipzig
Gunther Themm, Berlin

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

Tagungen 2019

05.-09.08., Lombard/USA: **68th Annual Denver X-Ray Conference & The 25th Congress on X-Ray Optics and Microanalysis (25th IXCOM)**, Kontakt: www.icxom25.com

07.-08.08., Vancouver/CA: **International Conference on Chemometrics in Analytical Chemistry (ICCAC 2019)**, Kontakt: <https://waset.org/conference/2019/08/vancouver/ICCAC>

20.-24.08., La Jolla/USA: **Methods & Applications of Fluorescence (MAF 2019)**, Kontakt: <http://maf2019.ucsd.edu/>

22.-25.08., Changchun/CN: **International Symposium on Electroanalytical Chemistry & International Meeting on Electrogenenerated Chemiluminescence (17th ISEAC & 3rd ECL)**, Kontakt: iseac-ecl2019.csp.escience.cn/

01.-05.09., Istanbul/TR: **XX. Euroanalysis**, Kontakt: www.euroanalysis2019.com

03.-07.09., Potsdam/D: **10th International Congress on the Application of Raman Spectroscopy in Art and Archaeology (RAA2019)**, Kontakt: www.raa2019.de

11.-13.09., Siófok/HU: **12th Balaton Symposium on High-Performance Separation Methods**, Kontakt: www.balaton.mett.hu

15.-18.09., Aachen/D: **GDCh-Wissenschaftsforum Chemie**, Kontakt: www.wifo2019-aachen.de

19.-20.09., Berlin/D: **FTMS-Fachgruppentreffen der DGMS**, Kontakt: <https://ftms.dgms.eu/>

22.-25.09., Haltern am See/D: **8th Late Summer Workshop der Wasserchemischen Gesellschaft**, Kontakt: <http://www.wasserchemische-gesellschaft.de/lsw-2019>

22.-26.09., Bari/IT: **XXVIII Congresso della Divisione di Chimica Analitica della Società Chimica Italiana (SCI 2019)**, Kontakt: <https://www.soc.chim.it/it/divisioni/analitica/barianalitica2019>

23.-27.09., Freiberg/D: **CANAS 2019 – Colloquium Analytische Atomspektroskopie & Anwendertreffen Plasmaspektrometrie & Glow Discharge – GD-Anwendertreffen**, Kontakt: <https://tu-freiberg.de/canas>

Tagungen 2020

13.-18.01., Tucson/USA: **2020 Winter Conference on Plasma Spectrochemistry**, Kontakt: <http://icpinformation.org/>

01.-04.03., Münster/D: **53. DGMS-Jahrestagung + ICP-MS-Anwendertreffen der DGMS-Fachgruppe Element-MS**

01.-05.03., Chicago/USA: **Pittcon 2020**, Kontakt: <https://pittcon.org/>

31.03.-03.04., München/D: **analytica und analytica conference**, Kontakt: www.analytica.de

05.-08.04., Warschau/PL: **Europt(r)ode XV**, Kontakt: <http://europtrode2020.eu/>

07.-10.09., Regensburg/D: **International Conference Series on Environmental & Food Monitoring (ISEAC-41)**, Kontakt: www.iseac-conferences.org

DAS KARRIERE PORTAL für Chemie und Life Sciences

Von Chemikern für Chemiker

Nutzen Sie das Netzwerk der GDCh:

- Stellenmarkt – Online und in den *Nachrichten aus der Chemie*
- Publikationen rund um die Karriere
- CheMento – das Mentoring Programm der GDCh für chemische Nachwuchskräfte
- Bewerbungseminare und –workshops
- Jobbörsen und Vorträge
- Gehaltsumfrage

www.gdch.de/karriere
twitter.com/GDCh_Karriere

GDCh
 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.

9. – 11. September 2019, Rheinbach (bei Bonn)

GLP-Intensivtraining mit QS-Übungsaufgaben: Methodenvalidierung und Gerätequalifizierung unter GLP (Gute Laborpraxis) – mit Praxisteil, Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP (GDCh) (Kurs 536/19)
Leitung: Prof. Dr. Jürgen Pomp

16. – 18. September 2019, Rheinbach (bei Bonn)

Qualitätskontrolle und Stabilitätsprüfung im regulierten Bereich, Mit Praxisteil und Workshops (Kurs 555/19)
Leitung: Prof. Dr. Jürgen Pomp

17. – 19. September 2019, Essen

Schwingungsspektroskopie für die chemische Qualitäts- und Prozesskontrolle, Theorie, Instrumentation und Applikationen für die Raman-, Mittel-Infrarot-, Nah-Infrarot- und Fern-Infrarot Spektroskopie (Kurs 503/19)
Leitung: Prof. Dr. Heinz Wilhelm Siesler

18. – 19. September 2019, Rheinbach (bei Bonn)

Einsatz der Pyrolyse-GC/MS zur Charakterisierung von Kunststoffen, Praxisorientierter Kurs für Einsteiger (Kurs 353/19)
Leitung: Prof. Dr. Margit Geißler

23. – 27. September 2019, Köln

Grundlagen der Massenspektrometrie: Messtechnik und Interpretation von Massenspektren (Kurs 319/19)
Leitung: Prof. Dr. Mathias Schäfer

24. – 26. September 2019, Mainz

Grundlagen der praktischen NMR-Spektroskopie für technische Mitarbeiter (Kurs 334/19)
Leitung: Dr. Johannes C. Liermann

25. – 26. September 2019, Frankfurt am Main

GMP-Intensivtraining: Hintergründe und Essentials der GMP (Gute Herstellungspraxis) auf deutscher, europäischer und amerikanischer Ebene – mit Praxisteil, Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP (GDCh) (Kurs 535/19)
Leitung: Dipl.-Ing. Jürgen Ortlepp

25. September 2019, Frankfurt am Main

Good Research Practice, Qualitätssicherung in der Forschung/Universität und Industrie (Kurs 545/19)
Leitung: Prof. Dr. Jürgen Pomp

26.– 27. September 2019, Frankfurt am Main

Management von Forschung und Entwicklung in der Chemie, Eine praxisnahe Einführung in Methoden und

Tools. Kursmodul zum Geprüften Wirtschaftskemiker (GDCh) (Kurs 929/19)

Leitung: Prof. Dr. Klaus Griesar

2. Oktober 2019, Frankfurt am Main

ICH-GCP-Grundkurs für Naturwissenschaftler und Dienstleister als Quereinsteiger in die klinische Prüfung, Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP Plus (GDCh) (Kurs 544/19)
Leitung: Dr. Volker Hoffmann

7. – 10. Oktober 2019, Frankfurt am Main

NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung, Fortgeschrittenenkurs (Kurs 506/19)
Leitung: Prof. Dr. Reinhard Meusinger

21. – 22. Oktober 2019, Frankfurt am Main

Einführung in die Betriebswirtschaftslehre für Chemiker, Optionaler Vorbereitungskurs zum Geprüften Wirtschaftskemiker (GDCh) 2020 (Kurs 900/19)
Leitung: Prof. Dr. Uwe Kehrel

23. – 24. Oktober 2019, Frankfurt am Main

Medizinprodukte gesetzeskonform planen, entwickeln und erfolgreich zulassen (Kurs 589/19)
Leitung: Dr. Dietmar Schaffarczyk

11. November 2019, Frankfurt am Main

Gute Vertriebspraxis „Good Distribution Practice (GDP)“ (Kurs 527/19)
Leitung: Dipl.-Ing. Jürgen Ortlepp

14. – 15. November 2019, Leipzig

Theorie und Praxis der UHPLC (Kurs 355/19)
Leitung: Prof. Dr. Thomas Welsch

14. November 2019, Frankfurt am Main

Gesetzlich geregelte Umweltanalytik – was ist wirklich wichtig? (Kurs 512/19)

18. November 2019, Frankfurt am Main

Die Qualitätssysteme GMP (Gute Herstellungspraxis) und GLP (Gute Laborpraxis) im Überblick – Ein Leitfaden der Guten Praxis, Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP (GDCh) (Kurs 511/19)
Leitung: Dr.-Ing. Barbara Pohl

18. – 19. November 2019, Frankfurt am Main

Organisation, Personal- und Projektmanagement, Kursmodul zum Geprüften Wirtschaftskemiker (GDCh) (Kurs 880/19)
Leitung: Prof. Dr. Uwe Kehrel



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER



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

Vorsitzender
Prof. Dr. Ulrich W. Scherer
Mannheim
u.scherer@hs-mannheim.de

**Arbeitskreis
Archäometrie**

Vorsitzender
Dr. Stefan Röhrs
Berlin
s.roehrs@smb.spk-berlin.de

**Arbeitskreis
Chemische Kristallographie**

Vorsitzende
Prof. Dr. Iris Oppel
Aachen
iris.oppel@ac.rwth-aachen.de

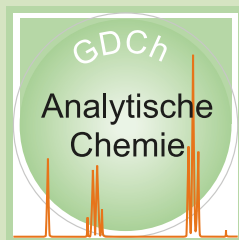
**Arbeitskreis
Chemometrik und
Qualitätssicherung**

Vorsitzender
Dr. Wolf von Tümpling
Magdeburg
wolf.vontuempling@ufz.de

**Arbeitskreis
Chemo- und Biosensoren**

Vorsitzender
Dr. Michael Steinwand
Owingen
msteinwand@innovendia.de

**Fachgruppe
Analytische Chemie**



Vorstand

Vorsitzender
Dr. Joachim R. Richert
joachim.richert@basf.com

Stellvertretende Vorsitzende
Prof. Dr. Carolin Huhn

Vertreter für die Hochschulen
Prof. Dr. Detlev Belder
Prof. Dr. Uwe Karst

Vertreter für die Industrie
Dr. Ulrich Engel
Dr. Heike Gleisner

Vertreter für die Junganalytiker
Dr. Mikheil Gogiashvili
Dr. Maria Viehoff

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

Vorsitzender
Dr. Martin Wende
Ludwigshafen
martin.wende@basf.com

**Arbeitskreis
Elektrochemische
Analysenmethoden (ELACH)**

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

**Arbeitskreis
Prozessanalytik**

Vorsitzender
Prof. Dr. Christoph Herwig
Wien
ak-prozessanalytik@gdch.de

**Arbeitskreis
Separation Science**

Vorsitzender
Dr. Martin Vogel
Münster
martin.vogel@uni-muenster.de

Industrieforum Analytik

Vorsitzender
Dr. Michael Arlt
Michael.Arlt@merckgroup.com

Mitglieder