

The logo for GDCh (Gesellschaft Deutscher Chemiker) features the letters 'GDCh' in a white, sans-serif font above a white, upward-curving arc that resembles a smile or a stylized 'D'.

Gesellschaft
Deutscher Chemiker

Fachgruppe
Analytische Chemie

Spezial: Industrielle Analytik

Wahl des Vorstands 2024–2027

Nachruf Georg-Alexander Hoyer

Mitteilungsblatt
3/2023





GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER



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

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

**Arbeitskreis
Archäometrie**

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

**Arbeitskreis
Chemische Kristallographie**

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

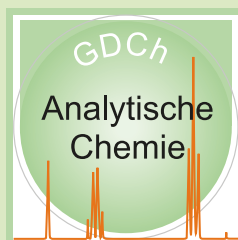
**Arbeitskreis
Chemometrik &
Qualitätssicherung**

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

**Arbeitskreis
Chemo- & Biosensoren**

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

**Fachgruppe
Analytische Chemie**



Vorstand 2020-2023

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

Stellvertretender Vorsitz
Dr. Michael Arlt
Darmstadt

Dr. Martin Wende
Ludwigshafen

Beisitz
Dr. Jens Fangmeyer
Leverkusen

Prof. Dr. Uwe Karst
Münster

Dr. Björn Meermann
Berlin

Prof. Dr. Tom van de Goor
Waldbronn/Marburg

Dr. Maria Viehoff
Darmstadt

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

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

**Arbeitskreis
Elektrochemische
Analysenmethoden (ELACH)**

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

**Arbeitskreis
Prozessanalytik (PAT)**

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

**Arbeitskreis
Separation Science**

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

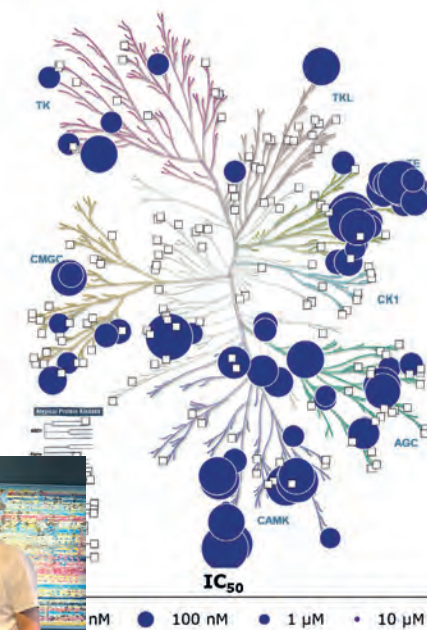
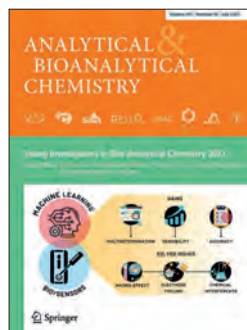
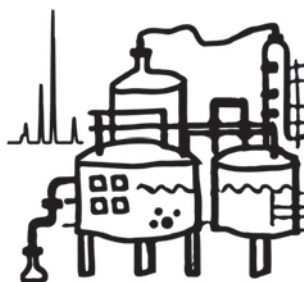
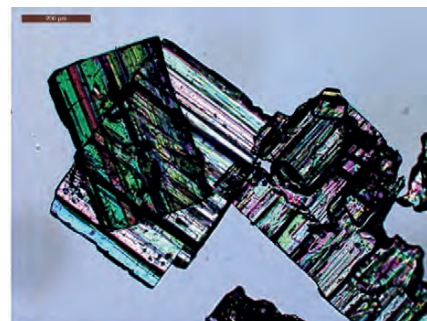
Industrieforum Analytik

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

Mitglieder

Inhalt 3/2023

Editorial	4
Aus der Fachgruppe	
Vorstandswahlen – Vorschlagsliste	5
Chemie Aktuell	
Mobiler Sprengstoffspurendetektor	10
Bioindikator für PFAS-Vorkommen	11
KI unterstützt Analyse metallischer Werkstoffe	12
Medien	
ABC in Kürze	13
Spezial: Herausforderungen in der industriellen Analytik	
Datenintegrität in der chem. Analytik	15
PFAS-Regulierung braucht verlässliche Analytik	17
DeepBio – Omics für die Wirkstoffentwicklung	19
Particle Engineering von Wirkstoffen	21
Eine grüne Alternative zu HILIC-HPLC	25
Hersteller und Anwender gemeinsam zum Ziel	27
Prozessanalytik und Industrial Internet of Things bei Merck	29
Von proprietär zu Open Source	32
Personalsituation in der Analytik	35
Tagungen & Fortbildungen	
54. DGMS-Jahrestagung	37
Preise & Stipendien	
SCIEX Microscale Separations Innovations Medal and Award	39
VORSPRUNG-Preis für KNAUER Ausschreibungen	40
Personalia	
Zum Tode von Georg-Alexander Hoyer	42
Geburtstage	43
GDCh-Fortbildungen	43
Impressum	40



Editorial

Liebe Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie,

die chemische Industrie steht vor Veränderungen, die in ihrer Grundsätzlichkeit wenige Vorbilder haben. Mindestens vier fundamentale Transformationsprozesse wirken aktuell zeitgleich auf sie ein – und die analytische Chemie spielt in diesen Veränderungsprozessen stets eine zentrale Rolle. In diesem Sonderheft des Mitteilungsblatts werden wir einige dieser Herausforderungen und Chancen der industriellen Analytik in Augenschein nehmen.

Werfen wir einen Blick auf die heutige chemische Industrie und ihren Weg zur klimaneutralen Produktion: Um bis 2050 Netto-Null-Treibhausgasemissionen zu erreichen, müssen wir uns von fossilen Energieträgern ab- und den Erneuerbaren zuwenden. Mit dieser Energietransformation – Transformation Nummer 1 – gehen neue Prozesse Hand in Hand, etwa regenerative Stromerzeugung und -speicherung, der Transport dieser Energieform oder auch der Aufbau einer kompletten Wasserstoffwirtschaft samt Infrastruktur. Um die hochgesteckten Klimaziele zu erreichen, müssen wir weniger fossilen Kohlenstoff als Rohstoff einsetzen, mehr biobasierte Rohstoffe und Materialien sowie neuartige Rohstoffe aus einer Kreislaufwirtschaft. Diese Transformation ist die Nummer zwei: die Transformation der Rohstoffbasis.

Geleitet vom Zielbild einer nachhaltigen Kreislaufwirtschaft hat die Europäische Kommission die „EU-Chemikalienstrategie für Nachhaltigkeit“ (CSS – Chemicals Strategy for Sustainability) und den „EU-Aktionsplan zur Schadstofffreiheit von Luft, Wasser und Boden“ verabschiedet – beides Teilaspekte des europäischen Green Deals und Hintergrund der dritten Transformation, der Nachhaltigkeitstransformation. Ansätze wie Safe-and-Sustainable-by-Design und verstärkte Kreislaufwirtschaft machen deutlich, dass unsere Zukunft von neuen Stoffen geprägt sein wird. Die Zahl neuer Materialien sowie die Zahl alter Materialien in neuen Kontexten wird zunehmen und so den Innovationsdruck dramatisch erhöhen. Nur eine datengetriebene Wissenschaft, basierend auf robusten und passgenauen Analysemethoden, wird schnelle Antworten auf deren sichere und nachhaltige Nutzung geben. In diesem Sonderheft erfahren Sie mehr über diese CSS-Themen.

Eine disruptive Transformation, die fast alle bisherigen Prozesse und Konzepte in vielen Lebensbereichen grundlegend verändern wird, ist die digitale Transformation, Transformation Nummer vier. Sie wird Innovationsprozesse beschleunigen wie keine andere technisch-wissenschaftliche Weiterentwicklung zuvor. Maschinelles Lernen (ML) und Künstliche Intelligenz (KI) haben das Potenzial, wissenschaftliche Entdeckungen, Prozess- und Produktinnovationen um den Faktor zehn bis hundert zu beschleunigen und die Produktivität der Forschung drastisch zu steigern. Eine der größten Heraus-



Joachim Richert

forderungen besteht darin, Daten mit dem technisch-wissenschaftlichen Wissen und den Erkenntnissen aus dem Geschäftsbetrieb besser zu verknüpfen. Die Zukunft liegt dabei in vernetzten, autonomen, sich selbst optimierenden Systemen, die stetig bessere Simulationen unserer Prozesse und Produkte erlauben, oder – mit anderen Worten – einen digitalen Zwilling unserer Prozesse und Produkte zu generieren, der es erlaubt, durch In-silico-Experimente und Simulationen entschieden weniger, aber zielführendere Experimente im Labor durchzuführen. Um diesen Integrationslevel zu erreichen, brauchen wir Daten nach den FAIR-Prinzipien und echte, offene und plattformunabhängige Standards.

Blicken wir auf den Einfluss der digitalen Transformation auf die Prozessanalytik. Echtzeitdaten aus Online-Analytik und In-Prozess-Kontrolle in Produktion und Supply Chain bis hin zum Endkunden liefern Möglichkeiten, Stoffströme, deren Qualität und Verfügbarkeit ressourcenschonend zu steuern. Schauen wir auf den Einsatz von ML und KI im Kontext eines analytischen Labors, dann können ML und Sprachmodelle wie ChatGPT große Mengen an Labordaten, experimenteller Ergebnisse und Literaturinformationen analysieren und in Berichten zusammenfassen. Sie können praktisch in Echtzeit Muster, Korrelationen und Anomalien in Daten erkennen und über Empfehlungssysteme, Prozessoptimierung, vorausschauende Wartung, Qualitätskontrolle, Automatisierung und Laborrobotik dazu beitragen, die Produktivität zu steigern und den gesamten Innovationsprozess zu beschleunigen.

Die Zukunft bleibt spannend – gestalten wir sie!

*Joachim Richert, BASF
Sprecher des Industrieforums Analytik*

Aus der Fachgruppe: Vorstandswahlen – Vorschlagsliste

Bereich Hochschulen und
Forschungsinstitute

Prof. Dr. Margit Geißler

Walpurgisstr. 12
45131 Essen
E-Mail: margitgeissler
@t-online.de



Bisherige Aktivität in der GDCh und der Fachgruppe

- Mitglied der GDCh seit 1989: Mitglied der Fachgruppe Analytische Chemie und der Wasserchemischen Gesellschaft
- Mentorin im Programm CheMento (2013)

Meine Kandidatur

■ Mein besonderer Schwerpunkt ist die Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses in der GDCh. Formate zur Vernetzung und Fortbildung könnten von mir betreut und gegebenenfalls weiterentwickelt werden.

Ein weiterer wichtiger Punkt ist für mich der Stellenwert der analytischen Chemie in der Chemiker:innenausbildung an Hochschulen und Universitäten. Dafür möchte ich mich innerhalb und außerhalb der GDCh einsetzen.

Der dritte wichtige Punkt ist das Bild der analytischen Chemie in der Gesellschaft. Öffentlichkeitsarbeit, um dieses Bild zu schärfen, ist ein Thema, dem ich mich in meiner Amtszeit widmen würde.

Kurzlebenslauf

- Seit Oktober 2012: Professur für Chemie, insbesondere analytische Chemie und Chemometrie, Hochschule Bonn-Rhein-Sieg
- Januar 2015 – August 2022: Vizepräsidentin Forschung und wissenschaftlicher Nachwuchs, Hochschule Bonn-Rhein-Sieg
- 1993 – 2012: Produkt-Managerin Europa, Shimadzu Europa GmbH, Duisburg
- 1989 – 1993: PhD-Studentin an der privaten Universität Witten/Herdecke

- 1985 – 1986: Austauschstudentin (DAAD), University of Sussex, Brighton, UK
- 1982 – 1989: Studium der Chemie (Diplom), Ruhr-Universität Bochum

Prof. Dr. Frank-Michael Matysik

Institut für Analytische Chemie, Chemo- und Biosensorik
Universität Regensburg
Universitätsstr. 31
93053 Regensburg
E-Mail: frank-michael.matysik@ur.de



Bisherige Aktivität in der GDCh und der Fachgruppe

- 2011 und 2016: Ausrichtung des CE-Forums in Regensburg
- 2015: Ausrichtung der 5. Frühjahrschule Industrielle Analytische Chemie in Regensburg
- Seit 2016: Vorsitzender des Arbeitskreises Elektrochemische Analysemethoden (ELACH)
- 2017: Begründung der Seminarreihe „Cross-Border Seminar on Electroanalytical Chemistry“ für ELACH-Doktoranden und tschechische Doktoranden (bisher 5 Seminare)
- 2019 – 2022: Vorsitzender der Auswahlkommission für den Heyrovsky-Ilkovic-Nernst-Vortragspreis der GDCh sowie der tschechischen und slowakischen chemischen Gesellschaften

Meine Kandidatur

■ Nach der langjährigen Tätigkeit im AK ELACH ist mir weiterhin der enge Kontakt zu den Arbeitskreisen wichtig, um analytische Aktivitäten der Fachgruppe über die Arbeitskreise kanalisieren zu können.

Außerdem ist es mir ein Anliegen, dass die analytische Ausbildung an möglichst allen Universitäten einen festen Platz neben den anderen chemischen Disziplinen erhält bzw. diesen weiter ausbauen kann und dass die Absolventen sehr gut auf die aktuellen Heraus-

forderungen der analytischen Chemie vorbereitet werden.

Für die Fachgruppe Analytische Chemie ist es wichtig, im regen Austausch auch mit ausländischen Fachkollegen zu stehen, um internationale Trends der Entwicklung unseres Fachgebietes rechtzeitig zu erkennen und nationale Strategien schärfen zu können.

Kurzlebenslauf

- Seit 2008: Universitätsprofessor für analytische Chemie an der Universität Regensburg
- 2002 – 2008: Privatdozent am Institut für Analytische Chemie der Universität Leipzig
- 2001: Habilitation an der Universität Leipzig
- 1995 – 1996: Postdoc-Aufenthalte bei R.G. Compton (Oxford University, UK) und bei A.M.O. Brett (Universidade de Coimbra, Portugal)
- 1994: Promotion im Arbeitskreis von G. Werner an der Universität Leipzig
- 1990 – 1991: Forschungsaufenthalt bei G. Nagy und E. Pungor (TU Budapest, Ungarn)
- 1990: Abschluss Chemiestudium (Diplom) an der Universität Leipzig

Dr. Björn Meermann

Bundesanstalt für
Materialforschung
und -prüfung (BAM)
Leiter Fachbereich 1.1 –
Anorganische Spuren-
analytik



Richard-Willstätter-Straße 11

12489 Berlin

E-Mail: bjoern.meermann@bam.de

Bisherige Aktivität in der GDCh und der Fachgruppe

- Seit Juni 2016: Regelmäßiger Autor (monatlich) für die *Nachrichten aus der Chemie* in der Sparte „Chemie-notizen“ für den Bereich analytische Chemie
- Engagement im Deutschen Arbeitskreis für Analytische Spektroskopie (DAAS) – zum Beispiel Unterstützung

von Sessions des DAAS auf Konferenzen durch wissenschaftliche Vorträge

- Organisation von Workshops im Rahmen der Fachgruppe (zum Beispiel PhD Seminar DAAS 2023)
- Seit Juni 2021: Mitglied des Vorstands der Fachgruppe Analytische Chemie der GDCh

Meine Kandidatur

■ Die Forschungsfragestellungen, an denen wir im Fachbereich 1.1 an der BAM arbeiten, liegen an der Schnittstelle zwischen Material- und Umweltanalytik. Die analytische Chemie ist der Teilbereich der Chemie, der uns die Möglichkeit eröffnet, stark interdisziplinär zu arbeiten. Neben herausfordernden analytischen Fragestellungen macht vor allem dies den Reiz meiner Arbeit für mich aus. Interdisziplinarität ist mir daher ein besonderes Anliegen, und daher möchte ich zwischen den AKs der Fachgruppe, aber auch zwischen den Fachgruppen innerhalb der GDCh die Zusammenarbeit weiter ausbauen und stärken.

Analytische Chemiker:innen spielen eine wichtige Rolle in vielen Bereichen – Ausbildung und Förderung von Studierenden im Bereich der analytischen Chemie ist mir daher ein weiteres wichtiges Anliegen.

Weiterhin ist mir die Mitarbeit als regelmäßiger Autor der *Nachrichten aus der Chemie* wichtig – hierüber können wir ein breites Publikum erreichen und die Sichtbarkeit der analytischen Chemie stärken. Hierfür möchte ich zum Beispiel in regelmäßigen Abständen neben nationalen auch internationale Kollegen:innen zu Beiträgen aus ihrer aktuellen Forschung einladen; hieraus können dann regelmäßig „Highlights aus der Analytik“ entstehen – dies erzeugt Öffentlichkeit und fördert langfristig weitere interdisziplinäre Kooperationen. Weiterhin ist es mir wichtig, in und für die wissenschaftliche Community aktiv zu sein – ich bin zum Beispiel Chair der European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry 2025 in Berlin – nur hierüber kann die analytische Chemie langfristig ihren Stellenwert in der Wissenschaft und Gesellschaft auf hohem Niveau halten.

Kurzlebenslauf

- Seit 2020: Universitätsangehöriger der Humboldt-Universität zu Berlin

(HU) – Lehre im Bereich analytische Chemie (Habilitation)

- Seit Juni 2019: Leiter des Fachbereichs 1.1 „Anorganische Spurenanalytik“ an der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berlin
- März 2012 – Mai 2019: Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Bundesanstalt für Gewässerkunde (BfG), Referat G2 – Gewässerchemie, Koblenz
- April 2010 – Januar 2012: Postdoc-Aufenthalt in der Arbeitsgruppe von Frank Vanhaecke an der Universität Gent, Belgien
- Dezember 2012: Promotion „Hyphenated Techniques for Speciation Analysis“
- Oktober 2006 – Dezember 2009: Doktorand in der Arbeitsgruppe von Uwe Karst an der Universität Münster
- April 2006 – September 2006: Diplomarbeit in analytischer Chemie in der Arbeitsgruppe von Uwe Karst an der Universität Münster
- Oktober 2001 – September 2006: Studium der Chemie (Diplom) an der Universität Münster

Prof. Dr. Kerstin Leopold

Institut für Analytische und Bioanalytische Chemie
Universität Ulm
Albert-Einstein-Allee 11
89081 Ulm
E-Mail: kerstin.leopold@uni-ulm.de



Bisherige Aktivität in der GDCh und der Fachgruppe

- 2014 – 2022: Vorstandsmitglied des Deutschen Arbeitskreises für Analytische Spektroskopie (DAAS)
- 2014 – 2022: Vorsitzende der Jury für den Bunsen-Kirchhoff-Preis (DAAS)
- Seit Sept 2020: Mitglied der GDCh-Auswahlkommission für den Carl-Roth-Förderpreis

Meine Kandidatur

■ Als zukünftiges Vorstandsmitglied der Fachgruppe Analytische Chemie würde ich mich freuen, aktiv die Zusammenarbeit von Wissenschaftler:innen in Industrie und Hochschule auf diesem Gebiet

mitgestalten zu können. Dabei möchte ich mich unter anderem für die Themen Nachhaltigkeit in der Analytik sowie Sichtbarkeit für und Zusammenarbeit mit anderen Fachdisziplinen engagieren.

Kurzlebenslauf

- Seit April 2011: Professorin für analytische Chemie und stellvertretende Leiterin am Institut für Analytische und Bioanalytische Chemie der Universität Ulm
- Oktober 2010 – Februar 2011: Elternzeit
- August 2010 – März 2011: Forschungsgruppenleiterin am Department Chemie der TU München
- November 2003 – Juli 2010: Habilitation in analytischer Chemie, TU München, AG M. Schuster
- April – Dezember 2008: Forschungsaufenthalt an der University of Plymouth, UK, AG P.J. Worsfold
- April – September 2003: Angestellte einer Patentanwaltskanzlei in München, Kador & Partner
- Januar 2000 – Januar 2003: Doktorandin in analytischer Chemie, AG M. Schuster, TU München
- Oktober 1994 – Dezember 1999: Studentin der Chemie (Diplom), TU München

Bereich Industrie

Dr. Michael Arlt

Merck KGaA
Site Management-Analytical Services
Frankfurter Straße 250
64293 Darmstadt
E-Mail: michael.arlt@merckgroup.com



Bisherige Aktivität in der GDCh und der Fachgruppe

- Mitglied der Fachgruppe in der GDCh seit 2013
- Sprecher des Industrieforums Analytik 2013 – 2019
- Seit 2019: Mitglied des Vorstands der Fachgruppe, stellvertretender Vorsitzender
- Ausrichtung der Frühjahrsschule Industrielle Analytik in Zusammen-

- arbeit mit den jeweils ausrichtenden Hochschullehrern: 2014 Mainz, 2015 Regensburg, 2016 Tübingen, 2017 Duisburg-Essen, 2018 Leipzig, 2019 Krefeld, seit 2019 Organisation des Programms der Frühjahrsschule
- Mitglied des Organisationskomitees der ANAKON 2019 in Münster und 2023 in Wien
 - Initiierung des Arbeitskreises GxP im Industrie Forum Analytik
 - Unterstützung der Junganalytiker bei der Organisation der Vortragsreihe „Meine ersten Tage bei...“

Meine Kandidatur

■ Ich arbeite gern an der Schnittstelle von Hochschule und Industrie. Ich mag es, jungen Studierenden das Mysterium „Industrie“ näherzubringen. Ich habe das in den Ausrichtungen der Frühjahrsschule sowie bei einigen Vortragsveranstaltungen tun dürfen und würde mir über die Vorstandsarbeit mit den anderen Vorstandskolleg:innen weitere Formate erarbeiten wollen. Ich genieße die Kontakte in die Hochschulwelt der Analytik. Direkte Austauschformate wie die ANAKON oder die analytica sind auch in einer zunehmend digitalen Welt wichtig und erhaltenswert.

Kurzlebenslauf

- Seit April 2012: Leiter Zentrale Analytik (Analytical Services) von Merck, einem internen Analytikkompetenzzentrum und -dienstleister mit 250 Mitarbeitern, Darmstadt
- August 2010 – März 2012: Leiter der Abteilung Bioanalytische Chemie, einer Abteilung der Zentralen Analytik von Merck, Darmstadt
- August 2008 – Juli 2010: Leiter Chemistry Boston, Boston, USA, eine Wirkstoffforschungsabteilung in der Pharmaforschung
- 2002 – 2010: Leiter Medicinal Chemistry Lead Finding, eine Wirkstoffforschungsabteilung in der Pharmaforschung
- 1994 – 2002: Laborleiter in Med Chem ZNS, eine Wirkstoffforschungsabteilung in der Pharmaforschung
- 1992 – 1993: Postdoc an der University of Alberta, Edmonton, Kanada, Arbeitsgruppe Ole Hindsgaul, Kohlenhydratchemie und Nukleotidchemie

- 1989 – 1992: Promotion an der Georg-August-Universität in Göttingen unter Leitung von L. F. Tietze
- 1984 – 1989: Studium der Chemie an der Georg-August-Universität in Göttingen

Dr.-Ing. Thomas Ehmann

Wacker Chemie AG
Corporate Analytics /
Head of Inorganic
Analysis
Johannes-Hess-Straße 24
84489 Burghausen
E-Mail: thomas.ehmann@wacker.com



Meine Kandidatur

■ Ich arbeite gerne mit Studierenden zusammen, um ihnen die Praxis und die Besonderheiten der industriellen Analytik näher zu bringen: In der Industrie besteht ein Spannungsfeld zwischen möglichst schneller Methodenentwicklung und gleichzeitig robusten Methoden. Ebenso wichtig sind das Miteinander mit den Mitarbeitenden im Labor und das Verhältnis untereinander.

Ich unterstütze Bachelor-, Master- und Promotionsarbeiten im engen Kontakt zwischen Hochschule und Industrie sowie die Umsetzungen der Arbeiten in die industrielle Analytik. Mein besonderes Interesse gilt der Wissensvermittlung von industriell-analytischen Themen, die in der universitären Ausbildung nicht behandelt werden.

Kurzlebenslauf

- Seit 2018: Leiter der Gruppe Anorganische Analytik Burghausen mit den Untergruppen Ultraspurenanalytik, Spurenanalytik, Ionen- und Elementanalytik, Röntgenfluoreszenz- und Spektroskopische Analytik, Physikalisch-Chemische Daten und Elementaranalytik
- 2007 – 2018: Leiter der Gruppe Flüssigchromatographie Burghausen mit den Untergruppen Size Exclusion Chromatographie und HPLC
- 2005 – 2007: Leiter der Gruppe Infrarot- und Raman-Spektrometrie Burghausen

- 1998 – 2005: Leiter der Gruppe Nicht-Metall-Analytik der Siltronic AG
- 1995 – 1998: Industriepromotion an der TU Darmstadt und der Wacker Chemietronic GmbH
- 1990 – 1994: Studium der Chemie an der TU Darmstadt

Prof. Dr. Ir. Tom van de Goor

Agilent Technologies
Deutschland
Hewlett-Packard-
Straße 8
76337 Waldbronn
E-Mail: tom_vandegoor@agilent.com



Bisherige Aktivität in der GDCh und der Fachgruppe

- Mitglied in der GDCh und der Fachgruppe seit 2015
- Im Vorstand der Fachgruppe seit Mai 2021
- Vorstandskontakt zum AK Separation Science
- Beiträge im Mitteilungsblatt
- Organisator „Meine ersten Tage bei...“
- Organisation analytica conference 2024

Meine Kandidatur

- Das ist mir wichtig / das möchte ich als Vorstandsmitglied erreichen:
- Die Fachgruppe Analytische Chemie bekannt machen
 - Unterstützung der Arbeitskreise
 - Die Fachgruppe tatkräftig bei ihrer Arbeit unterstützen und attraktiv machen für unsere Mitglieder
 - Eine kollaborative Brücke bauen zwischen Industrie und Akademiker
 - Junganalytiker unterstützen bei ihrer Karriereplanung

Kurzlebenslauf

- Seit 2017: Honorarprofessor Philipps-Universität Marburg, Fachbereich Chemie
- Seit 2017: Associate Vice President R&D Liquid Phase Separations Division
- 2007 – 2017: R&D-Direktor Flüssigkeitschromatografie & Elektrophorese

- 2002–2007: R&D-Manager Massenspektrometrie, Santa Clara, USA
- 1992–2002: Hewlett-Packard Zentrallabor, Palo Alto, USA
- Seit 1992: Mitarbeiter bei Hewlett-Packard / Agilent Technologies
- 1987–1992: Promotion in analytischer Chemie, TU Eindhoven, NL
- 1982–1987: Studium Chemieingenieurwesen (Diplom Ir), TU Eindhoven, NL

Dr. Martin C. Wende

BASF SE
Analytical and Material
Science
RGA/BE – J534
Carl-Bosch-Straße 38
67056 Ludwigshafen
am Rhein
E-Mail: martin.wende@basf.com



Bisherige Aktivität in der GDCh und der Fachgruppe

- Mitglied in der GDCh / Fachgruppe Analytische Chemie seit 1994
- 2006–2013: Vorstand des A.M.S.El
- 2014–2018: Stellvertretender Vorsitzender des DAAS
- 2019–2022: Vorsitzender des DAAS
- 2020–2023: Stellvertretender Vorsitzender der Fachgruppe Analytische Chemie
- Organisation von Junganalykertreffen in der BASF
- DAAS-Mentorenprogramm, DAAS-Laborleiter-Stammtische
- Unterstützung Frühjahrsschule Industrielle Analytische Chemie (Exkursion und Praktika)

Meine Kandidatur

■ Die Faszination für analytische Chemie hat mich während meines Studiums und in meinem ganzen bisherigen Berufsleben begleitet. Nur im engen Schulterschluss zwischen Industrie und Academia lassen sich aktuelle Themen wie die Analytik für Chemcycling, Polymer-REACH, PFAS oder Mikroplastik erfolgreich bearbeiten.

Ein übergreifendes Thema, mit dem ich mich persönlich schon länger beschäftige, ist die Weiterentwicklung der Analytik im Zeitalter der Digitali-

sierung (Analytik 4.0, Automatisierung und KI).

Ich möchte mich auch in meiner zweiten Amtsperiode als Fachgruppenvorstand weiterhin um die Belange der analytischen Chemie in Deutschland kümmern und die Erfahrung, die ich nach vielen erfolgreichen Jahren im Vorstand von analytischen Arbeitskreisen gesammelt habe, hier einbringen. Die Förderung des analytischen Nachwuchses ist für den universitären Bereich genauso wie für die Industrie von hoher Bedeutung und sollte auch weiterhin der größte Schwerpunkt der Fachgruppe bleiben. Den wissenschaftlichen Austausch zwischen den Analytikexperten, zum Beispiel auf der ANAKON, möchte ich weiter verstärken und die interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen den Arbeitskreisen intensivieren.

Kurzlebenslauf

- Seit August 2022: Mitglied im Führungsteam „Analytical and Material Science“ (BASF SE). Arbeitsschwerpunkte: Elementanalytik, Speziation und Analytik 4.0
- Januar 2022: Ernennung zum BASF-Fachexperten (Senior Research Fellow) auf dem Gebiet „Elementanalytik und Speziation“
- 2015–2022: Mitglied im Führungsteam des „Kompetenzzentrums Analytik“ (BASF SE)
- 2011–2015: Leiter der Analytik der BASF-Katalysatorforschung in den USA. Arbeitsschwerpunkte: Spektroskopie und Elektronenmikroskopie
- 2009–2011: Manager eines großen europäischen Analytikprojekts für BASF SE
- 2007–2009: Manager im strategischen Einkauf der BASF SE, Ludwigshafen
- 2002–2007: Laborleiter „Elementanalytik“ innerhalb der BASF-Forschung in Ludwigshafen
- 2000–2002: Applikationschemiker für Atomspektrometrie bei Perkin-Elmer

Dr. Diana Dötsch

Basell Polyolefine
GmbH
Industriepark Höchst,
C657
65926 Frankfurt a. M.
E-Mail: diana.doetsch@lyondellbasell.com



Bisherige Aktivität in der GDCh und der Fachgruppe

■ Seit 2019: Mitglied des Industrieforums Analytik, dadurch auch Teilnahme an den Benchmarking- und Benchmarking-Aktivitäten zusammen mit anderen Industrielaboren

Meine Kandidatur

■ Durch die Arbeit im Industrieforum Analytik sind persönliche Kontakte entstanden, die im analytischen Umfeld der chemischen Industrie sehr wertvoll sind. Es zeigt sich immer wieder, dass man gemeinsam die Anforderungen an die Labore, die unter anderem aus regulatorischen Gründen an die Firmen herangetragen werden, viel besser bewältigen kann. Gerade beim Thema Kreislaufwirtschaft, welches mir sehr am Herzen liegt und welches in den Firmen und Laboratorien immer wichtiger wird, ist deshalb der Kontakt zu Hochschulen, Universitäten und Forschungseinrichtungen essenziell. Ich möchte ein Bindeglied zwischen der Industrie und Junganalytiker:innen sein, um hier einen fortlaufenden Wissenstransfer zu ermöglichen und um junge Talente zu unterstützen, die sich als Berufseinsteiger:innen den neuen Herausforderungen in der Industrie stellen müssen.

Kurzlebenslauf

- Seit 2019: Leitung der Abteilung Polymeranalytik und Polymerphysik bei LyondellBasell in Frankfurt am Main mit Schwerpunkt Polyethylenanalytik und nachhaltige Polyolefinlösungen
- 2008–2018: Produktentwicklung Polyethylen bei LyondellBasell, zuständig für Polymerisationstechnologien (Gasphase, Suspension, HDPE, LDPE, Hochdruck, Niederdruck etc.)
- 2005–2007: Leitung Rheologielabor, LyondellBasell

- 2001–2004: Promotion mit Schwerpunkt NMR und Oberflächenchemie am Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz, im Arbeitskreis von Hans Wolfgang Spiess
- 1997–2001: Chemiestudium am King's College London, UK (Master of Science)

Bereich Junganalytik

Dr. Jens Fangmeyer

Currenta GmbH & Co.
OHG
Kaiser-Wilhelm-Allee 80
51373 Leverkusen
E-Mail: jens.fangmeyer
@currenta.biz



Bisherige Aktivität in der GDCh und der Fachgruppe

- Mitglied im Vorstand der Fachgruppe Analytische Chemie für die Junganalytiker:innen
- Etablierung der Vortragsreihe „Meine ersten Tage bei...“
- Etablierung des LinkedIn-Auftritts der Fachgruppe Analytische Chemie
- Mitglied des Helferteams zur Organisation der ANAKON 2019 in Münster
- Teilnahme am Doktorandenseminar des AK Separation Science in Hohenroda 2018 und 2019
- Teilnahme an der Frühjahrsschule Industrielle Analytik 2016 in Tübingen

Meine Kandidatur

■ Die letzten vier Jahre waren eine sehr herausfordernde Zeit für die gesamte Community der analytischen Chemie, in welcher der persönliche Austausch untereinander definitiv zu kurz kam. Als Vertreter der Junganalytiker:innen im Vorstand der Fachgruppe Analytische Chemie möchte ich mich daher noch mehr für die Gruppe der Studierenden und Berufseinstiegenden einsetzen. Hier haben wir in den vergangenen Jahren mit der Vortragsreihe „Meine ersten Tage bei...“ eine tolle Veranstaltung ins Leben gerufen, die bei allen Teilnehmenden sehr gut ankommt und Studierende aus verschiedenen Regionen schnell und einfach zusammenbringt. Wir konnten damit vielen Studierenden einen Ein-

druck vermitteln, wie divers die Beschäftigungsfelder der analytischen Chemie sind. Diese Reihe gilt es, am Leben zu halten, stetig weiterzuentwickeln und das entstandene Netzwerk weiter zu pflegen.

Darüber hinaus möchte ich meine Erfahrung aus der bisherigen Zeit im Vorstand der Fachgruppe dafür nutzen, weitere Formate zu schaffen bzw. nach der Corona-Pause wiederzubeleben, um den Austausch zu intensivieren und die Fachgruppe bei den Studierenden prä-senter zu machen.

Kurzlebenslauf

- Seit Juni 2020: Laborleitung Elementanalytik bei Currenta GmbH & Co. OHG
- Oktober 2017 – Mai 2020: Promotion in analytischer Chemie an der WWU Münster unter der Leitung von Uwe Karst
- Oktober 2015 – September 2017: Masterstudium in Chemie an der WWU Münster und der University of Colorado in Boulder, CO, USA
- Oktober 2012 – September 2015: Bachelorstudium in Chemie an der WWU Münster
- August 2009 – September 2012: Berufsausbildung zum Chemielaboranten bei der Firma Dynamit Nobel Explosivstoff- und Systemtechnik GmbH (zugehörig der Novasep Gruppe) in Leverkusen, im Anschluss zweimonatige Übernahme in der zentralen Analytik

Catharina Erbacher

Institut für Anorganische und Analytische Chemie

Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Corrensstraße 48
48149 Münster

E-Mail: catharina.erbacher@uni-muenster.de



Bisherige Aktivität in der GDCh und der Fachgruppe

- Teilnahme an der Frühjahrsschule Industrielle Analytik 2019 in Krefeld

- Teilnahme mit Vorträgen an GDCh-Veranstaltungen: Doktorandenseminar DAAS 2021, Doktorandenseminar AK Separation Science 2022, analytica conference 2022

Meine Kandidatur

■ Als Vertreterin der Junganalytiker:innen möchte ich die Diversität dieser Gruppe, bestehend aus Studierenden, Doktorierenden und Berufseinstiegenden, nutzen, um die Netzwerke der einzelnen Mitglieder auszuweiten. Hierbei werde ich mich zum einen für die Verbesserung des Netzwerks zwischen Studierenden verschiedener Universitäten einsetzen. Zu diesem Zweck möchte ich vermehrt auf verschiedenen Konferenzen Treffen für Junganalytiker:innen als Gelegenheit zum Austausch organisieren. Zusätzlich würde ich diese Treffen gerne nutzen, um insbesondere die Kontakte zwischen Doktorierenden kurz vor Abschluss ihrer Promotion und Berufseinstiegenden zu vertiefen. Dies soll einen Austausch von Erfahrungen im Rahmen des Berufseinstiegs ermöglichen.

Da ich selbst erst durch die Frühjahrsschule Industrielle Analytik im Masterstudium von den Aktivitäten der Fachgruppe erfahren habe, würde ich außerdem gerne ihre Präsenz in früheren Fachsemestern erhöhen. Eine Möglichkeit hierfür besteht darin, erfolgreiche Formate wie „Meine ersten Tage bei...“ fortzuführen und auch in jüngeren Semestern zu bewerben. Durch die Einblicke in verschiedene Unternehmen kann das Berufsbild des analytischen Chemikers aus erster Hand auf eine interessante Art und Weise vorgestellt werden.

Kurzlebenslauf

- Seit November 2020: Promotionsstudium in analytischer Chemie in der Arbeitsgruppe von Uwe Karst an der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster
- Oktober 2018 – September 2020: Masterstudium in Chemie an der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster
- Januar 2020 – Februar 2020: Industriepraktikum bei Merck KGaA, Darmstadt

- September 2019 – Dezember 2019: Forschungspraktikum in der Arbeitsgruppe von Risto Kostiaainen an der University of Helsinki, Finnland
- Oktober 2015 – August 2018: Bachelorstudium in Chemie an der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

Stephanie Bock

Auf der Morgenstelle 18
72076 Tübingen
E-Mail: Stephanie.Bock
@uni-tuebingen.de



Bisherige Aktivität in der GDCh und der Fachgruppe

■ Ich habe die Fachgruppe kennenlernen können über die Doktorandenseminare und die Vortragsreihe „Meine ersten Tage bei...“. Gerne möchte ich Teil dieses Netzwerks sein und mich mit meinen Ideen künftig aktiv einbringen.

Meine Kandidatur

■ Mir ist es wichtig, den Austausch zwischen den Junganalytiker:innen der verschiedenen Universitäten im Rahmen von neu belebten Junganalytiktreffen zu stärken. Ich möchte Formate schaffen, die einen intensiven Austausch zwischen Fachgruppenmitgliedern im Studium, im Berufseinstieg und mit Berufserfahrung ermöglichen. Dies gibt Raum für Fragen zur Vereinbarkeit von Beruf und Familie, zum Bewerbungsprozess sowie zu den Wünschen der jungen Analytiker:innen an ihre zukünftigen Arbeitgeber.

Die Sichtbarkeit der Fachgruppe und speziell der Junganalytiker:innen in den sozialen Medien liegt mir am Herzen.

Kurzlebenslauf

- Seit 2021: Promotion, Universität Tübingen
- Seit 2018: Dozentin Hector-Kinderakademie
- 2018 – 2021: M.Sc. Chemie, Universität Tübingen
- 2014 – 2018: B.Sc. Chemie; Universität Tübingen

Chemie Aktuell

Sprengstoffspurendetektor für den mobilen Einsatz

Ein Gründerteam der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) will einen mobilen Sprengstoffspurendetektor auf den Markt bringen.

■ Im zivilen Sicherheitsbereich werden Sprengstoffe, etwa an den Sicherheits-schleusen von Flughäfen, bislang vor allem durch ortsfeste Standgeräte nachgewiesen. Die wenigen aktuell auf dem Markt angebotenen portablen Geräte sind mit durchschnittlich fünf Kilogramm Gewicht nur sehr eingeschränkt für den mobilen Einsatz geeignet. Außerdem sind Wartung und Reinigung dieser Geräte sehr kostenintensiv.

„Für die meisten Anwender:innen sind die Geräte zudem zu teuer in der Anschaffung“, erklärt Mustafa Biyikal, Experte für chemische Sensoren an der BAM. „Sie vertragen sich auch nicht mit Wasser und sind daher bei hoher Luftfeuchtigkeit anfällig für Fehlalarme. Da sie auf Basis der Ionenmobilitätsspektroskopie arbeiten, enthalten einige Geräte eine radioaktive Quelle und unterliegen damit zahlreichen Sicherheitsbestimmungen bei Transport, Lagerung, Anwendung und Entsorgung.“

Biyikal hatte sich vor einigen Jahren das Ziel gesetzt, einen Sprengstoffdetektor zu entwickeln, der nicht nur leistungsstärker, sondern auch leichter und kostengünstiger als die vorhandenen Geräte ist. Zusammen mit Knut Rurack, seinem Mentor an der BAM, entwickelte er eine neuartige Nachweischemie, die auf chemisch-optischer Messtechnik beruht und hält dafür inzwischen mehrere

Patente. Dabei werden spezielle Farbstoffe genutzt, um Sprengstoffe zu detektieren. Sie reagieren auf die Sprengstoffe, zum Beispiel TNT, und ändern ihr Fluoreszenzverhalten; dies wiederum wird durch einen Fotoelektronenvervielfacher registriert und in ein elektronisches Signal umgewandelt. Der Nachweis erfolgt in Sekundenschnelle.

Ein Alleinstellungsmerkmal dabei: Nach Messung einer stark kontaminierten Probe muss lediglich der Chip gewechselt, nicht aber das ganze Gerät aufwendig gereinigt werden. Es gelang ihnen auch, die Nachweise für Nitro-, Nitrat-, Peroxid- und anorganische Sprengstoffe auf einem briefmarkengroßen Chip (Lab-on-a-Chip) unterzubringen und somit an Gewicht einzusparen.

Jetzt will der Sensorexperte den nur 1,3 Kilogramm schweren Sprengstoffdetektor mit einem Start-up zur Marktreife bringen. Dafür gründet er zusammen mit seinen BAM-Kollegen Martin Kaiser und Bruno Jan Rycek, Experten für Künstliche Intelligenz bzw. für Finanzen und Marketing, sowie Christopher Walter, einem Ingenieur aus der Luftfahrtindustrie, die True Detection Systems GmbH. In den kommenden anderthalb Jahren wird das Team durch das EXIST-Förderprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klimaschutz unterstützt.



Das Gründerteam von True Detection Systems: Christopher Walter, Mustafa Biyikal, Martin Kaiser und Bruno Jan Rycek (von links). (Foto: BAM)

Ab 2025 will das Team den Sprengstoffsensoren zunächst in der EU und Großbritannien auf den Markt bringen, später dann auch in den USA, Kanada und Asien.

„Die Ausgründung der True Detection Systems GmbH im wichtigen Bereich der zivilen Sicherheit zeigt, wie anwendungsnah und innovativ an der BAM geforscht wird“, sagt BAM-Präsident Ulrich Panne. „Sie ist ein weiteres Beispiel für einen erfolgreichen Technologietransfer von der Wissenschaft in die Praxis.“

Quelle: BAM

Bioindikator für PFAS-Vorkommen

Die Leber von Wildschweinen zeigt an, wie hoch die PFAS-Belastung ist

■ PFAS (per-/polyfluorierte Alkylsubstanzen) gelten als Ewigkeitschemikalien: Viele sind toxisch, andere wiederum sehr mobil oder akkumulieren sich in der Nahrungskette. Allerdings sind alle extrem langlebig und verteilen sich in der gesamten Umwelt. Wo dort die Belastungspunkte der PFAS liegen, ist nur mit sehr hohem Aufwand nachzuweisen. Deshalb braucht es Indikatoren. Wie ein Forschungsteam, das am Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ) koordiniert wird, nun im Fachmagazin *Science of the Total Environment* schreibt, kann die Leber von Wildschweinen als Bioindikator für diesen Zweck genutzt werden: Sie zeigt an, wie hoch die PFAS-Belastung vor Ort ist.

Die Forscherinnen und Forscher hatten für ihre Studie 66 PFAS-Verbindungen in den Fokus genommen, die sich in drei Kategorien einordnen lassen: Bereits seit längerem reglementierte PFAS-Gruppen; neue PFAS, die die Industrie als Ersatzstoffe für reglementierte PFAS einsetzt, sowie Vorläufersubstanzen, die sich zu anderen, langlebigeren PFAS abbauen können. Weil sich mit diesen Einzelanalysen jedoch nur ein kleiner Ausschnitt der mehr als 10000 von der Industrie eingesetzten PFAS in der Umwelt entdecken und viele polyfluorierte Verbindungen sich mangels Verfügbarkeit von analytischen Standards nicht



Die Leber von Wildschweinen eignet sich als Bioindikator für PFAS-Belastungen der Umwelt. (Foto: A. Künzelmann / UFZ)

messen lassen, bestimmte das Forschungsteam zudem mit einem neuen weiterentwickelten Verfahren, dem TOP(Total Oxidizable Precursors)-Assay, einen Summenparameter für PFAS im Wildschwein. „Der Summenparameter gibt an, wie viele Vorläuferverbindungen insgesamt in einer Probe vorhanden sind, die noch zu langlebigen Abbauprodukten reagieren können“, erklärt Jana Rupp, Umweltchemikerin am UFZ und Erstautorin des Papers. Der TOP-Assay liefert aber keine Informationen, wie hoch die Konzentrationen der einzelnen Vorläuferverbindungen sind.

Zum Einsatz kam die Analytik, die das UFZ gemeinsam mit dem DVGW-Technologiezentrum Wasser in Karlsruhe entwickelte, in Deutschland an drei Standorten mit unterschiedlichen Voraussetzungen: Ein Hotspot-Standort liegt in der Nähe der badischen Stadt Rastatt, wo vermutlich bis in die 2000er Jahre hinein PFAS-belasteter Papierschlamm als recycelter Kompost auf den Feldern ausgebracht wurde (siehe *Mitteilungsblatt* 03/2021). Beim zweiten Hotspot-Standort handelt es sich um ein Industriegebiet in Süddeutschland. Die dritte Untersuchungsfläche im Nordosten Deutschlands hat keine Standortauffälligkeiten, sodass sich dort die Hintergrundbelastung der PFAS feststellen lässt.

Mobile Allesfresser mit gut durchbluteter Leber

■ Dass die Wahl der Forschenden auf die Wildschweinleber fiel, hat mehrere Gründe. „Das Wildschwein ist weit verbreitet und wird überall gejagt. Über die Tierart kann man deswegen einen sehr guten Überblick bekommen, wo in

Deutschland Hotspots der Verbreitung der PFAS sind“, erklärt Jana Rupp. Da das Wildschwein sehr mobil ist und ein mehrere Quadratkilometer großes Areal beansprucht, spiegelt es damit auch die Belastung auf einer größeren Fläche wider – ein Vorteil gegenüber Bodenproben, mit denen es deutlich schwerer ist, Aussagen zur PFAS-Belastung größerer Flächen zu treffen.

Die Leber wiederum ist gut geeignet, weil sie sehr gut durchblutet ist: „PFAS reichern sich nicht wie die meisten Umweltschadstoffe im Fettgewebe an, sondern binden sich eher an Proteine. Deswegen zirkulieren sie im Blut und sind in der Leber sehr gut nachzuweisen“, erklärt Jana Rupp. Im Vergleich zu anderen an Land lebenden Tierarten wie Rotwild, Reh oder Gämse, die theoretisch ebenso als Indikatorart für PFAS infrage kommen könnten, hatten die Forscher:innen in einer anderen Studie festgestellt, dass die PFAS-Konzentrationen in der Wildschweinleber am höchsten sind. Die Gründe dafür: Das Wildschwein ist Allesfresser und steht an der Spitze der Nahrungskette, frisst also Mäuse, Frösche, Schnecken oder Würmer, die ihrerseits belastet sind. Zudem wühlt es viel im Boden und nimmt darüber indirekt auch PFAS auf.

Ergebnisse

■ In der Analyse zeigte sich nun, dass sich mit dem Bioindikator Wildschweinleber die PFAS-Belastung im Lebensraum des Tieres gut abbilden lässt. „Die PFAS sind überall und zum Teil auch in großen Mengen weit verbreitet. Wir konnten deutlich erhöhte Gehalte in Regionen mit bekannter-

maßen erhöhter PFAS-Belastung nachweisen“, sagt Thorsten Reemtsma, Leiter des UFZ-Departments Analytik und Letztautor der Studie. So war beispielsweise die PFAS-Konzentration in der Umgebung des Industrieunternehmens in Süddeutschland fast doppelt so hoch wie auf jenen Flächen, auf denen PFAS-belasteter Papierschlamm in der Landwirtschaft eingesetzt wurde – und fast achtmal höher als die Konzentrationen auf den Flächen mit einer Hintergrundbelastung, die als normal PFAS-belastet gelten kann.

Über die Leber konnten auch unterschiedliche Verteilungsmuster der verschiedenen PFAS-Gruppen an den drei Standorten festgestellt werden: So dominiert beim Industriestandort noch immer eine ältere PFAS-Substanz, die bereits verboten ist, aber als Altlast aufgrund ihrer extremen Langlebigkeit weiterhin nachgewiesen werden kann. Zudem fanden die Forscher dort auch neuere PFAS-Substanzen, die von der Industrie als Ersatz für verbotene PFAS-Gruppen eingesetzt werden. An den beiden anderen Probenahmeorten kommen fast ausschließlich ältere PFAS-Substanzen vor.

Ein ähnliches Belastungsmuster stellen die Forschenden auch in Bodenproben der zwei Hotspots fest – als wäre den Standorten ein chemischer Fingerabdruck aufgedrückt. „Der Vergleich der PFAS-Kontamination von Wildschweinen und Böden belegt, dass Wildschweinleber als Bioindikator für die PFAS-Kontamination der terrestrischen Umwelt geeignet ist“, bilanziert Thorsten Reemtsma. Noch sind viele lokale Belastungen in Deutschland unentdeckt, auch weil der analytische Aufwand mittels Bodenproben viel zu aufwendig ist. „Mit der Leber der Wildschweine lassen sich die belasteten Gebiete deutlich unkomplizierter ausfindig machen und eingrenzen.“

Quelle: Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung

Originalpublikation

J. Rupp, M. Guckert, U. Berger et al., „Comprehensive target analysis and TOP assay of per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in wild boar livers indicate contamination hot-spots in the environment“, *Science of the Total Environment* 2023. doi: 10.1016/j.scitotenv.2023.162028

Künstliche Intelligenz unterstützt Analyse metallischer Werkstoffe

Bisher ist die Analyse kristalliner Mikrostrukturen in metallischen Werkstoffen technisch herausfordernd und besonders zeitaufwendig. Forschende aus Werkstofftechnik und Informatik haben hierfür jetzt einen Algorithmus entwickelt: Aus nur wenigen Messdaten einer Röntgenstrukturanalyse rekonstruiert er die Ausrichtung der Kristallstrukturen im Werkstoff vollständig und genau.

■ Für die Eigenschaften metallischer Werkstoffe ist die innere Struktur aus kristallinen Einzelbereichen, sogenannten „Körnern“, entscheidend. Ihre Anordnung beeinflusst maßgeblich die Festigkeit und das Verhalten beim Verformen der Metalle. Formgedächtnislegierungen zum Beispiel verändern ihre Form durch temperaturbedingte Änderungen des inneren Kristallaufbaus. „Eine geeignete Mikrostruktur in diesen speziellen Werkstoffen zu schaffen, ist eine große technische Herausforderung. Das im Detail mit Röntgenanalysen zu überprüfen, ist besonders aufwendig“, erklärt Thomas Niendorf, Leiter des Fachgebiets Metallische Werkstoffe an der Universität Kassel.

Hierfür nutzen die Forschenden häufig die Methoden der Röntgendiffraktometrie. Dabei richten sie einen gebündelten Röntgenstrahl auf die Werkstoffproben. An dessen Kristallgitter wird der Strahl gebeugt. Ein Detektor empfängt die gebeugten Röntgenstrahlen, und eine Software stellt ihre Intensität in einer sogenannten Polfigur dar. Die Forschenden drehen und kippen die Werkstoffprobe, bis aus den Messdaten eine Polfigur entsteht. Diese Messreihen dauern oft mehrere Tage lang an. Anhand der Polfiguren können sie rechnerisch die Anordnung und Ausrichtung der Kristalle im Metall ermitteln.

„Mit unserem speziell entwickelten Algorithmus sind wir drei Mal schneller“, berichtet David Meier, Informationswissenschaftler vom Helmholtz-Zentrum Berlin und dem Fachgebiet Intelligente Eingebettete Systeme der Universität Kassel. „Mit maschinellem Lernen ist er so trainiert, dass er aus nur einem kleinen Ausschnitt der realen Messdaten von wenigen Stunden eine vollständige Rekonstruktion der Polfigur erstellt. Sie unterscheidet sich nur minimal vom Original.“



Forschende am Fachgebiet Metallische Werkstoffe bei den Vorbereitungen einer Röntgenstrukturanalyse (Foto: P. Blafield)

Dafür erstellte Meier gemeinsam mit den Werkstofftechnikern Polfiguren von zufälligen Anordnungen von Körnern im Metall mit einer Simulation. An diesen simulierten Abbildern erlernt eine individuell angepasste Deep-Learning-Architektur, aus einem Ausschnitt die vollständige Polfigur zu erzeugen. Dieses Rekonstruktionsnetzwerk kann zu einem kleinen Ausschnitt einer real gemessenen Polfigur die übrigen Bereiche rekonstruieren.

Der anschließende Vergleich von Rekonstruktion und realen, vollständigen Messergebnissen der Probe zeigt: Das Rekonstruktionsnetzwerk kann mit ausreichender Genauigkeit für das angewandte Beispiel die Probe analysieren. Aber: Um statistisch zu beweisen, dass die entwickelte Methode in anderen realen Szenarien funktioniert, muss sie in Folgestudien mit weiteren Proben aus unterschiedlichen Materialien evaluiert werden, sagt David Meier.

Quelle: Universität Kassel

Originalpublikation

D. Meier, R. Ragunathan, S. Degener et al., „Reconstruction of incomplete X-ray diffraction pole figures of oligocrystalline materials using deep learning“, *Scientific Reports* 2023, 13, 5410. doi: 10.1038/s41598-023-31580-1

ABC in Kürze

Neuigkeiten rund um Analytical and Bioanalytical Chemistry

Neues von ABC in Zahlen

■ Ende Juni gab Clarivate Analytics mit dem Journal Citation Report den neuen Impact Factor bekannt. Die folgende Liste gibt die Indikatoren wieder, welche die anhaltende positive Entwicklung von ABC zeigt:

- Impact Factor 2022: 4,3 (2021: 4,478; 2020: 4,142; 2019: 3,637) – ABC steht wieder auf Platz 20/86. Das Absinken des Impact Factors 2022 ist einer neuen Berechnungsgrundlage zuzuschreiben, welche die meisten Journale ähnlich getroffen hat.
- Total Citations 2022: 35929 (2021: 39315; 2020: 35942; 2019: 31192)
- CiteScore 2022: 7,5 (2021: 7,2; 2020: 6,2; 2019: 6,2)
- Google Scholar: H5-Index 2022: 63 (2021: 61; 2020: 58; 2019: 57)
- Usage/Downloads 2022: 3167707 (2021: 2675702; 2020: 1989015; 2019: 1694427)
- Overall Author Satisfaction 2022: 97%

Werden Sie Teil der ABC-Erfolgsgeschichte. Als Autor:in profitieren Sie von der hohen Sichtbarkeit Ihrer Arbeit in ABC. Wir freuen uns auf Ihre Einreichung.

Neues aus dem Team der ABC-Herausgeber

■ Diesen Sommer ist ABCs langjähriger Editor Gérard Hopfgartner aus dem Team ausgeschieden. Wir danken ihm herzlich für die Jahre der Zusammenarbeit, als Herausgeber und ehemaliger Vertreter der Schweizer Miteigentümer. Für die Zukunft wünschen wir ihm alles Gute.

Ende Juni fand das erste gemeinsame Editorentreffen mit den 2023 neu berufenen Herausgebern Soledad Cárdenas Aranzana, Alberto Cavazzini und Ulrich Panne statt. Auch die zwei chinesischen Herausgeber Qiuquan Wang (Xiamen University) und Wei Wang (Nanjing University) konnten endlich nach Jahren der Pandemie einreisen



Editor-Meeting. Von links: Joseph Zaia, Adam Woolley, Antje Baeumner, Alberto Cavazzini, Sabine Szunerits (im Hintergrund), Ulrich Panne, Wei Wang, Soledad Cárdenas Aranzana, Qiuquan Wang, Nicola Oberbeckmann-Winter. (Fotos: N. Oberbeckmann-Winter)

Adam Woolley
übergibt an Antje
Baeumner – ABC hat
eine neue Chair-
Editorin.



und teilnehmen. Stephen Wise war leider verhindert.

Bei guter Stimmung diskutierte das Team zwei Tage intensiv die zukünftige Ausrichtung der Zeitschrift. Am Ende des Meetings übergab der Chair-Editor Adam Woolley die Verantwortung an Antje Baeumner, die zum 1. Juli die Chair-Editorenschaft übernommen hat. Adam Woolley danken wir herzlich für die hervorragende Zusammenarbeit als ABCs erster Chair-Editor. Unter seiner Führung des Editorenteam stellte ABC

sich in den vergangenen sechs Jahren neu auf und legte die Grundlagen für den derzeitigen positiven Trend. Auf die Zusammenarbeit mit Antje Baeumner in ihrer neuen Funktion freuen wir uns sehr und werden gemeinsam mit ihr und dem Team an der Fortsetzung arbeiten.

Neues aus den Rubriken

■ Im Juli gibt es für Rätselliebhaber in der Reihe der Analytical Challenges einen neuen Beitrag, dieses Mal vom

Rubrikherausgeber Juris Meija geschrieben: „Best measurement challenge“.¹⁾ Einreichungsdatum für die Lösung ist der 1. Oktober; dann wird auch das nächste Rätsel publiziert.

Auch dieses Mal lädt die Rubrik „ABCs of Education and Professional Development in Analytical Science“ mit einem neuen Beitrag zum Lesen ein: „Buddy check' peer observation activity for hands-on learning in analytical chemistry laboratories“.²⁾

So lesen Sie ABC online

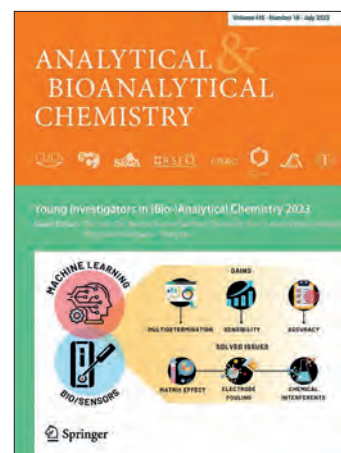
■ Alle ABC-Ausgaben und Topical Collections sind online unter: www.springer.com/abc. Der Klick in der rechten Spalte unter „Explore“ auf „Volumes and issues“ führt zur Übersicht über die ABC-Hefte („Volumes“), zu den noch keinem Heft zugeordneten Beiträgen („Online First“) und zu den Themenschwerpunkten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

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

Themenschwerpunkte im Herbst

■ Das Highlight des Sommers ist die sechste Ausgabe unserer Serie Young Investigators: „Young Investigators in (Bio-)Analytical Chemistry 2023“. Dank der sechs Gastherausgeber Zhi-Yuan Gu (CN), Beatriz Jurado Sánchez (ES), Thomas H. Linz (US), Leandro Wang Hantao (BR), Nongnoot Wongkaew (DE) und Peng Wu (CN) enthält die diesjährige Collection einen Spitzenwert von 78 Beiträgen; ein paar wenige Nachzügler runden das Bild in den kommenden Monaten ab. Überzeugen Sie sich von der außergewöhnlichen Qualität der Beiträge (<http://bit.ly/YoungInv2023>) und lernen Sie die Gastherausgeber in einem Interview kennen: link.springer.com/article/10.1007/s00216-023-04775-8.

Im Namen des Herausgeberteams und der ABC-Redaktion wünsche ich Ihnen eine schöne restliche Sommerzeit
Nicola Oberbeckmann-Winter,
Managing Editor ABC, Springer
(ORCID iD 0000-0001-9778-1920)



Das Cover zum Heft 415/18: Young Investigators in (Bio-)Analytical Chemistry 2023. Die Abbildung gehört zum Beitrag von Renato S. Lima und Mitarbeitenden.³⁾

Literatur

1) doi: 10.1007/s00216-023-04732-5

2) Anal. Bioanal. Chem. 2023, 415, 3299–3303.

doi: 10.1007/s00216-023-04755-y

3) doi: 10.1007/s00216-023-04514-z



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Inhouse-Kurse



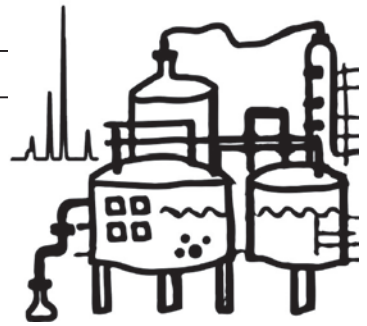
Profitieren Sie von unserem langjährigen Know-how und nutzen Sie zahlreiche Vorteile!

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

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

Datenintegrität in der chemischen Analytik

Daten sind das Herz der Analytik – umso wichtiger ist es, dass diese Daten richtig und verlässlich sind und sich nicht manipulieren lassen. Wie lässt sich das garantieren?



■ Der Polarforscher Robert E. Peary erreichte nach eigenen Angaben 1909 den Nordpol, was jedoch bis heute nicht voll anerkannt ist. Der Grund liegt in mangelhaften Aufzeichnungen. So enthält sein Routenbuch keine detaillierte Wegbeschreibung, die Seite des Tages der Polerreicherung ist leer bis auf das Datum. Er führte nur eine Dokumentation aus losen Blättern, jedoch kein echtes Logbuch. Die letzten Tage führte er die Tour ohne Expertenbegleitung durch, eine Bestätigung seitens Fachleute lag somit nicht vor. Und schließlich waren seine Tagesetappen rechnerisch nicht plausibel.¹⁾

Dieses Beispiel zeigt in einem allgemein verständlichen Kontext, wie wichtig verlässliche Daten sind – in der chemischen Produktion und Analytik wie auch in den meisten anderen Branchen. Im chemisch-pharmazeutischen Bereich haben sich die Mängel, die Inspektionen der US-amerikanischen Food and Drug Administration (FDA) fanden, im Zeitraum 2008 bis 2017 etwa verzehnfacht (Abbildung 1).²⁾ Dies liegt jedoch nicht daran, dass mehr Mängel existieren, sondern an der Tatsache, dass sich Auditorinnen und Auditoren inzwischen stärker bewusst sind, wie wichtig die Datenintegrität ist.

In der Analytik werden schon seit ihren Anfängen Daten erzeugt. Waren dies zu Beginn überwiegend wenige handschriftliche Aufzeichnungen, so sind dies heute Unmengen meist elektronischer Daten. Diese Daten definieren die Eigenschaften, aber auch die Qualität vielfältiger chemischer Produkte und unterliegen somit hohen Erwartungen an ihre Verlässlichkeit und Richtigkeit, also ihrer Integrität. Die Höhe der Erwartungen ist abhängig vom Einsatzgebiet der Produkte: bei rein technischen Chemikalien geringer als bei Wirkstoffen für Arzneimittel.

Anforderungen an die Datenintegrität sind dadurch auch in verschiedenen Gesetzen und Normen zu finden, zum Beispiel ISO 9001, Eudralex GMP (die europäische Gesetzgebung zu Arzneimitteln) und das US-Gegenstück, die 21 CFR Part 11, und andere.³⁻⁵⁾

Wie definiert sich der Begriff „Datenintegrität“?

■ Die ISO 9001 legt lediglich sehr allgemeine Anforderungen an die Integrität von Daten fest. So sollen Dokumente gelenkt werden, das bedeutet, ein Verfahren wird definiert, das festlegt, wie Dokumente erstellt, geprüft, genehmigt, gekennzeichnet, verteilt und aktualisiert werden. Auch wird ein angemessener Schutz gefordert, um die Vertraulichkeit zu sichern und vor unsachgemäßem Gebrauch zu schützen.

Weiterhin wird eine geeignete Ablage für die Informationen gefordert, die deren Lesbarkeit über den Erhaltungszeitraum garantiert. Die Überwachung von Änderungen (zum Beispiel durch Versionskontrolle) wird ebenso verlangt

wie der Schutz vor unbeabsichtigter Veränderung.

Wesentlich spezifischere Vorgaben finden sich aufgrund des hohen Risikos im chemisch-pharmazeutischen (GxP-) Bereich. Hier werden behördliche oder gesetzliche Vorgaben seitens der Weltgesundheitsorganisation (WHO), der Europäischen Arzneimittel Agentur (EMA), der FDA sowie den Ministerien vieler weiterer Staaten definiert.

Zusammenfassend hat sich für diese Definitionen das Akronym „ALCOA“ durchgesetzt, häufig ergänzt zu „ALCOA+“:

- Attributable – einer Handlung, Person, Produkt etc. zuzuordnen
- Legible – für einen Menschen lesbar und verständlich
- Contemporaneous – zeitnah erfasst
- Original – originale Daten oder diesen vollständig entsprechende Kopie
- Accurate – präzise, vollständig, korrekt und unverändert

Hinzu kommen für das „Plus“ die abgeleiteten Eigenschaften Complete (alle Daten inklusive Wiederholung, Reprozessierung

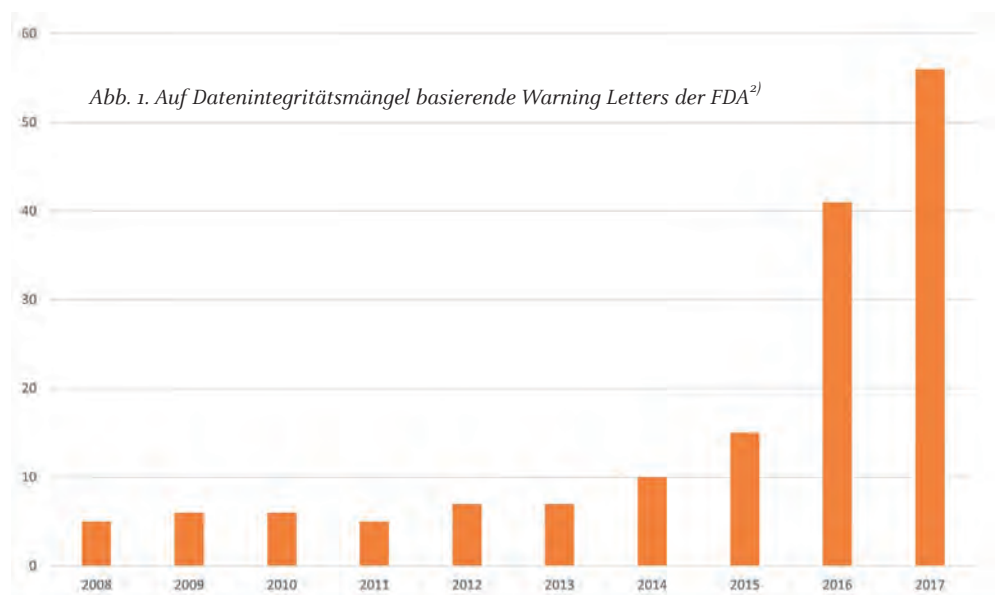


Abb. 1. Auf Datenintegritätsmängel basierende Warning Letters der FDA²⁾



sind vorhanden), Consistent (zum Beispiel automatisierte, unwidersprüchliche Datumsstempel), Enduring (dauerhaft lesbar) und Available (für die gesamte Aufbewahrungsdauer verfügbar).

Wie lässt sich die Integrität von Daten sichern?

■ Erfahrungsgemäß sind Verstöße gegen diese Prinzipien in den meisten Fällen unbeabsichtigte Fehler, lediglich etwa jeder fünfte Verstoß wird vorsätzlich begangen. Den Fehlern zugrunde liegen mangelhafte Prozesse, Unwissenheit, Unachtsamkeit oder technische Probleme. Vor allem bei elektronischen Daten können technische Maßnahmen diese Fehler, aber auch manche vorsätzliche Datenmanipulationen verhindern. Wo technische Maßnahmen nicht möglich sind, werden organisatorische Regelungen getroffen und Kontrollen eingeführt.

In der Praxis wirken sich diese Anforderungen je nach Arbeitsumfeld (unreguliert, ISO, GxP) unterschiedlich stark auf Softwareeigenschaften, Regularien und Verhaltensweisen aus. Im Folgenden werden allgemein anwendbare Maßnahmen aufgezeigt, die die Integrität von Daten sichern.

Da der Trend immer stärker zu elektronischen Daten geht, stehen IT-Systeme ganz besonders im Fokus der Anforderungen. Grundlegend sind hier anzuwenden die Prinzipien der Rechteenteilung (Nutzende und Administratoren organisatorisch getrennt, um Interessenskonflikte zu vermeiden) und der minimalen Zugriffsrechte. Diese reduzieren das Risiko vorsätzlicher Datenmanipulation.

Ein IT-System benötigt zur Gewährleistung dieser Prinzipien eine Benutzerverwaltung oder die Anbindung an ein zentrales Directory, zum Beispiel Microsoft Active Directory. In dieser Benutzerverwaltung werden Rollen definiert, wie Trainee, Anwender, Prüfer und Administrator, denen nur genau die Berechtigungen eingeräumt werden, die für die jeweilige Tätigkeit erforderlich sind.

Um Änderungen im IT-System oder den Messmethoden nachvollziehen zu können, ist ein Audit-Trail erforderlich. Ähnlich einem Logfile zeichnet dieser alle Änderungen auf, zum Beispiel an

Integrationsparametern oder den Probeensequenzen. Dokumentiert werden die Informationen, wer zu welchem Zeitpunkt welche Einstellungen mit Ursprungs- und Zielwert geändert hat. Wichtig ist, dass für kritische Parameter eine Begründung abgefragt wird, um die Änderung plausibel zu belegen. Ein solcher Audit-Trail darf sich natürlich nicht von den Benutzenden abschalten lassen.

Alle Messdaten, wie auch die Metadaten, zum Beispiel Audit-Trail-Einträge, müssen dem Erzeuger zuzuordnen sein sowie den Zeitpunkt der Erstellung oder Veränderung enthalten.

Sind elektronische Unterschriften im System möglich, so ist eine eindeutige Identifikation des Unterzeichnenden erforderlich. Diese kann im einfachen Fall bereits über die Anmeldung am System erfolgen, im pharmazeutischen Umfeld ist möglicherweise ein besonderes Zertifikat erforderlich. Ein solches Zertifikat stellt eine Art elektronischen Personalausweis dar und ist nur von der jeweiligen Person nutzbar.

Berechnungen, Back-ups und Archivierungen

■ Zwischen den Rohdaten (zum Beispiel Peakfläche) und dem Ergebnis einer Analyse (zum Beispiel Gehalt) findet in den meisten Fällen eine Berechnung statt. Diese lässt sich automatisch in den Methoden des IT-Systems durchführen, in zusätzlichen Kalkulationsprogrammen (etwa Excel), mit einem Taschenrechner oder schlicht auf dem Papier. Berechnungen sind potenzielle Fehlerquellen und sind daher auf ihre

Richtigkeit zu prüfen und zu sichern sowie hinreichend zu dokumentieren. Die Richtigkeit lässt sich entweder über eine Validierung einmalig prüfen, sofern sie nicht veränderbar ist, beispielsweise in einer Software oder einer geschützten Tabellenkalkulation, oder sie wird bei jedem Anwendungsfall von einer zweiten Person verifiziert (Vier-Augen-Prinzip).

Was aber, wenn die Festplatte des Rechners ihre Dienste versagt und erneuert werden muss? Betriebssystem und Anwendungsprogramme sind nach wenigen Stunden wieder installiert, was aber ist mit den Daten? Wohl denen, die eine Sicherung angelegt haben und diese regelmäßig aktualisieren. Dieses Problem ist auch im professionellen Kontext sehr wichtig, da unsere Daten Nachweise darstellen für Qualität der Produkte oder für Entscheidungen.

Für den Fall, dass solche Festplattenprobleme zu dauerhaftem Datenverlust führen können, ist eine Datensicherung (Back-up) erforderlich. Bei einem Problem werden nach der Wiederherstellung eines Systems die Daten aus dem Back-up zurückgeholt (Disaster Recovery). Diese Sicherung dient im Falle beschädigter Files auch zur Wiederherstellung einzelner Dateien.

Zusätzlich ist in der Regel eine Auslagerung (Langzeitarchivierung) der Messdaten erforderlich, da lokaler Speicherplatz begrenzt ist oder die Performance des Systems bei sehr großen Datenmengen stark nachlässt. Sowohl Back-up als auch Archivierung müssen auch sämtliche Metadaten enthalten. Sie unterliegen weiterhin, also während des gesamten Lebenszyklus (Abbildung 2) den

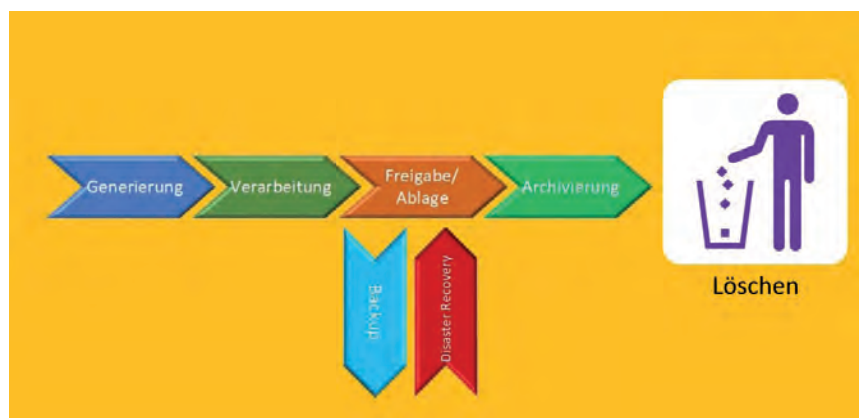


Abb. 2. Lebenszyklus von Messdaten



Regeln der Datenintegrität und sind vor Veränderung, Löschung und unbefugtem Zugriff zu schützen.

Und auf Papier?

■ Auch wenn Papieraufzeichnungen seltener werden, es gibt sie noch und sie stellen ebenfalls Daten dar, deren Integrität sicherzustellen ist. Jedoch liegen bei papierbasierten oder gar hybriden (Papier und elektronisch) Aufzeichnungen andere Anforderungen vor als bei rein elektronischen Daten.

So sind manuelle Aufzeichnungen umgehend anzufertigen, um Fehler zu vermeiden. Sie sind so anzufertigen, dass der Zeitpunkt, der Urheber sowie der Kontext, zu dem die Aufzeichnungen gehören, klar nachvollziehbar sind. Zusammengehörende Papiere sollen geheftet oder gebunden werden, um dies für alle Blätter sicherzustellen. Für längere Aufbewahrung ist beständige Tinte oder Toner zu verwenden. Änderungen sind auf eine Weise vorzunehmen, die es ermöglicht, den Zustand vor der Änderung noch zu erkennen sowie den Grund der Änderung, das Datum und die ausführende Person.

Sollen Papierdokumente durch elektronische Kopien (Scans) ersetzt werden, so muss nach dem Scannen verifiziert werden, dass der gesamte Inhalt lesbar und vollständig ist.

Rüdiger Lutz, Merck

Literatur

- 1) https://de.wikipedia.org/wiki/Robert_Edwin_Pearcy
- 2) The Food and Drug Law Institute (FDLI) <https://www.fdpi.org/2018/04/update-fda-data-integrity-enforcement-trends-practical-mitigation-measures>
- 3) DIN EN ISO 9001:2015 Quality management systems – Requirements, Kap. 7.5.
- 4) European Commission – Health and Consumers Directorate-General, EudraLex – The Rules Governing Medicinal Products in the European Union; Volume 4 Good Manufacturing Practice; Annex 11: Computerised Systems
- 5) U.S. Department of Health and Human Services – Food and Drug Administration; 21 CFR part 11

PFAS-Regulierung braucht verlässliche Analytik

Das aktuell in der EU diskutierte Verbot von per- und polyfluorierten Alkylsubstanzen (PFAS) ist eine Herausforderung für die Produktkontrolle, denn es gibt dafür noch keine standardisierten Methoden.



PFAS werden unter anderem eingesetzt, um Textilien wasserdicht zu machen. (Bild: computergeneriert mit DALL-E 2)

■ Per- und polyfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS) werden aufgrund ihrer Beständigkeit in der Umwelt umgangssprachlich „Ewigkeitschemikalien“ genannt. Die Bezeichnung „Überallchemikalien“ wäre ebenso treffend, denn PFAS wurden schon in den entlegensten Winkeln der Erde in Böden und Gewässern nachgewiesen, ebenso in Nahrungsmitteln und Trinkwasser sowie in Muttermilch und unserem Blut. Die gut 10000 verschiedenen Substanzen der persistenten Stoffgruppe kommen natürlicherweise nicht vor. Aufgrund ihrer fett-, schmutz- und wasserabweisenden Eigenschaften stecken sie aber in allen möglichen Produkten, von Einwegkaffeetassen über Skiwachs bis zu Outdoorjacken.

Auch Dichtungen, Schläuche, Membranen und Oberflächenbeschichtungen industrieller Anlagen, auch in der Chemieindustrie, enthalten PFAS oder bestehen daraus. Beim Elektrolyseprozess zur Herstellung von Natronlauge etwa kommt eine Membran zum Einsatz, die mit einem polyfluorierten Polymer verstärkt ist. Prozesstechnisch sei das ein enormer Fortschritt gewesen, erklärt David Schaffert, Chemiker in der Abteilung Analytical & Material Science

bei BASF in Ludwigshafen. Doch PFAS könnten aus der Membran in die Natronlauge gelangen. Ein solches Kontaminationsrisiko besteht auch bei anderen Erzeugnissen der Chemieindustrie, die wie Natronlauge vielfältig verwendet und zu verschiedensten Produkten verarbeitet werden.

Strikte Regulierung gefordert

■ Die produktionsbedingten Verunreinigungen sind ebenso bedenklich wie der bewusste Einsatz von PFAS, da sich die Substanzen in der Umwelt, im Menschen und anderen Lebewesen anreichern. Die Stoffgruppe gilt generell als gesundheitsschädlich. Toxikologisch untersucht sind allerdings erst wenige Verbindungen, unter ihnen die bereits verbotene Perfluorooctansäure (PFOA), die als krebserregend und reproduktionstoxisch eingestuft wurde.

Dem Vorsorgeprinzip folgend hat Deutschland zusammen mit Dänemark, den Niederlanden, Norwegen und Schweden der europäischen Chemikalienagentur (Echa) im Januar vorgeschlagen, Herstellung, Verwendung und Inverkehrbringen der gesamten Stoffgruppe zu beschränken. Die Echa hat den Vorschlag, der potenzielle Ausnahmen



nennt, im Februar publiziert und einen öffentlichen Konsultationsprozess gestartet. Informationen und Kommentare nimmt die Echa noch bis Anfang Herbst an. Aufgrund der komplexen Thematik ist mit einem längeren Beratungs- und Entscheidungsprozess zu rechnen, sodass die Verbote vermutlich frühestens 2027 greifen werden.

„Die geplante PFAS-Restriktion stellt uns in ihrer Breite und mit ihren extrem niedrigen Grenzwerten vor ganz neue Herausforderungen“, sagt Schaffert. „Tritt sie in der derzeitigen Form in Kraft, müssen wir nachweisen, dass unsere Produkte keine PFAS-Spuren aus Anlagenteilen enthalten.“

Die größte Aufgabe sieht er in der Methodenentwicklung: Für viele der möglichen Kontaminanten gebe es noch keine validierten Methoden. Genormte Analysenverfahren stehen zwar für Trinkwasser, Böden und ähnliche Proben zur Verfügung, jedoch nur für eine kleine Zahl von Analyten. Für Textilien, zum Beispiel von Funktionskleidung, gibt es zumindest Referenzmaterialien. Anders sieht es bei konzentrierter Natronlauge oder anderen aggressiven Chemieprodukten aus, die sich nicht wie herkömmliche Proben analysieren lassen.

Bei der BASF beschäftigt sich ein Team um Schaffert mit neuen Konzepten der PFAS-Analytik, um die vorgeschlagenen Bestimmungsgrenzen zu erreichen. Dabei geht es zum Beispiel um das Anpassen chromatographischer und massenspektrometrischer Techniken, die sich in der Umweltanalytik bewährt haben, sowie um Methoden wie die NMR-Spektroskopie, die keine Referenzstandards benötigen. Die Ionenchromatographie nach Verbrennung der Probe und Verfahren wie die Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma (ICP-MS) unter Bildung polyatomischer Ionen bieten sich ebenfalls an, um Fluor als Summenparameter zu bestimmen.

„Zickige“ Analyten und hohe Blindwerte

■ Dass die PFAS-Analytik ein ganzes Bündel an Techniken erfordere, betont auch Susanne Sölter, Applikationsspezialistin beim Gerätehersteller Agilent Technologies in Waldbronn. Sie

bezeichnet die Substanzen als „zickig“: Sie hafteten stark an Gefäßwänden und entzögen sich so dem Nachweis. Isotopenmarkierte Standards, mit denen sich solche Verluste sowie andere Matrixeffekte korrigieren lassen, seien in der PFAS-Analytik daher unverzichtbar.

Als Problem betrachtet Sölter außerdem die hohen Blindwerte. Aus oben genannten produktionstechnischen Gründen enthalten die im Analytiklabor verwendeten Lösemittel PFAS-Spuren. Auch Pipetten, Filter und andere Utensilien können mit PFAS belastet sein, selbst wenn sie nicht aus fluorhaltigen Polymeren wie PTFE (Handelsname Teflon) bestehen. Zudem sind in den Analysensystemen Dichtungen, Schläuche und weitere Komponenten aus fluorhaltigen Polymeren verbaut. Solche Bauteile müssten möglichst ausgetauscht werden, sagt Sölter. Ganz ausschließen ließen sich PFAS-Kontaminationen aber dennoch nicht. Für die HPLC gibt es daher spezielle Verzögerungssäulen. Sie sorgen dafür, dass die eigentlichen Analyten andere Retentionszeiten aufweisen als PFAS aus dem System.

Wenn man alle Vorsichtsmaßnahmen beachte, sagt Sölter, lägen die Blindwerte bei den meisten PFAS-Substanzen zwischen 0,1 und 0,5 Nanogramm pro Liter, teils aber auch höher. Es hängt von der zu untersuchenden Probe ab, ob dieser geringe Gehalt stört. Die Trinkwasserverordnung etwa verlangt ab 2026 eine Bestimmungsgrenze von 30 Nanogramm pro Liter für die Summe aus 20 ausgewählten PFAS beziehungsweise 1,5 Nanogramm pro Liter für jede Einzelsubstanz. PFAS in anderen Stoffen, Gemischen oder Erzeugnissen sind hingegen weniger streng reguliert. Hier gelten zum Beispiel Grenzwerte von 25 ppb (entsprechend 25 Mikrogramm pro Liter) für Perfluorooctansäure (PFOA) und Perfluorooctansulfonsäure (PFOS). Dieser Grenzwert soll laut dem jetzt diskutierten Regulierungsvorschlag auf alle PFAS erweitert werden, die sich mit gezielter Analytik bestimmen lassen. Zudem sollen sie in der Summe einen Wert von 250 ppb nicht überschreiten. Ausgenommen davon sind Fluorpolymere. Für sie und auch für alle ande-

ren Fälle, in denen gezielte Messungen nicht möglich sind, wird ein Grenzwert von 50 ppm vorgeschlagen, bestimmbar über den Gesamtfluorgehalt.

Trend zu Multi-Nachweisen

■ „Solange wir mit den Blindwerten kämpfen, können wir gerätetechnisch nicht viel an der Empfindlichkeit ändern“, erklärt Sölter. Der derzeitige Fokus liege daher eher darauf, schnelle Methoden zu entwickeln, die viele PFAS gleichzeitig nachweisen. Als Vorbild dient die Pestizidanalytik, die in einem Analysengang bis zu 500 Pestizide erfasst. „Der Trend geht hin zu solchen Multi-Methoden“, sagt Sölter. Aktuell ließen sich bestenfalls aber erst rund 50 PFAS gleichzeitig messen, auch weil es noch gar nicht so viele Standards gebe.

Kritisch sieht Schaffert den zeitlichen Rahmen. Er ist zwar überzeugt, dass sein Team die PFAS-Analytik entscheidend vorantreiben werde, aber Standardverfahren für eine so große Bandbreite an Substanzen ließen sich nicht in ein oder zwei Jahren entwickeln. Deshalb favorisiert er als Übergangslösung für die Produktkontrolle die Bestimmung von Fluor als Summenparameter. Dabei gehe zwar Information verloren, und bei einer Grenzwertüberschreitung müsse man mit einer spezifischeren Methode prüfen, welche PFAS den hohen Wert verursacht hätten oder ob gar anorganisches Fluorid im Spiel sei.

„Für ein erstes Screening ist die Summenparameterbestimmung aber die einfachste Lösung, auch für die Behörden“, sagt er und spricht damit einen wesentlichen Punkt an: Ein umfassendes PFAS-Verbot wäre auch für die Überwachungsbehörden eine Herausforderung. Sie brauchen ebenfalls eine verlässliche PFAS-Analytik, denn die strengste Regulierung nützt wenig, wenn sie sich nicht kontrollieren lässt.

Uta Neubauer

Uta Neubauer ist promovierte Chemikerin und freie Wissenschaftsjournalistin.

uta_neubauer@gmx.de



DeepBio – Omics für die Wirkstoffentwicklung

Omics-Technologien spielen eine immer größere Rolle in der modernen Wirkstoffentwicklung und haben das Potenzial, den gesamten Prozess zu revolutionieren – von der Entdeckung neuer Wirkstoffe bis hin zur personalisierten Medizin.

■ Der Begriff „Omics“ umfasst verschiedene Bereiche der Biowissenschaften wie Genomics, Transcriptomics, Proteomics und Metabolomics, welche die Gesamtheit aller Gene, Transkripte, Proteine und Metaboliten in einem Organismus untersuchen.¹⁾ So lassen sich Krankheiten und deren komplexe Wechselwirkungen im Körper molekular-mechanistisch betrachten.

Das Integrieren von Daten aus verschiedenen Omics-Bereichen kann komplexe Netzwerke und Signalwege identifizieren, die sich mit Wirkstoffen gezielt beeinflussen lassen. Durch die Identifizierung „abnormer“ Gene, Proteine oder metabolischer Veränderungen lassen sich potenzielle Zielmoleküle für die Wirkstoffentwicklung erkennen und weitergehend untersuchen. Da sich Machine-Learning-Algorithmen und Anwendungen der Künstlichen Intelligenz (KI) rasch entwickeln, ist damit zu rechnen, dass der kontinuierliche Einsatz von Omics-Technologien in Zukunft noch relevanter sein wird: Diese Technologien sind in der Lage, die großen Datenmengen, welche die Algorithmen benötigen, schnell und kostengünstig zu generieren.

Omics-Technologien werden auch immer wichtiger, wenn es darum geht, Toxizitäts- und Nebenwirkungsprofile von potenziellen Wirkstoffen zu bewerten. Durch die Analyse von Genexpressions-, Protein- oder Stoffwechselprofilen in Zellen oder Geweben lassen sich die Selektivitäten von Wirkstoffkandidaten testen, um potenzielle toxische Wirkungen vorherzusagen. Es ist besonders hervorzuheben, dass Omics-basierte Selektivitätsanalysen bereits früh in der Wirkstoffentwicklung eingesetzt werden können, zum Beispiel in Zellkultur-experimenten, und so dazu beitragen, Tierversuche zu reduzieren.

Zusätzlich helfen Omics-Technologien bei der Entwicklung personalisierter Medikamente oder Therapien. Indem man das individuelle genetische Profil eines Patienten analysiert oder

krankheitsspezifische Biomarker (Proteine, Lipide oder Metabolite) identifiziert, lassen sich präzisere Diagnosen stellen und maßgeschneiderte Therapien entwickeln. Dies ermöglicht es, Patienten gezielter zu behandeln, es erhöht die Wirksamkeit von Medikamenten meist deutlich und verringert unerwünschte Nebenwirkungen.

Omics-Technologien bei Merck

■ Unser Bioanalytiklabor ist Bestandteil der zentralen Analytik bei Merck am Hauptsitz in Darmstadt. Als sektorenübergreifende Funktion ist das Ziel aller Labore, hochwertige und anspruchsvolle analytische Techniken für die drei Businesssektoren HealthCare, Life Science und Electronics bereitzustellen. In den vergangenen Jahren haben wir uns auf den Aufbau einer Transomics-Plattform fokussiert, die unsere HealthCare- & Life-Science-Partner unterstützt, und eine umfangreiche Methodensammlung für unterschiedlichste Fragen aufgebaut.

Die etablierte Transomics-Pipeline beginnt mit der Extraktion der Zielmoleküle aus Zellen oder Geweben. Dabei setzen wir Lösungen und Extraktionsmethoden ein, um die Zielmoleküle sicher und umfassend zu erfassen. Nach der Extraktion werden die Extrakte für die Analyse mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie-Massenspektrometrie (LC-MS) gemessen. Diese analytische Methode ermöglicht es, die Zielmoleküle aufgrund ihrer physikalischen und chemischen Eigenschaften präzise zu trennen und zu detektieren. Die mit LC-MS generierten Daten werden anschließend mit spezifischen Software-Paketen analysiert.

Selektivitätsprofilierungen

■ Um Wechselwirkungen zwischen Zielproteinen und potenziellen Arzneimittelwirkstoffen zu untersuchen, braucht es detaillierte Analysen. Die Proteinbindung zu verstehen und potenzielle Off-Targets – also unerwünschte Bindungen

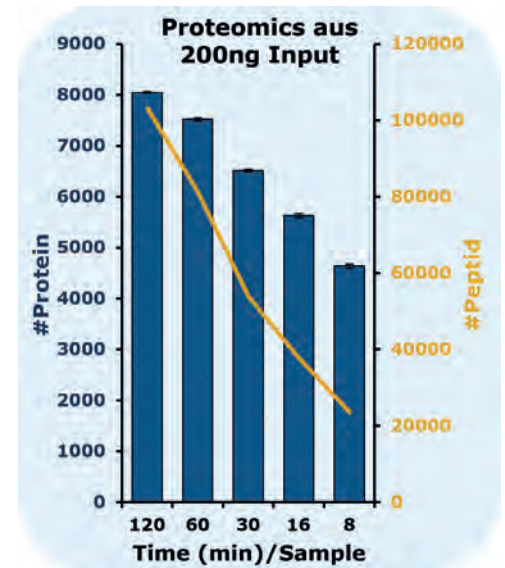


Abb. 1. Mit dem TIMS-TOF Pro sind wir in der Lage, mit 50–200 Nanogramm an Proteinmenge robust 5000 bis 7000 Proteine innerhalb weniger Minuten zu quantifizieren.

des Wirkstoffs an weitere zelluläre Proteine – zu identifizieren sind entscheidend, um die Wirksamkeit und Sicherheit von Arzneimitteln zu bewerten.

Mit unseren Proteomics-Workflows quantifizieren wir innerhalb weniger Minuten etwa ein Viertel des menschlichen Proteoms unter verschiedenen Bedingungen (Abbildung 1). Solche globalen Proteomics-Ansätze liefern ein umfassendes Bild, wie ein Wirkstoff das zelluläre Proteom beeinflusst. Um gezielt die Proteinbindung von Kleinmolekülen zu analysieren und potenzielle Off-Target-Interaktionen zu ermitteln, haben wir für die verschiedenen Modalitäten (kovalente und nicht-kovalente Inhibitoren, Proteolysis-Targeting Chimeras etc.) unterschiedliche proteomische Methoden aufgebaut.

KiNative

■ Um die Selektivität klassischer, nicht-kovalenter Kinaseinhibitoren zu bestimmen, eignet sich die KiNative-Methode: Sie erlaubt es, die Dosis-Bindungskurven (IC₅₀-Werte) für hunder-



te Kinasen aus Zellysaten in einem einzigen proteomischen Experiment zu bestimmen (Abbildung 2).²⁾ Dabei wird nach der Inkubation eines Zellysates mit einem Wirkstoffkandidaten eine biotinylierte ATP- (oder ADP-)Sonde zum Zellysate gegeben, welche die Biotingruppe auf einem Lysinrest in der ATP-Bindestelle von Proteinkinasen (und auch anderen ATP-bindenden Proteinen) kovalent übertragen kann. Ist diese Stelle bereits

von einem Wirkstoffkandidaten besetzt, findet die Biotinylierung nicht statt – das führt schlussendlich nach Anreicherung aller biotinylierten Proteine mit Streptavidin-Beads dazu, dass sich die Signalintensität der Kinase im abschließenden quantitativen LC-MS-Experiment reduziert. Die Ergebnisse lassen sich zusätzlich in einem Kinasebaum darstellen, der die hierarchischen Beziehungen zwischen den Kinasen veranschaulicht und da-

bei hilft, potenzielle Wirkstoffziele zu klassifizieren und zu identifizieren (Abbildung 3).

Thermal proteome profiling

■ Die nicht kinasespezifische TTP-Methode (Thermal proteome profiling) erweitert den Einsatzbereich: Sie erlaubt es, die Kleinmolekül-Protein-Wechselwirkungen von mehreren tausend Proteinen zu bestimmen.³⁾ Im ersten Schritt des Verfahrens werden Zellen oder Zellysate mit einem Wirkstoff inkubiert und bei unterschiedlichen Temperaturen erhitzt. Durch das Erwärmen denaturieren und aggregieren die Proteine, und mit quantitativer LC-MS-Analyse des nicht ausgefallenen Proteins im Überstand lässt sich für tausende Proteine eine Schmelztemperatur bestimmen, das ist die Temperatur, an der 50 Prozent des Proteins ausgefallen ist. Die Protein-Wirkstoff-Bindung verschiebt den Schmelzpunkt meist in Richtung höherer Temperaturen (das heißt, das Protein wird durch die Bindung des Wirkstoffes meist stabiler) – damit ist eine Protein-Wirkstoff-Bindung nachgewiesen.

Affinity based protein profiling

■ Für kovalente Kleinmolekülinhibitoren wurde die ABPP-Applikation (Affinity based protein profiling) etabliert.⁴⁾ Bei den kovalenten Kleinmolekülinhibitoren sind besonders Cysteinreste in aktiven Zentren von Zielproteinen ein gutes Ziel oder ein Angriffspunkt für neue Wirkstoffe.

Analog zur KiNative-Methode wird hier zunächst der Inhibitor auf Zell- oder Zellysatebene inkubiert, gefolgt von einer unselektiven Markierung aller freien Cysteinreste (nach Protein-denaturierung) mit cysteinreaktiver Sonde, die zusätzlich eine Biotineinheit trägt. Vergleichbar zum KiNative-Ansatz lassen sich im Anschluss alle cysteinhaltigen Peptide mit Streptavidin-Beads anreichern; mit quantitativer LC-MS lassen sich für über 10000 cysteinhaltige Peptide eine dosisabhängige Bindungskurve (IC₅₀) pro Experiment erstellen. Mit dieser Methode lässt sich auch die exakte Bindestelle im Zielprotein (und in den Off-Targets) bestimmen – eine weitere hilfreiche Information.

Abb. 2. Die KiNative-Methode ermöglicht es, Dosis-Bindungskurven für über 300 Kinasen in einem einzigen proteomischen Experiment zu erstellen.

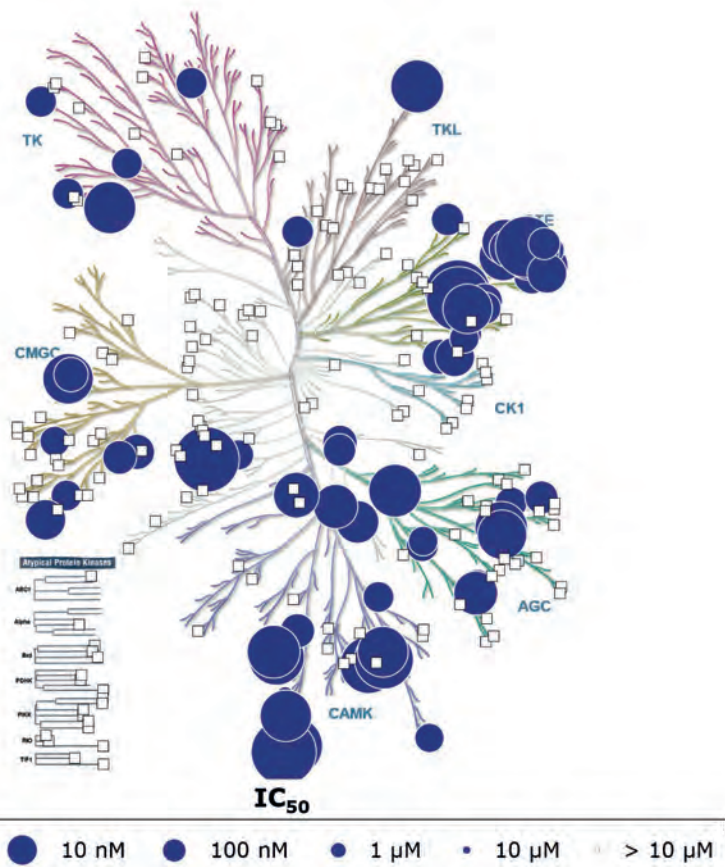
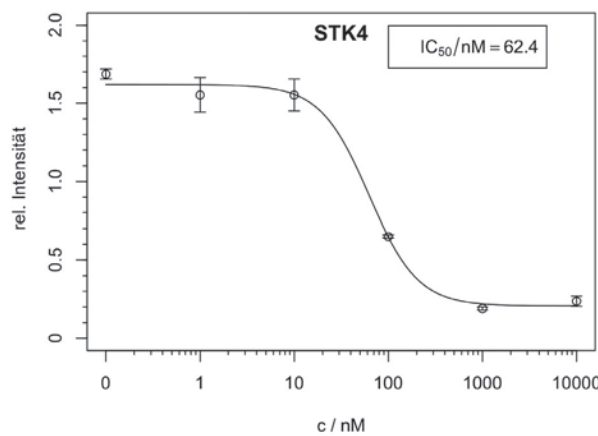


Abb. 3. Ergebnisse der KiNative-Methode lassen sich zusätzlich in einem Kinasebaum darstellen, der die hierarchischen Beziehungen zwischen den Kinasen veranschaulicht.



Proteolysis targeting chimeras

■ PROTACs (proteolysis targeting chimera) ist eine Klasse von Molekülen, die sich entwickeln lassen, um gezielt Proteine in Zellen zu degradieren. Sie bestehen aus einer Proteinbindungskomponente, die an das Zielprotein bindet, und einer Ligandkomponente, die an ein Enzym namens E3-Ubiquitin-Ligase bindet. Hierdurch bringt ein PROTAC-Molekül das Zielprotein in räumliche Nähe zur E3-Ligase, wodurch das Protein für den Abbau markiert und anschließend durch das Proteasom abgebaut wird.

Auch bei der Entwicklung dieser neuen Modalität spielen proteomische Methoden eine wichtige Rolle. Sie ermöglichen es zum einen, die Selektivität des Wirkstoffkandidaten bezüglich der Induktion von Proteindegradationen für mehrere tausend Proteine zu erfassen, zusätzlich lassen sich Sekundäreffekte aufklären und analysieren, die zum Beispiel durch reine Bindungseffekte entstehen. Die so gewonnenen Daten ermöglichen es, die Veränderungen, die PROTAC im zellulären System induziert, besser zu verstehen.

Faszination Omics

■ Omics-Forschung im Zusammenspiel mit semi- oder vollautomatisierten Probenaufbereitungsplattformen bieten ein enormes Entwicklungspotenzial. Sie erlauben eine effiziente Analyse großer Probenmengen, während bioinformatische Methoden das Verarbeiten und Interpretieren der generierten Daten unterstützen. So eröffnen beispielsweise Data Mining, maschinelles Lernen und statistische Modellierung die Möglichkeiten, zahlreiche wertvolle Erkenntnisse zu gewinnen, welche den Wirkstoffentwicklungsprozess revolutionieren können. Zukünftig werden auch Methoden der Künstlichen Intelligenz die Wirkstoffentwicklung weiter verbessern.

Dennoch sind die Grenzen und Herausforderungen der Omics-Technologien zu berücksichtigen, etwa geringe Probenmengen (Beispiel Patiententumore), Datenvolumen und -komplexität. Die vielen Methoden sind kontinuierlich zu validieren und zu standardisieren, um Zuverlässigkeit und Reproduzierbarkeit sicherzustellen, vor allem für eine breite Anwendung in der klinischen Praxis.

In Anbetracht der unermesslichen Möglichkeiten, die DeepBio-Omics-Technologien für die Wirkstoffentwicklung bieten, werden diese wesentlich dazu beitragen, neue Therapien und Medikamente zu entwickeln.

Jasjot Singh und Frank Fischer, Merck
 jasjot.singh@merckgroup.com
 frank.fischer@merckgroup.com

Literatur

1) M. Krassowski, V. Das, S. K. Sahu, B. B. Misra, „State of the field in multi-omics research: from computational needs to data mining and sharing“, *Frontiers in Genetics* 2020, 11, 610798.

2) M. P. Patricelli, T. K. Nomanbhoy, J. Wu et al., „In situ kinase profiling reveals functionally relevant properties of native kinases“, *Chemistry & Biology* 2011, 18(6), 699–710.
 3) H. Franken, T. Mathieson, D. Childs et al., „Thermal proteome profiling for unbiased identification of direct and indirect drug targets using multiplexed quantitative mass spectrometry“, *Nature protocols* 2015, 10(10), 1567–1593.
 4) S. M. Hacker, K. M. Backus, M. R. Lazear et al., „Global profiling of lysine reactivity and ligandability in the human proteome“, *Nature Chemistry* 2017, 9(12), 1181–1190.

Particle Engineering pharmazeutischer Wirkstoffe

In der chemischen, pharmazeutischen und Lebensmittelindustrie fallen viele Zwischen- und Endprodukte als Partikel an. Die physikochemischen Eigenschaften dieser Partikel beeinflussen den Isolationsprozess als Pulver und alle nachfolgenden Weiterverarbeitungsschritte.

■ Insbesondere in der pharmazeutischen Industrie beeinflussen Partikeleigenschaften von Wirk- und Hilfsstoffen häufig das Verhalten des Endproduktes: einer Tablette, eines Granulats oder einer Pulvermischung in einer Kapsel, einer Suspension etc. Die Eigenschaften der Partikel und deren Einfluss auf Zwischenstufen- und Produkteigenschaften zeigt am Beispiel einer pharmazeutischen Tablette Abbildung 1. Nicht nur, weil das Verhalten des pharmazeutischen Produkts kritisch ist, sondern auch aus Gründen der Wirtschaft-

lichkeit und Produktionsflexibilität, ist in den letzten Jahrzehnten das Interesse daran gestiegen, Partikeleigenschaften kontrollieren zu können, insbesondere bei pharmazeutischen Wirkstoffen.¹⁾

Partikeleigenschaften sind bestimmt durch die physikalische Form und den Prozess der Partikelerzeugung. Unabhängig vom Industriezweig werden verschiedene Prozesse der Partikelerzeugung eingesetzt: Sie beruhen größtenteils auf der Umwandlung einer flüssigen Phase (zumeist Lösung) in eine feste Phase. Bei der Wahl des Prozesses



Abb. 1. Wie Produkteigenschaften die Prozessschritte im pharmazeutischen Herstellungsprozess beeinflussen



sind die intrinsischen Eigenschaften der chemischen Entität zu beachten sowie die Anforderungen an die Partikeleigenschaften, die chemische und physikalische Stabilität des Produkts unter möglichen Prozessbedingungen, die Umweltverträglichkeit und die Wirtschaftlichkeit.

Insbesondere unter dem Aspekt der Wirtschaftlichkeit ist es zielführend, die Zahl der Prozessschritte zu minimieren und die Ausbeute zu maximieren. Das heißt: Eine Vermahlung oder Granulierung als zusätzliche Schritte sind nicht unbedingt von Vorteil, auch wenn sie es in vielen Fällen möglich machen, Partikeleigenschaften wie Partikelgröße und Pulverfließigenschaften einzustellen.

Viele Produkte fallen als kristalline Feststoffe an, die Kristallisation ist also der Prozessschritt, der die Partikel-

eigenschaften im Wesentlichen bestimmt. Im Großen und Ganzen sind die verschiedenen Arten der Kristallisation gut verstanden und beschrieben, dennoch ist der Prozess immer an die Substanz und die Anwendung anzupassen.²⁾

Was bedeutet Particle Engineering?

■ Unter Particle Engineering versteht man, den Prozessparameterraum zu untersuchen, um mögliche Variationen in Partikeleigenschaften zu finden und kontrollieren zu können. Abbildung 2 zeigt ein Beispiel mit Pulvereigenschaften, die ungünstig für die Isolierung des Feststoffes und dessen Weiterverarbeitung sind.

Beim Particle Engineering sind viele analytische Online- und Offlinemethoden im Einsatz, um unter anderem Parameter wie Kristallform, Lösungs-

konzentration, Partikelform und Partikelgröße zu verfolgen. Damit lässt sich ein Verständnis für den Prozess und insbesondere für kritische Parameter gewinnen. Viele analytische Daten lassen sich heutzutage online erfassen – die Onlineanalytik ist unter dem Begriff PAT (Process Analytical Technology) zusammengefasst. Auch viele der Offline-Spektroskopiemethoden sind inzwischen als Online- oder Inlinetechniken verfügbar. Neben den chemischen und strukturellen Veränderungen lassen sich mit der Onlinemikroskopie und Methoden zur Abschätzung der Partikelgrößenverteilung visuell verfolgen, wie sich Partikeleigenschaften im Laufe des Prozesses oder bei unterschiedlichen Prozessbedingungen verändern.

Komplementär dienen als Offlineanalytik je nach Anwendung Laserbeugung, dynamische Bildanalyse oder dynamische Lichtstreuung dazu, Partikelgrößenverteilungen zu ermitteln. Erweiterungen der Rasterelektronenmikroskopie, inverse Gaschromatographie, Zetapotentialmessungen und spektroskopische Mappingmethoden erlauben es, die Oberflächenchemie zu charakterisieren; mit Rasterkraftmikroskopie lässt sich die Oberflächentopologie analysieren.

Die folgenden Beispiele illustrieren, auf welche Art sich Partikeleigenschaften im Rahmen von Kristallisationsprozessen verändern lassen. Sie bilden aber lediglich einen Teil der Möglichkeiten ab.

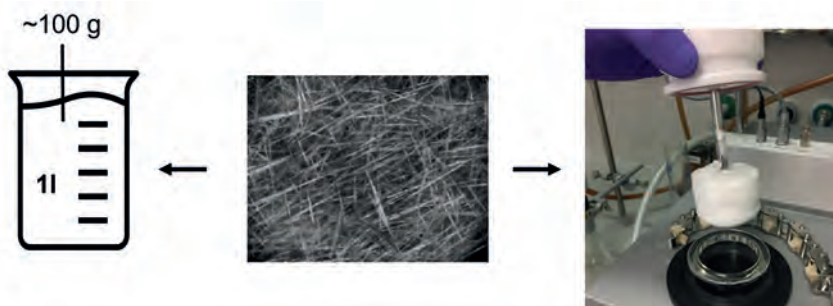


Abb. 2. Onlinemikroskopaufnahme eines kristallinen Produkts: Die Substanz fällt bevorzugt als nadelförmige Primärpartikel an. Das trockene Pulver hat eine sehr niedrige Schüttdichte und ein schlechtes Fließverhalten, da sich die Nadeln ineinander verhaken und daher eine voluminöse Struktur mit rauer Oberfläche ausbilden. Im Reaktor können sehr dichte, zusammenhängende Blöcke entstehen, die das Rührwerk blockieren und große Mengen Mutterlauge enthalten.

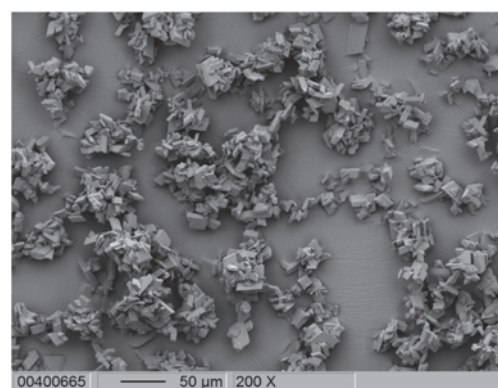
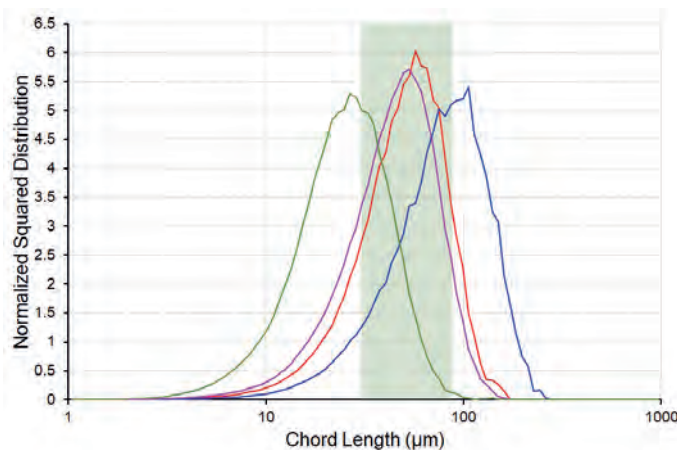


Abb. 3. Links: Sehnenlängenverteilungen von vier Design-of-Experiment-Batches (relativ, flächengewichtet). 2 Extrempunkte: grün und blau, 2 Wiederholungen des Mittelpunkts: rot und magenta. Rechts: REM-Aufnahme eines Batch im Kilogrammaßstab. Er kristallisiert unter den Bedingungen nahe des Design-of-Experiment-Mittelpunkts.



Beispiel 1: Design of Experiment

■ Für die Partikelgrößenverteilung war ein recht schmaler Zielbereich des $D_{V,50}$ vorgegeben (Median der volumenbasierten Partikelgrößenverteilung, gemessen mit Laserbeugung). Um die Ausbeute zu maximieren und die Zahl der Prozessschritte zu minimieren, sollte dieser bereits nach der Kristallisation vorliegen, das heißt ohne Siebung oder Vermahlung. Um den Parameterraum für einen klassischen, geimpften Kühlungskristallisationsprozess zu erfassen, wurde ein Design of Experiment (DoE) als Screening durchgeführt. Parameter waren die Impftemperatur (als Differenz zum Klarpunkt, sie bestimmt den Grad der Übersättigung), die Impfkristallmenge und die Länge isothermer Halteschritte; Kühlrate und Impfkristallgröße wurden als konstant angenommen.

Als Haupteinflussgrößen identifiziert wurden unter diesen Bedingungen die Impfkristallmenge und die Impftemperatur (also implizit Übersättigung zum Zeitpunkt der Impfkristallzugabe). Abbildung 3 zeigt die Sehnenlängenverteilungen, die inline bei den DoE-Versuchen aufgenommen wurde; Experimente mit Partikelgrößen innerhalb des Zielbereichs sind grün hinterlegt. Die REM-Bilder einer Charge im Kilogrammaßstab zeigen Agglomerate gut definierter Primärpartikel ebenfalls im Zielbereich der Partikelgröße – der Prozess war sehr gut skalierbar.

Beispiel 2: Salze, Solvate oder Cokristalle

■ Insbesondere in der pharmazeutischen Industrie werden physikochemische Eigenschaften auch durch die Herstellung von Salzen, Solvaten oder Cokristallen modifiziert.³⁾ Neben Parametern wie der Freisetzungsgeschwindigkeit lassen sich über die Wahl der Festkörperform auch gezielt Partikeleigenschaften verbessern (Abbildung 4).

- Kristallisation der freien Base aus einem optimierten Kristallisationsprozess resultiert in einem stark anisotropen Habitus der Primärpartikel (Abbildung 4a). Das so erhaltene Pulver der freien Base zeigt eine schlechte Fließfähigkeit und neigt dazu, sich beim Prozessieren stark elektrostatisch aufzuladen.

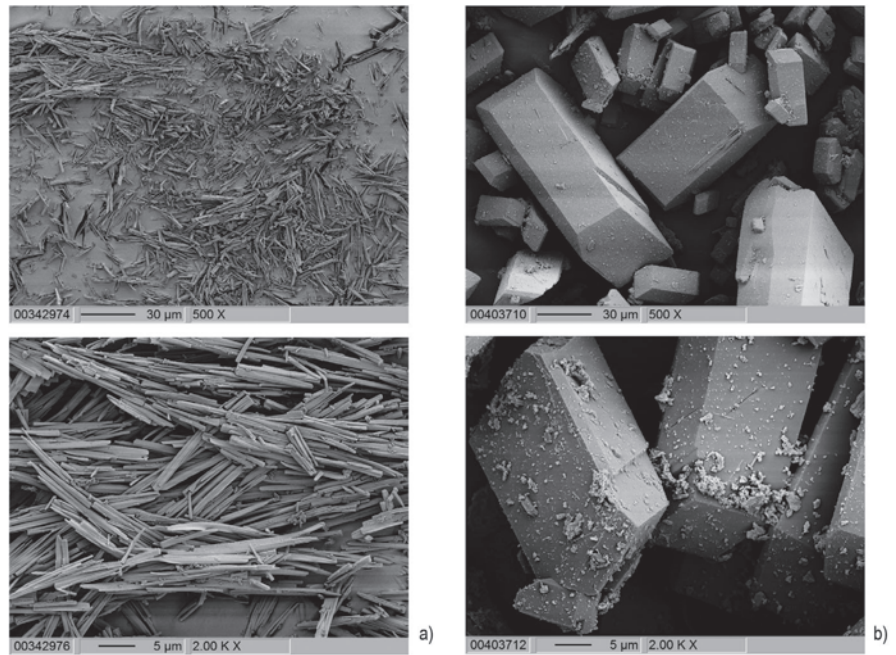


Abb. 4. a) REM-Aufnahmen des Wirkstoffkandidaten nach optimierter Kristallisation der freien Base (oben 500-fache, unten 2000-fache Vergrößerung). b) REM-Aufnahmen des Wirkstoffkandidaten nach optimierter Kristallisation des Fumeratsalzes (oben 500-fache, unten 2000-fache Vergrößerung).

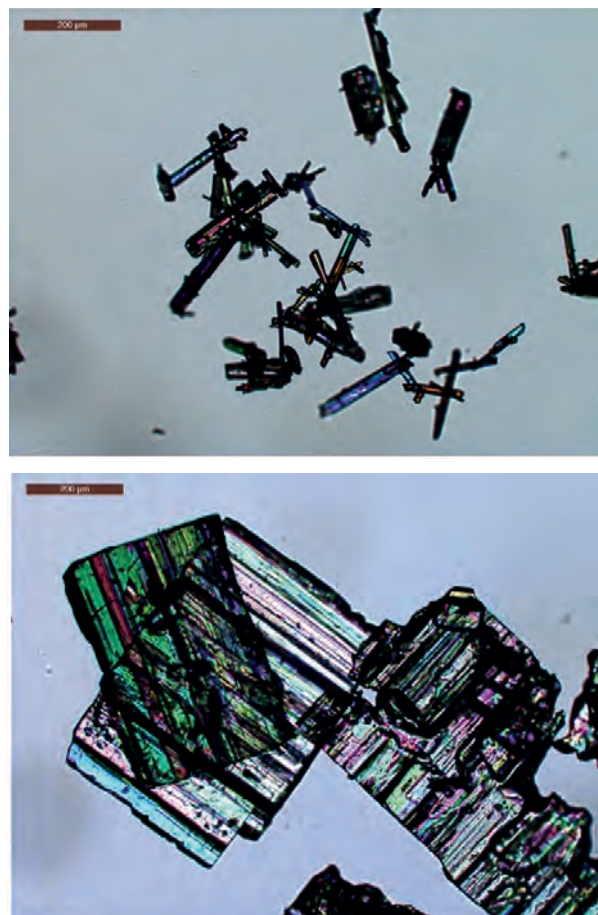


Abb. 5. Oben: Kristallisation des Wirkstoffkandidaten aus dem reinen Lösungsmittelgemisch. Unten: Kristallisation des Wirkstoffkandidaten aus einem Lösungsmittelgemisch mit 1% w/w Additiv.



- Die Kristallisation einer Salzform, in diesem Fall des Salzes eines Monofumarats, führte zu stark verbesserten Partikeleigenschaften: Die Primärpartikel sind nahezu isotrop geformt und deren Größe lässt sich über die Art der Kristallisationsführung gut kontrollieren (Abbildung 4b). Das Fumaratsalz zeigt im Vergleich zum Pulver der freien Base eine deutlich bessere Fließfähigkeit und eine deutlich geringere elektrostatische Aufladung.

Beispiel 3: Additive

■ Eine weitere Methode, um Partikeleigenschaften zu verändern, ist die Zugabe von Additiven, was die Kristallmorphologie verändern kann.²⁾ Hierfür ist ein Screen potenzieller Additive notwendig, der je nach Molekülgröße in silico oder experimentell erfolgt.⁴⁾ Die Effekte können gravierend sein.

Unter zehn Additiven in einem experimentellen Screen fand sich eines, das die Primärpartikelform stark beeinflusst: Statt stäbchenförmigen, schlecht fließenden Kristallen entstanden unter ansonsten identischen Prozessbedingungen in Anwesenheit von etwa 1% w/w Additiv plättchenförmige Partikel mit guten Schütt- und verbesserten

Pulverfließigenschaften (Abbildung 5).

Im regulierten Umfeld, insbesondere bei der Herstellung pharmazeutischer Wirkstoffe, ist die Auswahl möglicher Additive stark beschränkt. Bemühungen, eine allgemeingültige Richtlinie zu schaffen, welche die Bedingungen festlegt, unter denen Additive eingesetzt werden dürfen, sind momentan Gegenstand umfangreicher Diskussionen der Industrie mit den Arzneimittelbehörden.⁵⁾

Beispiel 4: Fällungskristallisation

■ Die bisherigen Beispiele zeigten, wie sich Primärpartikel oder -kristalle verändern lassen. Wenn dies nicht möglich ist, sich also beispielsweise keine vorteilhaften kristallinen Mehrkomponentensysteme bilden lassen und Additive und Lösungsmittel keinen signifikanten Einfluss haben, kann eine Kontrolle der Sekundärpartikel oder des Agglomerationsverhalten die Pulvereigenschaften des Produktes verbessern.

Neben alternativen Prozessen wie der Sprühtrocknung kann unter anderem ein Fällungskristallisationsprozess mit Lösungsmittelsystem zielführend sein. Abbildung 6 zeigt ein Beispiel für eine

sphärische Agglomeration, in der Lösungs- und Antilösungsmittel sowie ein Mediator eingesetzt wurden, um die Kristallisation aus einer Emulsion so zu kontrollieren, dass die Primärpartikel zu kompakten Agglomeraten verwachsen. Hierbei wurden in einem Screen Prozessparameter, Lösungsmittel und die Mischungsverhältnisse der drei Lösungsmittel identifiziert. Die resultierenden Agglomerate besaßen stark verbesserte Eigenschaften für die Weiterverarbeitung, beispielsweise stark gestiegene Schüttdichte und Pulverfließigenschaften.

Fazit

■ Wie die Beispiele zeigen, sind Partikeleigenschaften im Allgemeinen über den Kristallisationsprozess kontrollierbar. Eine Exploration von Prozessen und Prozessparameterräumen lässt sich mittlerweile bereits ab Millilitermaßstab mit PAT-Methoden begleiten und automatisieren. So führen wenige Experimente bereits zu einem recht umfangreichen Prozessverständnis.

Insbesondere in-situ-analytische Methoden lassen sich gezielt einsetzen und kombinieren, beispielsweise um polymorphe Umwandlungen sichtbar zu machen und zu verfolgen oder um die Kinetiken der Prozessschritte zu untersuchen und deren Einfluss auf Partikel- oder Produkteigenschaften zu bestimmen. Das daraus resultierende umfangreichere Prozessverständnis ist nicht nur wichtig, wenn sich der Produktlebenszyklus oder die Produktanforderungen im Zuge der Produktentwicklung verändern, es ist auch essenziell bei der Fehlersuche oder -behandlung.

Anke Marx, Michael Lange,
Maik Astheimer, Axel Becker
Merck

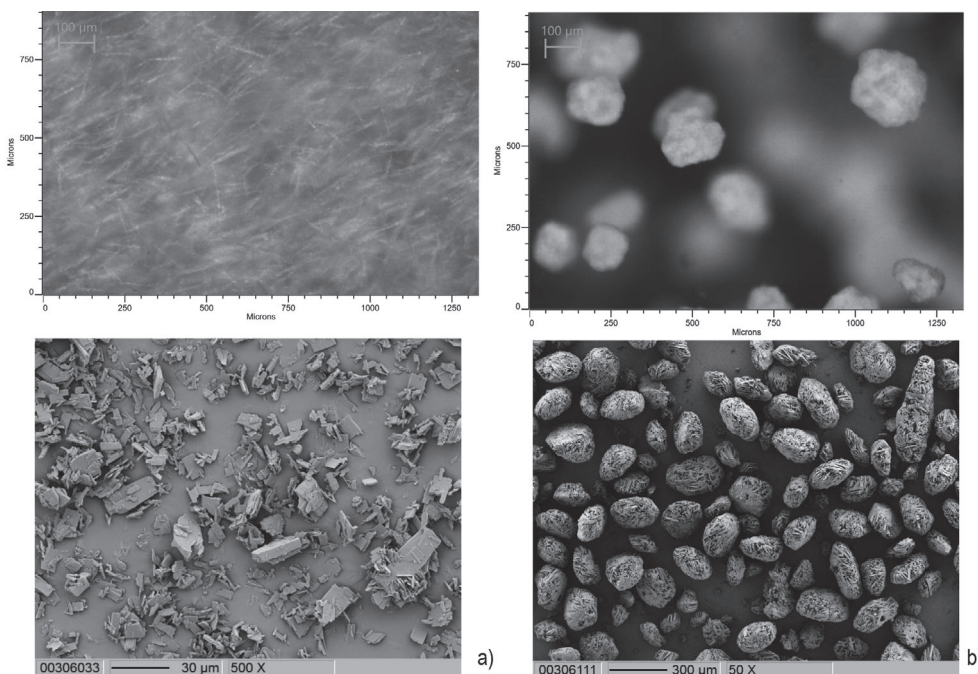


Abb. 6. a) Partikel aus dem besten Standardfällungsprozess, das heißt bei Zugabe eines Antilösungsmittels zu einer klaren Lösung oder umgekehrt. Oben: Onlinemikroskopaufnahme, unten: REM-Aufnahme nach Filtration und Trocknung. b) Partikel aus dem optimierten Fällungsprozess (sphärische Agglomeration). Oben: Onlinemikroskopaufnahme, unten: REM-Aufnahme nach Filtration und Trocknung.

Literatur

- 1) C.C. Sun, R. N. Davé, *Pharmaceutical Research* 2022, 39, 3041–3045. doi: 10.1007/s11095-022-03449-x
- 2) Ed. A. S. Myerson, D. Ezzemir, A. Y. Lee, *Handbook of Industrial Crystallization*, 3rd Ed. 2019, Cambridge Univ. Press, ISBN 780521196185.
- 3) A. Becker, *Drug Discovery Today* 2023, 5, 103527.
- 4) M. A. Bellucci, A. Marx, B. Wang et al., *Small Methods* 2023, 7, 2201692.
- 5) L. Schenck, D. Erdemir, L. Saunders Gorka et al., *Molecular Pharmaceutics* 2020, 17, 2232–2244.



Eine grüne Alternative zu HILIC-HPLC

Um kleine polare Analyten zu trennen, wird in der Regel HILIC-HPLC eingesetzt. Nachteile der Methode sind, dass zum einen die Äquilibration der Trennsäulen lange dauert, zum anderen braucht es hohe Mengen Acetonitril in der mobilen Phase, was für die Umweltbilanz ungünstig ist. Eine elegante Lösung verspricht der Umstieg zur HILIC-SFC.

■ Chromatographische Techniken, die kleine polare Analyten trennen und quantifizieren, sind in der chemischen Industrie von großer Bedeutung. Egal ob zur Produktkontrolle oder zur Prozessüberwachung: Entscheidend für die Qualitätssicherung ist es, Nebenkomponenten und Verunreinigungen zuverlässig zu detektieren und zu quantifizieren.

Die Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) stößt in ihrer gebräuchlichsten Variante, der Umkehrphasenchromatographie (reversed phase, RP) bei Analyten hoher Polarität in Ermangelung von Retention an ihre Grenzen. Geladene Analyten lassen sich mit Ionenchromatographie retardieren. Bei nicht geladenen polaren Analyten kommt für gewöhnlich eine wässrige Normalphasenchromatographie zum Einsatz, weithin als HILIC (hydrophilic interaction liquid chromatography) bekannt.

Allerdings zeigt diese Technik in der HPLC einige kritische Parameter: So dient als primäres Lösemittel der mobilen Phase Acetonitril. Das ist aus ökologischen und toxikologischen Gesichtspunkten ungünstig; zudem lösen sich polare Analyten nur in geringen Konzentrationen in wässrigen Lösungen mit hohem Acetonitrilgehalt. Generell sind Diffusionsprozesse in der HILIC-HPLC signifikant langsamer als in der Umkehrphasenchromatographie.

Überkritisches Kohlendioxid ist eine interessante Alternative zu Acetonitril. Diese Technik heißt HILIC-SFC (super-critical fluid chromatography).

Hintergrund

■ In der HILIC kommen polare stationäre Phasen aus der Normalphasen-HPLC zum Einsatz, um in der Regel polare Analyten zu trennen. Die Kombination mit mobilen Phasen aus der RP-HPLC schafft die Voraussetzungen für ein anderes Trennprinzip: Statt

Adsorption basiert die Trennung hier primär auf der Verteilung zwischen einer polarerer und unpolarerer Komponente in der mobilen Phase.

Überkritisches CO₂ anstelle von Acetonitril als Lösemittel in der mobilen Phase beschleunigt die Diffusion. Da Wasser allerdings kaum mit CO₂ mischbar ist, ist bei dessen Einsatz als polare Komponente der mobilen Phase Vorsicht geboten. Zum Einsatz kommen hier in der Regel Alkohol-Wasser-Mischungen.

Die Methode der HILIC-SFC

■ Ein kritischer Punkt der HILIC allgemein ist, dass polare Analyten im unpolaren Lösemittel Acetonitril schlecht löslich sind. Andererseits führen zu große Mengen des polaren Lösemittels Wasser im Injektionslösemittel und/oder die Injektion von zu großen Injektionsvolumina zu asymmetrischen Signalen im Chromatogramm.

In der SFC lassen sich die Analyten auch in anderen, höher viskosen Lösemitteln wie Alkoholen lösen. Bei polaren Analyten funktioniert das wesent-

Abb. 1. Trennung der Aminosäuren Alanin (Ala), Cystein (Cys), Glycin (Gly), Asparaginsäure (Asp) und Histidin (His) mit HILIC-SFC, gelöst in Wasser bei verschiedenen Konzentrationen (2,0 und 0,2 mg/mL) und Injektionsvolumina (1,0 und 10,0 µL)

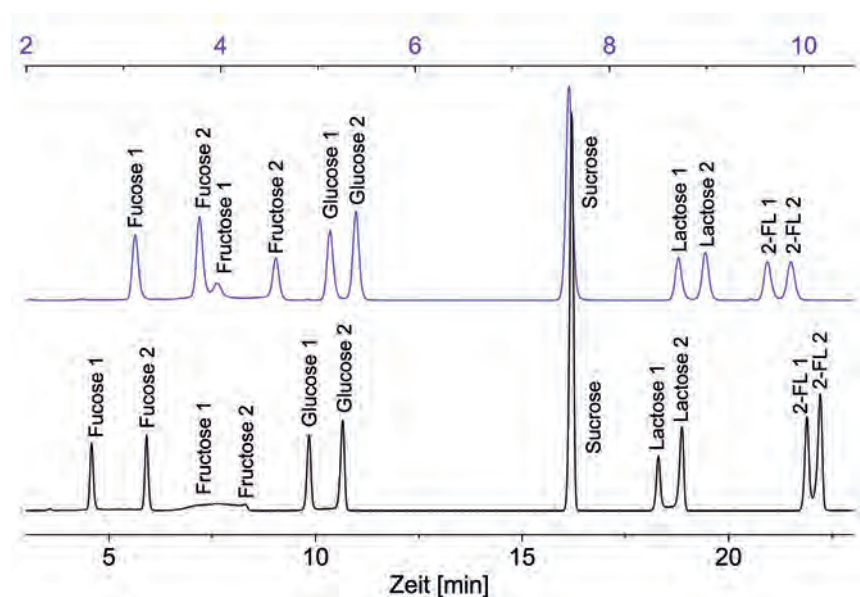
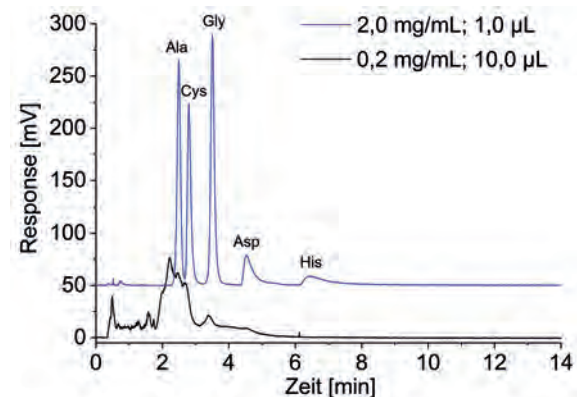


Abb. 2. Trennung von Zuckern; 2-FL: 2'-Fucosyllactulose.

Blaue Linie: SFC-Trennung (Injektionslösungsmittel 90/10 Ethanol/Wasser (v/v))

Schwarze Linie: HPLC-Trennung (Injektionslösungsmittel 90/10 Aceton/Wasser (v/v))



lich besser als Acetonitril-Wasser-Mischungen. Zu den alternativen Injektionslösemitteln, die als „grün“ gelten, zählen Ethanol, Isopropanol, Aceton, Dimethylcarbonat und Dihydrolevoglucosenon (Cyrene).¹⁻³⁾

Das Injektionslösemittel hat in der SFC großen Einfluss, da Polaritäts- und Viskositätsunterschiede die Peakformen der Elutionsbanden stark beeinflussen.⁴⁾ Ist der Polaritätsunterschied zwischen Injektionslösemittel und Eluent zu groß, so führt das zu einer Bandenverbreiterung. So darf das Injektionsvolumen maximal ein Prozent des Säulenvolumens betragen (Abbildung 1). Ansonsten führt der Lösemittelstärkeeffekt zu einem Plug, in dem die Analyten ohne vorherige Trennung mit dem stärkeren Injektionslösemittel mitgerissen werden.⁵⁾ Die molare Menge an Analyten ist in beiden in Abbil-

dung 1 dargestellten Fällen gleich, ausschlaggebend für eine bessere Trennung ist die Kombination aus höherer Konzentration und geringerem Injektionsvolumen.

Der entscheidende Vorteil der SFC ist allerdings die im Vergleich zur HPLC beschleunigte Diffusion. Dadurch wird nicht nur allgemein die Trennung schneller (Abbildung 2), sondern auch die Signalformen im Chromatogramm werden besser (Abbildung 3).

Abbildung 3 zeigt, wie das Injektionslösemittel in einer HPLC-Trennung die Breite der Signale beeinflusst und daher Ethanol als grüne Alternative zu Acetonitril nur schwer anwendbar wird. Bei der Analyse derselben Proben mit SFC ist dies nicht festzustellen; Ethanol lässt sich daher bevorzugt verwenden, um die Proben zu verdünnen.

Wie im HPLC-Chromatogramm der C₆-Polyole erkennbar, fehlen im Gegensatz zum SFC-Chromatogramm die Signale der früh eluierenden Komponenten. Wenn sich das komprimierte CO₂ beim Übergang in den Lichtstreuendetektor entspannt, kühlt es sich und damit die darin vorhandenen Analyten ab (Joule-Thomson-Effekt), was deren Detektion im Aerosol ermöglicht.

Beim Vergleich mit der HILIC-HPLC werden drei Vorteile der SFC deutlich:

- Schnellere Trennungen aufgrund beschleunigter Diffusionsprozesse (Abbildung 2)
- Bessere und lösemittelunabhängige Signalformen aufgrund beschleunigter Diffusionsprozesse (Abbildung 3)
- Leichter flüchtige Analyten werden aufgrund der Abkühlung durch CO₂ nach Entspannung im Detektor ebenfalls gekühlt, was eine Verdampfung

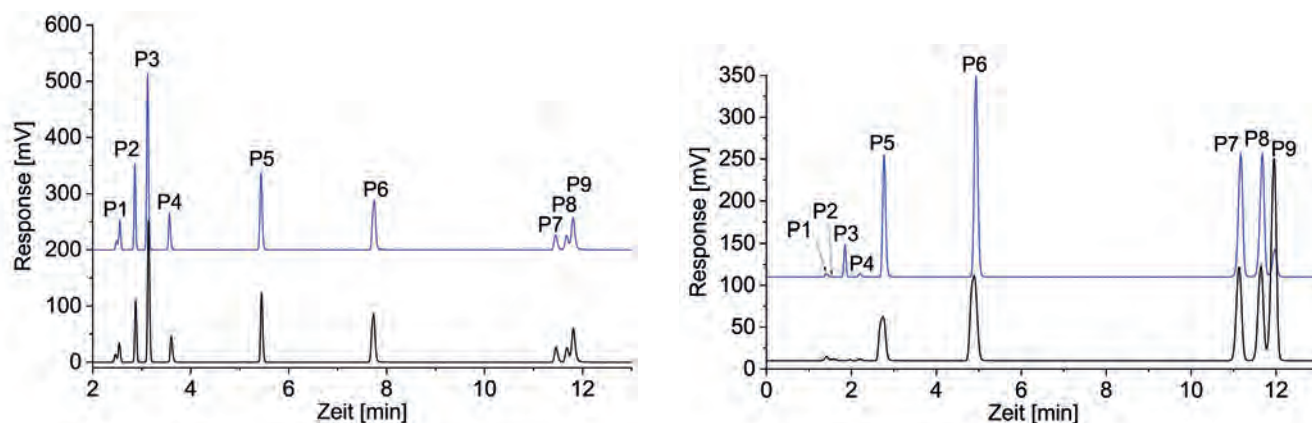


Abb. 3. Trennung von Polyolen basierend auf Hexanketten (P1-P9). Links: mit SFC. Rechts: mit HPLC.

Blaue Linie: Injektionslösungsmittel 90/10 Acetonitril/Wasser (v/v). Schwarze Linie: Injektionslösungsmittel 90/10 Ethanol/Wasser (v/v).

Lösemittel	Analyt		
	Aminosäuren	Zucker	Polyole
Acetonitril	+	+	+(+)
Aceton	n.a.	+(+)	+(+)
Ethanol	++	++	+(+)
Isopropanol	+(+)	+(+)	++
Dimethylcarbonat	n.a.	--	--
Cyrene	n.a.	-	-

- ++ sehr gut
- 0 neutral
- sehr schlecht
- n.a. nicht anwendbar: Reaktion von Ketonen/Estern mit Aminen möglich

Tab. Bewertung der Lösemittel basierend auf chromatographischer Leistung und Löslichkeit der Analyten



verhindert. Es resultiert eine größere Detektionstoleranz bei kleinen, leichtflüchtigen Analyten (Abbildung 3, rechts, P1-P4).

Insgesamt stellte sich Ethanol für alle Analyten neben Isopropanol und Aceton als geeignetstes Lösemittel heraus. Diese Lösemittel lösen im Vergleich zu Acetonitril die Analyten besser. Dimethylcarbonat war nicht ausreichend mit Wasser mischbar, um eine Probe injizieren zu können. Cyrene ließ sich aufgrund seiner Sichtbarkeit im UV-Detektor und seiner hohen Viskosität ebenfalls nicht sinnvoll einsetzen. Eine Übersicht zeigt die Tabelle (Seite 26).

„Grüne“ Lösemittel umfassen neben den aufgeführten organischen Verbindungen und überkritischen Fluiden wie CO₂ auch mehrere Gruppen von „designer solvents“, beispielsweise tiefeutektische Gemische, ionische Flüssigkeiten oder thermomorphische Lösemittel.⁶⁾ Obwohl deren Anwendung in der analytischen Chemie bisher kaum erforscht ist, wäre ihr Einsatz als Lösemittel in der SFC vorstellbar, was weiteren Raum zur Forschung bietet.

Bedeutung in der Industrie

Die SFC hat neben der schnelleren Trennung und dem geringeren Lösemittelverbrauch noch weitere Vorteile, die in der Industrie von Nutzen sein können. Das Reäquilibrieren der Säule nach Gradientenelution auf die anfängliche mobile Phase fällt in der SFC deutlich kürzer aus. Dies ermöglicht einen höheren Probendurchsatz – gerade im Routinebetrieb vorteilhaft. Das breite Ein-

satzspektrum der Methode erlaubt Flexibilität und auch komplexere und nicht alltägliche Proben zu analysieren. Überkritisches CO₂ als mobile Phase und andere grüne Lösemittel zur Verdünnung der Proben oder als Modifier machen die HILIC-SFC weitaus grüner als die HILIC-HPLC.

Insgesamt findet die SFC, über den präparativen Bereich hinweg, bisher allerdings nur wenig Anwendung. Das ist nicht zuletzt darauf zurückzuführen, dass der Aufbau eines SFC-Systems in den meisten Betrieben damit einhergehen muss, eine CO₂-Infrastruktur zu schaffen. Doch wie die hier präsentierten Beispiele verdeutlichen, kann sich dieser Schritt durchaus lohnen.

Stefan Lamotte

Analytical and Material Science, BASF
stefan.lamotte@basf.com

Michaela Wirtz, Mo Legelli

Fachbereich Angewandte Naturwissenschaften, Hochschule Bonn-Rhein-Sieg

Literatur

- 1) P. G. Jessop, *Green Chem.* 2011, 13, 1391–1398.
- 2) J. Sherwood, M. De Bruyn, A. Constantinou et al., *Chem. Commun.* 2014, 50, 9650–9652.
- 3) S.-H. Pyo, J. H. Park, T.-S. Chang, R. Hatti-Kaul, *Curr. Opin. Green Sustain. Chem.* 2017, 5, 61–66.
- 4) M. Enmark, D. Åsberg, A. Shalliker, J. Samuelsson, R. Fornstedt, *J. Chromatogr. A* 2015, 1400, 131–139.
- 5) G. Guiochon, A. Tarafder, *J. Chromatogr. A* 2011, 1218, 1037–1114.
- 6) V. Hessel, N. N. Tran, M. R. Asrami et al., *Green Chem.* 2022, 24, 410–437.

Hersteller und Anwender gemeinsam zum Ziel

Hier teilen eine promovierte Analytikerin, die tätig ist für eine Contract Development and Manufacturing Organization in der Biopharmazie, und ein promovierter Produktmanager für Kapillarelektrophorese- und HPLC-Systeme ihre Gedanken zu den analytischen Herausforderungen in dieser sich rasant verändernden Welt.

Es vergeht kein Monat ohne neue Innovationen, technische Fortschritte und Veränderungen, die Einfluss auf das tägliche Leben nehmen. Beispiele sind die Künstliche Intelligenz, die Dynamik des Marktes, aber auch neue biochemische und biotechnologische Fragen. Die Industrie, die mit Drei- bis Fünfjahresplänen arbeitet, stellt das vor die enorme Aufgabe, mit den Veränderungen Schritt zu halten.

Zentral ist der Workflow

Für Hersteller von Analysegeräten beginnt fast jede Neuentwicklung mit der Frage nach dem Workflow des Kunden. In Gesprächen mit Kunden stellt sich in der Regel schnell heraus, dass alle ihren eigenen Workflow besitzen oder sich wünschen. In der Regel startet der Kunde nicht bei null: Es gibt bereits eine Software-Infrastruktur oder Geräte, die eingebunden werden sollen.

Die Komplexität der Infrastruktur beim Kunden hat sich in den letzten Jahren durch Vernetzung und Automatisierung stark verändert. Dies erschwert die Situation für die Hersteller und Anbieter von analytischen Geräten: Versucht man jede Möglichkeit abzudecken, wird das Instrument oder die Software sehr schnell zu komplex, die Lernkurve zu steil und die Installation zu herausfordernd. Konzentriert man sich auf einige wenige Funktionen, schrumpft der Kundenkreis. Hier bedarf es intelligenter Lösungen mit einer einfachen ersten Funktionsebene, die aber Expertinnen und Experten das Anpassen ermöglichen.

Als Contract Development and Manufacturing Organization (CDMO) ist man zugleich auch Dienstleister bio-

Live dabei ...

Die GDCh bei   

www.facebook.com/gdch.de
www.twitter.com/gdch_aktuell
www.instagram.com/gdch_aktuell



pharmazeutischer Analytik. Sie ermöglicht es, Herstellungsprozesse zu etablieren, zu überwachen und zu optimieren, ist die Basis der Qualitätssicherung biopharmazeutischer Moleküle und unabdingbar beim Troubleshooting über den ganzen Prozess hinweg. Die täglichen Herausforderungen zeigen sich deutlich in den immer komplexer werdenden Molekülformaten und sehr eng getakteten Zeitlinien. Hier besteht Bedarf nach Analytik, die bei den unterschiedlichen Fragestellungen unterstützt. Es ist zunehmend wichtig, etablierte Analytik weiter zu optimieren und die Komplexität auf ein Minimum zu reduzieren. Dabei helfen smarte Lösungen von Herstellern, um die Automatisierung zu steigern, die Workflows zu vereinfachen und die Fehlerquellen zu minimieren.

Mit zunehmender Komplexität der Molekülformate müssen sich auch die analytischen Geräte und Workflows weiterentwickeln, um eine optimale Analytik zu bieten. Dabei gestaltet sich gerade das Aufsetzen und das Implementieren neuer Workflows als deutlich zeit- und kostenintensiv. Zudem sind oft neue Geräte und Software anzuschaffen. Um Flexibilität zwischen der etablierten Analytik und den neuen analytischen Fragen zu garantieren, wäre es wünschenswert, die Steuerung und Wartung so wenig komplex wie möglich zu halten und optional anzupassen, um einen passenden Detailgrad und optimale Arbeitsweise für die unterschiedlichen Anwender und Fragestellungen zu ermöglichen. Neue Geräte und Software müssen in Labor und Workflows implementiert werden, sind beispielsweise mit anderen analytischen Geräten, Auswertesoftware und weiteren Laborsystemen wie einem Laborinformations- und Managementsystem (LIMS) zu verknüpfen.

Beispiel Biopharmazie

■ Biopharmazeutische Proteine, etwa Antikörper (mAbs) sind komplex und für die Analytik keine leichte Aufgabe. Doch gerade hier ist zu erkennen, welchen Beitrag die Hersteller leisten, um Anwender zu unterstützen – sei es durch das Weiterentwickeln von Geräten und Verbrauchsmaterialien, durch

das Vereinfachen der Anwendung und der Datenauswertung oder durch geeignete Workflows bei analytischen Fragen, die auch Trenn- und Detektionsparameter empfehlen. Gerade für die Antikörperanalytik bieten viele Hersteller optimierte Lösungen, die nach geringen Anpassungen universell einsetzbar sind.

Anders sieht es bei mAb-like oder sogar non-mAbs wie hochglykosylierten Enzymen aus. Hier kommen die bewährten Trenn- und Detektionsmethoden allein durch die große Heterogenität der Moleküle schnell an ihre Grenzen. Da sich die Signale überlagern, kann es schwierig sein, beispielsweise die exakte Masse oder die Ladungsheterogenität des Proteins zu bestimmen. Dadurch wachsen die Anforderungen an die Trenn- und Detektionsleistung der Messgeräte, bei gleichzeitiger Minimierung unerwünschter Wechselwirkungen. Hier spielt gerade die Probenvorbereitung eine wichtige Rolle, um die Heterogenität zu reduzieren.

Die steigende Molekülkomplexität bietet den Herstellern analytischer Geräte und Software die Möglichkeit, dem Anwender zu helfen. Ein gutes Beispiel hierfür ist die multidimensionale HPLC. Diese Technik wurde vor mehr als zwanzig Jahren erstmals beschrieben. Vor zehn Jahren griff Agilent die Thematik auf und brachte ein erstes kommerzielles Produkt heraus.

Größte Schwierigkeit war die Entwicklung der Ventiltechnik, das Herz der mehrdimensionalen Chromatographie. Dies wurde über die Jahre mit Rückmeldung von Kunden und Kooperationspartnern kontinuierlich weiterentwickelt, um neuen Aufgaben gerecht zu werden. Doch erst die Entwicklung einer Software, mit der sich Ventilschritte, Spülvorgänge und Injektionen mit minimalem Anwender-Input automatisch programmieren lassen, hat die mehrdimensionale HPLC als eines der führenden Tools für komplexe Analytik weltweit in die Labore gebracht. Aufgabe für die Zukunft wird die Datenauswertung der komplexen Ergebnisse sein. Hier können Künstliche Intelligenz und maschinelles Lernen eine entscheidende Rolle spielen.

Hardware versus Software

■ Jahrzehntlang ging es in der HPLC-Entwicklung um immer extremere Spezifikationen, zum Beispiel den Maximaldruck um weitere 100 Bar zu erhöhen. Dies hat sich in den letzten Jahren stark gewandelt: Die Kunden sind zufrieden mit der Hardware; sie ist ausreichend. Der Fokus hat sich zunehmend auf die Software verschoben – gerade, weil sich die Zeit, die man mit der Anlage verbringt, hin zur Softwareanwendung verschoben hat.

Hier fuhr man lange einen minimalen Standard: Die Software musste funktionieren. Themen wie „Usability Design“, das Konzipieren einer Software mit dem Anwender im Kopf, haben sich in der analytischen Welt erst in den letzten Jahren etabliert, werden aber in hohem Maße – zu Recht – gefordert. Viele, gerade jüngere Anwenderinnen und Anwender beschäftigen sich täglich Stunden mit Handy, Tablet und Computer und sind eine intuitive Steuerung gewöhnt. Diese erwarten sie auch in der Steuerungssoftware im Labor. Hier müssen sich historisch gesehen eher Hardware-zentrierte Unternehmen hin zu Softwarefirmen entwickeln – ein Prozess, der durch den starken Wettbewerb um Softwareentwicklerinnen und -entwickler sowie andere Talente nicht einfach ist.

Aus Anwendersicht wichtig ist, dass die Steuerung einfach und die Analytik automatisierbar ist. Wünschenswert ist eine leicht zu bedienende Hard- und Software, die im besten Fall das analytische Personal unterstützt, um die Effizienz zu erhöhen und Fehlerquellen zu minimieren. Zum Beispiel kann die Software auf fehlende Eluenten oder Proben hinweisen oder Methoden und Parameter für optimale Analyseergebnisse vorschlagen.

Auch das unterstützte Troubleshooting, sei es methoden- oder geräteseitig, erleichtert die Arbeit im Labor. Gerade hier ist es von Vorteil, unterschiedliche User definieren zu können, um den Detailgrad entsprechend der Tätigkeit der Mitarbeitenden anzupassen. Dem reinen Anwender soll es möglich sein, die Analytik ohne große Hürden erfolgreich durchzuführen; gleichzeitig sollen Expertinnen und Experten die Möglichkeit



haben, Methoden zu entwickeln und Geräte-Troubleshooting bis zu einem gewissen Grad selbst zu betreiben. Hier gilt es, die Hard- und Software so einfach wie möglich und so detailreich wie nötig zu halten. Dies ist vor allem bei den immer anspruchsvollen Messgeräten nicht einfach, etwa bei mehrdimensionalen Trenntechniken und Massenspektrometern, die mit den komplexer werdenden analytischen Fragestellungen mithalten müssen.

Künstliche Intelligenz

■ Von der hoch komplexen Datenanalyse bis zur Rechnungsüberprüfung – die Künstliche Intelligenz (KI) hat sehr viele Bereiche auf Seiten von Hersteller und Anwender bereits erreicht.^{1,2)} Viele weitere werden folgen: Durch die lernenden Komponenten in der KI wird sich dies exponentiell weiterentwickeln.

Aus Sicht der Hersteller besteht die aktuelle Aufgabe darin, die neue Technologie in Produkte und in Firmenabläufe einzubinden. Erste Tests zeigen, wie gut selbst öffentlich zugängliche KI (ChatGPT, Bing) beim Erstellen von Servicetexten arbeitet. Hier ließen sich in Zukunft viele Arbeitsprozesse just in time erledigen, was komplexe zeitliche Absprachen zwischen Abteilungen einfacher macht. Auch bei der Softwareprogrammierung sind die Entwicklungssprünge enorm: Die KI kann schon jetzt einfache Softwareskripte völlig selbstständig schreiben.

Bei Produkten liegt die Herausforderung darin, die KI und die Datensicherheit zu integrieren. Aktuell sind viele Softwareprodukte, die Instrumente und Daten kontrollieren, proprietär. Das wird sich ändern müssen, wenn man mit öffentlich zugänglichen KI-Programmen arbeiten will. Anwendungsbereiche könnten sein: Methodenerstellung und Entwicklung inklusive Design of Experiment, Datenauswertung mit Patternvergleich, Datenbankabgleich und komplexe mathematische Berechnungen. Gerade in diesen beiden Feldern könnte sich die lernende Komponente der KI als große Hilfe erweisen.

Aus Anwendersicht wäre es hilfreich, mit KI und maschinellem Lernen

wiederkehrende Abläufe zu analysieren, zu automatisieren und zu optimieren. Hierzu zählen unter anderem Laborabläufe, Produktionsprozesse, Analytik und Datenauswertung. Zudem könnte die KI beim Lösen von Problemen helfen. Wichtig ist allerdings, die Datenintegrität sicherzustellen. Diese muss um jeden Preis zu jeder Zeit garantiert sein, was es schwierig macht, öffentlich zugängliche Systeme und Programme zu verwenden. Zudem ist ein gewisser Grad an Transparenz in der Arbeitsweise der Systeme zu erhalten: So bleiben Funktionsweise und Ergebnisse nachvollziehbar und kontrollierbar.

Fazit

■ Durch die immensen analytischen Herausforderungen, mit denen wir uns jetzt schon befassen und die stark zunehmen werden, ist es am erfolgversprechendsten, wenn Hersteller und Anwender von Analysegeräten gemeinsame Lösungen entwickeln und dies durch einen engen Austausch vorantreiben.

*Jennifer Römer,
Expertin für massenspektrometrische
Proteincharakterisierung,
Rentschler Biopharma, Laupheim*

*Jens Meixner,
Strategischer Produktmanager,
Agilent Technologies, Waldbronn*

Literatur

- 1) Digital Process Industry, „Künstliche Intelligenz: Wie die chemische Industrie dadurch schlauer wird“, 2021. www.digital-process-industry.de/kuenstliche-intelligenz-wie-die-chemische-industrie-dadurch-schlauer-wird (Abruf am 2. Juni 2023)
- 2) Labo, „Automation und KI im Chemielabor nutzen“, 2021. www.labo.de/news/automation-und-ki-im-chemielabor-nutzen.htm (Abruf am 2. Juni 2023)

Prozessanalytik und Industrial Internet of Things bei Merck

Die Zukunft ist digital, doch was bedeutet das für die chemische und pharmazeutische Industrie? Ein Einblick in die Herangehensweise an das Thema im Unternehmen Merck

■ Zwei Schlüsseltechnologien sind essenziell für die digitale Zukunft:

- eine breite PAT-Plattform (PAT = Process Analytical Technology)
- eine intelligente IIoT-Landschaft (IIoT = Industrial Internet of Things), basierend auf einem Standard für die Prozessentwicklung und Produktion (MTP = Module Type Package VDI 2658)¹⁻⁴⁾

In der digitalen Zukunft sollen alle Daten in einem Produktlebenszyklus digital verfügbar sein. Hierzu werden vor allem in der Verfahrensentwicklung die wichtigen Informationen vereint, um das Produkt aus dem Entwicklungsbereich in die Produktion zu überführen. Vier Treiber wollen wir mit dem digitalen Verständnis verbessern:

- Time2Market: Produkte müssen schneller für den Markt verfügbar sein.
- Qualität: Die Qualitätsanforderungen müssen robust erfüllt werden.
- Nachhaltigkeit: Die Produkte sollen nachhaltig verfügbar sein.
- Kosten: Wir müssen auf dem Weltmarkt konkurrenzfähig produzieren.

Diesen Herausforderungen begegnet das Unternehmen Merck unter anderem, indem es integrierte Prozessanalytik einsetzt.

Allgemeine Vorgehensweise

■ Aufgrund der starken Diversifizierung des Portfolios und der damit verbundenen Variabilität und Komplexität der Herstellprozesse, inklusive Kampagnen-basierter Multiproduktion, setzt Merck die Prozessanalytik derzeit vorrangig in der Produkt- und Verfahrensentwicklung ein.

Nicht infrage kommt in der Regel ein universeller, generischer Ansatz für den Einsatz von Onlineanalytik oder PAT. Stattdessen hat sich bei Merck folgendes Konzept etabliert (Abbildung 1):



- In der ersten Phase werden die Eigenschaften des Produkts und des Prozesses ermittelt, die sich mit prozessanalytischen Methoden erfassen lassen.
 - Sofern nicht bereits Daten für vergleichbare Materialsysteme oder Prozesse vorliegen, erfolgt anschließend ein Screening möglicherweise geeigneter Onlinemethoden an Edukten, Zwischenprodukten, Produkten und, falls zugänglich, Reaktionslösungen sowie Nebenkomponenten oder Verunreinigungen.
 - Während der Prozessentwicklung werden die Methoden, die zuvor als geeignet bewertet wurden, als Onlinemethoden implementiert.
- Prozess- oder Onlineanalytik ist eine Grundvoraussetzung, um Entwicklungszyklen in der chemischen Prozessentwicklung zu verkürzen und damit die Kommerzialisierung von Produkten zu beschleunigen sowie Produktionsprozesse nachhaltiger zu machen. Ein detailliertes Prozessverständnis entsteht

nur durch PAT in Kombination mit den Zeitreihendaten der Prozessparameter, wenn gewährleistet ist, dass Industriestandards angewendet werden. Dies eröffnet ein umfassendes digitales Verständnis des Prozesses, angereichert im späteren Produktlebenszyklus durch Daten aus der Produktion.

Datenreiche Modelle unterstützen die Beschreibung und spätere Entwicklung von Rezepten, die eine hochautomatisierte Produktion möglich machen und somit eine robuste und kostengünstige Herstellung unserer Produkte sicherstellen (Abbildung 2).

Abschließend wird überprüft, ob es wirtschaftlich sinnvoll ist, die erarbeiteten Methoden in den Produktionsbetrieb zu überführen, und ob das für die Routineproduktion erforderlich ist. Neben den technischen und ökonomischen Gesichtspunkten sind auch regulatorische Anforderungen zu erfüllen.

PAT und Automation sind der Schlüssel, um Prozesse in der kontinuierlichen Fertigung pharmazeutischer Wirkstoffe

und Feinchemikalien in Echtzeit zu verfolgen und zu steuern. Im pharmazeutischen Umfeld kann PAT in Zukunft die Freigabe in Echtzeit ermöglichen (Real Time Release Testing) und damit Medikamente auf dem Markt verfügbarer machen.

PAT-basierter Ansatz konkret bei Merck

Die kontinuierliche Fertigung (Continuous Manufacturing, CM) verändert grundlegend, wie Arzneimittel hergestellt werden, etwa feste orale Darreichungsformen.⁵⁾ Viele Pharmaunternehmen haben in den letzten Jahren den Weg von der Chargenproduktion zur kontinuierlichen Herstellung eingeschlagen. Der Schlüssel zu einer erfolgreichen Produkt- und Prozessentwicklung sowie einer späteren Herstellung unter GMP-Anforderungen (Good Manufacturing Practice) ist es, PAT an den entscheidenden Stellen über den gesamten Herstellungsprozess einzusetzen.⁶⁾ Neben der kontinuierlichen Direkttablettierung setzt Merck auf die Doppelschneckengranulierung kombiniert mit einer kontinuierlichen Trocknung. Den Herstellprozess inklusive PAT-Messstellen zeigt Abbildung 3 (Seite 31).

Continuous Manufacturing spielt dabei sowohl für die klinischen Studienphasen als auch für die kommerzielle Produktion eine entscheidende Rolle. Die vollkontinuierliche Fertigungslinie für klinische Prüfpräparate im kleinen Maßstab ermöglicht einen Durchsatz von 1 bis 4 kg/h. Hochintegrierte PAT-Systeme, gesteuert von einer PAT-Data-Management-Software (PDMS), ermög-

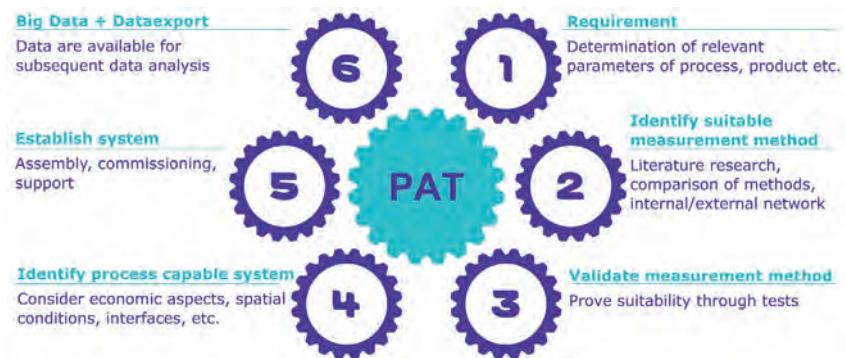


Abb. 1. Konzept zum Implementieren von Prozessanalytik bei Merck

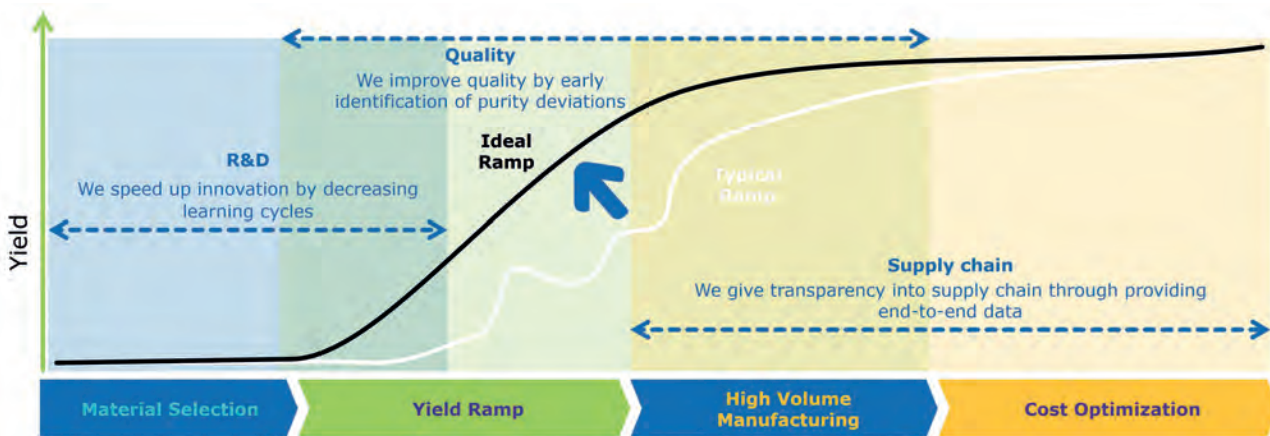


Abb. 2. Entwicklung der Prozessausbeute (Yield) über die Zeit mit Prozessanalytik (Ideal Ramp) im Vergleich zu konventionellen Ansätzen (Typical Ramp)

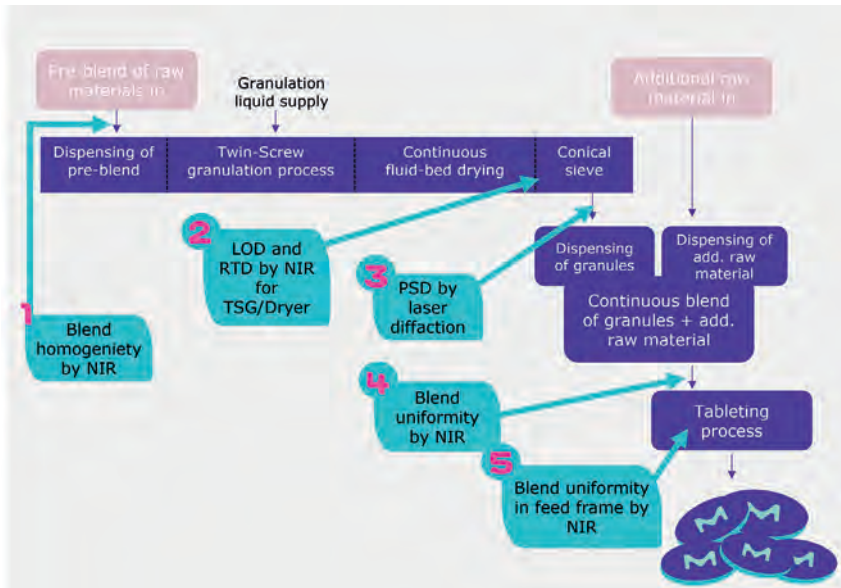


Abb. 3. Herstellprozess von Medikamenten inklusive der Stellen, an denen sich PAT-Messungen einbauen lassen

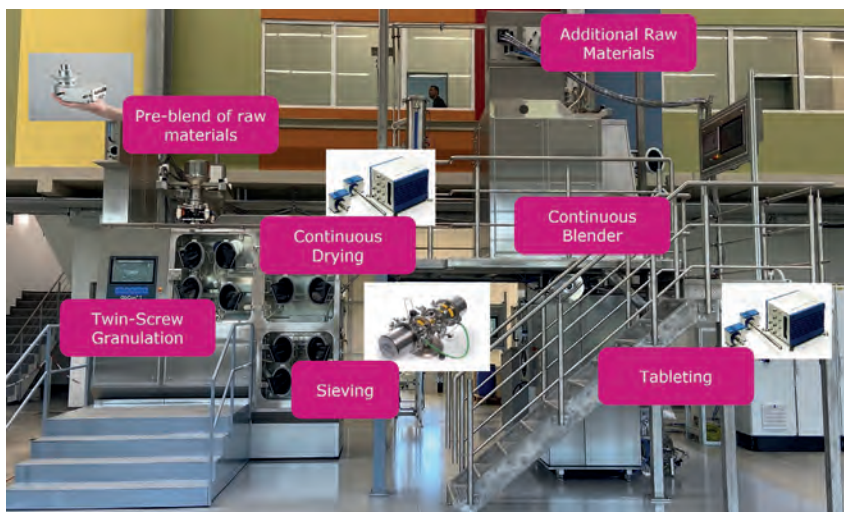


Abb. 4. Kontinuierliche Fertigungsanlage mit PAT-Geräten

lichen es, die kritischen Qualitätsparameter (Critical Quality Attribute, CQA) während des Herstellprozesses zu überwachen und dadurch die Anlage effektiv zu steuern.

Dafür wird PAT an den folgenden Positionen der Anlage eingesetzt (Abbildung 4):

- Nahinfrarot(NIR)-Spektroskopie, um die Mischgüte bei der Herstellung der Vormischung zu überwachen
- Bestimmen der Restfeuchte nach Granulation und Trocknung mit NIR
- Überwachen der Partikelgrößenverteilung mit Laserbeugung
- Überwachen der Mischgüte am kontinuierlichen Mischer mit NIR
- Bestimmen des Gehalts der pressfertigen Mischung auf der Tablettenpresse mit NIR

Auch spielt das Bestimmen der Verweilzeitverteilung (Residence Time Distribution, RTD) durch PAT eine entscheidende Rolle für das Prozessverständnis, die Simulation des Herstellungsprozesses sowie für die Kontrollstrategie. Bei Störungen in der CM-Anlage wird Material, das nicht den Spezifikationen entspricht, über einen – durch die Verweilzeit vorgegebenen – Zeitraum ausgeschleust und gelangt somit nicht in das Arzneimittel. Hierfür sind die Verweilzeiten in den Anlagenteilen zu bestimmen, das geschieht ebenfalls mit PAT-Geräten.

Die Überwachung des API-Gehalts (Active Pharmaceutical Ingredient, Wirkstoff) zeigt exemplarisch Abbildung 5. Nach etwa vier Minuten steigt der API-

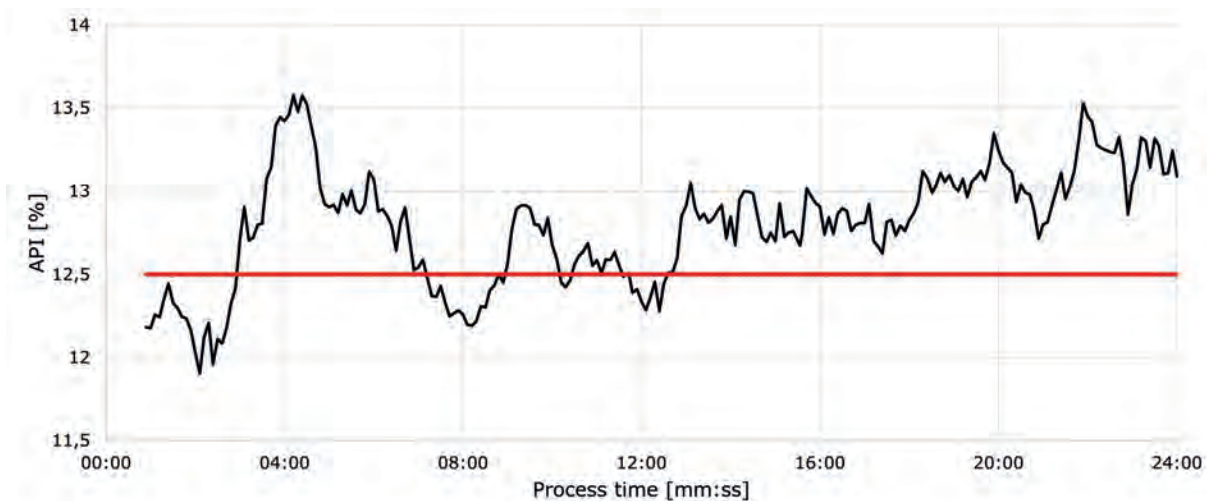


Abb. 5. Nahinfrarotmessungsvorhersage des Wirkstoffgehalts in Prozent über die Prozessdauer



Gehalt schlagartig in einem Spikeexperiment, geht wieder zurück und steigt dann nach etwa zwölf Minuten wieder langsam an. Die PAT-Methoden werden während der Produktion verwendet, um sowohl kurzzeitige Ereignisse als auch langfristige Trends zu erkennen – so wird die Produktqualität sichergestellt.

Herausforderungen und Abschlussbetrachtungen

■ Wer PAT im GMP-Bereich einsetzen möchte, muss die regulatorischen Vorgaben hinsichtlich der Qualifizierung des Equipments und der Validierung der analytischen Methoden berücksichtigen. Hierbei sind die Anforderungen der Arzneimittelagenturen teilweise unterschiedlich und noch nicht stringent geregelt. Die neue Richtlinie ICH Q13 für die kontinuierliche Herstellung bietet allerdings eine gute Grundlage für den Einsatz von PAT und sieht PAT sogar als unabdingbar an, wenn Arzneimittel kontinuierlich gefertigt werden. Dieses geht bis zum Real Time Release von Arzneimitteln, auch für Merck ein Ziel in den kommenden Jahren.

Neben analytischen Fragen ist eine weitere Herausforderung, wie sich PAT-Messstellen in den Prozess oder das Prozessleitsystem integrieren lassen. Hier sind unter anderem auch die Hersteller von PAT-Geräten gefragt, um die Einbindung über die standardisierte Module-Type-Package-Schnittstelle zu ermöglichen.

Der erste Schritt beim Erheben analytischer Daten ist es, die Messaufgabe zu definieren. Neben Machbarkeitsstudien im Labor lassen sich analytische Daten auch direkt im Prozess erheben. Bei Machbarkeitsstudien in einem analytischen Labor sind die größten Herausforderungen, die Proben bereitzustellen sowie die Methode oder das Analysenmodell auf das Analysenequipment im Prozess zu übertragen. Es ist sicherzustellen, dass die Proben, die analysiert werden, repräsentativ für den Prozess sind und sich die Analysemethoden in den Prozess implementieren lässt. Hierzu gehören messgerätespezifische Parameter wie Auflösung, Nachweisgrenze und Messbereich. Darüber hinaus sind chemometrische Modelle für Onlinemethoden in der Regel durch orthogonale Analysenmethoden zu kalibrieren.

Die Systeme müssen nicht nur betreut und bedient werden, sondern es braucht auch eine Qualitätssicherung. Die DIN EN 14181 beschreibt die drei Qualitätssicherungsstufen (Qual) und eine regelmäßige Funktionsprüfung.⁷⁾ Hierbei wird zum Beispiel der Einbau und die Kalibrierung automatischer Messeinrichtungen mit Standardreferenzmaterialien sowie die regelmäßige Funktionsprüfung festgelegt. Die Dimensionierung von Messsonden oder sicherheitsrelevante Anforderungen wie Explosionsschutzauslegung des Equipments sind ebenfalls zu beachten.

Es braucht ein enges Zusammenspiel von Expertenfunktionen aus chemischer und physikalischer Analytik, Prozesstechnik, Automatisierungstechnik, Forschung und Entwicklung, Produktion sowie aus dem Zulassungsbereich, um die Herausforderungen zu bewältigen. Um PAT im Betrieb erfolgreich und mit Akzeptanz zu implementieren, sind zudem die Mitarbeitenden und die Organisation frühzeitig einzubinden und mit den neuen Techniken vertraut zu machen.

*Christoph Körber, Stefan Busche,
Evelyn Kyris, Christiane Schlander
und Sebastian Härtner
Merck, Darmstadt
christoph.koerber@merckgroup.com*

Literatur

- 1) VDI/VDE/NAMUR 2658 Blatt 1, *Automatisierungstechnisches Engineering modularer Anlagen in der Prozessindustrie – Allgemeines Konzept und Schnittstellen*, Beuth Verlag 2019–10.
- 2) VDI/VDE/NAMUR 2658 Blatt 2, *Automatisierungstechnisches Engineering modularer Anlagen in der Prozessindustrie – Modellierung von Bedienbildern*, Beuth Verlag 2019–11.
- 3) VDI/VDE/NAMUR 2658 Blatt 3, *Automatisierungstechnisches Engineering modularer Anlagen in der Prozessindustrie – Bibliothek für Datenobjekte*, Beuth Verlag 2020–09.
- 4) VDI/VDE/NAMUR 2658 Blatt 4, *Automatisierungstechnisches Engineering modularer Anlagen in der Prozessindustrie – Modellierung von Moduldiensten*, Beuth Verlag 2022–10.
- 5) ZVEI, *Modulbasierte Produktion in der Prozessindustrie – Auswirkungen auf die Automation im Umfeld von Industrie 4.0: Empfehlungen des AK Modulare Automation zur NE148 der Namur 2015*.
- 6) ICG Q13: *Continuous Manufacturing of Drug Substances and Drug Products Q13, ICH Harmonised Guideline*, 2022
- 7) DIN EN 14181, *Emissionen aus stationären Quellen- Qualitätssicherung für automatische Messeinrichtungen*, Beuth Verlag 2015–10.

Von proprietär zu Open Source

In der zunehmend automatisierten und digitalisierten Industrie limitieren proprietäre Hardware- und Softwarekomponenten analytisch-chemischer Instrumente oft die Integration in Daten-Workflows und die Auswertung analytischer Daten. Aus diesem Grund wurde das Open-Source-Python-Projekt MOCCA entwickelt: Es ermöglicht eine effiziente und flexible chemometrische Analyse von HPLC-Rohdaten.

■ Die synthetische Chemie befindet sich in einer Phase der digitalen Transformation. Aufgrund der stetig steigenden Anforderungen an Synthese- und Entwicklungsprozesse kleiner Moleküle werden Automatisierungs- und Digitalisierungslösungen in chemischen Laboren immer attraktiver, um die Effizienz zu steigern und Kosten zu senken.

Analytische Rohdatenerzeugung und -analyse sind traditionell an proprietäre Hardware und Software spezifischer Hersteller gebunden, insbesondere bei der hochauflösenden Flüssigkeitschromatographie (HPLC). Oft werden aus den Rohdaten nur wenige Informationen extrahiert (zum Beispiel die Peakfläche eines einzigen Peaks) und ein Großteil der Daten verworfen. Dies steht im Widerspruch zu modernen datenzentrierten Ansätzen in Automatisierung und Digitalisierung. Das Open-Source-Python-Projekt MOCCA nimmt diese Herausforderungen an und verbessert die Nutzung analytischer Daten.¹⁾

Workflows mit MOCCA

■ MOCCA steht für Multivariate Online Contextual Chromatographic Analysis: Es macht es möglich, HPLC–DAD-Rohdaten aus Diodenarray-Detektoren (DAD) zu analysieren. Offene Datenformate (zum Beispiel Allotrope) und die Nutzung einer offenen Umgebung (Python) führen zu datenbasierten Entscheidungen im Prozess (Abbildung 1, Seite 33).

Im Workflow ergeben sich ganz neue Möglichkeiten. Beispielsweise ist eine Routine

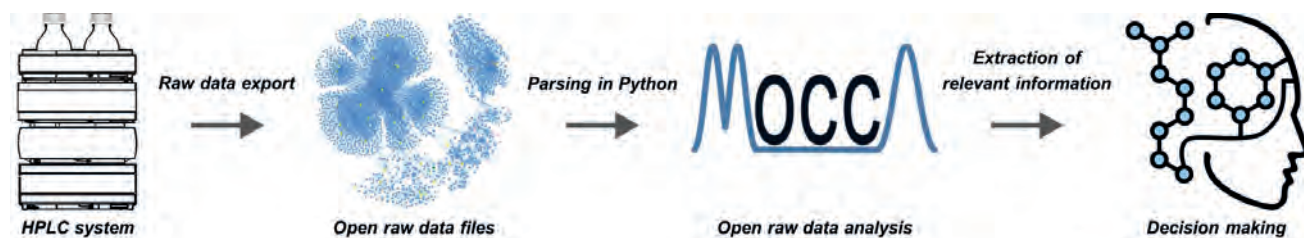


Abb. 1. Daten-Workflow: Zunächst werden chromatographische Rohdaten in offenen Datenformaten (zum Beispiel comma-separated values oder Allotrope) exportiert und in Python eingelesen. Mithilfe von MOCCA werden diese Daten analysiert. Nach dem Extrahieren der für einen Prozess relevanten Information lassen sich datenbasierte Entscheidungen im Prozess treffen.

zur automatisierten Peak-Deconvolution, mit der sich bekannte Signale weiterhin quantifizieren lassen, selbst wenn diese von Signalen unerwarteter Verunreinigungen oder Nebenprodukte überlagert sind. Abbildung 2 zeigt ein reales Chromatogramm aus einer Fallstudie, in dem das Signal des Produkts P mit einem unerwarteten Nebenprodukt I überlappt. MOCCA führt Peak-Purity-Checks auf allen Signalen aus (rote und

grüne Flächen in Abbildung 2, oben) und erkennt, dass das potenzielle Produktsignal verunreinigt ist. Daraufhin wird die Peak-Deconvolution-Routine angewendet: Sie verwendet HPLC-DAD-Rohdaten aus Kalibrationsmessungen, um die individuellen Retentionsprofile sowie die Spektren der Verbindungen zu errechnen (Abbildung 2, unten).

Obwohl kommerzielle Softwarelösungen bereits multivariate Rohdaten-

analysen ermöglichen, sind sie nur begrenzt flexibel in der Workflow-Implementierung. MOCCA ist als Open-Source-Projekt anpassungsfähiger. Es fungiert als Plug-and-Play-Modul, das nicht durch spezifische Projektrahmen eingeschränkt wird.

Reaktionsscreening und -optimierung

■ In einer unserer Fallstudien verwendeten wir MOCCA, um eine industriell relevante Reaktion mit Wellplate-Screening zu untersuchen: die palladiumkatalysierte Cyanierung von Arylhalogeniden (Abbildung 3). Die irreversible Desaktivierung der katalytisch aktiven Palladiumkomplexe in Gegenwart überschüssigen Cyanids erfordert eine konstant niedrige Cyanidkonzentration in der Reaktionslösung. In unserem Ansatz wurde das durch eine vorgelagerte Entschützungsreaktion von *O*-acylierten Cyanohydrinen gewährleistet.

In dem Screening wurden sieben geschützte Cyanohydrine (Abbildung 3b), vier Basen (Abbildung 3c) und drei Liganden (Abbildung 3d) getestet. Jede Kombination wurde auf einer Mikrotiterplatte angesetzt und nach abgeschlossener Reaktion mit HPLC-DAD analysiert. Die Rohdaten wurden mit MOCCA ausgewertet. In diesen Reaktionen entstehen neben dem Hauptprodukt auch eine Reihe von unvorhersehbaren Nebenprodukten. Diese zu identifizieren und zu quantifizieren, insbesondere wenn sie mit den Signalen des Hauptprodukts überlappen, stellt ein typisches Problem bei solchen Screening-Datensätzen dar.

MOCCA verfolgte sowohl die Signale bekannter als auch die unbekannter Verbindungen über eine Vielzahl an Experimenten. Außerdem wurden erneut relevante Signale von Signalen unerwarteter Nebenprodukte überlagert.

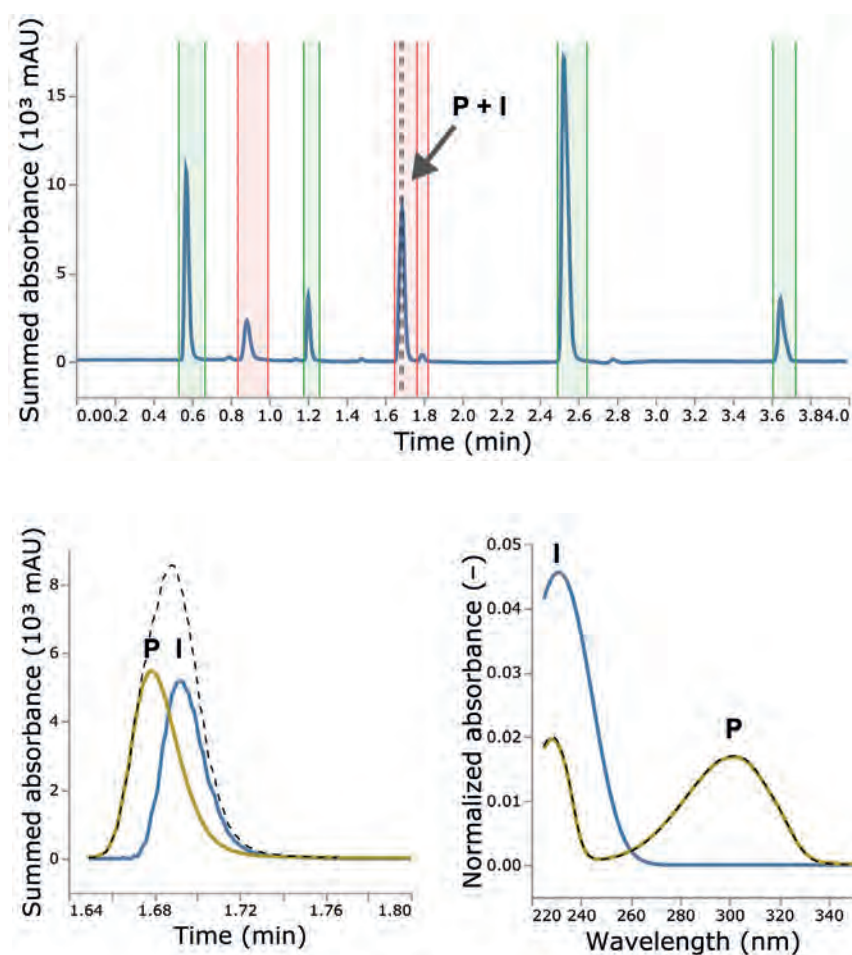


Abb. 2. Peak-Deconvolution-Routine. Oben: MOCCA führt Peak-Purity-Checks aus und findet ein mit einem Nebenprodukt (I) verunreinigtes Produktsignal (P). Unten: Errechnete Retentionsprofile (links, gestrichelte Kurve ist das originale, verunreinigte Retentionsprofil) und Spektren der beiden Verbindungen (rechts, gestrichelte Kurve ist das UV-Vis-Spektrum des reinen Produkts).



Hier ermöglichte die chemometrische Datenanalyse es, die Screenings auszuwerten, ohne dass es nötig war, eine neue HPLC-Methode zu entwickeln, die die Signale aller Nebenprodukte von den relevanten Signalen auftrennt. Abbildung 4 fasst die Ergebnisse zusammen.

Die Rolle offener Datenformate und Open Source

Die Ergebnisse unserer Fallstudie demonstrieren, wie sich MOCCA für die Datenanalyse und Chemometrie in chemischen Laboren einsetzen lässt. Die

Kombination aus umfassender Datenanalyse und Flexibilität beim Anpassen von Workflows macht MOCCA zu einer attraktiven Option, um Prozesse in der synthetischen Chemie zu optimieren. Open-Source-Tools wie MOCCA eröffnen nicht nur neue Perspektiven für Forschung und Entwicklung in der synthetischen Chemie, sondern können generell dazu beitragen, Barrieren in der Datenanalyse zu überwinden, die durch proprietäre Hard- und Software entstehen.

Offene Daten und Open-Source-Software bereitzustellen und zu nutzen sind wichtige Schritte auf dem Weg zu einer

vollständig digitalisierten und datengetriebenen Chemie. Sie fördern nicht nur die wissenschaftliche Zusammenarbeit und den Informationsaustausch, sondern ermöglichen auch eine effizientere und nachhaltigere Chemie. Die analytische Chemie erlangt durch die digitale Transformation eine Schlüsselrolle für das Aufnehmen und Interpretieren analytischer Daten, die weniger durch Hersteller und mehr durch die Prozessanforderungen bestimmt sind. Projekte wie MOCCA machen deutlich, wie sehr die analytische Chemie durch Open-Source-Software und offene Datenstandards die digitale Transformation in der Chemie vorantreiben kann.

Christian P. Haas, Agilent
christian.haas@agilent.com

Maximilian Lübbsmeyer, Bayer
max.luebbesmeyer@bayer.com

Dieser Text wurde mit Unterstützung von GPT-4 verfasst.

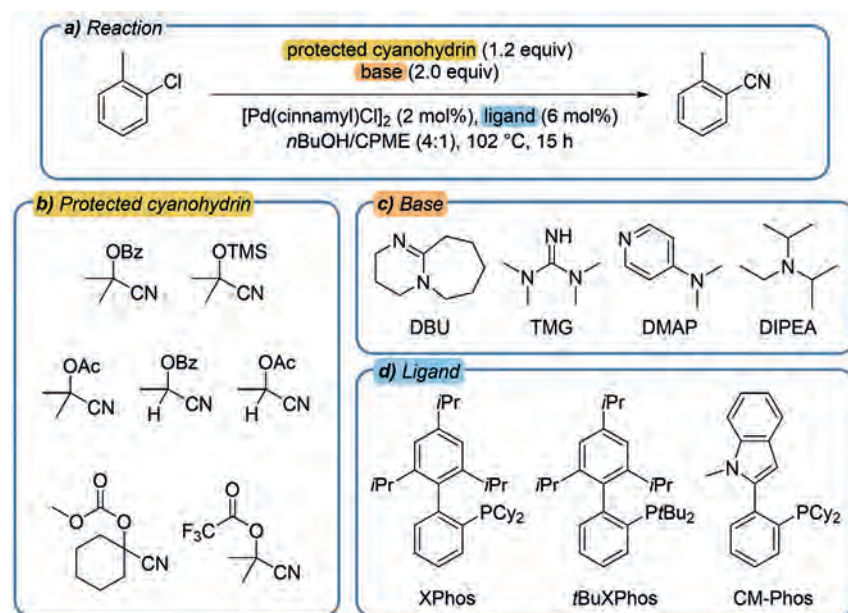


Abb. 3. a) Reaktionsbedingungen der palladiumkatalysierten Cyanierung von 2-Chlortoluol zu o-Tolunitril und die für das Wellplate-Screening verwendeten Reagenzien: b) geschützte Cyanohydrine, c) Basen, d) Liganden.

Literatur

Dieser Artikel basiert auf einer Zusammenarbeit zwischen der Bayer AG und dem Department of Chemical Engineering am Massachusetts Institute of Technology (MIT). Der Artikel nimmt Bezug auf

- 1) C. P. Haas, M. Lübbsmeyer, E. H. Jin et al., „Open-Source Chromatographic Data Analysis for Reaction Optimization and Screening“, ACS Cent. Sci. 2023, 9, 2, 307–317. Die entnommenen und zum Teil abgeänderten Abbildungen unterliegen der Creative Commons License (CC BY 4.0).

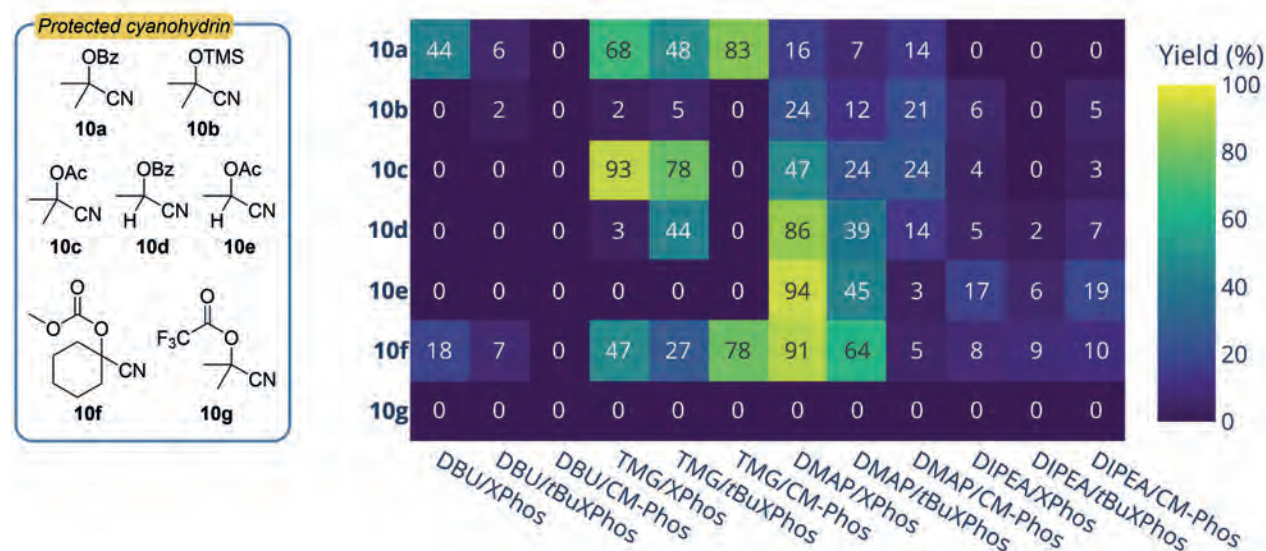


Abb. 4. Ausbeute (rechts) des Hauptproduktes o-Tolunitril bei Verwendung geschützter Cyanohydrine, Liganden und Basen (links)



Personalsituation in der Analytik

Müssen sich die Analytikabteilungen in Deutschland auf eine große Lücke an Fachkräften einstellen? Nein, im Moment eher nicht, geben aktuelle Studien, aber auch Ausbildungszentren für die chemische Industrie Entwarnung. Gleichwohl wird es immer herausfordernder, die richtigen Leute für die anstehenden Aufgaben zu gewinnen – vor allem, wenn man mit anderen Branchen konkurrieren muss.

■ Der Fachkräftemangel ist in aller Munde. Für viele Betriebe wird es immer schwieriger, offene Stellen zu besetzen. Zum Beispiel in der Informationstechnologie: Laut einer Studie des Kompetenzzentrums Fachkräftesicherung (KOFA) standen im Jahr 2022 in Deutschland knapp 68 000 offenen IT-Stellen nur etwa 27 000 entsprechend ausgebildete Arbeitssuchende gegenüber. Andere Engpassberufe, also Berufe, bei denen es deutlich mehr offene Stellen als Arbeitssuchende gibt, sind neben den Gesundheits- und Sozialberufen vor allem Berufe in der Elektrotechnik.

Wie sieht es in der chemischen Industrie aus? Einen Überblick gibt die KOFA-Studie „Fachkräftecheck Chemie“ aus dem Jahr 2021, die die Stellenentwicklung und die Zahl der unversorgten Bewerberinnen und Bewerber bis 2021 untersucht.¹⁾ Unterschieden werden chemische „Kernberufe“, also Berufe in Forschung und Entwicklung (F&E), Laborberufe und Berufe in der Produktion sowie die chemierelevanten Berufsfelder Technik und Instandhaltung, IT und Softwareentwicklung sowie kaufmännische Berufe. Letztere Berufe teilen sich die chemisch produzierenden Unternehmen mit vielen anderen Branchen, von der Kraftfahrzeugindustrie bis hin zum Banksektor.

Das Personal für die Analytikabteilungen kommt im Wesentlichen aus den Kernbereichen F&E und Labor. Die Berufe hier sind vielfach durch ein gehobenes Anforderungsniveau gekennzeichnet – die Bundesagentur für Arbeit unterscheidet qualifizierte Fachkräfte mit mindestens zweijähriger Berufsausbildung, Spezialistinnen und Spezialisten mit Bachelor- oder Fortbildungsabschluss (Meister, Techniker, Fachhochschulabschluss) und Expertinnen und Experten mit mindestens vierjährigem Hochschulabschluss (Master oder Diplom).

Gut gerüstet in den Kernberufen

■ Der KOFA-Studie Chemie zufolge gab es 2021 in den Kernberufen der Chemie genügend oder annähernd genügend Fachkräfte aller Qualifikationsniveaus. Für F&E und die Laborberufe verzeichnet die KOFA-Studie gar keine Fachkräftelücke und sogar einen Überhang an Arbeitssuchenden, während sich in der Produktion ein Fachkräftengpass auf dem unteren Qualifikationsniveau abzeichnet. Gut besetzt sind die kaufmännischen Abteilungen. Ganz anders sieht es bei Technik und Instandhaltung und der IT und Softwareentwicklung aus: Hier kommt in einigen Berufen eine arbeitssuchende Person auf drei bis vier offene Stellen. Vor allem IT-Expertinnen und -Experten sind Mangelware.

Die Kernberufe sind auch deshalb so gut abgedeckt, weil die Chemiebranche traditionell ihre eigene Fachkräftesicherung betreibt. Durch die duale Ausbildung können die Unternehmen effizient die Zahl der Ausbildungsplätze an den Stellenbedarf anpassen. So bietet die chemische Industrie heute 40 Prozent mehr Ausbildungsplätze im IT-Bereich an als vor zehn Jahren, während die Zahl bei den übrigen Berufsfeldern insgesamt konstant blieb oder – im kaufmännischen Bereich – sogar abnahm.

Werden aber die Ausbildungsplätze alle besetzt? Schließlich schrumpfen die Schuljahrgänge, und die Akademisierung steigt. Die Chemieindustrie steht in dieser Hinsicht gut da. „Wir haben nach wie vor in der Ausbildung eine Besetzungsquote von 98 Prozent“, sagt Astrid Merz, Leiterin des Geschäftsbereichs Ausbildung bei der Provalidis, dem zentralen Aus- und Weiterbildungsanbieter des Chemiestandorts Höchst in Frankfurt am Main. Auch am Ausbildungszentrum der BASF in Ludwigshafen wurden 2022 nach eigenen Angaben bis auf wenige Ausnahmen alle angebotenen Plätze besetzt.

Recruiting und Trends

■ Anbieter legen sich mächtig ins Zeug, um junge Leute zu rekrutieren. Die BASF geht mit Aktionstagen, Berufspraktika, Social-Media-Präsenzen und Quereinsteigerprogrammen aktiv auf Interessierte zu. Die Provalidis setzt unter anderem einen Schwerpunkt auf Feriencamps, um Schülerinnen und Schülern mit einem Laborberuf vertraut zu machen.

Hierbei tritt eine Zielgruppe in Erscheinung, die es in der Vergangenheit deutlich weniger gab: „Wir stellen fest, dass sich eine zunehmende Zahl von Studienabbrechern für eine Ausbildung bei der BASF interessiert, und freuen uns über diese Bewerbungen“, heißt es aus der BASF. Auch Astrid Merz berichtet, dass viele Studierende, die mit den mathematischen Anforderungen eines Studiums nicht klarkommen, erfolgreich auf eine technische Ausbildung umschwenken.

Laut Merz lässt sich ein weiterer Trend ausmachen. So führe die zunehmende Akademisierung dazu, dass vermehrt Bachelor-Absolventinnen- und -Absolventen auf Laborstellen eingestellt würden, die zuvor von Laboranten oder Labortechnikerinnen besetzt waren. Umgekehrt sei der höchste akademische Abschluss, die Promotion, in der Industrie weniger stark nachgefragt. „Früher sind Chemiker fast immer über F&E ins Unternehmen eingestiegen“, sagt Merz. „Heute wird F&E vielfach zurückgefahren oder ausgegliedert. In allen anderen Bereichen, von Produktion über Regulatory bis Qualitätsmanagement, werden nun gerne Master-Absolventen eingestellt.“

MINT-Berufe sind Engpassberufe

■ Auch wenn die Statistik in den Kernbereichen der Chemie – und besonders auf den höheren Qualifikationsniveaus – keine Fachkräftelücke aufdeckt, sind andere Zahlen beunruhigend. So nimmt



die Zahl der MINT-Studierenden, also Teilnehmende eines Studiengangs der Mathematik, Informatik, Naturwissenschaft und Technik, stetig ab. Laut dem MINT-Frühjahrsreport 2023 des Instituts der deutschen Wirtschaft (IW) nahmen im Jahr 2022 über 176 000 Personen ein MINT-Studium auf, 2016 waren es noch 198 000.²⁾ Aber gerade diese Personen benötigt die deutsche Wirtschaft, rechnet der Report vor: „Um die Herausforderungen von Digitalisierung, Dekarbonisierung, Demografie und Deglobalisierung zu meistern, werden deutlich über 50 000 MINT-Kräfte allein für Forschungstätigkeiten zusätzlich benötigt.“

Und das über alle Wirtschaftszweige. In die Anwärter Schlange auf MINT-Abgänger reiht sich die Chemie trotz momentanem Überhang in den Kernberufen ein. Auch die Chemie benötigt mehr MINT-Personal, um die Transformation erfolgreich zu gestalten. Die Studie „Chemie-Arbeitswelten 2030“ des Bundesarbeitgeberverbandes Chemie (BAVC) untersuchte kürzlich, welche Auswirkungen die Transformation der chemisch-pharmazeutischen Industrie auf die Arbeitswelt bis 2030 haben wird.³⁾ Demnach könnten im günstigen Szenario 25 000 Stellen zusätzlich geschaffen werden – hauptsächlich in IT, Anlagenbau, Umwelttechnik, aber insbesondere auch in Forschung und Entwicklung.

Führungskräfte, Frauenanteil, Internationalität

■ Die KOFA-Studie Chemie warnt zudem vor einem kommenden Mangel an Führungskräften. Denn mehr als die Hälfte der Personen in leitender (Labor-)Funktion gehört zu den Babyboomern und geht in absehbarer Zeit in Rente. Um einem kommenden Mangel vorzubeugen, empfiehlt die Studie, jetzt gezielt Nachwuchskräfte zu identifizieren und vorzubereiten oder vermehrt auch Quereinsteiger zu qualifizieren.

Eine Lösung, um mehr Menschen in MINT-Berufe zu bekommen, könnte ebenfalls sein, den Frauenanteil in den MINT-Fächern zu erhöhen. Derzeit sind 34 Prozent der Studierenden, 9 Prozent der Auszubildenden und 16 Prozent der Berufstätigen im MINT-Bereich weiblich. In den MINT-Studiengängen stieg der Frauenanteil seit 2005 in Deutschland moderat um 10 Prozent an. Im Ausbildungsbereich bleiben Mädchen und Frauen jedoch bemerkenswert zurückhaltend.

Das liegt definitiv nicht an mangelnden Marketingbemühungen. „Tatsächlich müssen wir feststellen, dass der Anteil an Bewerberinnen für diese Berufsbilder trotz aller Anstrengungen nicht signifikant gestiegen ist“, räumt Astrid Merz für den Ausbildungsbereich der Provisadis ein. Die BASF nennt in der Ausbildung am Standort Ludwigshafen

eine Frauenquote von durchschnittlich 20 Prozent.

Können internationale Fachkräfte aushelfen? Tun sie bereits, vor allem in den Engpassberufen der IT, aber auch im F&E-Bereich. Hier ist das Qualifikationsniveau hoch, und vielerorts ist Englisch die Arbeitssprache. Eher konservativ sieht es dagegen bei Abschlüssen aus, die vor der Industrie- und Handelskammer (IHK) geleistet werden müssen. „Die IHK bietet nach wie vor nur deutschsprachige Prüfungen an. Das ist natürlich ein limitierender Faktor, abgesehen von der schwierigen Bewerbung von außerhalb der EU und der Anerkennung von Abschlüssen“, sagt Astrid Merz. Zumindest letztere Hürden will die Regierung mit dem für dieses Jahr geplanten Fachkräfteeinwanderungsgesetz ein wenig senken.

*Roswitha Harrer, Otterberg
Wissenschaftslektorat und
Wissenschaftskommunikation
www.words4science.de*

Literatur

- 1) www.kofa.de/daten-und-fakten/studien/fachkraeftecheck-chemie-2021
- 2) <https://www.iwkoeln.de/studien/christina-anger-julia-betz-axel-pluennecke-mint-bildung-staerken-potenziale-von-frauen-aelteren-und-zuwandernden-heben.html>
- 3) https://www.bavc.de/downloads/News/Chemie-Arbeitswelten_2030_finale_Studie.pdf

Keine halben Sachen.

Die Welt ist voll von Halbwissen. Besonders im sensiblen Umfeld der Chemie ist dies jedoch fehl am Platz. Deshalb arbeiten wir seit 1947 mit Leidenschaft und Liebe zum Detail daran, dass evaluierte Daten und Fakten rund um das Themenfeld Chemie zur Verfügung stehen. Immer. Und ohne Ausnahme. So wurde „Der RÖMPP“ Synonym für inzwischen über 65 000 Stichwörter und über 240 000 Querverweise, auf die man sich verlassen kann. Das sollten Sie sich am besten selbst anschauen.



Sonderpreis
für GDCh-Mitglieder **139,- €**
für stud. Mitglieder **69,- €** www.gdch.de



Nur 100% sind 100%.
www.roempp.com



54. DGMS-Jahrestagung

14. bis 17. Mai 2023 in Dortmund

■ Mit ihrer 54. Jahrestagung nahm die Deutsche Gesellschaft für Massenspektrometrie (DGMS) die Reihe ihrer Jahrestagungen wieder auf, die im März 2020 durch die Corona-Pandemie eine abrupte Unterbrechung erfahren hatte. Zweimal hatte das Team vom Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften (ISAS) in Dortmund die Tagung verschieben müssen; umso erfreuter schienen die rund 450 Tagungsteilnehmenden zu sein, dass endlich wieder eine Präsenztagung ohne Einschränkung stattfand.

Dortmund war nunmehr das dritte Mal Ort einer DGMS-Tagung. Bereits 2011 hatte der Organisator der diesjährigen Tagung, Albert Sickmann (ISAS), diese Veranstaltung ausgerichtet und auch 1991 war das ISAS, zu der Zeit vertreten durch Michael Linscheid, Veranstalter der Jahrestagung, damals noch der Vorgängerorganisation Arbeitsgruppe Massenspektrometrie (AGMS).

Workshops

■ Am Nachmittag vor der Tagung fanden sechs kurze Workshops statt; deren breit gestreute Inhalte reichten vom Umgang mit speziellen Softwarepaketen bis zu Ionisationsmethoden und MS-Techniken. Im Einzelnen waren das „Skyline“, „Alternative Ionisation Techniques“, „Lipidomics“, „Metrology in Mass Spectrometry“, „MS Imaging“ und „Proteome Discoverer“.

Tagungsauftakt

■ Das Ende der Corona-Zeit feierte die DGMS-Vorsitzende Thorsten Benter (Universität Wuppertal) genüsslich mit einem Bier des gleichnamigen Anbieters, als er die Teilnehmenden am Sonntagnachmittag begrüßte. Mit Organisator Albert Sickmann stieß er auf eine gute Tagung an.

Der erste Plenarvortrag „Shaken, not Stirred! – James Bond in the Spotlight of Physics“ von Metin Tolan (Universität Göttingen) gab dem Tagungsauftakt eine gewisse Lockerheit: Metin Tolan fühlte den Stunts und den Spezial-



Thorsten Benter von der Universität Wuppertal (rechts) stößt mit Albert Sickmann vom ISAS in Dortmund auf eine gute Tagung an.

techniken des britischen Doppelnullagenten als Physiker auf den Zahn.

Mit dem Wolfgang-Paul-Vortrag ehrt die DGMS seit 1997 jeweils eine Persönlichkeit für ihr prägendes Werk in der Massenspektrometrie. In diesem Jahr war Thomas R. Covey (AB Sciex, Concord, Ontario, Kanada) dazu eingeladen worden. Als Geräteentwickler blickte er auf vier Jahrzehnte der Verbesserung von Atmosphärendruckionisationsquellen zurück und die Effizienz, mit der diese Interfaces Ionen in die Gasphase und bis zum Massenanalysator transferieren. Seit den Anfängen hat die erhöhte Effizienz die Empfindlichkeit um einen Faktor von rund einer Million gesteigert und damit erst die enorm niedrigen Nachweisgrenzen ermöglicht.

Tagungsprogramm

■ Insgesamt gab es sechs weitere Plenarvorträge. Dem Ablauf der Tagung entsprechend folgten Jörg Feldmann (Universität Graz, Österreich) mit „ICP-MS as a contributing tool to non-target screening in environmental monitoring“, Theodore Alexandrov (EMBL, Heidelberg) mit „Spatial single-cell metabolomics reveals metabolic cell states“ und Joachim Richert (BASF, Ludwigshafen) mit „Omics and beyond – mass spectrometry as a key enabling platform in chemical industry“. Dabei wurde deutlich, wie sehr die industrielle Analytik auf eine Breite der Methoden in Kombination mit einer ausfallsicheren Verfügbarkeit setzt, im Gegensatz zu der oft



Metin Tolan von der Universität Göttingen seziert die Physik hinter den Aktionen und Techniken des legendären MI6-Agenten 007.

ultimativen Spezialisierung in der universitären Forschung.

Weitere Plenarvorträge hielten Kathryn Lilley (Universität Cambridge, UK) über „Mapping dynamic re-localization of the subcellular transcriptome and proteome“ und Mario Thevis (Deutsche Sporthochschule Köln) über „Mass spectrometry in sports drug testing – advances and challenges“. Thevis zeigte, wie problematisch falsch positive Tests sind, und gab Einblicke in teils recht delicate Bereiche bei der Aufnahme oder Übertragung von Wirkstoffen. Den letzten Plenarvortrag hielt John R. Yates (Scripps Research Institute, La Jolla, USA) zum Thema „Why does deltaF508

CFTR fail to mature and cause cystic fibrosis: interactions, modifications and in-vivo structure?“ Hier zeigte sich die immense Rolle der Bioinformatik, wenn es darum geht, aus zehntausenden Spektren Informationen zu gewinnen.

Dazu kamen in den parallelen Vortragssessions 20 Keynotevorträge und 62 eingereichte Vorträge in insgesamt 21 Sessions; eine davon war in Erinnerung an den kürzlich verstorbenen Michael Przybylski arrangiert worden (siehe *Mitteilungsblatt* 2/2023). Bei der Tagung wurden außerdem in zwei Nachmittags-sessions insgesamt 174 Poster präsentiert. Im Foyer hatten 17 Firmen aus dem Bereich der MS und Trenntechniken sowie des Zuhörers ihre Stände aufgestellt und einige Aussteller boten darüber hinaus Lunch-Seminare an.

Wissenschaftspreise

■ Im Unterschied zur ausgesetzten Präsenztagung waren die Wissenschaftspreise der DGMS kontinuierlich auch in den Corona-Jahren ausgelobt und bei den Online-Mitgliederversammlungen vergeben worden. Die feierlichen Verleihungen und die Möglichkeit, preisgekürte Arbeiten zu präsentieren, waren allerdings auf die nächste Präsenztagung verschoben worden. Daher standen bei der 55. DGMS-Tagung in einigen Kategorien die Preisverleihungen für drei Jahrgänge an.

Mattauch-Herzog-Förderpreise

■ Den Mattauch-Herzog-Förderpreis vergibt die DGMS seit 1988 an Wissenschaftler:innen 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. Mit dem Mattauch-Herzog-Förderpreis 2021 wurde Jens Soltwisch (Universität Münster) ausgezeichnet, der maßgeblich bei der Entwicklung der MALDI-Nachionisierungstechnik mitwirkte. Dabei schießt ein zweiter Laser verzögert zum Desorptionslaser und orthogonal zu diesem in das sich ausbreitende Plasma und steigert so die Ionisationseffizienz teils um das 100-Fache. Diese Technik ist seit einigen Jahren als MALDI-2 kommerziell verfügbar.

Für das Jahr 2022 ging die Auszeichnung an Charlotte Utrecht (Uni Siegen

und DESY Hamburg) für ihre Entwicklung massenspektrometrischer Methoden und Technologien, die wichtige Fortschritte dabei erzielten, die native Massenspektrometrie weiterzuentwickeln sowie Massenspektrometrie und Röntgenbeugung miteinander zu koppeln.

Den Preis für das Jahr 2023 erhielt Sven Heiles (Universität Duisburg-Essen und ISAS) für seine Arbeiten zur strukturellen und lokalen Differenzierung von Lipiden mit massenspektrometrischen Methoden unter Verwendung lichtinduzierter Derivatisierungs- und Fragmentierungsreaktionen.

Preis für Massenspektrometrie in den Biowissenschaften

■ Bei diesem Vorschlagspreis bewertet eine Jury die Vorgeschlagenen. Das Preisgeld finanzieren Waters (3000 Euro) und die DGMS (2000 Euro). In diesem Jahr standen die Verleihungen für die Jahre

2022 und 2023 an. Unglücklicherweise waren zur Tagung kurzfristig sowohl die Jury-Vorsitzende Kathrin Breuker (Universität Innsbruck, Österreich) als auch die beiden Preisträger:innen nicht in der Lage, zur Tagung anzureisen. Daher wurden die Preisträger:innen stellvertretend von Marianne Engeser (Universität Bonn) und Michael Mormann (Universität Münster) präsentiert. Den Preis 2022 erhielt Andrea Sinz (Universität Halle-Wittenberg) für ihre Entwicklungen in der Protein-Crosslinking-Massenspektrometrie sowie von spaltbaren Crosslinkern. Der Preis 2023 ging an Yuri Rappsilber (Universität Edinburgh, UK, und TU Berlin) für seine Arbeiten zur quantitativen Crosslinking-Massenspektrometrie.

Wolfgang-Paul-Preise

■ Die Wolfgang-Paul-Preise werden seit 1997 für Dissertationen und Master-



Die Mattauch-Herzog-Preise wurden verliehen an Sven Heiles (2023), Charlotte Utrecht (2022) und Jens Soltwisch (2021) (von links).



Verleihung der Wolfgang-Paul-Preise 2023. Von links: Sarah Nentwich, Stefan Wagner, Jochen Boosfeld, Thorsten Benter, Stefan Pieczonka und Michael Mormann.

arbeiten vergeben, die deutlich zur Entwicklung der MS beitragen. Dafür stiftet Bruker Daltonik jedes Jahr das Preisgeld, aufgeteilt in je 5000 Euro für die Promotionen und 2500 Euro für die Masterarbeiten. Die Promotionen wurden in Kurzvorträgen präsentiert, während die Masterpreise mit einem Poster vertreten waren.

Die Promotionspreise des Jahres 2021 gingen an Bing Peng (Universität Duisburg-Essen und ISAS Dortmund) und an Eike Mucha (FU Berlin). Den Wolfgang-Paul-Masterpreis erhielt René Kevin Rahrt (Universität Göttingen). Im Jahr 2022 wurde nur der Promotionspreis verliehen; ihn erhielt Marc Jäger (TU Darmstadt). Die Preise des Jahres 2023 wurden vergeben an Stefan Pieczonka (TU München) und an Stefan Wagner (Universität Leoben, Österreich). Der Masterpreis 2023 ging an Sarah Nentwich (Universität Siegen).



Verleihung der Wolfgang-Paul-Preise 2021. Von links: Michael Mormann, Jochen Boosfeld, René Rahrt, Eike Mucha, Bing Peng und Thorsten Benter.



Zum Konferenzdinner begrüßt Organisator und bekennender BVB-Fan Albert Sickmann vom ISAS Dortmund die Gäste in der VIP-Lounge des Dortmunder Fußballstadions.

Konferenzdinner

■ Wie schon bei der Tagung im Jahr 2011 hatte Albert Sickmann die VIP-Lounge des Dortmunder Fußballstadions, für dessen gelb-schwarzen Verein sein Herz schlägt, für das Konferenzdinner gebucht. Davor gab es eine Stadionführung durch Pressebereich, Kabine und den Spielertunnel hinaus an die Trainerbank und schließlich hoch auf die Südtribüne. Bei gutem Essen, Tischfußball und später noch Musik blieben so Einige bis spät in die Nacht beisammen.

Die 55. Jahrestagung der DGMS wird vom 10. bis 13. März 2024 auf dem Campus Freising-Weihenstephan der TU München stattfinden, organisiert von Bernhard Küster und Corinna Dawid. Mehr Infos: www.dgms.eu

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

Preise & Stipendien

Internationaler Forschungspreis für Christian Neusüß



Preisverleihung auf dem International Symposium on Microscale Separations and Bioanalysis 2023. Von links: Vincent T. Remcho, Präsident der Society for Microscale Separations and Bioanalysis, Christian Neusüß und Linda Pregaman von der Firma SCIEX. (Foto: E. Ogunkunle, Florida State University)

■ Christian Neusüß von der Hochschule Aalen ist mit dem renommierten Forschungspreis „SCIEX Microscale Separations Innovations Medal and Award“ ausgezeichnet worden. Er erhielt den Preis für seine langjährigen Forschungsarbeiten zur Kapillarelektrophorese-Massenspektrometrie, konkret für die Entwicklung des nanoCEasy-Interface. Zum zweiten Mal nach Detlev Belder (2020) geht der Preis damit an einen Forscher aus Deutschland. Die Auszeichnung ist mit einem Preisgeld von 5000 US-Dollar verbunden und wurde auf dem 39. International Symposium on Microscale Separations and Bioanalysis (MSB 2023) in Tallahassee, USA, überreicht.

<https://msb-conferences.org/awards>

KNAUER im Kanzleramt geehrt

Am 9. Mai wurde in Berlin im Bundeskanzleramt der VORSPRUNG-Wirtschaftspreis verliehen, eine Auszeichnung des Ostdeutschen Wirtschaftsforums OWF.



Geschäftsführung von KNAUER (Carsten Losch und Alexandra Knauer, Mitte) mit Land-der-Ideen-Geschäftsführer Philipp Mehne (links) und Staatsminister Carsten Schneider (rechts). (Foto: Deutschland – Land der Ideen/B. Brundert)

■ Schirmherr Carsten Schneider, Staatsminister und Beauftragter der Bundesregierung für Ostdeutschland, überreichte den VORSPRUNG-Preis für Berlin in Form einer Urkunde an Unternehmerin und Geschäftsführerin Alexandra Knauer und Geschäftsführer Carsten Losch. Die Auszeichnung wurde zum dritten Mal an Unternehmen in Ostdeutschland und Berlin vergeben, die als Vorbilder für die Zukunft der Wirtschaft angesehen werden.

„Wir freuen uns sehr über diese Anerkennung und fühlen uns geehrt, als Vorbild und als Mitgestalter der Transformation gesehen zu werden“, teilte KNAUER-Geschäftsführer Carsten Losch mit.

Eine unabhängige Expertenjury unter der Leitung von Matthias Platzeck, Ministerpräsident a. D. des Landes Brandenburg, wählt aus jedem ostdeutschen Bundesland ein Unternehmen als Preis-

träger aus, das hohes Innovationsstreben und gesundes Wachstum vereint und vorbildhaft für die nachhaltige Transformation der Wirtschaft steht.

Das für das Land Berlin ausgezeichnete Unternehmen KNAUER Wissenschaftliche Geräte GmbH ist einer der führenden deutschen Anbieter wissenschaftlicher Instrumente und Lösungen in der Flüssigkeitschromatografie. KNAUER ist mit seinen 60 Jahren Tradition im wissenschaftlichen Gerätebau ein hochbewegliches Unternehmen geblieben, das während der Covid-19-Pandemie im Rekordtempo ein Mischverfahren für mRNA-Impfstoffe entwickelt hat, mit dessen Hilfe die Herstellung von Milliarden Corona-Impfdosen in kurzer Zeit möglich wurde (siehe *Mitteilungsblatt* 1/2023).

Quelle: KNAUER

Ausschreibung

Mattauch-Herzog-Preis 2024

der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie

■ Die Deutsche Gesellschaft für Massenspektrometrie (DGMS) vergibt den Mattauch-Herzog-Preis, gestiftet von der Firma Thermo Fisher Scientific. Der Preis steht unter der Schirmherrschaft der DGMS und wird seit 1988 in der Regel jährlich an jüngere Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler für herausragende Leistungen in den massenspektrometrischen Wissenschaften vergeben. Er stellt eine der renommiertesten und höchstdotierten Auszeichnungen in den analytischen Wissenschaften dar.

Der Mattauch-Herzog-Preis ist nach Josef Mattauch und Richard Herzog benannt, die 1934 ein neuartiges Massenspektrometer vorstellten, dessen Ionenoptik unter dem Namen Mattauch-Herzog-System weltweit bekannt wurde. Der Preis würdigt wichtige Arbeiten und bedeutende Fortschritte insbesondere im Bereich instrumenteller und theoretischer Entwicklungen sowie neuer Anwendungsmöglichkeiten und Methoden in der organischen/biochemischen Analytik und der Element- und Isotopenanalytik.

Die Preissumme beträgt 12 500 Euro. Sie kann in Ausnahmefällen auf zwei Personen aufgeteilt werden. Über die Preisvergabe entscheidet eine unabhängige Jury. Die Preisverleihung erfolgt auf der 55. Jahrestagung der DGMS, die vom 10. bis 13. März 2024 in Freising stattfinden wird. Bewerben können sich Personen, die ihre Arbeiten in einem europäischen Land durchgeführt haben. Die Sprache für die Bewerbung und für die eingereichten Arbeiten ist Deutsch oder Englisch.

Die Preisvergabe ist nicht an eine formale wissenschaftliche Qualifikation gebunden, sondern dient der Auszeichnung jüngerer Forscherinnen und Forscher. Diese sollten daher im Bewerbungsjahr das vierzigste Lebensjahr in der Regel nicht überschritten haben. Die DGMS und die Stifterfirma ermutigen qualifizierte Wissenschaftlerinnen nachdrücklich, sich zu bewerben. Weitere Einzelheiten zur Bewerbung und die

Impressum

Herausgeber:
Vorstand der Fachgruppe Analytische Chemie in der Gesellschaft Deutscher Chemiker
PO-Box 900440
60444 Frankfurt/Main

c.kniep@gdch.de
Telefon: 069 7917– 499
www.gdch.de/analytischechemie

Redaktionsschluss Heft 04/2023: 04.10.2023

Beiträge bitte an die Redaktion

Redaktion:
Brigitte Osterath
Am Kalkofen 2, 53347 Alfter
mitteilungsblatt@go.gdch.de
Grafik: Jürgen Bugler

Druck: Seltersdruck & Verlag Lehn GmbH & Co. KG

Bezugspreis im Mitgliedsbeitrag enthalten
Erscheinungsweise: 4 x jährlich
ISSN 0939–0065

Statuten des Mattauch-Herzog-Preises finden Sie auf der Homepage der DGMS: www.dgms.eu.

Ihre Bewerbung richten Sie bitte in elektronischer Form bis zum **1. November 2023** an die Vorsitzende der Jury:

Prof. Dr. Andrea Sinz
Department of Pharmaceutical Chemistry & Bioanalytics
Center for Structural Mass Spectrometry
Institute of Pharmacy
Martin-Luther University Halle-Wittenberg
Kurt-Mothes-Str. 3, Entrance C
D-06120 Halle/Saale
andrea.sinz@pharmazie.uni-halle.de

Ausschreibung

Massenspektrometrie in den Biowissenschaften 2024

der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie (DGMS)

Die DGMS schreibt einen Wissenschaftspreis für eine herausragende wissenschaftliche Leistung in der Massenspektrometrie im Bereich der Biowissenschaften aus. Der Preis wird durch die DGMS vergeben und zeichnet wissenschaftliche Arbeiten zu Methodenentwicklungen und Anwendungen der Massenspektrometrie in den Biowissenschaften aus.

Der Preis ist von der DGMS mit 5000 Euro dotiert und wird zusammen mit einer Urkunde bei der Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie überreicht. In Ausnahmefällen kann der Preis zu gleichen Teilen an zwei Personen vergeben werden. Die Vergabe des Preises erfolgt ausgehend von Nominierungsvorschlägen (Selbstonominierungen werden nicht berücksichtigt). Die Auswahl der Preisträger wird durch eine vom Vorstand der DGMS bestätigte Jury getroffen.

Die nächste Preisverleihung erfolgt auf der 55. Jahrestagung der DGMS, die vom 10. bis 13. März 2024 in Freising stattfinden wird.

Nominierungen zur aktuellen Ausschreibung mit einer kurzen Begründung der Preiswürdigkeit der wissenschaftlichen Leistung können bis zum **1. November 2023** (Poststempel) bei der Vorsitzenden der Jury ‚Massen-

spektrometrie in den Biowissenschaften‘ eingereicht werden:

Prof. Dr. Kathrin Breuker
Institut für Organische Chemie
Universität Innsbruck
Centrum für Chemie und Biomedizin (CCB)
Innrain 80/82
A-6020 Innsbruck
E-Mail: kathrin.breuker@uibk.ac.at

Ausschreibung

Wolfgang-Paul-Studienpreise

Wolfgang-Paul-Studienpreise 2024 der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie, gestiftet durch Bruker Daltonics

Die Deutsche Gesellschaft für Massenspektrometrie (DGMS) vergibt jährlich den Wolfgang-Paul-Studienpreis für hinsichtlich der Qualität und Originalität herausragende Master- und Doktorarbeiten auf dem Gebiet der Massenspektrometrie.

Dieser Preis wurde 1997 durch die DGMS etabliert und das Preisgeld wird seither vollständig von Bruker Daltonics gestiftet. Der Preis ist insgesamt mit 7500 Euro dotiert und kann geteilt werden. Der Preis erinnert an Professor Wolfgang Paul, der für seine grundlegenden Arbeiten zur Ionenfalle und zu ionenoptischen Geräten 1989 den Nobelpreis für Physik erhielt. Paul war lang-

jähriger Präsident der Alexander-von-Humboldt-Stiftung. Der Preis wird jährlich anlässlich der Jahrestagung der DGMS durch eine Jury vergeben. Vorsitzender der Jury ist derzeit Michael Mormann, Universität Münster.

Die Preisverleihung an die Preisträgerinnen und Preisträger erfolgt anlässlich der 55. Jahrestagung der DGMS, die vom 10. bis 13. März 2024 in Freising stattfinden wird.

Bewerber können sich für 2024 alle Absolventen einer deutschen Universität oder Fachhochschule, die bei Bewerbung eine entsprechende Arbeit abgeschlossen haben und bei denen das Prüfungsverfahren zwischen dem 01.11.2022 und dem 31.10.2023 beendet wurde. Deutsche Absolventen ausländischer Universitäten können sich ebenfalls bewerben.


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


Ihre Bewerbung richten Sie bis spätestens zum **1. November 2023** an den Vorsitzenden der Jury:

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

LIVES IN CHEMISTRYLEBENSWERKE IN DER CHEMIE

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



FACHGRUPPE
GESCHICHTE
DER CHEMIEHIER
BESTELLEN:
1-i-c.org/order

Personalia

Zum Tode von Georg-Alexander Hoyer

(1934 – 2022)

Am 27. August 2022 verstarb Professor Georg-Alexander Hoyer. Er war in der Vergangenheit Vorsitzender und langjähriges Vorstandsmitglied der Fachgruppe Analytische Chemie, Mitglied des GDCh-Vorstands sowie des Kuratoriums der *Nachrichten aus der Chemie* und hat mit seinen vielfältigen Aktivitäten überall nachhaltige Spuren hinterlassen. Als hochrangigen Industrievertreter zeichnete ihn eine besondere Kombination aus Verbindlichkeit und effektivem Arbeiten aus.

Georg-Alexander Hoyer wurde 1934 in Berlin geboren und besuchte die Volksschule in Berlin-Neukölln. Wegen der Bombardierungsgefahr im Berlin der späten Kriegsjahre hielt er sich 1944/45 zeitweise bei Verwandten seines Vaters in Radebeul bei Dresden auf. Es entstand eine Bindung, die die langen Jahre der deutschen Teilung überstand.

1955 legte Georg-Alexander Hoyer das Abitur in Berlin-Neukölln ab und nahm das Studium der Chemie an der Freien Universität Berlin auf. Die Diplomprüfung schloss er 1961 mit seiner Arbeit „Untersuchungen über Thiazolidin-4-carbonsäuren“ ab und promovierte 1964 an der gleichen Hochschule mit „Untersuchungen über den Einfluss chemischer Strukturmerkmale auf physikalische Eigenschaften in der Kohlenwasserstoffreihe“. Unmittelbar im Anschluss trat er in das Unternehmen Schering in die Abteilung Pflanzenschutzforschung ein. 1970 wechselte er in die Spektrometrie zur Strukturaufklärung und leitete später die Abteilung Analytik, Theoretische Chemie und Computeranwendungen. In seinen Arbeiten verband er die Strukturanalyse und die Spurenanalyse mit vielen anderen Teilgebieten der Chemie.

Bis zu seiner Pensionierung Ende des Jahres 1999 verantwortete er den konsequenten Ausbau des analytischen Know-hows bei Schering, indem er diverse physikochemische Methoden



Georg-Alexander Hoyer

etablierte. Schon früh führte er auch die Methoden des Computermodelling ein. Neben seinen wissenschaftlichen Aktivitäten bekleidete er bei Schering diverse Leitungsfunktionen und wurde Mitinhaber zweier Patente: zu Previcur (Pflanzenschutz) und zu Magnevist (Pharma). Seine wissenschaftlichen Aktivitäten bei Schering sind in etwa hundert Publikationen niedergelegt. Seit 1994 war Georg-Alexander Hoyer auch im Aufsichtsrat von Schering tätig. Nach seiner Pensionierung war er weiterhin als Berater für analytische Chemie gefragt.

1994 wurde Georg-Alexander Hoyer wegen seiner hervorragenden wissenschaftlichen Leistungen in der analytischen Chemie die akademische Würde eines Honorarprofessors an der Humboldt-Universität zu Berlin verliehen.

Als Industriechemiker hatte er früh erkannt, dass die Analytik zunehmend die industrielle Wertschöpfungskette dominiert. Die Gesellschaft forderte zunehmend, dass sich allgemeine und industrielle Entscheidungen auf analytisch abgesicherte Daten stützen statt auf empirische Erfahrungen und traditionelle Vorgehensweisen. Gute Analytik schafft Vertrauen und ist damit auch Voraussetzung für Produktion und Vermarktung. Dieser zunehmende

Anspruch der Gesellschaft erfordert es, die analytische Ausbildung und Forschung zu stärken. Der Rahmen dafür wurde im „GDCh-Memorandum Analytik“ dargelegt, federführend unter Georg-Alexander Hoyer entwickelt und im Jahr 2002 vom GDCh-Vorstand verabschiedet.

Wegen seiner Verdienste um die Entwicklung des Fachgebiets analytische Chemie – als Wissenschaftler aus der Industrie, Honorarprofessor an der Humboldt-Universität zu Berlin und als langjähriges Mitglied des Aufsichtsrats von Schering – wurde Georg-Alexander Hoyer 2003 die Clemens-Winkler-Medaille der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie verliehen.

Besondere Verdienste leistete er bei der Zusammenführung der Analytikerinnen und Analytiker aus beiden Teilen Deutschlands sowie bei der Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses. Mit großem Engagement bemühte er sich um die Integration des analytischen Zentrums der ehemaligen Akademie der Wissenschaften der DDR in den Standort Berlin-Adlershof der Bundesanstalt für Materialforschung und -Prüfung (BAM). Dafür verlieh ihm 2005 der Bundespräsident das Verdienstkreuz am Bande des Verdienstordens der Bundesrepublik Deutschland.

Mit seinem Tod verliert die analytische Community einen hervorragenden Wissenschaftler, geschätzten Kollegen und lieben Menschen.

Reiner Salzer

Geburtstage

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

Zum 60. Geburtstag

Jürgen H. Gross, Lorsch
Wolfgang Buscher, Steinfurt
Jürgen Lerche, Dresden
Wilhelm Müller, Sutz, Schweiz
Frank Klages, Langenhagen
Joachim Kurz, Lampertheim
Detlef Günther, Zürich, Schweiz
Hans-Heinrich Bigge, Gebsattel
Ralf Troß, Offenburg
Frank Allmüller, Moers

Zum 65. Geburtstag

Dieter Fischer, Dresden
Jochen Schmidt, Hannover
Jürgen Rottmann, Wuppertal
Jürgen Schram, Krefeld
Manfred Weißer, Stutensee
Susanne Dörks, Köln
Michael Steiger, Hamburg

Mathias Ulbricht, Berlin
Wolfgang Treder, Münster
Katharina Seitz, Frankfurt am Main
Rainer Böhling, Bonn
Jolanta Oleksy-Frenzel, Berlin

Zum 70. Geburtstag

Joachim Nölte, Stein, Schweiz
Jürgen Mattusch, Schkeuditz
Frank Carl Martin Kuebart, Köln
Wolf-Dieter Wagner, Germering
Helmut Roidl, Bad Bellingen

Zum 75. Geburtstag

Eberhardt Herdtweck, Kolbermoor
Joachim Schwanbeck, Hamburg
Rudolf Seelemann, Köln
Michael Linscheid, Berlin
Wolfgang Schoknecht, Fellbach
Michael Haschke, Eggersdorf

Zum 80. Geburtstag

Frank Schley, Berlin
Hans-Peter Sieper, Gelnhausen
Wolfgang Lindner, Klosterneuburg, Österreich
Hans-Joachim Korb, Markranstädt
Heinrich Schönemann, Neukirchen-Vluyn
Heinz Wilhelm Siesler, Essen

Zum 85. Geburtstag

Peter Hoffmann, Darmstadt

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.

GDCh-Fortbildungen

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

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

6. – 27. September 2023 (immer mittwochs), online
NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung, Fortgeschrittenenkurs (Kurs 506/23)
Leitung: Prof. Dr. Reinhard Meusinger

14. September 2023, Frankfurt am Main oder online
Die Qualitätssysteme GMP (Gute Herstellungspraxis) und GLP (Gute Laborpraxis) im Überblick – Ein Leitfaden der Guten Praxis, Einzelnen oder als Modul im Fachprogramm „Geprüfter Qualitätsexperte GxP GDCh (m/w/d)“ buchbar (Kurs 511/23)
Leitung: Dr.-Ing. Barbara Pohl

21. – 22. September 2023, Frankfurt am Main
Moderne Rietveld-Analyse in der praktischen Übung (Kurs 389/23)
Leitung: Prof. Dr. Robert E. Dinnebier

26. – 28. September 2023, Frankfurt am Main
GLP-Intensivtraining mit QS-Übungsaufgaben: Methodenvalidierung und Gerätequalifizierung unter GLP (Gute Laborpraxis) – Mit Praxisteil, Einzelnen oder als Modul im Fachprogramm „Geprüfter Qualitätsexperte GxP GDCh (m/w/d)“ buchbar (Kurs 536/23)
Leitung: Prof. Dr. Jürgen Pomp

26. – 27. September 2023, online
Störungs- und Notfallmanagement: Business Continuity Management (BCM) vor dem Hintergrund von Altlasten und Schadenssanierung, Kurs einzeln oder als Modul im Fachprogramm „Geprüfter Notfallmanager GDCh (m/w/d)“ buchbar (Kurs 912/23)
Leitung: Dr. Bernd Herber

4. – 6. Oktober 2023, Mainz
Grundlagen der praktischen NMR-Spektroskopie für technische Beschäftigte (Kurs 334/23)
Leitung: Dr. Johannes C. Liermann

17. – 19. Oktober 2023, Mainz
Fortgeschrittene praktische NMR-Spektroskopie für technische Beschäftigte (Kurs 335/23)
Leitung: Dr. Johannes C. Liermann

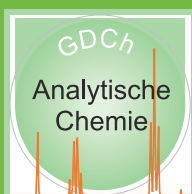
24. – 25. Oktober 2023, Frankfurt am Main oder online
Schwingungsspektroskopie für die chemische Qualitäts- und Prozesskontrolle, Theorie, Instrumentation und Applikationen für die Raman-, Mittel-Infrarot-, Nah-Infrarot- und Fern-Infrarot-Spektroskopie (Kurs 503/23)
Leitung: Prof. Dr. Heinz Wilhelm Siesler



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Fachgruppe Analytische Chemie

Die Stimme der analytischen Chemie



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

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

AUSTAUSCH & INFORMATION

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

PREISE & EHRUNGEN

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

STIPENDIENPROGRAMM & MEHR

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

GDCh-Geschäftsstelle

Dr. Carina S. Kniep

Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V.

Varrentrappstraße 40-42
60486 Frankfurt am Main

Telefon: +49 (0)69 7917-499
E-Mail: c.kniep@gdch.de



TAGUNGEN & VERANSTALTUNGEN

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

KOOPERATIONEN

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

MITGLIEDSCHAFT

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

VORSTAND DER FACHGRUPPE

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

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

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

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

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

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

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

Dr. Maria Viehoff, Merck KGaA, Darmstadt

www.gdch.de/analytischechemie