

SEPTEMBER 2023 • 67. JAHRGANG • ANALYTICALSCIENCE.WILEY.COM

Wiley  
Analytical  
Science  
Award  
2024

  
**Jetzt**  
zählt Ihre  
Stimme!

WILEY

Schwerpunkt

Digitale Transformation  
des Labors



was-award.de

WILEY



## Themenschwerpunkt **Nachhaltigkeit im Labor**

Waschaktive, biobasierte Lipopeptide, Nachhaltigkeit in der chemischen Industrie, Elastokalorik – Cool in die Zukunft und Probenlagerung sowie Logistik unter dem Aspekt der Nachhaltigkeit – diese und weitere Themen erwarten Sie in der **GIT Labor-Fachzeitschrift 10/2023**.

Anzeigenschluss: 25.09.2023

Erscheinungstermin: 18.10.2023

Newsletter: 18.10.2023

Weitere Veröffentlichungen finden Sie auch im Themenschwerpunkt auf Wiley Analytical Science:

<https://bit.ly/WAS-Themenschwerpunkt-Nachhaltigkeit>





# Das digitale Labor wird in wenigen Jahren Realität sein

**D**iese Aussage ist seit einer nicht geringen Anzahl von Jahren immer noch wahr. Aber woran liegt es, dass wir noch nicht im digitalen Labor der Zukunft angekommen sind?

Meiner Meinung nach gibt es zwei Gründe; der erste ist, dass sich das Ziel kontinuierlich „nach vorne“ bewegt, also der Anspruch an das digitale Labor einer Evolution unterliegt. Schrittweiser Fortschritt ist aus der Innenperspektive nur schwer wahrzunehmen. Der zweite Grund ist, dass sowohl die Hersteller als auch die Anwender noch darauf warten, welcher der vielen verschiedenen Standards sich durchsetzen wird. Hier ist die Situation aktuell noch so unüberschaubar wie bei den Formaten, die die DVD als Medium für Filme ablösen sollte. Die Situation in den Laboren ist glücklicherweise so, dass eine binäre Entscheidung nicht vonnöten ist. Entscheidend ist, in welcher Umgebung die Digitalisierung stattfinden soll. Wenn eine Analytik-Station in einer OPC-UA-Umgebung innerhalb eines Prozessleitsystems eingebunden werden soll, so ist es nur logisch, auf LADS oder OPC-UA zu setzen. Wenn das Analytik-Labor unabhängig existiert, so kann SiLA die bessere Alternative sein. Entscheidend ist, dass der Aufwand für den Umzug auf digitale Prozesse beherrschbar ist.

In dieser Ausgabe finden Sie zwei Artikel von Autorenteam der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM). Der

erste Beitrag von Matthias Maiwald et al. beschreibt am Beispiel einer (noch) virtuellen Wasserstoff-Tankstelle, wie eine digitale Qualitätsinfrastruktur geschaffen werden kann. Der zweite Artikel der BAM von Rukeia El-Athman und Bastian Rühle et al. gibt einen Einblick über die Einführung von openBIS als Plattform für das Datenmanagement in einem Nanomaterial-Labor.

Karl Kleine und Cornelia Hunke berichten, wie elektronische Signaturen im regulierten Umfeld vom GxP eingeführt werden können, um die Compliance und Nachverfolgbarkeit zu erhöhen. Hier sind die Anforderungen durch die Gesetzgebung klar definiert. Jetzt gilt es, herauszufinden bei welchen Prozessen gesteigerte Effizienzen zu erwarten sind, um die eSignatur gewinnbringend einzusetzen.

Im vorletzte Artikel unseres Schwerpunktes beschreibt Albrecht Liebscher et al. die Schritte, die nötig sind, um von der Erfassung über die Integration der Daten letztendlich zur Innovation zu gelangen.

Abschließend stellt Burkhard Schäfer vor, wie Microsoft 365 erüchtigt werden kann, Labordaten zugänglich zu machen. Denn dann können die Daten mittels Tools, die in der gewohnten Software-Umgebung existieren, bearbeitet werden.

Die Hürden auf dem Weg zum digitalen Labor der Zukunft werden meines Erachtens nach kleiner. Mehr und mehr Hersteller beginnen, Interesse daran zu zeigen, ihre Geräte mit den Standards kompatibel zu machen. Das kann der

Anfang der fundamental wichtigen hersteller-unabhängigen Interoperabilität im Labor sein. Letzten Endes haben sowohl die Wirtschaft als auch die Wissenschaft sehr viel zu gewinnen, wenn sich die Datenverarbeitung nicht auf das Abspeichern der Daten beschränkt,

sondern aus den Daten neue Erkenntnisse gewonnen werden.

Ich wünsche Ihnen eine vergnügliche und hoffentlich erkenntnisreiche Lektüre dieser Ausgabe.

Dr. Martin Graf-Utzmann



**Industrie 4.0  
Lösungen  
für Ihr Daten-  
management**

## Datenbanken für alle Aufgaben

- ✓ Laborinformations- und Managementsystem
- ✓ elektronisches Laborjournal
- ✓ Artikel- u. Chemikalienverwaltung
- ✓ Probenahmeplanung
- ✓ Probelagerung
- ✓ Schnittstellen zu Analysegeräten
- ✓ Finanz- u. Auftragsverwaltungen
- ✓ Logistik u. Tourenplanung
- ✓ Scanner, Etiketten, Augmented Reality
- ✓ u.v.m.



Rampenweg 1b | 29352 Adelheidsdorf  
Tel. 05085 - 9894-0 | [www.hm-software.de](http://www.hm-software.de)



Magazin

**VORWORT**  
Das digitale Labor wird in wenigen Jahren Realität sein 3

**INTERVIEW**  
FutureLab.NRW: Digitalisierung, Automatisierung, Miniaturisierung 6

Künstliche 3-D-Organoid-Systeme ermöglichen ein naturgetreueres Studium des Lebens 9

**STANDPUNKT**  
Komplexität in der Materialwissenschaft managen 12

**VERANSTALTUNGEN**  
Symposium: Fachübergreifende moderne Analytik 14

Falling Walls Science Summit 2023 14

7. AnalytikTag des IUTA 15

LIMS-Forum 15

**LESENSWERT**  
Digitale Chemieindustrie 16

**LIFE SCIENCE IM VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE**  
Auszeichnung für die Förderung der Bionik 17

20 MINUTEN 18

Marktplatz

**PRODUKTPROFIL**  
YMC Europe: IEX-Säulen von YMC – auch verfügbar im (semi)präparativen Maßstab 51

**PRODUKTE** 52

**WILEY ANALYTICAL SCIENCE AWARD** 54

**BUYERS GUIDE** 58

VORSCHAU Ausgabe 10/2023

**Schwerpunkt: Nachhaltigkeit im Labor**  
Elastokalorik – Cool in die Zukunft  
Effiziente und nachhaltige Klimatisierung von Morgen  
*F. Louia und P. Motzki*

**Anzeigenschluss: 25.09.2023**  
**Erscheinungstermin: 18.10.2023**



**FutureLab.NRW: Digitalisierung, Automatisierung, Miniaturisierung**

Das Institut für Umwelt und Energie, Technik und Analytik (IUTA, Duisburg) hat im Rahmen des Projektes FutureLab.NRW die Infrastruktur für ein digitalisiertes Modelllabor für die miniaturisierte instrumentelle und wirkungsbezogene Analytik der Zukunft realisiert. Erfahren Sie mehr darüber im Interview mit Thorsten Teutenberg und Ulrike Gerecke.



**Elektronische Signatur – Fluch oder Segen?**

Die Autoren Karl Kleine und Cornelia Hunke beleuchten die Bedeutung elektronischer Signaturen als Element der Digitalisierung, auch im regulierten Umfeld. Sie beschreiben den Rahmen für derartige Unterschriften und geben Tipps für die Umsetzung anhand eines schrittweisen Vorgehens.

Fachartikel

**SCHWERPUNKT: Digitale Transformation des Labors**

**Auf dem Weg zu einer digitalen Qualitätsinfrastruktur** 20  
Eine Labor-Testplattform für die Integration von Sensoren und Messgeräten  
*M. Maiwald et al.*

**Datenmanagement im Nanomaterial-Labor** 24  
Einsatz von ELN-Software zur digitalen Transformation des Laboralltags  
*H. Bresch et al.*

**Elektronische Signatur – Fluch oder Segen?** 27  
Revolution im ISO-/GxP-Umfeld  
*K. Kleine und C. Hunke*

**Raten oder Daten** 30  
Von Strg + C bis KI: Das bieten digital verfügbare Daten im Labor  
*A. Brendel, A. Liebscher, P. Kraus*

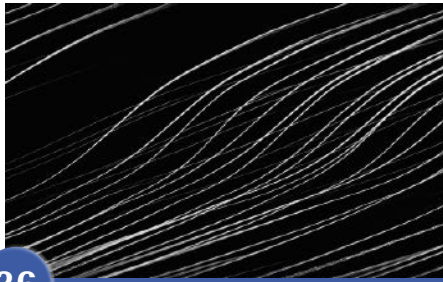
**AnIML und Microsoft 365** 33  
Labordaten einfach und schnell verwalten und nutzen  
*Burkhard Schäfer*

**Partikelmesstechnik**

**Nanopartikel auf der Überholspur** 36  
Optofluidische Kraft Induktion für Echtzeit-Partikelcharakterisierung  
*Marko Šimić et al.*

Willkommen im Wissenszeitalter. Wiley pflegt seine 200-jährige Tradition durch Partnerschaften mit Universitäten, Unternehmen, Forschungseinrichtungen, Gesellschaften und Einzelpersonen, um digitale Inhalte, Lernmittel, Prüfungs- und Zertifizierungsmittel zu entwickeln. Wir werden weiterhin Anteil nehmen an den Herausforderungen der Zukunft – und Ihnen die Hilfestellungen liefern, die Sie bei Ihren Aufgaben weiterbringen. Die GIT-Laborfachzeitschrift ist ein wichtiger Teil davon.

**WILEY**



© Marko Šimić, Brave Analytics

36

Partikelmesstechnik

### Nanopartikel auf der Überholspur

Marko Šimić *et al.* stellen in ihrem Fachartikel OF2i als ist eine innovative Technologie zur Echtzeit-Vermessung von Nanopartikeln in industriellen Herstellungsprozessen vor. Mit optischem Kraftübertrag und hoher zeitlicher Auflösung können so dynamisch kleinste Änderungen im Prozess schnell detektiert werden.



© BlazingDesigns - stock.adobe.com

48

Umweltanalytik

### Unbekannte Metabolite in Pflanzen identifizieren

Bei der Verwendung geklärter Abwässer für die Bewässerung in der Landwirtschaft, können Pflanzen darin in Spuren enthaltene Arzneimittel aufnehmen und metabolisieren. Um diese zu identifizieren, wurde ein „reverse engineering“ workflow mit Ionenmobilitäts-massenspektrometrie entwickelt, welchen Franz Mlynek *et al.* in ihrem Fachartikel vorstellen.

## Biotechnologie

**Struktur-Funktionsstudie einer Indol-Monooxygenase** 39  
Enzymoptimierung erlaubt (enantio-)selektive Biokatalyse  
*D. Tischler und N. Sträter*

## Lebensmittelanalytik

**Epigenetischer Fingerabdruck als Herkunftsnachweis von Fleisch** 42  
Neue Ansätze für mehr Lebensmittelsicherheit und Tierwohl  
*S. Tönges et al.*

## Wasseranalytik

**Non-Target Screening für die Wasseranalytik** 46  
Auf dem Weg zur internationalen Normung  
*M. Petri*

## Umweltanalytik

**Unbekannte Metabolite in Pflanzen identifizieren** 48  
Reverse Engineering Workflow für die Ionenmobilitätsmassenspektrometrie  
*F. Mlynek et al.*

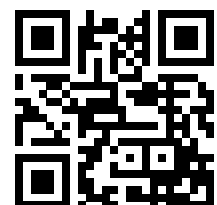
**Nutzen Sie unser kostenfreies ePaper!**

<https://bit.ly/Printausgabe-GIT>



**Gute Produkte verdienen eine Auszeichnung**  
– den Wiley Analytical Science Award.

**Kontakt:**  
**Isabel Brenneisen**  
ibrenneise@wiley.com  
+49 6201 606 716



was-award.de



# FutureLab.NRW: Digitalisierung, Automatisierung, Miniaturisierung

Die nordrhein-westfälische Landesregierung hat im Frühjahr 2016 eine Initiative zur Förderung des Forschungs- und Innovationspotentials ins Leben gerufen. Eines dieser Projekte ist das FutureLab.NRW, in dessen Rahmen das Institut für Umwelt und Energie, Technik und Analytik (IUTA, Duisburg) die Infrastruktur für ein digitalisiertes Modelllabor für die miniaturisierte instrumentelle und wirkungsbezogene Analytik der Zukunft realisiert. Erfahren Sie mehr darüber im Interview mit Dr. Thorsten Teutenberg, Abteilungsleiter Forschungsanalytik & Miniaturisierung am IUTA und Ulrike Gerecke, Business Development, SmartLab Solutions.

## Was war die Motivation des FutureLab.NRW? Was ist der größte Treiber für das Projekt gewesen?

**T. Teutenberg:** Als private Forschungseinrichtung stehen wir mit unseren Ideen genauso im Wettbewerb wie auch die Unternehmen mit ihren Produkten. Das IUTA als anwendungsorientierte und praxisnah forschende Einrichtung hat seit der Gründung immer Wert darauf gelegt, Methoden, Verfahren und Dienstleistungen für die Industrie und mit der Industrie – insbesondere mit kleinen und mittleren Unternehmen – zu entwickeln. Das FutureLab.NRW sollte daher als Modelllabor aufgebaut werden, um

neue Wege zu beschreiten und insbesondere die Schwerpunkte der Digitalisierung und flexiblen Automation mit der fortschrittlichen instrumentellen und wirkungsbezogenen Analytik zu verknüpfen.

## Was ist der aktuelle Stand der Digitalisierung in Laboren, beispielsweise auch verglichen mit der Automotive-Produktion?

**U. Gerecke:** Zunächst einmal ist zu konstatieren, dass die Digitalisierung in den Laboren sehr unterschiedlich ist. In vielen Laboren ist es immer noch üblich, die Dokumentation rein papierbasiert und manuell durchzuführen. Dies liegt unter anderem daran, dass die einzelnen Prozesse sehr heterogen sind und nicht, wie zum Beispiel in der Automobilproduktion, ein spezifisches Produkt entwickelt wird. In einigen Laboren hängt die Digitalisierung immer noch an einer zentralen Person, die beispielsweise ein LIMS (Labor-Informationen-Management-System) über viele Jahre oder sogar Jahrzehnte Inhouse aufgebaut und weiterentwickelt hat. Die Umstellung auf digitale Prozesse erfolgt darüber hinaus nicht „über Nacht“, sondern es muss gewährleistet sein, dass das neue System alle Anforderungen erfüllt, die durch Normen und Standardisierung vorgegeben werden. Das bedeutet, dass für die initiale Phase der Digitalisierung deutlich mehr Personalressourcen benötigt werden, als in der Regel verfügbar sind, denn die Digitalisierung darf kein Selbstzweck sein, sondern muss die Mitarbeitenden im Idealfall sofort und spürbar entlasten.

## Wünschenswert wäre für viele Labore eine Plug'n'Play-Lösung statt der derzeitigen Insel-Lösungen vieler Gerätehersteller. Wie weit ist man davon entfernt? Was fehlt für die barrierefreie Nutzung der Systeme?

**T. Teutenberg:** Leider ist noch viel zu häufig zu sehen, dass Geräte- und auch Software-Hersteller davon überzeugt sind, Kundenbindung zu erzeugen, indem ein eigenes „Ökosystem“ geschaffen wird, das nicht über offene Schnittstellen verfügt. Es ist nachvollziehbar, dass die Branche verunsichert ist, weil sich Geschäftsmodelle verändern. Einige Hersteller fürchten daher, austauschbar zu sein oder zu werden. Genau diese Mentalität führt aber dazu, dass wir noch sehr weit von einer echten Plug'n'Play-Lösung entfernt sind. Für eine nahtlose Datenkommunikation muss immer noch eine Zusatzsoftware geschrieben werden, eine sogenannte Middleware. Dieser Prozess ist aufwändig und teuer und wird für jedes Labor prinzipiell individuell durchgeführt. Um eine echte Barrierefreiheit zu erzeugen, wäre die Festlegung auf dedizierte Standards ein Muss. Initiativen wie SiLA (Standardization in Laboratory Automation) oder OPC UA LADS (Open Platform Communication Unified Architecture Laboratory Analytical Device Standard) schaffen hierfür die Voraussetzungen.

## Wie ist Ihre Lösung aufgebaut? Welche Disziplinen sind von Relevanz?

**T. Teutenberg:** Leider führt kein Weg daran vorbei, sich mit Fragestellungen aus dem Bereich IT und Software auseinanderzusetzen. Allerdings

war uns nicht daran gelegen, das Labor als reine „IT-Fabrik“ anzusehen. Das Ziel ist, eine Software-Plattform aufzubauen, um Sensoren, Analysensysteme und weitere Software herstellerunabhängig und -übergreifend über offene Schnittstellen anzubinden. Wir haben uns daher für ein sogenanntes Labor-Ausführungssystem (LES, Laboratory Execution System) mit LIMS-Funktionalitäten entschieden. Dieses bildet die Grundlage, um auch zukünftig Geräte einzubinden, die zum aktuellen Zeitpunkt erst in der Entwicklungsphase sind.

**U. Gerecke:** Sowohl im Kontext der Forschungsanalytik als auch der Tagesroutine ist die Einbindung der Geräte in das LES von zentraler Bedeutung. Durch diese Einbindung lassen sich die Geräte direkt ansteuern und orchestrieren, die Messergebnisse unmittelbar auslesen und digital erfassen. Es entfällt das manuelle Übertragen auf Papier. So werden nicht nur die Mitarbeitenden entlastet und Übertragungsfehler vermieden, sondern die Daten der automatisierten Auswertung zugänglich gemacht. Berichte können so automatisch erzeugt und im elektronischen Laborjournal und/oder einer ERP-Software abgespeichert werden. Schließlich hilft es keiner künstlichen Intelligenz, Daten im Aktenordner zu haben. Um den Datenschatz zu heben, und auch wirtschaftlich nutzen zu können, braucht es einen großen Datasee.

**Sie haben für das Modelllabor ein neuartiges Tisch-Design gewählt. Welche Vorteile sehen Sie hierin?**

**U. Gerecke:** Ein Teil des FutureLab.NRW ist mit hexagonalen Labormöbeln, dem iHEX System, ausgestattet, in denen Geräte funktionsintegriert sind. Dies hat zwei entscheidende Vorteile. Zum einen ist ein Labor keine starre Fabrik, son-

dern die Prozesse werden stetig und dynamisch angepasst. Mit diesem modularen Konzept können neue Workflows ohne einen signifikanten Eingriff in die bestehende Laborinfrastruktur schnell umgesetzt werden. Dies kann der Fall sein, wenn an einer verfahrenstechnischen Anlage ein Arbeitsplatz eingerichtet werden muss, um einfache Analysen durchzuführen, zum Beispiel um den pH-Wert einer wässrigen Lösung zu messen oder Chemikalien abzuwiegen. Mit dem iHEX-System können solche Arbeitsplätze für ein bestimmtes und befristetes Projekt in-



● **Thorsten Teutenberg** hat zum Thema „Hochtemperatur-HPLC“ am Lehrstuhl für Analytische Chemie an der Ruhr-Universität Bochum promoviert. In 2004 wechselte er an das IUTA als wissenschaftlicher Mitarbeiter. Seit 2012 leitet er die Abteilung Forschungsanalytik & Miniaturisierung. Schwerpunkte seiner wissenschaftlichen Arbeiten sind die Entwicklung neuartiger Detektions- und Kopplungssysteme auf Basis der Flüssigkeitschromatografie, Massenspektrometrie und Schwingungsspektroskopie. Aktuell ist er am Aufbau und der Weiterentwicklung eines voll digitalisierten Labors der Zukunft (FutureLab.NRW) beteiligt.

## Mit Sicherheit in besten Händen

### Die neuen Labor-Standgeräte

Liebherr hat speziell für den medizinischen und wissenschaftlichen Sektor ein umfassendes Sortiment an professionellen Kühllösungen entwickelt. Jüngstes Ergebnis: eine neue Standgeräte-Serie. Die Kühl- und Gefriergeräte maximieren Ihre Sicherheit bei der Lagerung temperaturempfindlicher Substanzen. Und in Kombination mit dem digitalen SmartMonitoring minimieren sie Ihren Aufwand bei den Kontroll- und Dokumentationspflichten. Details unter: [home.liebherr.com/ScientificHealthcare](http://home.liebherr.com/ScientificHealthcare)

# LIEBHERR

Kühlen und Gefrieren:  
Scientific and Healthcare



dividuell eingerichtet werden, sodass unnötige Laufwege vermieden werden. Durch die Integration von Geräten in Labortische können Laborflächen effektiver genutzt werden. Es ist vielen Nutzern immer noch nicht bewusst, dass die Kosten für ein Labor circa um das Achtfache über den Kosten einer vergleichbaren Bürofläche liegen. Gerade in Zeiten der Energie- und Klimakrise ist das ein aktiver Beitrag, technische Ressourcen effektiver zu nutzen. Ökonomie und Ökologie gehen hier „Hand-in-Hand“.

### Wo sehen Sie die Grenzen der Labor-Automatisierung? Für welche Prozesse ist sie besonders geeignet, um digitalisiert zu werden?

**T. Teutenberg:** Ich persönlich sehe keine technischen Grenzen in Bezug zur Labor-Automatisierung. Meiner Meinung nach wird sich jeder Laborprozess automatisieren lassen. Die Frage ist nur, zu welchem Zeitpunkt dies wirtschaftlich ist. Wir haben uns diesem Thema aus der Forschungsperspektive genähert und versuchen, die im Rahmen von FutureLab.NRW entwickelten Konzepte nun schrittweise in die Unternehmen zu überführen. Auf der einen Seite gibt es sogenannte Hochdurchsatz-Anwendungen. Hier werden Tausende von Proben an einem einzigen Tag auf einen oder mehrere Parameter analysiert. In einem solchen Fall lohnt es sich möglicherweise, in eine komplexe Automations-Anlage zu investieren, die nicht flexibel genutzt werden kann. Ganz anders sieht es im „klassischen“ Umwelt-, Lebensmittel- oder Prüf-Labor aus. Der Probendurchsatz in Bezug auf eine bestimmte Methode ist zumeist gering, manchmal werden nur wenige Proben in einer Woche analysiert, dafür existiert aber eine Vielzahl an Methoden, die immer wieder einen angepassten Workflow voraussetzen. Unser Konzept setzt bei flexiblen Automationskonzepten an. Wir sind dazu übergegangen, sogenannte kollaborierende Robotersysteme zu nutzen, die flexibel für verschiedene Aufgaben genutzt werden können. Eine große technische Hürde existiert allerdings zurzeit noch bei der Entwicklung sol-

cher Workflows. Die Automatisierung im Labor ist auch deshalb noch weit hinter dem technisch Machbaren, weil die Spezialisten fehlen, die für die Programmierung benötigt werden. Mit unserem Ansatz wollen wir den Domänenexperten, also den Fachmann im Labor, befähigen, die Automatisierung selbstständig durchzuführen. Wir setzen daher Software ein, mit deren Hilfe Workflows intuitiv programmiert werden können. Die Nutzung kostengünstiger 3D-Drucker bietet zusätzlich die Möglichkeit, Kleinteile oder sogenannte „Accessoires“ selber zu fertigen.

### Welche neuen Anforderungen stellen sich an die Qualifikation von Fachkräften?

**T. Teutenberg:** Aus meiner Sicht muss ein Fachdisziplinen-übergreifendes Ausbildungskonzept her. Dies betrifft sowohl die Qualifikation des wissenschaftlichen Personals, aber auch der technischen Angestellten. Vorbei sind die Zeiten, in denen nach einem festen Kurrikulum vorgegangen wird, das nur die Inhalte der eigenen Disziplin berücksichtigt.

**U. Gerecke:** Kollaboration zwischen den Fachdisziplinen ist heutzutage wichtiger denn je. Eine gute und solide Grundausbildung in der Analytik ist natürlich nach wie vor notwendig, allerdings müssen neue Technologien schneller Einzug in die Ausbildung und Lehre halten, als es noch vor 10 oder 20 Jahren der Fall war. Ein Laborant sollte heute wissen, wie er einen 3D-Drucker nutzen kann. Ein wissenschaftlicher Mitarbeiter muss verstehen, über welche Datenschnittstellen eine Geräteintegration vorgenommen werden kann.

### Ein Ziel des Projekts war es, ein Modell-system zu entwickeln, was KMU selbst schnell implementieren können. Wo sehen Sie die größten Gewinne? Welche Teilprozesse sollten aus Ihrer Sicht in jedem Labor implementiert werden?

**T. Teutenberg:** Wichtig ist, sich nicht von Beginn an zu verzetteln beziehungsweise zu überfordern. Für mich persönlich ist ein erster „Quick Win“ die Einführung eines elektronischen Laborjournals.

Anders als bei einem LIMS ist es relativ schnell, einfach und kostengünstig möglich, Forschungsergebnisse digital zu erfassen. Für akademische Einrichtungen sind hier sogar Open-Source-Software-Pakete verfügbar, da insbesondere an Universitäten häufig kein zentrales Budget zur Verfügung steht. Für gewerblich ausgerichtete Laboratorien gibt es eine Vielzahl an kommerziellen Software-Produkten, die durch die Hersteller validiert sind. Ist dieser Einstieg geschafft, können weitere „Digitalisierungsprojekte“ umgesetzt werden. Die Nutzung eines Labor-Ausführungssystems, in das bereits mehrere Geräte integriert sind, ist dann der nächste logische Schritt. Wichtig ist, Meilensteine zu definieren und den Erfolg der einzelnen Maßnahmen im Team zu bewerten. Der wirkliche Mehrwert der einzelnen Digitalisierungsteilschritte ist häufig erst retrospektiv sichtbar.

### Was sind die nächsten Schritte für das „Zukunftslabors“?

**T. Teutenberg:** Unsere Strategie sieht vor, die Laborinfrastruktur nun sukzessive mit der Gebäudeinfrastruktur zu vernetzen. Dies ist insbesondere bei der Planung und dem Neubau von Laboren entscheidend. Auf diese Weise können dann Sensordaten mit den Labordaten vereinigt werden. Diese Metadaten liefern wichtige Hinweise, um die Qualität der analytischen Daten zu bewerten. Ein naheliegendes und eigentlich sehr triviales Beispiel ist das gebäudeumfassende Temperaturmonitoring. Wenn alle Geräte und Sensoren miteinander verbunden sind, kann die nächste Entwicklungsphase eingeleitet werden. Mittels maschinellen Lernens und echter KI-Anwendungen können Vorhersagen in Bezug auf die Datenqualität und den Gerätestatus getroffen werden. Entwicklungen wie ChatGPT haben uns vor Augen geführt, welche Möglichkeiten prinzipiell existieren, wenn auf eine große und frei zugängliche Datenbasis zurückgegriffen werden kann. Die Entwicklung einer solchen intelligenten Software war nur möglich, weil unfassbare Datenmengen zur Verfügung standen, mit denen entsprechende KI-Modelle „gefüttert“ werden konnten. Auch wenn wir häufig von Big-Data im Labor reden, verglichen mit den Datensätzen, die Unternehmen wie Microsoft, Amazon & Co. zur Verfügung stehen ist das, was wir aktuell im Labor an Daten erzeugen, eher wie ein kleiner Staubpartikel in einer großen Produktionshalle.

*Das Interview wurde geführt von Corinna Herbst, stellvertretende Chef-Redakteurin der GIT Labor-Fachzeitschrift.*

### ● KONTAKT |

**Dr. Thorsten Teutenberg**  
Abteilungsleiter Forschungsanalytik  
& Miniaturisierung  
Institut für Umwelt & Energie,  
Technik & Analytik e. V. (IUTA)  
Duisburg, Deutschland  
teutenberg@iuta.de

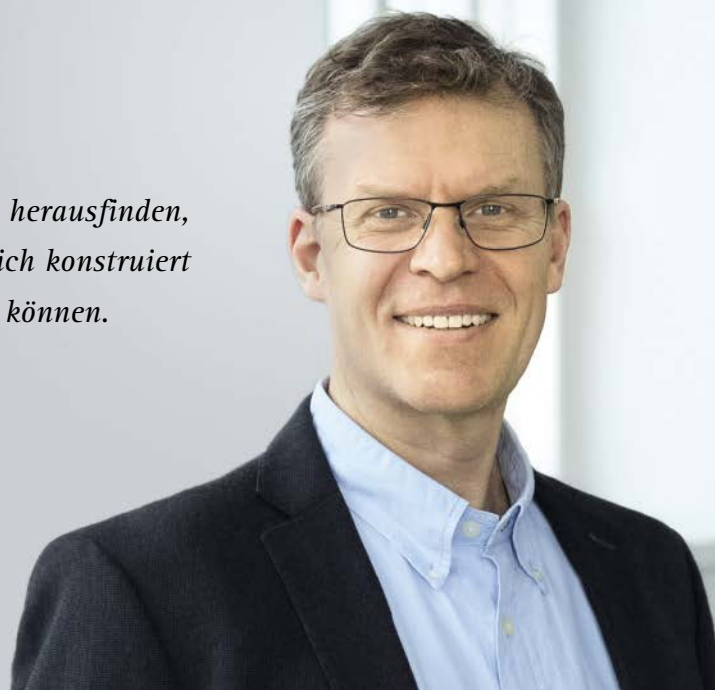


● **Ulrike Gerecke** ist Molekularbiologin mit 10 Jahren Erfahrung in akademischen und industriellen Laboren. Seit 2022 ist sie Business Development Managerin bei SmartLab Solutions. Sie bringt Kompetenzen im Vertriebs-Aufbau und der Finanzierung von jungen Hightech-Unternehmen mit. Das Team der SmartLab Solutions transformiert Labore der Life Sciences auf Software- und Hardware-Ebene.





*Wir wollen gemeinsam herausfinden, wie Organoide erfolgreich konstruiert und hergestellt werden können.*



Matthias Hebrok, Technische Universität München

## Künstliche 3-D-Organoid-Systeme ermöglichen ein naturgetreueres Studium des Lebens

**O**rganoide bieten den modernen Lebenswissenschaften neue Alternativen und Wege für die Erforschung der komplexen Zusammenhänge des Stoffwechsels sowie der Entwicklung und Regeneration von Geweben. Anhand von Organoiden lassen sich die verflochtenen Anordnungen und Interaktionen von Zellen im dreidimensionalen Raum untersuchen, eine Möglichkeit, die den meisten anderen Versuchsmodellen vorenthalten ist. Die steigenden Investitionen in diese Technologie und die verstärkte Einbindung von künstlicher Intelligenz (KI) offenbaren deren aktuellen Stellenwert. Erfahren Sie im Interview mit Herrn Prof. Matthias Hebrok von der Technischen Universität München mehr über die aktuellen Potentiale und die Zukunftsperspektiven der Organoid-Forschung.

**Inwieweit kann anhand von Organoiden die komplexen Prozesse einer Organentwicklung untersucht werden? Welche Vorteile eröffnen sich und wo liegen die Grenzen?**

**M. Hebrok:** Die Organoide, die wir heutzutage produzieren, sind prinzipiell organähnliche Strukturen. Ich persönlich arbeite hauptsächlich im Bereich der Bauchspeicheldrüse und ein Or-

ganoid, das wir herstellen wollen, spiegelt den endokrinen Charakter der hormonproduzierenden Inselzellen des Pankreas wider. Dazu gehören zum Beispiel die insulinbildenden  $\beta$ -Zellen, deren Funktion bei Diabetes gestört ist oder die  $\alpha$ -Zellen, die das antagonistische Hormon Glukagon generieren, um Zucker freizusetzen, wenn der Organismus körperliche Anstrengung erfährt. Es bleibt aber festzuhalten, dass wir aktuell noch nicht über das ausreichende Wissen und die Erfahrung verfügen, um jede einzelne Zelle in genau der richtigen Architektur in die Organoid-Strukturen einzugliedern beziehungsweise. So einzubringen, damit ein ganzes Organ hergestellt werden kann. Das ist immer noch eine der Grenzen, die es zu überwinden gilt. Was wir aus unseren Arbeiten aber lernen, ist aus meiner Sicht schon sehr faszinierend. Denn unter Zellkulturbedingungen können wir Gewebe sowie organoidähnliche Strukturen entstehen lassen, die bereits erstaunliche Ähnlichkeit mit deren Pendanten in unserem Körper haben. Das Organoid im Endstadium zu untersuchen ist das Eine, die Beobachtung der Entwicklung über die Zeit – und damit die Berücksichtigung der 4. Dimension – ist die andere interessante Herangehensweise. Denn mit der Veränderung der räumlichen Struktur der Organoide im zeitlichen Kontext ist die Funktionalität verknüpft, die 3-dimensionale Anordnung richtig zusammen-

zufügen. In diesem Zusammenhang spielt das Einsetzen eines Entwicklungsschritts zum richtigen Zeitpunkt eine überaus entscheidende Rolle. Das ist etwas, das mit 2-dimensionalen Zellkulturen nicht nachvollzogen werden kann. Viele Forscher, die heutzutage mit humanen Organoiden arbeiten, haben früher mit Tiersystemen (u. a. Maus) gearbeitet und dadurch viel über die Entwicklungsbiologie erfahren. Aber die Maus

● **Matthias Hebrok** promovierte in Entwicklungsbiologie am Max-Planck-Institut für Immunbiologie in Freiburg und wurde als Postdoktorand am Howard Hughes Medical Institute der Harvard University in Cambridge (USA) ausgebildet. Bis August 2022 war er Professor an der University of California, San Francisco (USA), wo er von 2010-2020 Direktor des Diabetes Center war. Seit September 2022 ist er Direktor des neu gegründeten Instituts für Diabetes und Organoid-Technologie am Helmholtz Zentrum München. Außerdem wurde er zum Professor an der Technischen Universität München ernannt, wo er den Lehrstuhl für Angewandte Stammzell- und Organoidsysteme innehat und Direktor des neuen Zentrums für Organoid-Systeme (COS) ist.

entwickelt sich eben doch etwas anders als der Mensch und damit sind auch die Funktionen der Organe anders zu bewerten. Das heißt, man kann Prinzipien am Tiermodell darstellen und lernen, aber wenn man das Humansystem verstehen will, muss man mit dessen Organoiden arbeiten. Neben der Ausbildung der 3-D-Struktur ist ein weiterer Aspekt die Interaktion von klar zu unterscheidenden Zelltypen, die sich dabei entwickeln. Man verwendet embryonale (hES-Zellen) oder induzierte pluripotente Stammzellen (hiPS-Zellen), deren Potenzial sich auszeichnet, in jede Körperzelle transformiert werden zu können. Das heißt, wenn diese Zellen die richtige Anleitung beziehungsweise Informationen bekommen, dann können diese schrittweise durch bestimmte Entwicklungsstadien geführt werden, um entsprechende organähnliche Gewebe aufzubauen, wie beispielsweise für das Herz, die Bauchspeicheldrüse oder das Gehirn. Während des Ablaufs dieser Entwicklungsprozesse entstehen sukzessive und zum richtigen Zeitpunkt verschiedene Zelltypen, die dann miteinander interagieren. Wenn dieses nachvollziehbar und verstanden wird, führt das zu wichtigen Hinweisen, wie sich ein Mensch gesund entwickelt und andererseits, wie es auch zu Fehlentwicklung kommen kann.

### Welche Rolle wird die Organoid-Forschung in der Zukunft einnehmen? Werden herkömmliche Zellkulturen in der 2-D-Matrix bald der Vergangenheit angehören?

**M. Hebrok:** Es ist für mich durchaus vorstellbar, dass sich die Lebenswissenschaften immer weiter von den zweidimensionalen Matrices entfernen und hin zu den drei- beziehungsweise vierdimensionalen Modellen bewegen werden. Das hängt einfach damit zusammen, dass natürliches Leben nie in einer 2-dimensionalen räumlichen Ordnung existiert. Das heißt, selbst Epithelstrukturen, sei es im Darm, auf der Haut oder in der Lunge, existieren nicht isoliert in einem zweidimensionalen Gefüge, sondern diese schichtartigen Strukturen sind in einer dreidimensionalen Umgebung eingebettet. Während der Entwicklung ist klar zu sehen, dass sich diese Formen über die Zeit immer unter dem Einfluss der benachbarten Zellen sowie Geweben herausbilden. Sei es, dass Epithel oft mit Mesenchym im Verbund vorliegt oder wie in dem Pankreas zu sehen ist, das Mesenchym in den Islet-Strukturen integriert ist und die Zellen dort, wie eine Art Klebstoff in einer definierten 3-dimensionalen Ordnung zusammenhält. Weiterhin bietet ein entsprechendes Organoid-System, den

Einfluss der verschiedenen humoralen Zellen des Immunsystems während der Entwicklung nachzuvollziehen. Diese Zellen patrouillieren und kontrollieren den räumlichen Aufbau von Geweben und die Zellfunktionen auf Normalität oder Entartung. Aber die humoralen Zellen spielen auch eine Rolle bei der Wundheilung und der Reparatur von Zellgeweben. Diese Aspekte kann man in einer 3-dimensionalen Organoid-Matrix viel naturähnlicher nachbauen und studieren als in einer 2-dimensionalen Kultur.

### Neben den Studien zu Entwicklungsprozessen von Geweben, welche weiteren wissenschaftlichen Untersuchungen eröffnen sich mit Hilfe der Organoid-Forschung?

**M. Hebrok:** Es ermöglicht beispielsweise das prinzipielle Nachbauen von Krankheitsbildern. Wir haben Patienten, deren Genom Mutationen aufweisen, so dass in manchen Fällen nur ein Protein fehlt oder entweder dieses unter-, über- oder zeitlich verschoben exprimiert wird. Entnehmen wir aus dem Soma dieser Patienten, sei es von deren Blut- oder Hautzellen, IPS-Zellen, dann können wir die veränderte Entwicklung von Geweben unter dem Einfluss der Mutation initiieren und beobachten. Auf diese Weise wäre es möglich, Rückschlüsse auf die Rolle und Funktion des betroffenen Proteins im Rahmen der Gewebsbildung zu ziehen und dadurch korrespondierende Krankheitsbilder besser verstehen zu lernen. Außerdem können Organoiden auch aus murenen Geweben und aus Krebsgewebe aufgebaut werden. Diese zeigen im Vergleich zu den in den menschlichen Organismus eingebetteten Geweben erstaunlicherweise sehr ähnliche Parameter und Eigenschaften. Also das, was unter Zellkulturbedingungen auf diese Weise nachkonstruiert wird, dient als wertvolles Testmaterial, um zum Beispiel die Heterogenität von Tumoren zu untersuchen. Weiterhin ist es mit Hilfe der Geneditierung praktikabel, gezielt einzelne DNA-Basen oder ganze Gene austauschen und somit Zelltherapie zu betreiben. Durch den Einbau von Reportergenen wollen wir lernen, zu welchem Zeitpunkt bestimmte Gene an- beziehungsweise abgeschaltet werden, um hier eine bessere Analyse von der Entwicklung der Organoiden herzustellen. Zusammengefasst können wir heutzutage Designer-Zellen konstruieren, die im Prinzip einige wenige genetische Veränderungen mit sich tragen. Warum ist das wichtig? Unsere Evolution ist noch nicht abgeschlossen, sondern ein konstant fortlaufender Prozess, in dem die Zellen danach streben, immer widerstandsfähiger und robuster zu werden. Mit unseren technischen Möglichkeiten können wir jetzt bereits Zellen erzeugen, die metabolisch aktiver oder für die Zelltransplantation besser geeignet sind, weil sie das Immunsystem des Empfängers nur schwach oder gar nicht mehr anregen. Es ist möglich, Zellen darzustellen, die bestimmte Wirkstoffe besser oder schlechter abbauen können. Die Optionen für das Arzneimittelscreening sind

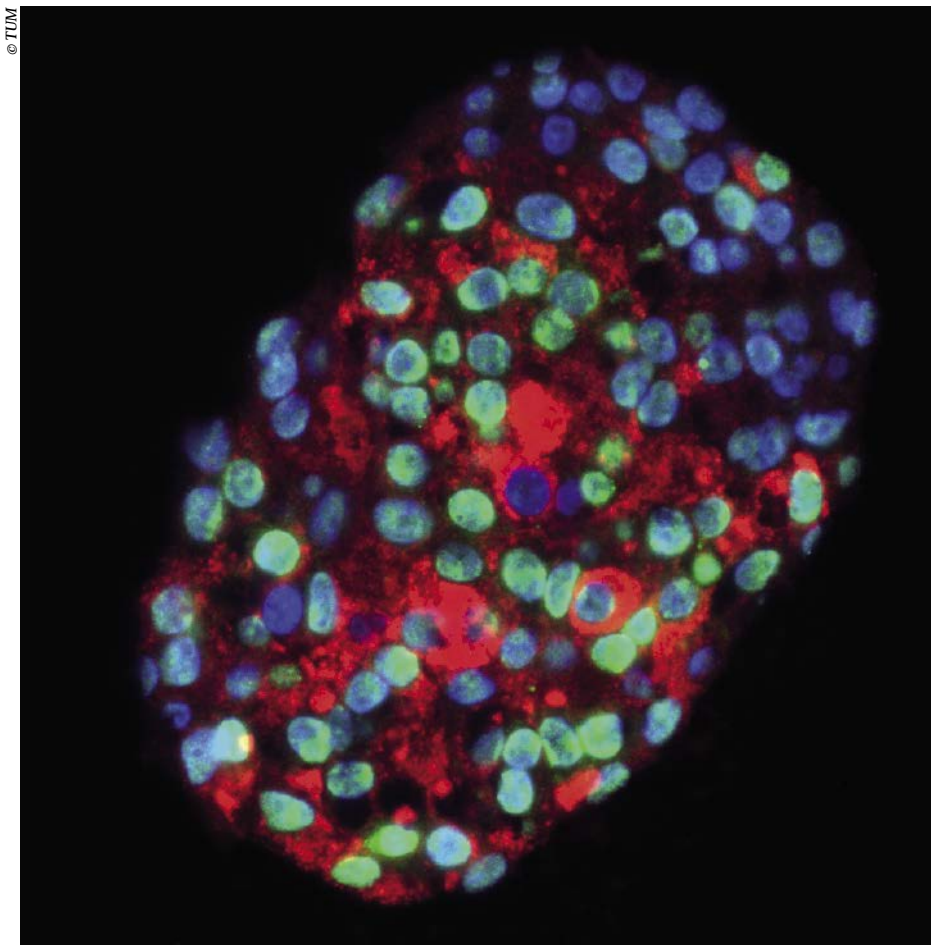


Abb.1: Aus Stammzellen generierte Inselorganoiden. Die benutzen Marker sind: Blau – DAPI (nukleärer Marker); Grün – PDX1 (Transkriptionsfaktor in Betazellen); Rot – Insuling (Hormon in Betazellen).

ein weiterer Bestandteil aus einer Vielzahl an denkbaren möglichen Anwendungen. Aus meiner Sicht erstreckt sich bislang ein grenzenloses Feld an Alternativen, den menschlichen Organismus in seiner natürlichen Entwicklung besser studieren zu können.

### Inwieweit kann künstliche Intelligenz (KI) die Organoid-Forschung unterstützen und dessen Weiterentwicklung vorantreiben?

**M. Hebrok:** Die KI wird ohne Frage einen sehr großen Einfluss auf die Organoid-Forschung nehmen und die Weiterentwicklung rasant beschleunigen. Konkrete Details dazu kann ich im Augenblick aber noch nicht geben. Aber die folgende Anwendungsmöglichkeit ist für mich denkbar: Hinsichtlich der Designer-Zellen haben wir ein unglaubliches Wissen über die Genetik, die in den Zellkernen enthalten ist, ebenso über die Genetik von Patienten, die eine Mutation im Genom aufweisen. Wir verstehen immer mehr den Stoffwechsel, welche Proteine miteinander interagieren, sich gegenseitig modulieren und sich in ihren Tätigkeiten gegenseitig beeinflussen, verändern, einschränken oder aktivieren. Dabei gibt es aus meiner Sicht unglaublich viele Möglichkeiten, die künstliche Intelligenz beziehungsweise Machine Learning zu integrieren. Einfach um zum Beispiel die Beantwortung der folgenden Frage zu unterstützen: Wie würde eine höher entwickelte Zelle aussehen? Wie definiere ich eine höher entwickelte Zelle? Im Hinblick auf die  $\beta$ -Zellen des Pankreas, zum Beispiel eine leistungsfähigere Zelle, die mehr Energie hat, damit vergleichsweise mehr Insulin produziert, nicht anfällig für oxidativen Stress ist, der oft zu beobachten ist. Aber auch der metabolische Stress, der dadurch in Erscheinung tritt, da die Zelle zu viele Moleküle produziert, was über ihr eigentliches Potenzial hinaus geht. In diesem Kontext kann ich mir sehr gut einen wertvollen Beitrag der KI vorstellen, um Gene und Veränderungsmöglichkeiten durch Modulierung zu analysieren, wie Expression gesteigert oder verringert werden kann. Dann ist aus meiner Sicht durchaus möglich, die

Millionen Jahre von Evolution auf einen Zeitraum von 5 bis 10 Jahren zu reduzieren.

*Das vollständige Interview lesen Sie unter:  
<https://bit.ly/GIT-Hebrok>*

*Das Interview wurde geführt von Dr. Martin Friedrich, externer Redakteur der GIT Labor-Fachzeitschrift.*

### ● KONTAKT |

**Prof. Dr. Matthias Hebrok**  
Angewandte Stammzell- und Organoidsysteme  
Zentrum für Organoid-Systeme (COS)  
Technische Universität München, Deutschland

Institut für Diabetes und Organoid-Technologie (IDOT)  
Helmholtz Zentrum München, Deutschland

ORCID: 0000-0002-3833-8862  
[matthias.hebrok@tum.de](mailto:matthias.hebrok@tum.de)

## Experten für Reproduzierbarkeit

- **Verlässliche Hardware-Optionen für jeden Maßstab**  
Robuste, hoch-effiziente Säulen vom nano- bis in den (semi)präparativen Maßstab.
- **Große Bandbreite an Applikationen**  
RP, NP, HILIC, chirale, SFC, IEX, SEC oder HIC Säulenoptionen.
- **Direkter Support durch YMC-Experten**  
Wenn Sie Unterstützung benötigen, sind wir für Sie da. Sie sind unsere Priorität!

**YMC**  
EUROPE GMBH  
The Selectivity Company

Entdecken Sie unsere Website: **[www.ymc.eu](http://www.ymc.eu)**  
**Aktuelle Infos und umfassender Support**  
E-Mail [support@ymc.eu](mailto:support@ymc.eu) · Telefon +49 2064 427-0



# Komplexität in der Materialwissenschaft managen

## Hybride Service-Bündel für die Schadensanalyse

**W**ird das Geschäftsmodell eines Materialprüfungslabors von belastungsfähigen Labor-Berichten um die Schadensanalyse erweitert, braucht es mehr als ein übliches LIMS (Labor-Information- und Management-System). Hierbei ist ein Experte vonnöten, der alle Wertschöpfungsschritte für den Markt erfüllen kann. Dazu zählen neben Kompetenzen im Bereich des Marketings, Erstgespräche, die Klärung technischer Aspekte, das Erstellen kaufmännischer Angebote, die Orchestrierung der Proben und Untersuchungen, das Bewerten von Ergebnissen, die Erstellung von Gutachten sowie deren Verteidigung und die Nachsorge. Ferner wird weitere Infrastruktur benötigt, hierzu gehören unter anderem eine Bibliothek, ein zugängliches Archiv ähnlicher Fälle, eine gut dokumentierte Kundenkommunikation, eine Übersicht der Kapazitäten der Spezialisten und Experten, qualifizierte Sublieferanten und ein standardisiertes Berichtswesen nach dem 4-Augen-Prinzip. Im Folgenden erörtert Julius Nickl, Inhaber und Geschäftsführer der GWP Gesellschaft für Werkstoffprüfung, eine als hybrides Service-Bündel, kurz hySB, bezeichnete Zusammenstellung, die in seinem Unternehmen eingeführt wurde.

Eine komplexe Schadensanalyse braucht oft ein Bouquet an genormten werkstofftechnischen Prüfungen wie Materialographie, Zugversuche, Elementanalyse, Oberflächen- & Bruchcharakterisierungen, Korrosionsfestigkeit. Und, alle Prüfungen müssen spezifisch auf das Material (Metall, Kunststoff, Keramik, Pyrotechnik, Verbundwerkstoffe) zugeschnitten sein. Dazugehörige, individuelle, vom Experten frei definierte Prüfungen, sind zum Beispiel  $\mu$ -CT, Funktionstests, Nachstellen von Schadenshypothesen und auftragsspezifische Methodenentwicklung. Diese Vielfalt ist verwirrend und nur durch eine unternehmensweite Standardisierung der genormten sowie individueller Angebotspositionen können effektiv syndisziplinäre Angebote vom Experten zusammengestellt werden – oft mit großem Nutzen für den Kunden.

disierung der genormten sowie individueller Angebotspositionen können effektiv syndisziplinäre Angebote vom Experten zusammengestellt werden – oft mit großem Nutzen für den Kunden.

### Bereiche zur Wissensgenerierung

„Wissen schafft Fortschritt“ gilt auch in der produzierenden Industrie. Betrachtet man technische Prozesse und Produkte, können vier Bereiche zur Wissensgenerierung durch ein materialwissenschaftliches Labor (im Folgenden dient

als Grundlage die GWP – Gesellschaft für Werkstoffprüfung) definiert werden.

- Die Schadensanalysen in den Materialwissenschaften umfassen die Branchen Automotive, Prozessindustrie, Medizintechnik, Energie und weitere. Dabei hat für alle Experten die Ermittlung der technischen Ursache (engl. Pinpointing the technical root cause) bei Rückrufen, Versicherungsfällen oder Gerichtsgutachten oberste Priorität.
- Die werkstofftechnischen Entwicklungen fordern viele Kompetenz; im Kundenauftrag beschäftigt man sich neben den Prozessen (Diamanten löten, „kalt“ schweißen, Isolations- & Gleit-Lackierungen, stents, Kostenreduzierungen) auch mit den Produkten (Aluminiumguss, Baubeschläge, Hartstoffe, Katalysatoren, Handgeräte, Brennstoffzellen).
- Labor-Services sind das Rückgrat eines werkstofftechnischen Labors. Für die Schadensanalyse und die Entwicklungen liefern sie belastbare Berichtsunikate sowie die Laborberichte nach Norm zur Qualitätssicherung (Serienprüfungen) für die laufende Produktion beim Kunden.
- Werkstätten bergen und fertigen als Kernaufgabe Proben für die Labor-Services. Sie können große Proben-Mengen für Serienprüfungen (z. B. Batteriegehäuse) und schwere Lasten (z. B. Windkraftlager) handhaben. Darüber hinaus betreiben sie CNC-Maschinen, Roboter, Handmaschinen und dergleichen mehr. Auch führen Werkstatt-Spezialisten technologische Arbeiten durch.

Die aufgeführten Bereiche werden von Experten mit meist Konzeptionierungen, Bewertungen und Gutachten sowie von erfahrenen Spezialisten in den Laboren und Werkstätten, die mit Proben, Gegenständen und Maschinen arbeiten und welche die Fakten zu den gewünschten Themen liefern, bedient. Man erkennt, dass das Zusammenspiel all' dieser Themen komplex ist. Hier gilt: Kommunikation ist alles und die Digitalisierung dazu ist anspruchsvoll.

### Effektive Organisation

Ein gutes Prüflabor organisiert die Fachbereiche und die Stabsstellen zu einer effektiven Organisation. In Abbildung 1 ist ein Organigramm eines syndisziplinär arbeitenden Betriebes dargestellt – man erkennt die Vielfalt an zu steuernden Aufgabengebiete. Und diese Melange sollte in einer integrierten Software-Lösung abgebildet sein – lediglich das Marketing wird

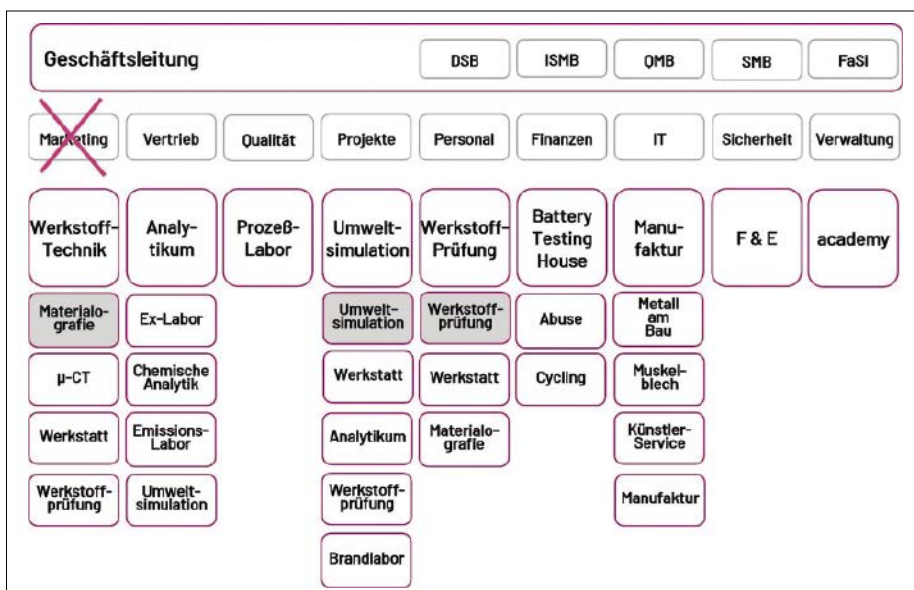


Abb. 1: Geltungsbereich einer integrierten LIMS, ERP und CRM-Software-Lösung im Falle GWP.

nicht erfasst. Als Besonderheit in diesem Markt der Schadensanalyse wurde erkannt, dass im Vertrieb ebenfalls Experten vonnöten sind, denn diese können fachkundig mit den Interessenten sprechen und auch bei der Auftragsbearbeitung auf Augenhöhe mit den Kunden sein. Daraus folgt üblicherweise für Dienstleister, dass viele Mitarbeiter angebotsfähig sein müssen, über 1.000 Services und Experten-Leistungen in der Software gepflegt sind, sowie die Software entsprechend viele Vertriebler zulässt.

Es ist anspruchsvoll, diese Vielfalt an Themen softwaretechnisch und auch intellektuell zu managen. Zugleich ist jedoch genau diese Komplexität auch die Chance für einen Wettbewerbsvorteil in der Schadensanalyse. Glaubt man an die Vision, dass hySB großen Nutzen für die Kunden liefern, also auch lukrativ sind, muss man sie effektiv installieren. Kernfragen der Geschäftsleitung dazu sind:

- Was umfassen die hySB alles außerhalb des Labores?
- Wie groß ist die gewonnen Synergie kurzfristig?
- Kann man langfristig Werte (z.B. Wissensdatenbank) und Skalierbarkeit (z.B. mit KI) schaffen?
- Wer ist in der Lage dieses Projekt der Digitalisierung der hySB zu leiten?
- Welche Software-Architektur wählt man?

## Technik, Umsetzung und Kosten im Unternehmen

In der Gesellschaft für Werkstoffprüfung wurde durch jahrzehntelange Entwicklung einer eignen CRM- & ERP-Lösung durch einen einzelnen Mitarbeiter Erfahrung in der Digitalisierung gesammelt. Das Wachstum auf 50 Mitarbeiter machte ein kommerzielles System erforderlich.

Nach einer schwierigen Evaluation in dem zersplitterten Markt der LIMS wurde sich für



**„Wissen schafft Fortschritt“ gilt auch in der produzierenden Industrie.**

ein Inegris iLIMS zur Digitalisierung des hySB entschieden. Hierbei wurde ein SAP-ähnliches betriebswirtschaftliches System in Kombination mit dem LIMS gewählt, um keine weiteren Anbieter oder Schnittstellen erforderlich zu machen.

Die Implementierung erforderte 2,5 Jahre, um rund 70% des geplanten Betriebsumfang zu erreichen. In der „Opportunity 1“ – der interne Name der Anwendung – wurden über 50 „Manager“ in one-to-many-Beziehungen zu den einzelnen Themen der ERP und des LIMS integriert (Kontakte, Kunden, Lieferanten, Chancen, Positionen, Angebote, Aufträge, Skills, Prüfmittel, QM-Anweisungen, Rechnungen, etc.). Besonders wichtig und auch besonders herausfordernd sind die übergreifenden Arbeitsabläufe für hohe Effizienz und Nutzerzufriedenheit. Hierzu zählt beispielsweise, dass ein Interessent, der anruft, automatisch erfasst wird, eine interaktive Prüfmittelüberwachung erfolgt, ein On- & Offboarding, eine weitestgehende Automatisierung der Prüfberichte, und vieles mehr.

Mit dieser integrierten Organisation sind Anforderungen nach DSGVO erfüllbar sowie eine Akkreditierung nach ISO 17025 und Zertifizierungen nach TISAX. Es wird erwartet, dass weitere Zertifizierungen, für zum Beispiel Luftfahrt oder Militär, auf Bestehendes zugreifen können und nur relativ wenig neu installiert werden muss.

Die Hardware betreffend lässt sich sagen, dass die Anwendung und IT-Administration aus Kostengründen lokal betrieben, sowie drei Standorte in Deutschland über eine sichere Verbindung versorgt werden. Gegenwärtig wird die IT von 3,5 Mitarbeitern bestritten, was 7% aller Mitarbeiter entspricht (das ist eine Verdopplung der relativen IT-Größe, Tendenz steigend). Ein ausgedehntes Consulting des s/w-Herstellers kommt zusätzlich dazu.

Vor der Implementierung wurde mit Kosten von circa 10% eines Jahresumsatzes für Lizenzen, Personal und Hardware-Erweiterung geplant, so ist aktuell eine Budgetüberschreitung von 200% zum ursprünglich geplanten Umfang zu verzeichnen. Während der Entwicklung kamen zusätzliche Wünsche zu Funktionalitäten auf, die jährlich ca. 1-2% des Jahresumsatzes

kosten. Einsparungen durch wegfallende Lizenzen gab es wegen der Eigenentwicklung des Vorgängers nicht.

## Auf den Punkt

Will man die die komplexen Materialwissenschaft digitalisieren, erfordert das einen immensen Aufwand an Energie, Mitarbeitern und Geld. Rückblickend wurde bei der GWP trotz der Erfahrung der Aufwand unterschätzt. Dies lag auch an immer wieder neu auftauchenden Themen. Einer Schätzung aus Implementierung und Fortentwicklung zusammen, ergibt sich eine 2- bis 3-fache Budgetüberschreitung. Solch eine Kostenexplosion kann Unternehmen scheitern lassen.

Hier stellt sich nun die Frage, warum der Aufwand betrieben und die Risiken in Kauf genommen werden sollten? Der Nutzen ist ebenfalls immens: Wurden erst alle Kompetenzen in digitale Prozesse „gegossen“ und von den notwendigen Stabstellen beherrscht, entstehen Synergie, Qualität, Effizienz, Skalierbarkeit und Mitarbeiterzufriedenheit. Das ist absolute Zukunftssicherung.

Zusätzlich werden neue Lösungen möglich. Hierzu zählen:

- Die künstliche Intelligenz kann „gefüttert“ werden gegenwärtig reicht die Fantasie noch nicht aus, welcher Nutzen gestiftet werden kann.
- Die Mitarbeiter könne zu anerkannten Experten gefördert werden.
- Der Kunde erhält Laborergebnisse in Echtzeit.

Wir sind davon überzeugt, dass die Komplexität in der Materialwissenschaft managen zu können, der Weg in die zukünftige Wissensgesellschaft ist. Und die hySB sind die beste Zukunftssicherung für Prüflaboratorien und den hochentwickelten Standort Deutschland.

*Lesen Sie zusätzlich am Beispiel des Takata-Airbag-Rückrufes mehr über das hybride Service-Bündel auf Wiley Analytical Science: <https://bit.ly/GIT-Nickl>.*

## ● KONTAKT |

**Dr. Julius Nickl**

GWP Gesellschaft für Werkstoffprüfung mbH  
Zorneding/München, Deutschland  
[julius.nickl@gwp.eu](mailto:julius.nickl@gwp.eu)



● **Julius Nickl** studierte Chemie und promovierte an der ETH Zürich, Schweiz. Nach einem Postdoc-Aufenthalt in Berkeley, USA, begann er 1993 seine berufliche Laufbahn bei GWP Gesellschaft für Werkstoffprüfung. 1998 wurde er Inhaber und Geschäftsführer. Neben der wachsenden GWP gründete er mehrere Unternehmen, zuletzt GWP Technologie, eine Beteiligung im TIC-Markt.

# Symposium: Fachübergreifende moderne Analytik

13. Oktober 2023, Sonthofen

**D**as Symposium zur innovativen Nutzung analytischer Verfahren findet bereits zum 6. Mal statt und möchte über alle Branchen und Fachgebiete hinweg Wissenschaftler:innen, Expert:innen und Entscheider:innen aus Industrie, Behörden und Universitäten zusammenbringen, die auf dem weitläufigen Gebiet der Analytik tätig sind.

Die Veranstaltung findet am 13.10.2023 ab 09:30 Uhr in der Schule für ABC-Abwehr und Gesetzliche Schutzaufgaben der Jägerkaserne in Sonthofen mit zwei Schwerpunkten statt:

- Information über neue Entwicklungen im Spektrum der Analytik und Anwendung von bestehenden Techniken unter besonders herausfordernden Bedingungen.

- Zusammenbringen und Vernetzen von Experten, Spezialisten und Entscheidern aus dem Teilnehmerkreis, um künftige Zusammenarbeit zu ermöglichen und zu fördern.

Die Einbindung vieler Fachgebiete aus zahlreichen Organisationen gibt der Veranstaltung eine ungewöhnlich hohe Vielfaltigkeit und Heterogenität. Das ermöglicht eine interdisziplinäre Perspektive auf analytische Techniken und Fragestellungen. Die kurzen Fachvorträge mit Ihren kritischen Diskussionen und die lockere Atmosphäre sollen den intensiven gegenseitigen Austausch unterstützen. Denn auch die Analytik ist ein Teil der Wissenschaft, in der bekanntlich Erfindungen und Fortschritte eher nebenbei, zufällig oder aus einer „Eselei“ entstanden sind. Und so entdeckt vielleicht der ein oder andere

Teilnehmer neue Wege und unerwartete Möglichkeiten, die zu Lösungen der eigenen Herausforderungen verhelfen.

Eine Teilnahme am Symposium und am Netzwerk ist nur durch persönliche Einladung einer der Veranstalter möglich. Registrierte Mitglieder finden weitere Informationen unter: [forum.analytik-netzwerk.org](https://forum.analytik-netzwerk.org).

Zur geplanten Agenda gelangen Sie hier: <https://bit.ly/Symposium-Analytik>

## ● KONTAKT |

**Dr. Hans-Christian Müller**  
freiberuflicher Berater für Qualitätsmanagement  
Rosenheim, Deutschland  
[symposium@analytik-netzwerk.org](mailto:symposium@analytik-netzwerk.org)

# Falling Walls Science Summit 2023

7.-9. November 2023, Berlin

**D**er Falling Walls Science Summit ist ein internationales, interdisziplinäres und sektorübergreifendes Forum für wissenschaftliche Durchbrüche und den Dialog zwischen Wissenschaftler:innen und der internationalen Öffentlichkeit. Die Veranstaltung findet jedes Jahr vom 7. bis 9. November zum Jahrestag des Falls der Berliner Mauer unter dem Leitmotiv "Which are the next walls to fall in science and society?" in Berlin statt.

Die Summit Formate umfassen folgende Punkte:

- Falling Walls Pitches für Nachwuchswissenschaftler:innen, wissenschaftliche Start-Ups und Science Engagers am 7. November
- Falling Walls Circle für Debatten zu aktuellen politischen, wissenschaftlichen und gesellschaftlichen Themen am 8. November und
- Falling Walls Science Breakthroughs of the Year für wissenschaftliche Durchbrüche am 9. November.



Mit seiner umfangreichen Agenda ist der Falling Walls Science Summit der Treffpunkt für globale Akteure aus Wissenschaft, Wirtschaft, Politik, Medien und Zivilgesellschaft, um das Potenzial wissenschaftlicher Durchbrüche zur Lösung großer Herausforderungen und zur Gestaltung einer nachhaltigen Zukunft zu diskutieren. Der ganzheitliche Ansatz des Wissenschaftstreffens ist einzigartig und zieht führende Forscher, CTOs, Wissenschaftsstrategen, Wissenschaftsförderer und Medien an. Der Falling Walls Science Summit wird von der gemeinnützigen Falling Walls Foundation organisiert.

Weitere Informationen finden Sie unter: <https://falling-walls.com>

## ● KONTAKT |

**Olena Taran**  
Press Officer  
Falling Walls Foundation gGmbH  
Berlin, Deutschland  
[olena.taran@falling-walls.com](mailto:olena.taran@falling-walls.com)

# 7. AnalytikTag des IUTA

9. November 2023, Duisburg

**A**m 9. November 2023 ist es wieder so weit: Unter dem Thema „Automatisierung, Digitalisierung und Miniaturisierung im Kontext des neuen Modelllabors FutureLab.NRW“ findet der mittlerweile 7. AnalytikTag des Instituts für Umwelt & Energie, Technik & Analytik (IUTA) in Duisburg statt.

Erleben Sie praxisnahe Vorträge und Diskussionen von Expertinnen und Experten, die Ihnen Einblicke in aktuelle Forschungsergebnisse und Anwendungsfelder geben. Erfahren Sie, wie Automatisierung Laborabläufe vereinfacht, Digitalisierung Sensor- und Geräteintegration ermöglicht und Miniaturisierung die Messtechnik verändert. Diese Trends haben maßgeblichen Einfluss auf die Analytik der Zukunft und eröffnen vielfältige Möglichkeiten zur Prozessoptimierung und Datenanalyse.



Das wissenschaftliche Vortragsprogramm wird durch eine Ausstellung namhafter Hersteller von Analysegeräten und Unternehmen aus den Bereichen der Laborautomatisierung und Digitalisierung begleitet. Darüber hinaus werden Führungen durch das Labor der Zukunft angeboten. Nutzen Sie diese Gelegenheit, Ihr Fachwissen zu erweitern und sich mit Gleichgesinnten auszutauschen. Melden Sie sich frühzeitig an, um da-

bei zu sein, denn die Teilnehmerzahl ist begrenzt. Die Veranstalter freuen sich darauf, Sie beim 7. AnalytikTag am IUTA begrüßen zu dürfen.

Weitere Informationen zum Programm und zur Anmeldung finden Sie unter: <https://bit.ly/GIT-7-AnalytikTag>



## ● KONTAKT |

**Dr. Thorsten Teutenberg**  
Abteilungsleiter Forschungsanalytik & Miniaturisierung  
Institut für Umwelt & Energie,  
Technik & Analytik e. V. (IUTA)  
Duisburg, Deutschland  
[teutenberg@iuta.de](mailto:teutenberg@iuta.de)

# LIMS-Forum

13.-14. November 2023, Köln

**D**as Fachwissen rund um Labor- Informations- und Management-Systeme steht im Mittelpunkt des jährlichen „LIMS-Forums“, das vom 13. bis 14. November 2023 Anwender und Experten zu Laborsoftware in Köln zusammenführt.

Egal ob Sie erstmalig auf der Suche nach einem passenden LIMS sind oder sich als Anwender:in auf den neuesten Stand bringen wollen, das LIMS-Forum bietet sowohl Einsteiger:innen als auch fortgeschrittenen Nutzenden in der Ausstellung und den Vorträgen den passenden Input.

Das Programm beinhaltet nicht nur wissensvermittelnde Fachvorträge, sondern auch praxisbezogene Anwendervorträge. Round-Table-Discussions laden zu kleinen Gesprächsrunden mit verschiedenen Themen ein. Das Format der Talkshops bietet Diskussion in größerer Runde, in der das Auditorium Experten zu den Themen LIMS-Schnittstellen, Digitalisierung im akkreditierten Labor und der immer wieder gestellten Frage „Cloud oder On-Premise?“ befragen kann.

Und wie immer dabei: Die LIMS-Ausstellung, in der mehr als 20 ausstellende Firmen Ihre Pro-



dukte und Dienstleistungen präsentieren. Hier haben Besucher die Gelegenheit, sich in persönlichen Gesprächen bei den Herstellern über deren Systeme zu informieren und diese direkt miteinander zu vergleichen.

Als Ergänzung zum LIMS-Forum stellen sich die Fachleute am separat buchbaren Future Lab Day am 15. November den Fragen der Zukunft. Diskutieren Sie in moderierten Talkshops, erfahren Sie in den Future Lab Sessions mehr über die Vorstellungen der LIMS-Anbieter und entwickeln Sie so ein Verständnis dafür, welche technischen Innovationen für Ihr Labor relevant werden und wie Sie Ihre Zukunftschancen verbessern können.

Weitere Informationen finden Sie unter: <https://www.lims-forum.de/>



## ● KONTAKT |

**Elke Bonny**  
Dr. Klinkner und Partner GmbH  
Saarbrücken, Deutschland  
[elke.bonny@klinkner.de](mailto:elke.bonny@klinkner.de)

# Digitale Chemieindustrie

Die chemische Industrie wandelt sich und steht vor neuen Herausforderungen. Die Digitalisierung spielt eine große Rolle – als Auslöser für Veränderungen und durch neue technologische Möglichkeiten. Das Buch „Digitale Chemieindustrie: Anforderungen Chemie 4.0, Praxisbeispiele und Perspektiven“ bietet hierzu umfassende Einblicke. Es beleuchtet den Status quo, zeigt Praxisbeispiele aus Unternehmen und Wege für eine

erfolgreiche digitale Transformation. Geschrieben von führenden Expert:innen aus Industrie, Hochschule und Consulting. Ein Leitfaden für Projektteams, Führungskräfte, Wissenschaftler:innen und Unternehmensberater:innen in der Chemieindustrie. Die Digitalisierung betrifft alle – Händler:innen, Mittelständler:innen, Konzerne und Chemie-/Pharma-Standorte. Ein Exemplar können Sie bei dem Gewinnspiel auf Seite 18 gewinnen.

## Was war der konkrete Anlass das Buch zu schreiben?

**C. Suntrop:** Die Chemie hat eine zu wenig attraktive Lobby, obwohl sie das erfolgskritische Rückgrat vieler Industriezweige ist. Hierzu soll das Buch einen Beitrag leisten und zeigen, wie viele spannende Digitalisierungs-Cases in der Industrie schon verankert sind und welche spannenden Aufgaben dort auf uns alle warten. Es geht darum einen Überblick zum Stand der branchenspezifischen Digitalisierung zu erhalten und damit auch das eigene Unternehmen bezüglich des digitalen Reifegrades einordnen zu können. Das Buch soll den Leser:innen konkrete Hilfestellungen zur eigenen Digitalisierung geben. Idealerweise finden sie digitale Ansätze und Impulse zur Disruption und Evolution des eigenen Unternehmens und können diese für eine erfolgreiche Transformation umsetzen.

## Spielt künstliche Intelligenz schon eine Rolle in der aktuellen Industrie?

**C. Suntrop:** Definitiv ja. Durch den gewaltigen Technologiefortschritt steht nun Rechenpower für komplexe Modellierungen, virtuelle Experimente und Simulationen zur Verfügung, die vor 10 Jahren noch undenkbar gewesen ist. Dies bildet die Basis für den Einsatz von künstlicher Intelligenz, die immer häufiger zum Einsatz kommt. Es gibt bereits viele realisierte Anwendungen: KI-Systeme zur Unterstützung von Entscheidungen, KI in der Produktionstechnik und im Supply Chain Management, intelligente Prozessdatengenerierung und deren automatisierte Überwachung.



**Carsten Suntrop**

ist Managementberater, Inhaber der Strategieberatung CMC<sup>2</sup> und hat eine Professur für Unternehmensentwicklung. Seine Tätigkeitsschwerpunkte sind Strategieentwicklung und -umsetzung, Organisationsgestaltung und Digitalisierung für mittelständische und große Chemie-/Pharmaunternehmen sowie für Standort-Betreiber und Dienstleister der Chemie- und Pharmaindustrie. Er ist promovierter Wirtschafts- und Sozialwissenschaftler und begleitet die chemisch-pharmazeutische Industrie seit über 25 Jahren in ihrer strukturellen, prozessualen und digitalen Entwicklung.

## Welche Zielgruppen bedient das Buch?

**C. Suntrop:** Das Buch ist ein Fach- und Praktiker-Buch. Es zielt auf diejenigen ab, die sich mit Digitalisierung im Chemieunternehmen strategisch oder operativ beschäftigen wollen und müssen. Das reicht von den Geschäftsführern und Vorständen der chemischen Industrie (Mittelstand und Konzerne) und den Industriedienstleistern für die Chemie über die CDO's/ Leiter für die Umsetzung der Digitalisierung hin zu Projektleitern und Projektteams digitaler Projekte in der chemischen Industrie. Auch die IT- und TK-Leiter als auch Funktions- und Bereichsverantwortlichen (Head of Production, Head of R&D, Head of Sales, etc.) finden in diesem Buch Anregungen für ihre Perspektive. Für Hochschulen und Unternehmensberater gibt es zahlreiche Impulse zur Strukturierung von Perspektiven oder Aufzeigen von Handlungsmodellen.



Digitale Chemieindustrie  
Anforderungen Chemie 4.0, Praxisbeispiele und Perspektiven  
Suntrop, Carsten  
1. Auflage, Hardcover  
69,90 €  
ISBN: 978-3-527-34971-5



Weitere Lesenswert-Bücher:  
<https://bit.ly/WAS-Lesenswert>



Das komplette Interview finden Sie unter:  
<https://bit.ly/Lesenswert-Suntrop>



# Auszeichnung für die Förderung der Bionik

**P**rof. Dr. Heike Beismann wurde die VDI-Ehrenplakette für herausragendes ehrenamtliches Engagement verliehen. Beim 10. Bionik-Kongress an der Hochschule Bremen (HSB) tauschten sich am 12. und 13. Mai 2023 mehr als 130 Teilnehmende aus Wissenschaft, Praxis und Gesellschaft in über 70 Fachvorträgen, Poster-, Filmbeiträgen und Ausstellungs-exponaten über bio-inspirierte technische Innovationen und aktuelle Potenziale der Bionik aus. Dabei ging es insbesondere um Nachhaltigkeit und Klimaneutralität.

Zudem wurden in feierlichem Rahmen in der Oberen Rathaushalle in Bremen mehrere Auszeichnungen vergeben, darunter die Ehrenplakette des VDI.

Prof. Dr. Heike Beismann (Westfälische Hochschule) erhielt diese besondere Auszeichnung in

Anerkennung ihres herausragenden ehrenamtlichen Engagements für die nationale und internationale Förderung der Bionik. Die HSB-Professorin und Kongressleiterin Antonia Kesel hob als Laudatorin hier insbesondere das langjährige intensive Engagement der Wissenschaftlerin für die Bionik im VDI und insbesondere für die geglückte Publikation der Richtlinie VDI 6220 Blatt 2 (Bionische Produktgestaltung) sowie die Internationalisierung in Kooperation mit dem DIN (ISO /TC 288 Biomimetics) heraus. Das waren und sind Meilensteine in der Bionik, so die Laudatorin.

## ● KONTAKT |

**Dr. Martin Follmann**  
Verein Deutscher Ingenieure (VDI)  
Düsseldorf, Deutschland  
tls@vdi.de  
www.vdi.de/tls



Abb. 1: Verleihung der VDI-Ehrenplakette an Prof. Dr. Heike Beismann von der Westfälischen Hochschule (Mitte): Es gratulieren Simon Jäckel (VDI, links) und Laudatorin Prof. Dr. Antonia Kesel (Studiengangsleitung Bionik & B-I-C, HSB, Präsidiumsmitglied des VDI, Vorsitzende VDI-Fachbeirat Bionik). Quelle: HSB Hochschule Bremen

## 26.-28.9.2023

Nürnberg, Germany

# POWTECH

International Processing Trade Fair for

**POWDER**  
**BULK SOLIDS**  
**FLUIDS**  
and **LIQUIDS**

Erleben Sie auf der POWTECH den Puls der Verfahrenstechnik! Nutzen Sie die Chance, die neuesten Innovationen, Lösungen und Technologien zu entdecken. Lassen Sie sich von führenden Unternehmen und Experten inspirieren, knüpfen Sie Kontakte zu den Entscheidern und Innovatoren der Branche. Erleben Sie die Energie und Dynamik der POWTECH und tauchen Sie ein in die Welt rund um Pulver, Granulat, Schüttgut und Flüssigkeiten.

Wir freuen uns auf Ihren Besuch!

Im Verbund mit

 **PARTEC**  
International Congress  
on Particle Technology

Ideelle Träger



Werden Sie Teil der  
POWTECH-Community!  
[powtech.de/besucher-werden](https://powtech.de/besucher-werden)

NÜRNBERG MESSE



© PhotosG - stock.adobe.com

## Kuriositäten

Der Alltag von Menschen mit Magersucht ist geprägt von der Angst vor Gewichtszunahme und den Maßnahmen, diese zu verhindern. Entsprechend schwierig ist es für die Betroffenen, die medizinisch dringend geratene Gewichtszunahme zu erreichen. Wissenschaftler\*innen der Abteilung für Psychosomatische Medizin und Psychotherapie am Universitätsklinikum Tübingen und des MPIs für Intelligente Systeme haben nun eine Virtual Reality-Brille entwickelt, mit dem Betroffene sich dem gefürchteten Szenario stellen können. Erste Ergebnisse deuten darauf hin, dass die wiederholte virtuelle Darstellung mit gesundem Körpergewicht Personen mit Magersucht hilft, ihre Angst vor einer Zunahme zu reduzieren.

[https://bit.ly/GIT\\_Brille](https://bit.ly/GIT_Brille)

Mit Methoden des sogenannten Geoengineering könnte das Klima theoretisch künstlich beeinflusst und abgekühlt werden. Berner Forschende haben nun untersucht, ob man mit einer künstlichen «Abdunkelung der Sonne» das Abschmelzen des westantarktischen Eisschildes verhindern könnte. Die Resultate zeigen, dass die künstliche Beeinflussung nicht ohne Dekarbonisierung auskommt und hohe Risiken mit sich bringt.

[https://bit.ly/GIT\\_Geoengineering](https://bit.ly/GIT_Geoengineering)

Rund 150 Millionen Arztbriefe werden pro Jahr in Deutschland geschrieben. Das kostet Zeit, die an anderer Stelle fehlt. Abhilfe könnte der „Arztbriefgenerator“ schaffen, der das Dokument in einem Bruchteil der Zeit erstellen kann und derzeit von Wissenschaftler\*innen des Fraunhofer IAIS entwickelt wird. Die Anwendung basiert auf einer Kombination aus Algorithmen und Künstlicher Intelligenz, die beim sogenannten Natural Language Processing (NLP) eingesetzt wird. Welch vielfältige Chancen sich darüber hinaus durch NLP für Krankenhäuser ergeben, steht im neuen Whitepaper „Natural Language Processing in der Medizin“.

[https://bit.ly/GIT\\_Arztbriefe](https://bit.ly/GIT_Arztbriefe)

## Science for Kids

Das Fraunhofer-Institut IISB ruft für das Schuljahr 2023/2024 zum 3. deutschlandweiten Schülerwettbewerb „Wer züchtet den schönsten Kristall?“ für Schülerinnen und Schüler der 5. – 13. Jahrgangsstufe auf. Mit einfachen Mitteln und ein wenig Geduld sollen schöne und große Kristalle aus einer wässrigen Lösung „gezüchtet“ werden (so nennt man die Kristallherstellung). Zeit ist bis zum 15. Dezember 2023. Danach wählt eine Jury die schönsten Kristalle aus. Die Sieger werden bei einer feierlichen Preisverleihung im Rahmen der Deutschen Kristallzüchtungstagung im März 2024 in Erlangen prämiert.

[https://bit.ly/GIT\\_Kristalle](https://bit.ly/GIT_Kristalle)

Spritzen gehören wahrlich nicht zu den beliebtesten medizinischen Erfindungen, sind aber oftmals notwendig. Gerade Kinder haben jedoch häufig Angst vor dem kleinen Pieks. Um ihnen die Angst zu nehmen, haben Student\*innen der Uniklinik Regensburg und der Ostbayerischen Technischen Hochschule den „VacciFriend“ entwickelt. Die lächelnde Raupe verdeckt die Spritze und lenkt so von der Nadel ab. Jetzt wurde der „VacciFriend“ beim „5-Euro-Business“-Wettbewerb des Hochschulstandorts Regensburg/Amberg-Weiden mit dem ersten Preis ausgezeichnet.

[https://bit.ly/GIT\\_VacciFriend](https://bit.ly/GIT_VacciFriend)

## Aktuelles zur Saison

### Deutsche Leberstiftung warnt vor Pilzvergiftungen

Die Niederschläge im Frühling und Sommer lassen Pilzfreunde schon jetzt auf eine gute Pilzsaison 2023 hoffen. Doch der Genuss selbst gesammelter Pilze kann gefährlich sein: Immer wieder landen – häufig bei unerfahrenen Pilzsammler:innen – giftige Exemplare im Körbchen, dann auf dem Teller und die Betroffenen im Krankenhaus. Schlimmstenfalls kann der Verzehr von Giftpilzen lebensgefährlich sein und beispielsweise zu einem akuten Leberversagen führen. Damit die noch bis Oktober dauernde Pilzsaison möglichst vergiftungsfrei verläuft, mahnt die Deutsche Leberstiftung zur Vorsicht beim Pilze sammeln und gibt Tipps für den Vergiftungsfall.

[https://bit.ly/GIT\\_Pilze](https://bit.ly/GIT_Pilze)



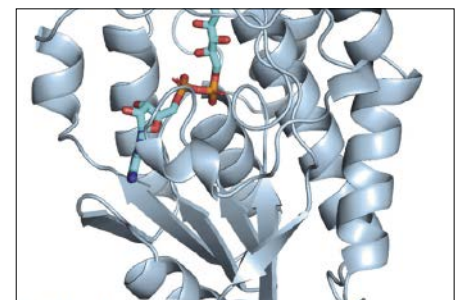
© avdvalde - stock.adobe.com

## Buch zu gewinnen!

Finden Sie das Originalbild zu diesem Bildausschnitt im Heft und schicken Sie uns den Titel des Beitrags über [git-labor@wiley.com](mailto:git-labor@wiley.com) Betreff: Lesenswert GIT0923. Mit etwas Glück gewinnen Sie ein Exemplar „Digitale Chemieindustrie“ von Carsten Suntrup Seite 16.

**Einsendeschluss: 18. Oktober 2023**

Bei mehreren Einsendungen entscheidet das Los.



### Gewinner!

Zum Gewinn aus der GIT Labor-Fachzeitschrift 05-06/2023 gratulieren wir:

**J. Diegmann aus Alzenau**

## Sikaku!

		5		2					
						4			
						3	12		
		21					5		
2									
4		30		5			8		
							4		
8						18			6
								4	
		5					3		3
14									3

www.crauswords.com

## Heimische Tiere

Hornissen: Friedliche Brummer



© Jürgen Kottman - stock.adobe.com

In der Zeit zwischen Mitte August und Mitte September erreicht das Hornissenvolk seinen Entwicklungshöhepunkt. Die NABU versichert aber, dass diese großen Wespen bei Einhaltung bestimmter Verhaltensregeln erstaunlich friedfertig seien. So greifen Hornissen niemals grundlos an, sie sind sogar scheuer als Honigbienen und ziehen es immer vor, einem Konflikt durch Flucht auszuweichen. Störungen wie heftige Bewegungen, Blockieren der Flugbahn sowie Erschütterungen am Nest müssen natürlich grundsätzlich vermieden werden. Die Hornisse zählt wegen ihrer akuten Bestandsgefährdung zu den besonders geschützten Arten. Sie darf nicht getötet, und ihr Nest darf nicht zerstört werden. Bei kritischer Lage genügt oft auch die elementare Absicherung eines Nestes, etwa durch Anbringen von Fliegendraht im Bereich von Gebäuden. Ist eine Umsiedlung von Hornissennestern unvermeidlich, sollte man sich an die örtliche NABU-Gruppe wenden.

Übrigens: Hornissengift ist nicht toxischer als Bienen- oder Wespengift.  
[https://bit.ly/GIT\\_Hornissen](https://bit.ly/GIT_Hornissen)

## Bilderrätsel

Ganz genau hinsehen, ist die Aufgabe bei diesem Rätsel. Wir haben das rechte Bild manipuliert. Finden Sie alle **acht Fehler**, die wir für Sie versteckt haben. Schicken Sie das Bild mit den markierten Fehlern an [git-labor@wiley.com](mailto:git-labor@wiley.com) (Betreff: Bilderrätsel GIT09/23). Wir verlosen unter allen richtigen Einsendungen eine kleine Überraschung. Einsendeschluss ist der 18. Oktober 2023.



© Damian Sobczyk - stock.adobe.com

# Auf dem Weg zu einer digitalen Qualitätsinfrastruktur

Eine Labor-Testplattform für die Integration von Sensoren und Messgeräten

Michael Maiwald<sup>1</sup>, Ricardo Soruco Aloisio<sup>1</sup>, Klas Meyer<sup>1</sup>, Christian Klaus<sup>1</sup>



**U**m die internationale Spitzenposition deutscher Unternehmen der Prozessindustrie auch in Zukunft sicher zu stellen, müssen die Unternehmen ihre Prozesse und Geschäftsabläufe digitalisieren und gemeinsam mit der Forschung innovative neue Methoden, Apparate, Anlagen, Sensoren und Automatisierungstechnik sowie Datenkonzepte entwickeln. All dies erfordert den Aufbau neuer Fähigkeiten, Investition in Talente, interdisziplinäre Kommunikation zwischen verschiedenen Personen und Abteilungen und eine Bereitschaft zur Veränderung.

Am Beispiel der Datenintegration aus der Sensor-Feldebene beziehungsweise Geräteebene einer Versuchs-Wasserstofftankstelle, die im Rahmen des von der BAM und anderen Partnern ins Leben gerufenen Projekts „Digitale Qualitätsinfrastruktur“ [1] betrieben wird, wurde eine Strategie abgeleitet, wie eine solche Infrastruktur – zunächst als Testplattform – in einer Laborumgebung aufgebaut sein kann. In einem zweiten Schritt lässt diese später auf ein „Produktivsystem“ übertragen und sicher in die Haus-IT integrieren. Mittlerweile befassen sich viele Arbeitsgruppen verschiedener Verbände mit der digitalen Transformation und damit auch mit der Datenintegration von Messgeräten, Sensoren und Aktoren. Die Namur Interessengemein-

schaft Automatisierungstechnik der Prozessindustrie hat beispielsweise das NOA-Konzept (Namur Open Architecture) entwickelt. [2–3] Geräte- und Softwarehersteller bieten ein enorm vielseitiges Lösungsangebot an. Die Digitalisierungslandschaft ist in jedem Haus und für jeden Prozess anders. Man kann also auf keine Musterlösungen zurückgreifen. Der vorliegende Artikel richtet sich an diejenigen, die eine Test-Umgebung einrichten und einen Überblick über die Vielzahl an Möglichkeiten aus einer praktischen und anwendungsorientierten Perspektive erhalten möchten.

**Hintergrund – Das Projekt QI-Digital mit dem Fallbeispiel: Verlässliche Wasserstofftankstelle**

Vertrauen in Qualität und Sicherheit, das auch in der digitalen Transformation gelten soll. In einer zunehmend digitalisierten Welt muss auch die Qualitätssicherung von Produkten, Prozessen und Dienstleistungen neu gedacht werden. Das Ziel ist es, die bewährte Qualitätsinfrastruktur (QI) noch besser zu machen. QI-Digital ist eine Initiative der zentralen Akteure der deutschen Qualitätsinfrastruktur (QI) – DIN, DKE, DAkkS, PTB sowie BAM. Das Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK) unterstützt QI-Digital als wesentlichen Beitrag für den Erfolg von

innovativen Technologien, Produkten und Prozessen zur Stärkung des Wirtschaftsstandorts Deutschland. Die praxisnahen Testumgebungen sind als offene Kooperationsplattformen konzipiert und bieten die notwendige physische Infrastruktur für die Forschungs- und Entwicklungsarbeiten an diesen Fallbeispielen: Verlässliche Wasserstofftankstellen; Künstliche Intelligenz in der Medizin; Additive Fertigung für den Mittelstand.

Die digitale Qualitätsinfrastruktur meint hierbei die Bereitstellung aller notwendigen Unterlagen für eine digital basierte Optimierung der Anlagenverfügbarkeit über den gesamten Lebenszyklus einer Anlage – hier konkret die Versuchsplattform Wasserstofftankstelle, eine reale Tankstelle, jedoch ausschließlich für Versuchszwecke.

Herkömmliche Inspektions- und Wartungsverfahren sind sehr aufwändig, erfolgen oft nach wiederkehrenden Prüfungen und führen zu längeren Schließungen der Tankstelle. Im Projekt wird der Fokus auf die Datenintegration aus der Sensor-Feldebene beziehungsweise Geräteebene und die Verarbeitung der Informationen gelegt. Generell werden in Anlagen der Prozessindustrie werden die Daten heutzutage noch nicht umfassend genutzt, könnten aber zukünftig zusammen mit Modellen analysiert werden, um unbekannte Zusammenhänge aufzuzeigen. Hier kommen physik-basierte, datengetriebene sowie hybride Modelle zum Einsatz.

**Zielstellung: Sichere Datenübertragung bestehender und zusätzlicher Sensoren und Geräte**

Die einzelnen Module der Wasserstofftankstelle, wie Vorratsbehälter, Kompressoren, Kälteanlagen, Dispenser usw. sind heute getrennt voneinander projektiert und konventionell automatisiert. Typischerweise sind bis zu ca. 50–100 Sensoren und Aktoren klassisch instrumentiert, um die Anlage automatisiert zu betreiben. Im Rahmen von QI-Digital werden möglichst viele Informationen und Daten aus der vorgegebenen Automatisierung der Versuchsplattform benötigt. Eine Teilaufgabe ist daher die Implementierung der Namur Open Architecture (NOA), wo ein sicheres und rückwirkungsfreies Auslesen

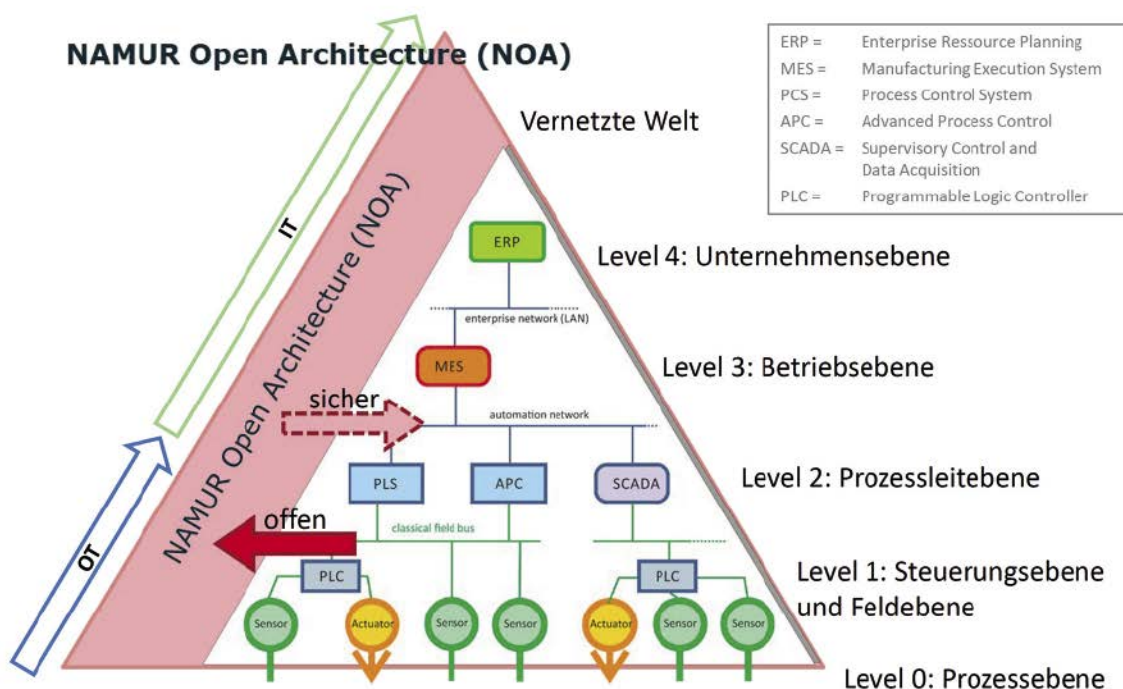


Abb. 1: Klassische Automatisierungspyramide (weiß) und NOA-Konzept (rosa). In diesem zusätzlichen Netzwerk gibt es eine Verschmelzung von OT- und IT-Komponenten [2–3].

von Daten gedanklich durch eine „Datendiode“ erfolgt. Im Rahmen des Konzepts lassen sich so typische Anwendungsfälle der Datenintegration bestehender Anlagen („Brownfield“) oder Laborumgebungen abbilden.

Neben den bestehenden Sensordaten ist die Integration vieler weiterer, zum Teil selbst entwickelter, Sensoren und Messgeräte notwendig. Die Aufgabenstellung erweitert sich um die Bereitstellung einer Automatisierungsplattform für diese zusätzlichen Sensoren und Geräte nach dem NOA-Konzept (sogenannte M+O-Sensoren). Ohne auf weitere Details einzugehen sei kurz aufgezählt, welche zusätzlichen Teilprojekte in QI-Digital vorgesehen sind: (a) Zusätzliche Sensoren, wie Druck- und Temperaturmessstellen, an denen mit digitalen Kalibrierscheinen experimentiert werden soll [4], erweitert um Kontextinformationen, wie zum Beispiel Wetterdaten einer benachbarten Wetterstation des Deutschen Wetterdienstes; (b) Wasserstoff-Sensornetzwerke zur Erforschung von „virtuellen“ Sensoren auf Basis physikalischer Modelle; (c) analytische Messgeräte zur Messung der Wasserstoffreinheit und (d) zerstörungsfreie Messmethoden und Wasserstoff-Druckbehälter, wie akustische Emission, geführte Ultraschallwellen und faseroptische Sensorik, die eine Lebensdauerprognose ermöglichen sollen – ebenfalls auf Basis physikalischer Modelle.

Damit aber nicht genug. Für die Vorbehandlung von Daten(strömen) muss eine lokale Serverumgebung als Bindeglied zur Hardware konzipiert werden. Dieses kann im Sensor oder Messgerät selbst stattfinden

(Embedded Computing) oder in prozessnahen Workstations oder Geräterechnern (Edge-Computing). Da zu einer digitalen Beschreibung der physischen Komponenten der Wasserstofftankstelle auch (dynamische) Simulations-Modelle eingesetzt werden, werden zusätzlich Workstations, Datenserver und sogenannter Container benötigt. Im Zusammenspiel ermöglichen die Komponenten die Abbildung aller für eine (QI-Digital-) Fragestellung benötigten Informationen – als sogenannte Verwaltungsschale (Asset Administration Shell [5]). Die Verwaltungsschale wird oft als „Digitaler Zwilling“ bezeichnet. Hier braucht es eine sorgfältige Abgrenzung eines Testsystems von dem parallel betriebenen Produktivsystem an der Tankstelle.

Die hier skizzierten Anforderungen an die Daten-Architektur der Testplattform Wasserstofftankstelle können sehr gut mit denen einer typischen Anlage der Prozessindustrie oder mit der Gerätelandschaft in einem Labor verglichen werden. Zusammenfassend werden solche Aufgabenstellungen mindestens durch folgende Faktoren erschwert: [6]

- Die Akteure gehören meist unterschiedlichen Disziplinen und Unternehmensbereichen an und haben unterschiedliche Vorschriften, „Kulturen“ und eine unterschiedliche Nomenklatur/Sprache.
- Die Akteure in Verantwortung der Teilprojekte haben sehr unterschiedliche Ansprüche und Dokumentationsbedarf.
- Es wird nicht zwischen Testsystem und Produktivsystem unterschieden. Testsysteme werden teils produktiv genutzt. Produktivsysteme werden nicht hinreichend aktualisiert und daraufhin validiert.

- Es besteht eine konservative Haltung, da die Aufgabenstellungen nur vorankommen, wenn die Akteure sich aufeinander zubewegen und vertrauen.
- Generell verzeihen konventionelle, meist analoge Arbeitsabläufe logische Unstimmigkeiten. Dieses macht die Digitalisierung sehr schwierig.

#### Die OT- und IT-Landschaft

Um die Herausforderungen eines repräsentativen Testsystems aus Sicht der Automatisierungstechnik besser zu verstehen, werden zwei Begriffe kurz vorgestellt: Operational Technology (OT) und Information Technology (IT). Die Begriffe sind vor allem in einer industriellen Konstellation sehr präsent, da sich die Schwerpunkte, die Fachkräfte, die Programmiersprache, die Schutzziele sowie die Automatisierungsanbieterhersteller in diesen zwei Bereichen stark unterscheiden. [6]

Der hardwarenahen OT werden die produktionsrelevanten Systeme wie Sensorik, Aktorik, speicherprogrammierbare Steuerungen (SPS) und weitere Prozessleitsysteme zugeschrieben. Es geht vor allem um die Betriebssicherheit (den Schutz von Menschen und Umwelt), Verfügbarkeit (z. B. einen 24/7-Betrieb, eine langlebige Lebensdauer und ggf. ein redundantes System), Echtzeitanforderungen und Zuverlässigkeit.

Die IT hingegen ist ein Oberbegriff (sowohl Software als auch Hardware) für Systeme zur Steuerung, Verarbeitung, Speicherung und Sicherung von Daten. Innerhalb der Automatisierungspyramide (siehe

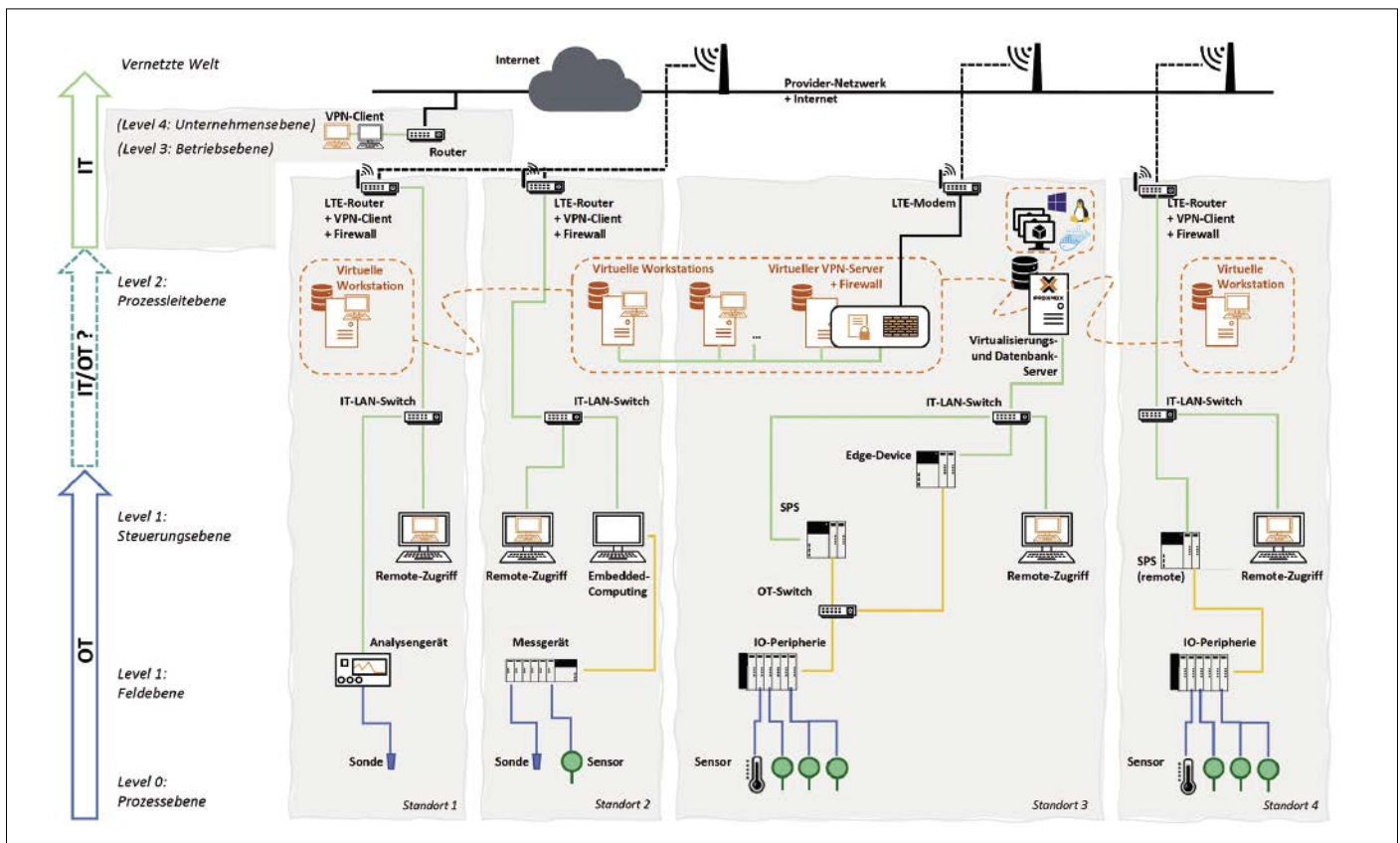


Abb. 2: Netzwerktopologie über die Testumgebung, in der sich die Teilnehmer in verschiedenen Standorten befinden. Besonderheit ist der Einsatz der Open-Source Virtualisierungsplattform Proxmox VE zur Datenaggregation und zur erweiterten Datenverarbeitung, Prozessleit- oder Steuerungsaufgaben.

Abb. 1) ist die IT-Domäne in der Betriebs- und Unternehmensführung bei den letzten zwei Ebenen repräsentiert. In der Testplattform schließt die IT die Aufgaben ein, die von der OT nicht übernommen werden.

Stellt man die IT der OT gegenüber, so liegt der Fokus eher auf der Steuerung von Daten als von der Sensorik/Aktorik. Werden die Prioritäten ihrer Schutzziele verglichen, so ergibt sich folgende Gegenüberstellung von Höchststen zum Niedrigsten:

OT: Betriebssicherheit (Safety) -> Verfügbarkeit -> Integrität -> Vertraulichkeit  
 IT: Vertraulichkeit -> Integrität -> Verfügbarkeit

Auf der anderen Seite verdeutlicht die Automatisierungspyramide, wie der Datenaustausch zwischen den Aufgabenbereichen verkettet ist, zum Beispiel: Bestimmte Sensorinformationen können nur über die dazwischen liegenden Ebenen und über unterschiedliche Kommunikationsprotokolle den oberen Arbeitsbereich erreichen. Das ist vor allem den OT-Schutzzielen – aber auch teils den proprietären und den nicht einheitlichen Kommunikationsprotokollen geschuldet. Wenn man die technischen Anlagen der Prozessindustrie unter die Lupe nimmt, findet man eher konservative Konzepte. Die Fortschritte Richtung offener Datenintegration sind schleppend, da bestehende Anlagen (sog. Brownfield-

Anlagen) der Prozessindustrie einen langen Lebenszyklus haben. Umstellungen erfordern hohe Investitionskosten.

Den einheitlichen und durchgängigen Datenaustausch nach heutigen Anforderungen und technischen Möglichkeiten bezeichnet man als IT/OT-Konvergenz. Ein repräsentatives Beispiel dafür ist das (Industrial)-Internet-of-Things, kurz (I)IoT.

### Die Konnektivität

Im Hinblick auf die Konzeption der Testsysteminfrastruktur, die die Integration von Sensoren aus der Feldebene, die Datenverarbeitung, und den Datenzugang umfassen soll, spielt die Konnektivität beziehungsweise der Datenaustausch zwischen den Arbeitsbereichen eine wesentliche Rolle. Je nach OT-Hersteller können sich die Kommunikationsschnittstellen unterscheiden und letztendlich die Kompatibilität von Geräten einschränken. Sehr oft ist man auf einen bestimmten SPS-Hersteller angewiesen, wenn die Auswahl über Sensorik und Aktorik getroffen wurde, oder eine bestehende OT-Technik im Einsatz und dem Anwender vorgegeben ist. Nichtsdestotrotz haben sich die OT-Hersteller in den letzten Jahren gegenüber offenen Kommunikationsstandards entgegenkommend gezeigt und teil-

weise erkannt, dass ein Absatzmarktpotential dadurch entstehen kann. Klares Beispiel dafür ist die Entwicklung von OPC-UA [7], ein offenes Kommunikationsprotokoll, das bereits zur Verbindung von Automatisierungskomponenten in den höheren Hierarchien eingesetzt wird.

Die Verbindung über mehrere Standorte und der Fernzugriff auf diese Komponenten wird im dargestellten Testsystem über einen SSL-VPN-Tunnel realisiert. Der Datenaustausch über den Telekommunikations-Provider und letztlich auch das Internet, wird damit bis zum Ende verschlüsselt. Diesbezüglich werden der SSL-VPN-Server und die Firewall als Dienste in einer virtuellen Umgebung auf einem Server eingebettet [8], währenddessen sich die Teilnehmer aus der Ferne, entweder eine SPS oder ein Rechner (z. B. Windows-Rechner), als SSL-VPN-Client verbinden können. Im Falle der SPS sitzt der SSL-VPN-Client auf einem Mobilfunkrouter, der die IT-Aufgaben über den Fernzugriff übernimmt. Die SPS aus der Ferne ist demzufolge integriert und gleichberechtigt in dem lokalen Netzwerk.

Abbildung 2 veranschaulicht die Netzwerktopologie der Testumgebung mit den entsprechenden Netzwerkkomponenten.

- Am Standort 1 wird ein typisches Analysengerät betrieben (hier Laserspektrometer). Idealerweise wird das Gerät per

TCP-IP direkt an das lokale OT-IT-Netzwerk angebunden. Die Bedienungssoftware ist auf der virtuellen Workstation am Standort 3 abgebildet, auf die über einen VPN-Client zugegriffen werden kann.

- Am Standort 2 ist beispielsweise ein Messgerät abgebildet, das eine spezielle Schnittstelle zu einer Auswerteeinheit benötigt (hier z.B. Faseroptische Sensorik mit Netzwerkanalysator und Embedded Computing zur Behandlung der Datenströme).
- Standort 3 stellt eine typische OT-Landschaft dar, in der Sensoren (und Aktoren) an eine Speicherprogrammierbare Steuerung (SPS) angehängt sind. Neu sind Edge-Devices, die an der Schnittstelle zwischen OT und IT stehen und Funktionen aus beiden Welten übernehmen, wie zum Beispiel die Anbindung von OT-Komponenten und die Übernahme von Edge-Computing (erweiterte Datenverarbeitung) und Prozessleit- oder Steuerungsaufgaben. Am Standort 3 ist auch der zentrale Virtualisierungs- und Datenbank-Server stationiert. Im vorliegenden Fall wird die Open-Source Virtualisierungsplattform Proxmox VE (Virtual Environment) [9] eingesetzt, die auf einem Debian-Linux Betriebssystem basiert. Dieser Server aggregiert alle auflaufenden Datenströme von allen Standorten und stellt diese für einen festgelegten Zeitraum lokal zur Verfügung („Historian“). Eine der virtuellen Workstations übernimmt die Aufgabe eines VPN-Servers mit Firewall, der einen sicheren „Tunnel“ zu den anderen Standorten herstellt.
- Am Standort 4 wird eine weitere Testanlage mit OT-Komponenten betrieben.

## Fazit

Das hier beispielhaft vorgestellte System ist eine Basis für die digitalen Transformation einer Testplattform Wasserstofftank-

stelle, die als typische Anlage der Prozessindustrie oder ein automatisiertes Laboratorium betrachtet werden kann. Ziel ist die Erfassung von Daten und Kontextinformationen und ihre Aggregation in höhere Steuerungsebenen. Dieses Testsystem ist als Inselnetzwerk definiert. Es eignet sich dazu, klassische Bereiche der Operational Technology durch bewährte Lösungen der Informationstechnologie zu ersetzen. Die zunehmend zu findenden offenen Standards für Hardware und Konnektivität (wie z.B. das Protokoll OPC-UA) erleichtern diesen Prozess. Beispielsweise wird hier die Virtualisierungsplattform Proxmox VE integriert, die besonders für Laborumgebungen interessant ist. Auf Basis der gewonnenen Daten und Kontextinformationen werden digitale Modelle erarbeitet und in der sogenannten Verwaltungsschale hinterlegt. Aus den Datenströmen der Anlage oder eines Labors und diesen Modellen lassen sich schließlich Echtzeitinformationen aus den Prozessen ableiten, wie etwa Informationen zum Betriebszustand, oder es lassen sich Zertifikate erstellen.

Ein solches Testsystem und die Experimentierphase sind wichtige Bestandteile zum Kompetenzerwerb und zur Ableitung der notwendigen Infrastruktur. In einem analog aufgebauten Produktivsystem können die abgeleiteten Modelle, Kalibrierungen oder Parametrierungen dann sicher eingesetzt werden.

### Zugehörigkeiten

<sup>1</sup>Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berlin, Deutschland

### ● KONTAKT |

Michael Maiwald  
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)  
Berlin, Deutschland  
Michael.Maiwald@bam.de

[1]

Literatur:  
<https://bit.ly/Maiwald-QI>



## Präzision und Leistung in neuem Glanz

Das Q-TOF-Massenspektrometer LCMS-9050 verbindet die schnellsten und empfindlichsten Quadrupol-Technologien mit einer einzigartigen TOF-Architektur. Stabile Massengenauigkeit und höchste Geschwindigkeitsparameter sorgen für ein Höchstmaß an Flexibilität.

- **Bessere Ergebnisse bei Identifizierung und Strukturaufklärung**
- **Weniger Aufwand für das Gerätemanagement**
- **Erhöhte Verfügbarkeit und verbesserter Durchsatz**
- **Mehr Zeit für die eigentlichen Daten**





© BAM

# Datenmanagement im Nanomaterial-Labor

Einsatz von ELN-Software zur digitalen Transformation des Laboralltags

Harald Bresch<sup>1</sup>, Rukeia El-Athman<sup>1</sup>, Thilo Muth<sup>1</sup>, Jörg Rädler<sup>1</sup>, Bastian Rühle<sup>1</sup>

**A**ngesichts der zunehmenden Digitalisierung und dem Einsatz datenintensiver Methodiken in der Wissenschaft stehen Forschende vor der Herausforderung, stetig wachsende Datenmengen nachvollziehbar zu dokumentieren, langfristig zu speichern und für Dritte nachnutzbar zu machen. Um diesen Anforderungen gerecht zu werden, bietet sich die Nutzung von Software-Lösungen an, welche Forschungsdatenmanagement mit der digitalen Dokumentation von Laborinventar und Experimenten in elektronischen Laborbüchern (engl. electronic lab notebooks (ELN)) verknüpfen.

## Motivation für das Pilotprojekt „BAM Data Store“

An der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) in Berlin wird täglich eine Vielzahl verschiedenartiger Messungen durchgeführt und dadurch ein hohes Volumen an wissenschaftlichen Datensätzen

erzeugt. Um die Anforderungen der BAM an eine zentrale Forschungsdateninfrastruktur zu definieren und deren Umsetzung in einer geeigneten Software zu testen, wurde Ende 2020 das Projekt „BAM Data Store“ ins Leben gerufen. Fünf Forschungseinheiten aus unterschiedlichen Bereichen der Materialforschung fungierten als Pilotgruppen, die im Rahmen einer mehrmonatigen Testphase von einem internen Team bei der Implementierung einer individuell auf ihre Bedürfnisse zugeschnittenen Data Store-Instanz unterstützt wurden. Hierzu zählte die Entwicklung eigener Metadatenschemata zur Dokumentation von Laborinventar und experimentellen Schritten, aber auch die Bereitstellung geeigneter IT-Schnittstellen.

## openBIS: Eine Open-Source-Software zur Verknüpfung von Datenmanagement und ELN

Als zugrundeliegende Software für den BAM Data Store dient die Open-Source-Software

openBIS [1,2], welche seit 2007 von der ETH Zürich entwickelt wird. openBIS war ursprünglich als Framework zur Unterstützung von akademischem Datenmanagement im lebenswissenschaftlichen Bereich gedacht, wird aber zunehmend in anderen Forschungsdomänen eingesetzt, unter anderem in der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik [3]. Die Software bietet eine browserbasierte Benutzeroberfläche für die digitale Darstellung von Laborinventar und ein elektronisches Laborbuch für die flexible Dokumentation von Versuchsabläufen. Dateien beliebigen Formats können entweder über die Benutzeroberfläche oder über Programmierschnittstellen importiert und mit Inventarelementen und Versuchsschritten verknüpft werden. Darüber hinaus bietet openBIS verschiedene Schnittstellen für den Datentransfer, zum Beispiel für den Export von (Meta-) Daten in das öffentliche Datenrepositorium Zenodo [4] sowie für die interaktive Datenanalyse mittels Jupyter Notebooks [5].

openBIS ist eine klassische Java-Anwendung für Linux-Server, als Datenbank kommt



PostgreSQL zum Einsatz. Um größtmögliche Flexibilität und Konfigurierbarkeit zu ermöglichen, wurde jeder Pilotgruppe ein eigenständiger, zentral administrierter openBIS-Server zur Verfügung gestellt. Alle Datensätze (Dateien und Ordner) werden direkt im Dateisystem des Servers gespeichert, was gegebenenfalls viel Platz erfordert; die Datenmodelle, Metadaten, Beziehungen und Berechtigungen hingegen werden durch die Datenbank verwaltet. Ein speziell angepasster und eng mit openBIS gekoppelter JupyterHub auf jedem Server diente dem Test der Datenanalyse. Zentrale Fileshares und individuelle Import-Skripte (in openBIS „Dropbox“ genannt) wurden zum automatisierten Import und ersten Analyse von Daten direkt aus den verschiedenen Laborgeräten genutzt.

#### Pilotgruppe „nanoPlattform“

Die „nanoPlattform“ ist ein BAM-internes Projekt mit dem Ziel, Referenzmaterialien, Referenzdaten, und Referenz-Standardarbeitsanweisungen im Bereich der Nanomaterialien zu entwickeln und zur Verfügung zu stellen. Nanomaterialien unterscheiden sich von üblichen Chemikalien sowie von der Bulk-Form eines Materials durch weitere relevante Parameter, darunter die spezifische Oberfläche, das Verstaubungsverhalten, das Agglomerationsverhalten, die Hydrophobizität und der Partikeldurchmesser. Die OECD-Prüfrichtlinie Nr. 125 gibt unter anderem vor, dass für die Bestimmung des Partikeldurchmessers von Nanomaterialien mehrere verschiedene Methoden eingesetzt werden sollen. Diese Vorgabe erfordert ein einheitliches und im Optimalfall vernetztes Datenmanagement für die eingesetzten Methoden. Dokumentation und Rückverfolgbarkeit der Messungen sind dabei zentrale Anforderungen.

An dem Projekt „nanoPlattform“ sind mehr als 30 Forschende und technisches Personal

unterschiedlichster Fachdisziplinen aus 10 verschiedenen Fachbereichen der BAM beteiligt, die an unterschiedlichen Standorten arbeiten. Die umfangreichen Anforderungen an die Arbeit mit Nanomaterialien, die dazu nötige verteilte Infrastruktur und Interdisziplinarität und die Fokussierung auf Referenzmaterialien und Referenzdaten machten das Projekt zu einem idealen Anwendungsfall für die Pilotierung des BAM Data Store.

#### Von der Synthese/Prozessierung und Charakterisierung...

Die digitale Erfassung eines Nanomaterials beginnt mit dessen Synthese oder Prozessierung. Alle Einzelschritte des experimentellen Prozesses werden im ELN festgehalten, sequenziell miteinander verknüpft und mit standardisierten Kontextinformationen in Form von nutzerdefinierten Metadatenfeldern sowie Freitext beschrieben. Die derart dokumentierten experimentellen Schritte werden mit den verwendeten Chemikalien und Instrumenten aus dem digitalen Inventar verlinkt, wodurch eine genaue Zuordnung aller verwendeten Komponenten gewährleistet ist. Bei unerwarteten Abweichungen des synthetisierten Nanomaterials oder der Messergebnisse bleiben mögliche Fehlerquellen oder Gründe für die Abweichungen stets nachvollziehbar. So ließe sich beispielsweise rekonstruieren, ob eine neue Charge einer Chemikalie oder eine Chemikalie mit anderem Reinheitsgrad in der Synthese verwendet wurde, oder ob ein Gerät ab einem bestimmten Datum systematisch Abweichungen im Vergleich zu dessen früherer Leistung zeigte. Zudem werden die Nanomaterialien und verwendeten Reagenzien mit Barcodes versehen, um die spätere Suche nach Proben im Data Store zu erleichtern.

Im nächsten Schritt erfolgt die Materialcharakterisierung mit unterschiedlichen Methoden und Messverfahren. Auch

hier werden alle verwendeten Chemikalien und Komponenten sowie Messgeräte digital erfasst. Die Messdaten werden anschließend unter Nutzung der Dropbox in den Data Store hochgeladen und automatisch mit dem charakterisierten Material und dem experimentellen Schritt verlinkt. Gleichzeitig werden im Rahmen des Uploads die relevanten Metadaten aus den Messdaten mit Hilfe selbst entwickelter Parser-Skripte extrahiert und in die eigens dafür angelegten Metadatenfelder eingetragen. In einigen Fällen findet gleichzeitig eine automatische Datenverarbeitung und -analyse statt, deren Ergebnisse gemeinsam mit den Rohdaten im Data Store abgelegt werden. Die Forschenden können hierdurch einen schnellen Überblick über die relevantesten Ergebnisse des Charakterisierungsschrittes gewinnen sowie gezielt nach bestimmten Größen oder Parametern suchen.

#### ...zur Analyse und Veröffentlichung

Komplexere Auswerterroutinen und Datenanalysen werden teilweise offline mit spezialisierter Software vorgenommen, woraufhin die Ergebnisse und prozessierten Daten manuell oder automatisch im Data Store abgelegt werden. Ein großer Synergie-Effekt entsteht durch die Möglichkeit, die gespeicherten Daten über eine Python-Schnittstelle direkt in Jupyter Notebooks zu laden und dort zu bearbeiten. Diese Notebooks werden ebenfalls im Data Store gespeichert und sind mit den entsprechenden experimentellen Schritten verlinkt, wodurch die zur Datenanalyse verwendeten Algorithmen für alle Projektmitarbeitenden direkt einsehbar sind. Vorlage-Skripte für die Datenanalyse in Python orientieren sich dabei an Standardarbeitsanweisungen und bieten für jede verwendete Methode

verkauf@lovibond.com • www.lovibond.com



## Thermostatschränke



- Kontinuierliche Temperierung bei unterschiedlichen Anwendungen in Industrie & Forschung
- Temperaturbereich 2 °C bis 40 °C, stufenlos regelbar in Schritten von 0,1 °C
- Niedriger Energieverbrauch
- Beleuchtetes LED-Display mit Ist-/Sollwertanzeige
- Optimiert für Bestimmungen von BSB bei 20 °C
- Innenliegende Steckdosen
- 5 Modelle in 4 Größen
- Standard- oder Glastür

QUALITY Made in GERMANY

**Lovibond®** Water Testing

www.lovibond.com

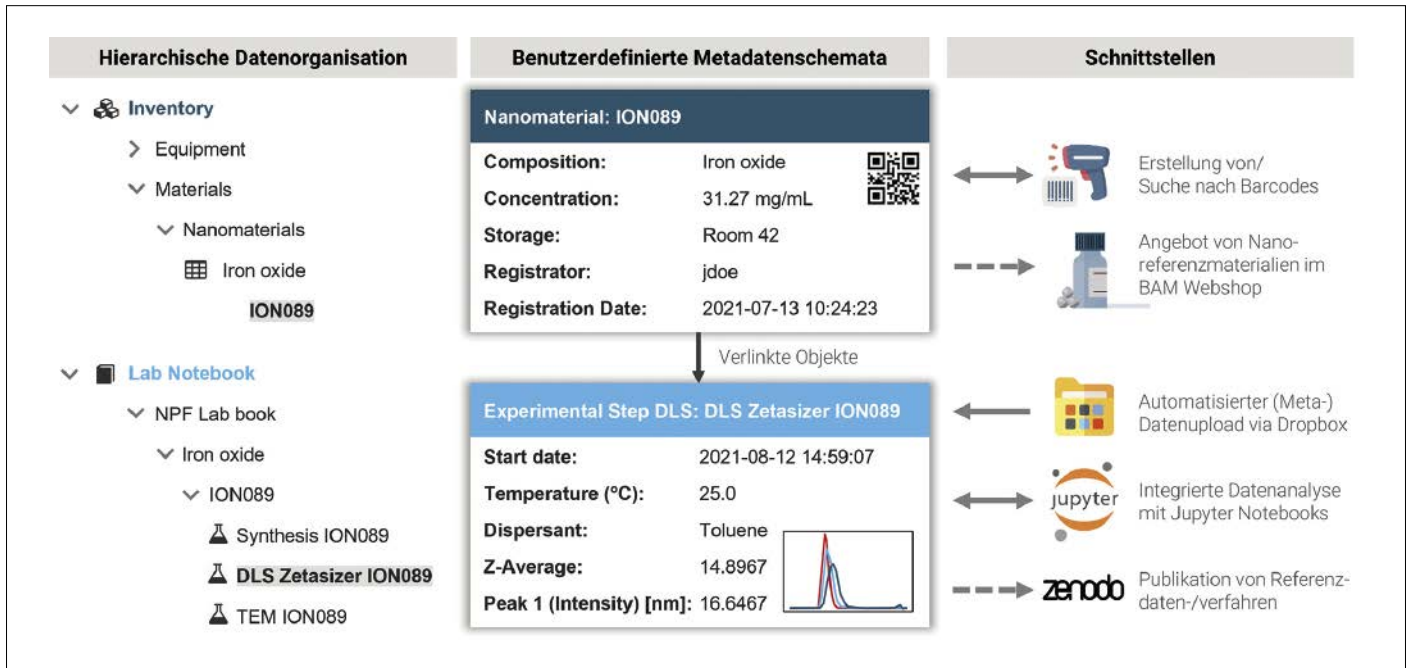


Abb. 1: Implementierung der ELN-Software openBIS für die „nanoPlattform“ der BAM: Instrumente und Nanomaterialien (z.B. Eisenoxid-Nanopartikel) werden im digitalen Inventar des Data Store mit Metadaten beschrieben und mit Barcodes gekennzeichnet. Spezifische experimentelle Schritte (z.B. die Bestimmung des hydrodynamischen Durchmessers mittels dynamischer Lichtstreuung) werden im ELN des Data Store dokumentiert und mit dem untersuchten Nanomaterial sowie dem genutzten Instrument verlinkt. Dateien, welche Roh- oder prozessierte Daten enthalten, werden verknüpft mit experimentellen Schritten gespeichert. Verschiedene Schnittstellen ermöglichen u.a. einen automatisierten Upload von (Meta-)Daten sowie eine integrierte Datenanalyse mit Jupyter Notebooks.

viel Flexibilität bei der Auswertung, garantieren aber auch ein Mindestmaß an Einheitlichkeit, Fehlervermeidung und Unsicherheitsbetrachtung. Der entscheidende Vorteil dieses Verfahrens ist die ausführliche Dokumentation und Nachvollziehbarkeit jedes Auswerteschrittes und die damit einhergehende sehr gute Reproduzierbarkeit.

Nach sorgfältiger Prüfung werden die synthetisierten und mit mehreren Methoden charakterisierten Referenzmaterialien schließlich im BAM-Webshop angeboten [6]. Die Daten und Auswerteschritte bleiben entsprechend den Vorgaben guter wissenschaftlicher Praxis dauerhaft gespeichert und können somit auch von neuen Mitarbeitenden gefunden und nachvollzogen werden. Referenzdaten und -protokolle können zudem exportiert und auf öffentlichen Servern wie beispielsweise dem Forschungsdatenrepositorium Zenodo publiziert werden.

Insgesamt wurden im Rahmen des Projekts >150 Chemikalien und >90 Instrumente digital inventarisiert, >400 Nanomaterialien synthetisiert oder prozessiert und >800 experimentelle Schritte registriert. Diese Zahlen unterstreichen den Umfang und die Bedeutung dieses Projekts, das als Prototyp für die Integration komplexer Datenanalysen in die Forschungsumgebung an der BAM dient. Abbildung 1 zeigt exemplarisch die Dokumentation der Charakterisierung von Eisenoxid-Nanopartikeln im ELN.

### Ausblick: Institutsweite Einführung von openBIS

Wie das Beispiel der „nanoPlattform“ zeigt, sind die ersten Schritte zur Digitalisierung des Laboralltags gemacht, aber bis analoge Laborbücher an der BAM endgültig der Vergangenheit angehören, ist noch ein weiter Weg zu beschreiten. openBIS ist zwar ein mächtiges Werkzeug für digitales Forschungsdatenmanagement, setzt aber gerade in der Einführungsphase einen hohen Arbeitsaufwand bei der Entwicklung individueller Metadaten-Schemata und ein Überdenken gewohnter Prozesse voraus. Zudem gilt es eine Balance zwischen individueller Anpassung und Standardisierung zu finden, um trotz unterschiedlicher Arbeitsabläufe eine Akzeptanz der Software-Lösung sowie eine Interoperabilität und Nachvollziehbarkeit von Forschungsergebnissen zu gewährleisten.

Insgesamt stellt der Übergang zur digitalen Forschungslandschaft eine große Herausforderung dar, die sowohl technische als auch kulturelle Aspekte im Laboralltag berührt. Die „nanoPlattform“ der BAM veranschaulicht diesen Übergang, während die geplante institutsweite Einführung von openBIS an der BAM eine vielversprechende Zukunft für die effiziente, kollaborative und transparente Forschungspraxis im digitalen Zeitalter aufzeigt, in dem der Data Store allen Forschenden der Einrichtung als zentrale Infrastruk-

tur für das Management und die Speicherung von Forschungsdaten zur Verfügung steht.

### Zugehörigkeit

<sup>1</sup>Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berlin, Deutschland

### ● KONTAKT |

#### Dr. rer. nat. Rukeia El-Athman

Referat eScience

Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)

Berlin, Deutschland

rukeia.el-athman@bam.de

#### Dr. rer. nat. Bastian Rühle

Projektgruppe „Self-Driving Lab für Advanced Materials“

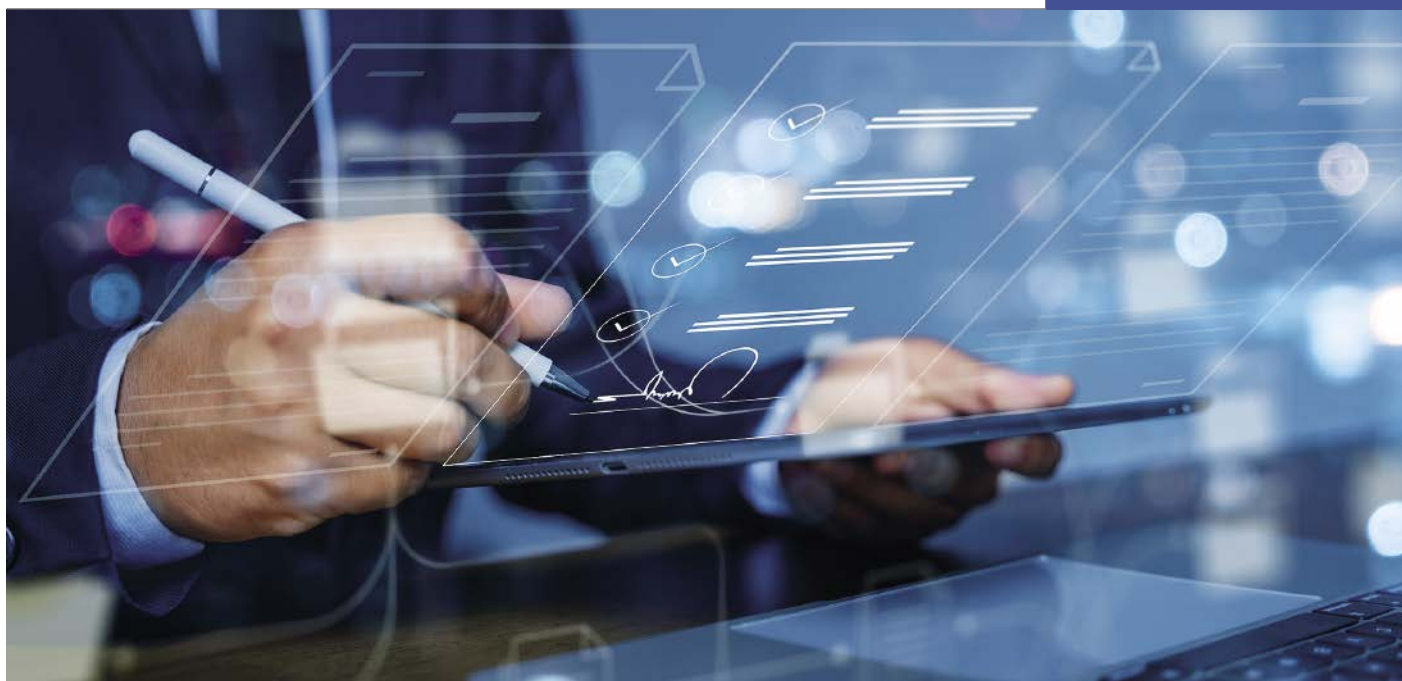
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)

Berlin, Deutschland

bastian.ruehle@bam.de

[1]

Literatur:  
<https://bit.ly/GIT-El-Athman>



# Elektronische Signatur – Fluch oder Segen?

## Revolution im ISO-/GxP-Umfeld

Karl Kleine<sup>1,\*</sup> und Cornelia Hunke<sup>2,\*</sup>

**E**Signaturen sind ein Schlüssel der digitalen Transformation. Die Digitalisierung hat längst in regulierten Branchen wie Pharma, Medizintechnik und Energie Einzug gehalten. Dennoch wird die wegweisende Innovation der elektronischen Signatur in Deutschland in diesen Bereichen noch immer nur zögerlich eingesetzt. In diesem Artikel werden die Gründe dazu beleuchtet und die Einführung, Implementierung und langfristige Überprüfbarkeit unter Berücksichtigung von GxP-Regularien und ISO-Normen erläutert. eSignaturen sind die effiziente Alternative zu herkömmlichen papierbasierten Unterschriften. Sie sind in einer zunehmend digitalen Welt unverzichtbar. Im Folgenden werden wertvolle Tipps gegeben, um Bedenken und Herausforderungen zu minimieren und einen erfolgreichen Umstieg auf elektronische Signaturen zu ermöglichen. Die eSignatur kann Effizienz und Compliance optimal verbinden und unterstützt die Unternehmen beim erforderlichen Wandel zum Digitalen.

### Die Dinosaurier der Unterschriftenwelt

Die Zeit der klassischen papierbasierten Unterschriften (engl. wet ink signatures) ist vorbei. Es ist Zeit, aufzubrechen und die moderne, effiziente und umweltfreundliche Lösung der eSignatur zu erschließen. Im Labor beispielsweise werden elektronische

Systeme zur Datenerfassung, -bearbeitung und zur Berichterstellung routinemäßig eingesetzt, wie in Labor-Informationen-Management-Systemen, LIMS. Ein Anachronismus wäre, in diesen Systemen noch eine „wet ink signature“ zur Autorisierung von Eingaben oder Berichten einzusetzen. Zur Effizienzsteigerung von ausgewählten Prozessen in elektronischen Systemen sind eSignaturen ein „must have“.

### Einsatzzwecke

Eine Anforderung im regulierten Umfeld ist zum Beispiel die Bestätigung der Dateneingabe durch eine „Unterschrift“. Auch Bestätigungen einer Freigabe für Experimentergebnisse, Freigaben von Berichten für externe Kunden, die zur Einreichung bei Behörden als Teil eines Zulassungsdossiers verwendet werden, gehören dazu. Je nach Bedeutung des Nachweises im Labor werden unterschiedliche Qualitäten einer Unterschrift benötigt. Dies wird in den Regularien definiert. Oftmals ist es schwierig die regulatorischen Forderungen in Gesetzen oder anderen Regelwerken zu identifizieren, welche Qualität eine Freigabe oder Unterschrift haben muss. 2010 hat die APV (Arbeitsgemeinschaft für Pharmazeutische Verfahrenstechnik) ein grundlegend noch gültiges Erläuterungsdokument veröffentlicht [1]. Die „Sprachregelung“ in Gesetzen (in Deutschland) lautet hierzu „in Schriftform“

beziehungsweise „schriftlich genehmigt“, „unterzeichnen“ [5] und in diesen Fällen wird eine vollwertige manuelle Unterschrift benötigt oder eben die elektronische Variante eine sogenannte „qualifizierte elektronische Signatur“. Diese ist durch die europäische eIDAS-Verordnung [2] definiert und für die EU verbindlich. Konkret werden Anforderungen zur „fortgeschrittenen“ (FES) und „qualifizierten“ elektronische Signatur (QES) definiert. Beispiele für eine QES-Forderung sind der Akkreditierungsantrag bei der Deutschen Akkreditierungsstelle (DAkkS), der Antrag zur Genehmigung einer klinischen Prüfung beim Bundesamt für Arzneimittel und Medizinprodukte (BfArM) oder die Unterschriften auf dem Prüfplan und Abschlussbericht durch die Prüflleitung und der Qualitätssicherung im Rahmen von Prüfungen nach der Guten Laborpraxis.

In den allermeisten Fällen sind einfache „Bestätigungen beziehungsweise ein Kürzel“ ausreichend. Das vereinfacht den Einsatz elektronischer Mittel für Unterschriften deutlich. Ohne QES können zum Beispiel Freigaben von Standardarbeitsanweisungen (SOPs), von Ergebnissen in elektronischen Laborsystemen, Abzeichnen von Wartungsunterlagen und vieles mehr erfolgen.

### Compliance mit Effizienz

Der Einsatz von eSignaturen im ISO- und im GxP-Umfeld macht mühsame Papier-

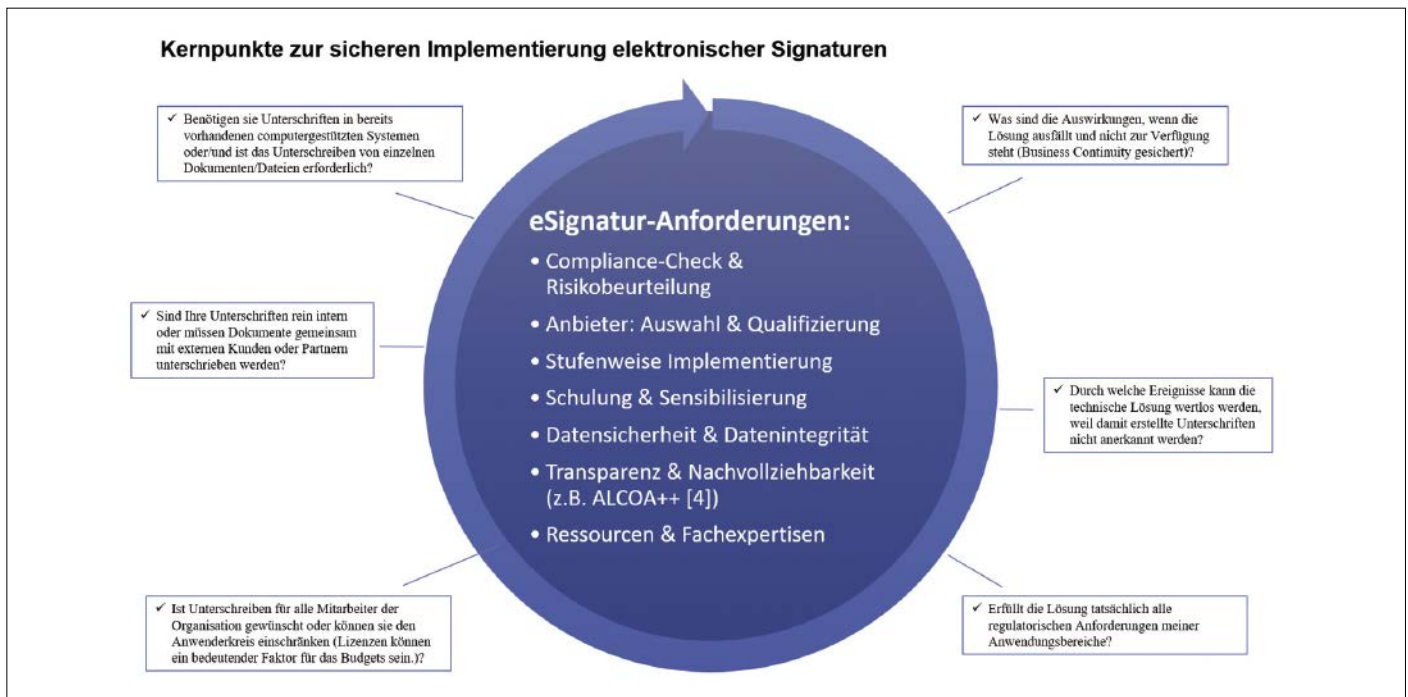


Abb. 1: Kernanforderungen zur elektronischen Signatur und einige wichtige Fragen zur Einführung.

prozesse, zeitraubende manuelle Prüfungen und die Aufbewahrung von Papierdokumentation überflüssig. Mit wenigen Klicks können Dokumente signiert/genehmigt werden, bei voller Compliance.

### Mut zur Veränderung

Für die Anwendungsbereiche GxP und ISO-basierte Qualitätsmanagementsysteme (QMS) sind heute durch internationale und europäische Organisationen Regularien zu computerisierten Systemen, Cloud-Systemen und eSignaturen veröffentlicht (EU [3], EMA [4], OECD [5-9], PIC/S [10], ZLG [11]), FDA [13], DIN ISO [14-20]. Die regulatorischen Dokumente bieten einerseits große Herausforderungen zur Umsetzung, geben andererseits die Sicherheit für Compliance bei Erfüllung dieser Anforderungen. Ein strukturiertes Projekt mit klaren Zielen bringt sie digital vorwärts und führt zur Effizienzsteigerung. Ein kompetentes Team mit Unterstützung externer Partner, führen sie sicher durch diesen Veränderungsprozess.

### Schritte der Implementierung

#### Anforderungen und Anwendungsfälle

Legen Sie Ihre Anwendungsfälle fest (auch, in welchen Prozessen Sie weiterhin manuell unterschreiben wollen). Für computergestützte Systeme (inkl. eSignatur-Lösung) ist im regulierten Umfeld sowie bei der Akkreditierung und Zertifizierung immer eine Anforderungsspezifikation, die Benutzeranforderung (engl. User Requirements Specification/

URS), erforderlich. Es ist sinnvoll dies als Anwendungsfälle zu beschreiben, statt technische Details zu spezifizieren. Definieren Sie Ihre Anwendungsfälle einschließlich von Leistungsmerkmalen (wie viele Benutzer oder Unterschriften pro Tag/Monat o.ä.). Für die Vereinbarungen mit Anbietern, zum Beispiel durch Verträge, gilt als gute Praxis, sich über das Leisten von Unterschriften abzustimmen. Zur Vermeidung von Schwachstellen und Missverständnissen (und ggf. zusätzlichen Kosten) vereinbaren Sie die Details möglichst präzise. Eine solide Vorbereitung ist die Basis einer gezielten Marktsondierung für eine praktikable und konforme eSignatur-Lösung.

#### Auswahl der Technologie und des Anbieters

Die technische Lösung muss zu Ihrem Anforderungsprofil passen, die rechtlichen Anforderungen erfüllen und mit aktuellen technischen Standards arbeiten, beispielsweise zeitgemäßen Verschlüsselungstechnologien. Prozesse und Sicherheitsmaßnahmen müssen aktuellen Sicherheitsstandards entsprechen und robust integriert werden können. Etablierte Cloud-Technologien (eSignatur-Lösungen können dazu gehören) haben in Hinsicht auf Agilität, Skalierbarkeit, Zusammenarbeit, Datenintegrität und -sicherheit Vorteile und lassen sich anhand von Kriterien prüfen [12]. Achten Sie darauf, dass nicht nur der Anbieter die Technik kennt und versteht. Hier ist auch bei Ihnen ein Kompetenzaufbau gefragt, damit Sie die richtigen Fragen stellen können und das zu Ihnen passende Produkt auswählen. Binden Sie schon bei der Planung die regulatorisch Verantwortlichen und geeigneten Fachpersonen ein (z.B. IT, QA/QS).

#### Risikobewertung und Prüfung der Compliance

Risikobewertung ist in Bezug auf Softwarelösungen im regulierten Umfeld ein unverzichtbarer Bestandteil einer geplanten Einführung und auch in der operativen Phase sollten Risiken weiter erfasst und bearbeitet werden. Die Thematik Risikobewertung wird oftmals eher als Belastung, denn als Hilfe gesehen. Angemessene Risikobewertungen helfen Ihnen, überzogene Maßnahmen bei der Implementierung zu vermeiden oder deutlich zu reduzieren.

#### Stufenweise Implementierung

Führen Sie eSignaturen schrittweise ein, beginnend mit weniger kritischen Prozessen. Sammeln Sie Erfahrungen, um die erforderlichen Anpassungen vorzunehmen. Der Erfahrungsgewinn hilft Ihnen bei der Einführung in kritischen Bereichen. Dies schafft insgesamt Sicherheit, Vertrauen und Akzeptanz.

#### Transparenz

Informieren Sie frühzeitig die relevanten Zertifizierungsstellen, Behörden, Kunden und Mitarbeiter über die geplante Einführung! Insbesondere die GLP-Behörde beurteilt die Einführung einer elektronischen Unterschrift als relevante (meldepflichtige) Änderung zu einer bestehenden GLP-Bescheinigung. Auch die US-amerikanische FDA (Food and Drug Administration) erwartet in ihrem Anwendungsbereich gemäß des US-Gesetzes 21 CFR Part 11 §100 (c) eine Mitteilung über den geplanten Einsatz von elektronischen Unterschriften als Ersatz zu den händischen Unterschriften [13].

### Schulung und Sensibilisierung

Die Einführung eines Systems für eSignaturen erfordert die Schulung aller Nutzer, Ihrer Mitarbeiter. Dabei sind die für das Verfahren spezifischen Sicherheitsaspekte der eSignaturen im Fokus. Sensibilisieren Sie die Mitarbeiter für potenzielle Bedrohungen, zum Beispiel die Entwendung der persönlichen Identifikation (das sind mindestens Benutzername und Passwort, ggf. auch ein elektronisches Token). Stellen Sie sicher, dass die Technologie richtig angewendet wird. Denken Sie daran, dass Administratoren für diese Systeme speziell vorbereitet und geschult sein müssen.

### Datenintegrität und -sicherheit

Implementieren Sie adäquate Sicherheitsmaßnahmen wie Verschlüsselung, Zugriffskontrollen, Protokollierung und Auditierungsmaßnahmen. Dies gewährleistet die Datenintegrität generell und stärkt das Vertrauen der begutachtenden Stellen in die eingeführte eSignatur-Lösung.

### Ressourcen und Fachexperten

Häufig mangelt es an zeitlichen, personellen oder fachlichen Ressourcen zur Umsetzung und adäquaten Auditierung beziehungsweise Inspizierung dieser Systeme. Die Wahl (intern bzw. externer) geeigneter Fachleute und eine kontrollierte, adäquate Ressourcen-Planung sind hier entscheidend.

### Die Langzeitarchivierung als Schlüssel zum Erfolg

Langzeitarchivierung von eSignaturen galt oft als Knackpunkt bei deren Einführung. Moderne eArchivierung und entsprechende Standards können heute die Integrität und Verfügbarkeit der eSignaturen über Jahrzehnte gewährleisten. Hier ist die techni-

sche Auswahl entscheidend: Für eSignaturen, die mit dem Attribut „LTV“ (long-term validity) ausgestattet sind, stellt der Zertifikatgeber die Überprüfbarkeit der Zertifikate über lange Zeiträume sicher. Richtig geplant und geprüft, sind so eSignaturen zeitgemäß und langfristig zuverlässig.

### Die Zukunft ist elektronisch

Die eSignatur ist nicht nur eine vorübergehende Mode, sondern die Zukunft im GxP- und ISO-Umfeld. Die technologischen Entwicklungen werden weiterhin Fahrt aufnehmen und Unternehmen, die sich solchen Entwicklungen verschließen, riskieren ihre Wettbewerbsfähigkeit. Weitere Technologien, wie zum Beispiel AI und die Blockchain-Technologie, stehen am Start. Durch Integration der Blockchain, beispielsweise zur QES wird die Sicherheit und Nachvollziehbarkeit der GxP-Dokumentation noch erheblich gesteigert. Solche neuen Technologien versprechen zur eSignatur und vergleichbaren Anforderungen künftig eine erhebliche Steigerung der Sicherheit und Unveränderlichkeit, zum Beispiel dank ihrer dezentralen und unveränderlichen Eigenschaften. Diese Technologien befinden sich für den regulierten Bereich noch im Entwicklungsstadium, und die breite Anwendung hängt, wie bei allen neuen Technologien, auch von der Akzeptanz und von der Aktualität der regulatorischen Dokumente durch offizielle Stellen ab.

### Ausblick

Digitalisierung und die eSignaturen werden kommen. Wir müssen uns darauf ein-

stellen. Darauf einstellen bedeutet, die Frage zu stellen, für welche Zwecke die Signatur in welcher Form gebraucht wird und welche Prozesse mittels eSignaturen effizienter gestaltet werden können. Die technischen Lösungen gibt es bereits, aber sie werden laufend weiterentwickelt und die Auswahl einer oder mehrerer Lösungen für verschiedene Anwendungszwecke erfordert einen klaren Blick auf das Notwendige. Im regulierten Umfeld haben die Behörden in verschiedenen Anwendungsbereichen die Anforderungen festgelegt und somit den Rahmen für die Implementierung einer konformen eSignaturlösung definiert. Dies erzeugt zurzeit für alle Beteiligten Sicherheit, sowohl bei der Umsetzung als auch bei der Überprüfung.

### Zugehörigkeiten:

<sup>1</sup>Simply Quality – Dr. Karl Kleine, Weilheim in Oberbayern, Deutschland

<sup>2</sup>DiQualis Deutschland, Saarbrücken, Deutschland

\* geteilte Autorenschaft

### KONTAKT |

Dr. Karl Kleine

Simply Quality – Dr. Karl Kleine

Weilheim in Oberbayern, Deutschland

ORCID: 0000-0003-0438-7567

karl.kleine@simply-quality.de

[1] Literatur:  
<https://bit.ly/GIT-Kleine-1>



**HITEC ZANG**

# Alles für Ihr digitalisiertes Labor!

## LabVision®-System

- Messwerte zentral erfassen
- Versuchsabläufe automatisieren
- Prozesse lückenlos dokumentieren

Jetzt scannen, um die Zukunft des Labors zu entdecken!

**ilmac** • 26.-28.09.2023  
Besuchen Sie uns in Halle 1.0, Stand B168



© Seventyfour - stock.adobe.com

# Raten oder Daten

Von Strg + C bis KI: Das bieten digital verfügbare Daten im Labor

Alexander Brendel<sup>1</sup>, Albrecht Liebscher<sup>1</sup>, Patrick Kraus<sup>1</sup>

**S**eit mehreren Jahrzehnten macht es die Industrie allen anderen Branchen vor und zeigt, welche Vorteile und Möglichkeiten die Vernetzung und Digitalisierung von Maschinen, Geräten und Prozessen bietet. In der Laborwelt gewinnt das Vorgehen deshalb ebenfalls zunehmend an Bedeutung, insbesondere weil hier häufig noch manuelle und deshalb fehleranfällige Datentransfers verbreitet sind und mit der Dokumentation eine nicht wertschöpfende Tätigkeit eine wichtige Rolle spielt. Doch lohnen sich die Investitionen in Digitalisierung und Vernetzung überhaupt und welche Möglichkeiten eröffnen sich tatsächlich? Ein Crashkurs in fünf Schritten (siehe Abb. 1) gibt Auskunft.

**Schritt eins: zentrale Verfügbarkeit – die einfachste Form der Datennutzung**

Wer nicht das Privileg hat, bereits in einem digitalisierten und vernetzten Labor zu arbei-

ten, der kennt es aus dem eigenen Alltag: Parameter am Gerät einstellen, Versuchsergebnisse händisch ins Laborbuch abschreiben oder via USB-Stick exportieren und die Daten anschließend am PC wieder eintippen beziehungsweise importieren – wahlweise für die Berechnung weiterer Prozessschritte oder für die Dokumentation. Zwei wesentliche Merkmale charakterisieren dieses Vorgehen: Zeitfresser und Fehlerteufel.

Mit der Vernetzung digitaler Laborgeräte ändert sich das grundlegend. Erstmals stehen die Daten aller vernetzten Geräte zentral zur Verfügung. Das können Parameter des Geräts selbst sein (beispielsweise Betriebsstunden) oder Versuchsparameter (beispielsweise Rührgeschwindigkeit oder Versuchsergebnis). Eine Middleware führt alle Daten an einem Ort zusammen, auf den Mitarbeitende oder Labor-Informationen-Management-Systeme (LIMS) direkt Zugriff haben. Middleware beschreibt die verbindende Ebene zwischen Laborgeräten und LIMS/ELN (elektronische Laborbücher). Hier lau-

fen alle Daten zentral zusammen. Höhere Ausbaustufen einer Middleware verarbeiten die Daten zudem weiter, sodass zwar alle Rohdaten in einem sogenannten Data Warehouse strukturiert abgespeichert sind, aber nur relevante und aufbereitete Daten an Anwenderinnen und Anwender oder höhere IT-Systeme (z. B. LIMS) weitergegeben werden. Wichtig ist, dass all jene Gerätedaten digital zugänglich sind, die zum Prozess gehören. Nur dann ist die sogenannte „Single Source of Truth“ gegeben, also ein Datensatz, der allein gültig ist (es gibt keine weiteren analogen oder digitalen Datensätze, die zu einer doppelten Datenhaltung führen und deshalb widersprüchlich sein könnten). Labore mit mehreren Prozessen müssen nicht komplett umstellen, sondern können zunächst den wichtigsten Prozess mit dem größten Kosten-Nutzen-Potenzial digitalisieren. Teilweise bringt schon die Gerätevernetzung innerhalb von Teilprozessen nennenswerte Verbesserungen der Arbeitsqualität, -ergebnisse und -geschwin-



*Labore mit mehreren Prozessen müssen nicht komplett umstellen, sondern können zunächst den wichtigsten Prozess mit dem größten Kosten-Nutzen-Potenzial digitalisieren.*

digkeit – weshalb auch eine kleinschrittige, stufenweise Finanzierung solcher Digitalisierungsprojekte möglich ist.

Labormitarbeitende können die ursprünglich autark vorliegenden Daten nun erstmals zentral abrufen und weinternutzen, ohne selbst im Labor zu sein. Sie können den Betriebsstatus von Geräten einsehen oder Versuchs- und Geräteparameter kopieren und für weiterführende Berechnungen oder für Dokumentationen verwenden. Insbesondere für Letztere ergibt sich so ein papierloses Labor. Zwar liegen nun alle benötigten Daten vor, jedoch müssen die Anwenderinnen und Anwender die Daten weiterhin selbst herausuchen.

#### Schritt zwei: unidirektionale Kommunikation zum Benutzer – das Labor meldet sich

Wer nicht gerne in großen Datenpools nach den richtigen Daten sucht, bevorzugt vermutlich zeitsparende Übersichten mit den relevanten Infos – sogenannte Dashboards. Beispiel: Welches Gerät ist derzeit in Betrieb? Vor der Vernetzung mussten Laborverantwortliche hierfür ins Labor gehen. Mit der Vernetzung der Geräte in Schritt eins können die Mitarbeitenden den Betriebszustand im Datenpool herausuchen. Mit einem Dashboard übernimmt die Middleware die Suche nach den Daten und zeigt die Parameter individualisierbar an. Dashboards dienen demnach unterschiedlichen Personen und Gruppen dafür, schnell an relevante Informationen zu gelangen. In vielen Fällen bereitet die Middleware die

Rohdaten hierfür erst noch auf. Sie berechnet beispielsweise aus den sekundlich gesendeten Temperaturdaten eines Thermometers den Mittelwert, da dieser für die Nutzerinnen und Nutzer eine höhere Aussagekraft hat als sekundlich schwankende Werte. User-zentrierte Dashboards benötigen ein User Management, sodass die Middleware weiß, welche Person welches Dashboard und welche Funktionen benötigt. Mit dem User Management entsteht zudem die Möglichkeit für einen Audit Trail (also die digitale Überwachung und Dokumentation, welche Person welche Parameter aufgerufen und geändert hat, welche Befehle sie dem System erteilt hat oder wer wann welche Fehlermeldung erhalten und quittiert hat). Ein kombiniertes Berechtigungsmanagement beschränkt zudem auf Wunsch den Zugriff auf Daten und gibt ausgewählte Inhalte nur für bestimmte Personen(-gruppen) frei.

Gleichzeitig resultiert aus den nun aufbereiteten und einzelnen Personengruppen zugeordneten Daten die Möglichkeit, dass die Middleware aktiv Fehlerzustände erkennt und dokumentiert (Logging) sowie Informationen an die relevanten Personen verschickt (Messaging) – beispielsweise Mitteilungen zu Fehlermeldungen und Alarmen (Temperatur im Kühlschrank über kritischem Wert) oder wenn Arbeitsschritte abgeschlossen sind. Diese Nachrichten kann das System grundsätzlich an alle Arten von Endgeräten weltweit schicken, also auf Wunsch auch an Smartphones. Laborverantwortliche müssen somit nicht mehr vor Ort im Labor sein, sondern das Gerät informiert sie. Um

Vorgänge manuell zu stoppen oder auszulösen, ist jedoch weiterhin die Anwesenheit vor Ort erforderlich.


#### Schritt drei: bidirektionale Kommunikation – Gerätesteuerung aus der Ferne

Wer Arbeitsschritte remote starten oder stoppen oder Geräteparameter aus der Ferne konfigurieren möchte, benötigt anstelle der bisherigen unidirektionalen Kommunikation eine bidirektionale. Labormitarbeitende können so über entsprechende Dashboards Befehle an Laborgeräte senden, beispielsweise einen Rührer mit definierter Rührgeschwindigkeit und -dauer starten. Spätestens jetzt benötigt das System den in Schritt zwei bereits erwähnten Audit Trail, um normenkonform zu dokumentieren, welche Person wann und mit welchen Parametern welchen Prozess gestartet hat. Diese Daten schreibt die Middleware zusammen mit etwaigen Versuchsergebnissen fälschungssicher in die Datenbank und in elektronische Laborbücher (ELN).

#### Schritt vier: Prozesse werden digital

Während in den Schritten eins bis drei vernetzte Laborgeräte für Einzelkommunikation im Fokus standen, betrachtet Schritt vier die Prozesse (zum Beispiel Standard Operating Procedures: SOP) – oder ein Beispiel für Musikschaffende: Bis jetzt waren es Einzelproben, ab sofort probt das gesamte Orchester.



The Original   
Filter Papers since 1883

Go and explore our range of  
high-quality products!

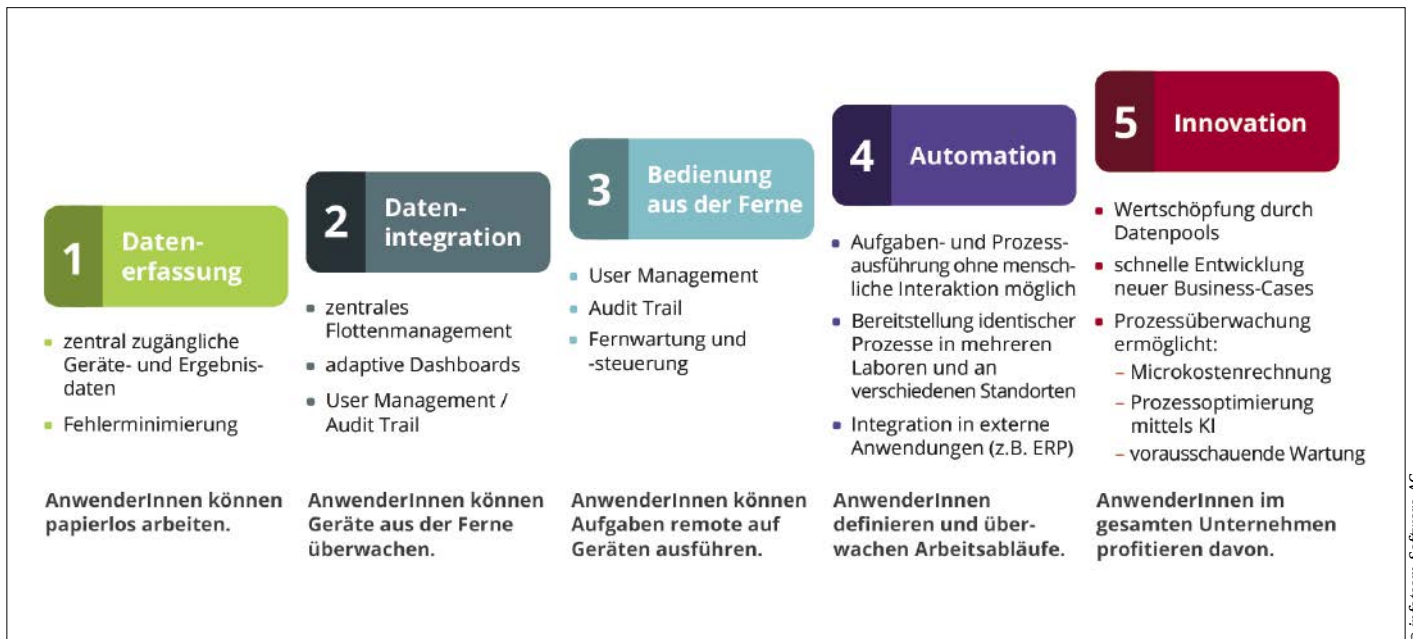
- Filter papers
- Thimbles
- Membranes
- Syringe Filters

**New!**  
PES Membranes  
&  
Syringe Filters



**Hahnemühle**   
Life Science

Diagnostic  
Environment  
Food & Beverage  
Microbiology  
Molecular Biology



© infoteam Software AG

Abb. 1: Die Stufen 1–5 im Überblick: Die Funktionalitäten bauen aufeinander auf und sind als flexibel zu verstehen. Ob beispielsweise das User Management in Stufe 2 oder Stufe 3 angesiedelt ist, richtet sich nach den individuellen Anforderungen der Labore.

Prozesse beschreiben die Interaktion zwischen Mitarbeitenden, Geräten und Software eines kompletten Arbeitsablaufs. Mitunter überschneiden sich Prozesse, indem sie auf dieselben Geräte zugreifen. Prozessdaten liegen dann vor, wenn der Datenfluss des gesamten Arbeitsablaufs (Workflow) digitalisiert abgelegt wird. Es existieren also nicht nur einzelne Datenpunkte (beispielsweise nur das Versuchsergebnis), sondern für jeden Zeitpunkt alle relevanten Datenpunkte. Neben der realen Welt entsteht so eine digitale Kopie – der sogenannte digitale Zwilling.

Für digitale Zwillinge ist ein hohes Maß an Automatisierung hilfreich und bisweilen auch notwendig, um alle relevanten Daten digital verfügbar zu haben. Welche Parameter das sind, ist von Prozess zu Prozess unterschiedlich. In den meisten Fällen müssen hierfür auch Systeme und Software in die Middleware eingebunden und vernetzt sein, die bislang losgelöst voneinander agierten. Durch den hohen Grad der Vernetzung und Automatisierung ergibt sich eine Skalierbarkeit des Prozesses, denn ob das System die Arbeitsschritte ein- oder parallel zehnmal durchführt, ist lediglich eine Frage der verfügbaren Hardwarekomponenten. Menschliche Mitarbeitende werden dadurch keinesfalls arbeitslos. Anstatt manuellen Routinearbeiten nachzugehen, stehen sie für höherwertige Aufgaben zur Verfügung und nutzen ebenfalls die Prozessdaten: So können sie im Arbeitsalltag beispielsweise schlussfolgern, dass 20 Prozent der Proben unbrauchbar sind, weil die Temperatur in einem Kühlschrank für eine

bestimmte Dauer um einen bestimmten Wert zu hoch war. Auch für das Management halten Prozessdaten Hinweise bereit, etwa wo es einen organisatorischen Flaschenhals gibt und ob eine Optimierung rentabel ist.

Sobald Arbeitsabläufe durchgängig digitalisiert sind, steht erstmals auch ein Softwaremodul zur Verfügung, das anhand der durchzuführenden Arbeiten die ideale Reihenfolge vorgibt und weiß, wann wo welches Gerät frei ist oder benötigt wird (ggf. auch mit sich überkreuzenden Prozessen) – sogenannte Scheduler.

#### Schritt fünf: KI – das Labor denkt mit

Bereits in den Schritten eins bis drei entstehen große Datenpools (Data Lakes), die je nach Anforderung den Einsatz von statistischen Verfahren oder Systemen künstlicher Intelligenz (KI) zulassen. Die vorliegenden Prozessdaten aus Schritt vier komplettieren die Data Lakes. In ihnen kann KI Zusammenhänge (Korrelationen) aufspüren, die für menschliche Experten entweder zu komplex sind oder so umfangreich, dass die Berechnung Jahrzehnte dauern würde. Die Erfahrung aus der Praxis zeigt, dass eine wahllose Suche in den Daten durchaus wertvolle Erkenntnisse hervorbringen kann, die Wahrscheinlichkeit hierfür aber einem Glücksspiel entspricht. Deutlich zielführender ist es, konkrete Fragestellungen von der KI untersuchen zu lassen oder der KI anhand der Daten Wissen anzutrainieren, sodass sie Entscheidungen selbst trifft oder Empfeh-

lungen gibt. So sagt sie beispielsweise den Ausfall von Geräten voraus, schlägt Formulierungen für die Dokumentation vor oder erkennt Bildmuster automatisiert und ruft nur dann menschliche Experten hinzu, wenn die Daten nicht eindeutig sind.

Für all jene, die bereits mit dem Training und dem Einsatz einer KI für eine konkrete Fragestellung oder Aufgabe liebäugeln und nun befürchten, dass sie erst die Schritte eins bis vier durchlaufen müssen: Es gibt durchaus die Möglichkeit, einen Data Lake speziell für diese eine Anwendung aufzubauen und gegebenenfalls hierfür eine Einzelautomatisierung für die Datenerhebung zu bauen. Sobald jedoch Betriebs- und Gerätedaten global notwendig sind oder ganze Prozesse in die Analyse einfließen sollen, braucht es die Schritte eins bis vier.

#### Zugehörigkeit

<sup>1</sup>infoteam Software

#### ● KONTAKT |

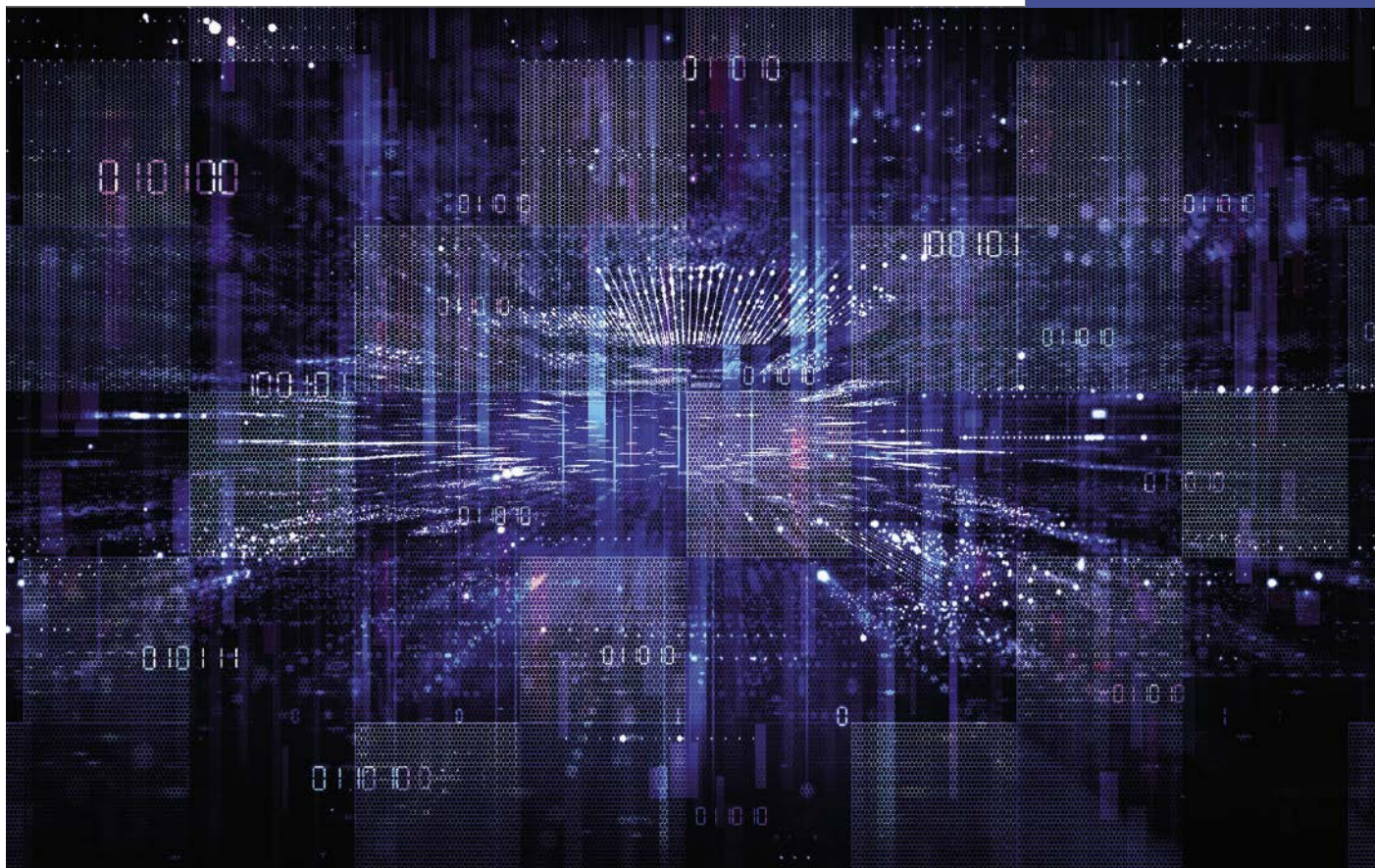
##### Albrecht Liebscher

Key Account Manager & Product Owner  
zenLAB-Middleware  
infoteam Software AG  
Bubenreuth, Deutschland  
albrecht.liebscher@infoteam.de



Zur Onlineversion:  
<https://bit.ly/GIT-Liebscher>





© Jack Moreh, freerangestock.com

# AnIML und Microsoft 365

Labordaten einfach und schnell verwalten und nutzen

Burkhard Schäfer

**D**ie Kombination von Microsoft 365 und dem Datenstandard AnIML ermöglicht schnelles und unkompliziertes Labordatenmanagement unter Verwendung von Standards. Labore können ihre Labordaten effizient verwalten und auf einfache Weise breit zugänglich machen. Durch Nutzung bestehender IT-Infrastruktur wird die Einführung von Standards in der Laborwelt zum Kinderspiel.

## Einleitung

In modernen Laboren sind Daten der Schlüssel zur wissenschaftlichen Forschung und Entwicklung. Von chemischen Analysen über biologische Untersuchungen bis hin zu physikalischen Messungen werden enorme Mengen an Daten generiert und gespeichert. Die korrekte Verwaltung und Interpretation dieser Daten sind entscheidend für den Fortschritt in vielen wissenschaftlichen Disziplinen.

Jedoch stellt die Verwaltung von Labordaten oft eine Herausforderung dar. Verschiedene Messgeräte verwenden unterschiedliche Formate, proprietäre Software erschwert den Datenaustausch, und das Fehlen einheitlicher Standards kann zu Inkompatibilitäten führen. In diesem Kontext gewinnen offene Datenstandards zunehmend an Bedeutung. Diese Standards bieten einen gemeinsamen Rahmen für die Strukturierung und den Austausch von Daten, unabhängig von der Art des Laborexperiments oder des Messgeräts. Ein solcher offener Standard ist das AnIML-Datenformat. Dieses Format zielt darauf ab, Labordaten in einer einheitlichen und strukturierten Weise darzustellen, um ihre Interoperabilität zu erleichtern.

Im vorliegenden Artikel werden wir uns mit der Herausforderung befassen, wie Labordatenstandards, insbesondere AnIML, in Organisationen weit verbreitet eingesetzt werden können. Wir werden einen Blick auf einen Ansatz werfen, der eine nahtlose Integration wissenschaftlicher Daten in Microsoft 365 ermöglicht.

## AnIML und andere Datenstandards

In der heutigen wissenschaftlichen Landschaft sind offene Datenstandards unverzichtbar, um die Hürden bei der Dateninteroperabilität zu überwinden. Einer dieser wegweisenden Standards ist das „AnIML-Datenformat“ (Analytical Information Markup Language). AnIML wurde entwickelt, um Labordaten in einem einheitlichen XML-Format zu repräsentieren, unabhängig von der Art der Messungen oder Experimente.

AnIML bietet eine klare Struktur, die sowohl Rohdaten als auch Metadaten umfasst. Diese Struktur erleichtert den Datenaustausch zwischen verschiedenen Laborgeräten und Softwareanwendungen. Das Format definiert standardisierte Tags für eine Vielzahl von Experimenttypen, von chemischen Analysen bis hin zu Bioprozessen.

Neben AnIML gibt es eine Vielzahl anderer offener Datenstandards, die in verschiedenen wissenschaftlichen Bereichen etabliert sind. Diese Standards reichen von chemischen Strukturdaten (z.B. MDL Mol-

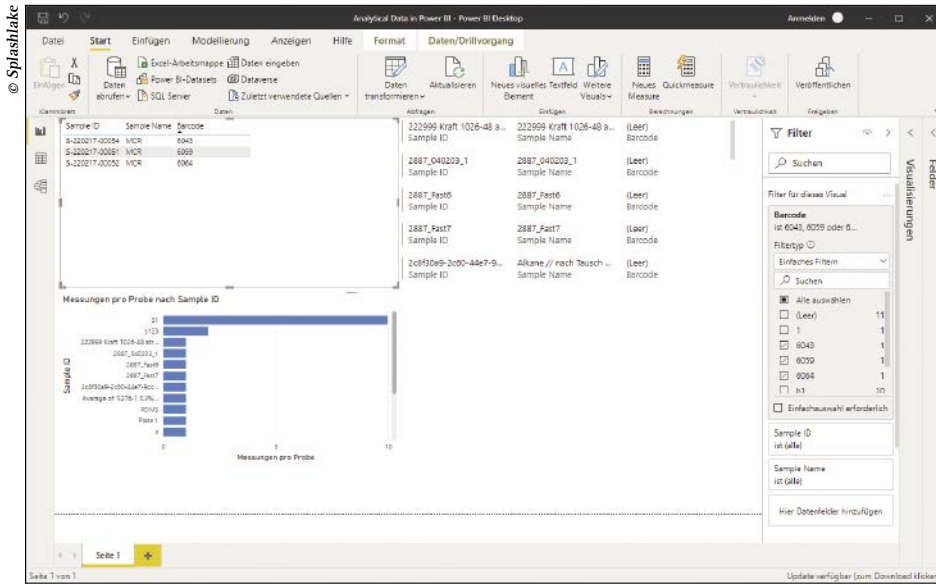


Abb. 1: Daten können in PowerBI für Auswertungen, Kennzahlen und Dashboards genutzt werden.



Abb. 2: Gerätedaten können direkt in Microsoft 365 interaktiv visualisiert werden.

file) bis zu spektralen Daten (z.B. JCAMP-DX, mzML). Sie bieten eine wünschenswerte Grundlage für den Datenaustausch und die Zusammenarbeit zwischen Forschern und Laboratorien weltweit.

Die Einführung und Verwendung solcher Standards erfordern jedoch oft spezialisierte Softwaretools und Know-how. Darüber hinaus ist oft nicht klar, wie die Vorgehensweise aussehen sollte, um Standards in der eigenen Organisation einzuführen. Dies kann zu Hindernissen bei der breiten Anwendung führen. Doch wie kann die Implementierung von Datenstandards, einschließlich AnIML, in Organisationen erleichtert werden?

### Integration mit Microsoft 365: Vereinfachte Datenverwaltung und Auswertung

Um die Verwaltung von Labordaten mit Standards zu vereinfachen, ist Splashlake

eine Partnerschaft mit Microsoft eingegangen. Diese erlaubt die native Integration von AnIML mit der Microsoft 365-Cloud und den Office-Anwendungen. So werden die Herausforderungen der Datenverwaltung und -auswertung auf innovative Weise angegangen.

Gerätedaten können direkt in SharePoint und OneDrive abgelegt werden. Dabei werden Fremdformate automatisch ins AnIML-Format konvertiert. Metadaten werden extrahiert und durchsuchbar gemacht. Dies geschieht unter Verwendung bestehender Microsoft-Technologie, die in Unternehmen bereits ausgerollt und verfügbar ist

Labors können ihre Daten in einer sicheren Cloud-Umgebung speichern, die von verschiedenen Benutzern einfach zugänglich ist. Die Daten werden automatisch synchronisiert und sind von überall aus abrufbar.

Die Integration unterstützt auch die nahtlose Überführung der Daten in Microsoft

Excel mit Hilfe von PowerQuery. Dies ermöglicht es Anwendern, Daten ohne besondere technische Fähigkeiten zu analysieren und auszuwerten. PowerBI wird ebenfalls unterstützt, was erweiterte Analysemöglichkeiten eröffnet. So werden Anwender in die Lage versetzt, ihre Daten auszuwerten, ohne stets auf Data Scientists angewiesen zu sein.

Der Ansatz geht jedoch über reine Datenverwaltung hinaus. Chromatogramme, Spektren und ähnliche Daten können problemlos in Microsoft Word oder PowerPoint eingefügt werden, um Berichte und Präsentationen zu unterstützen. Dies erleichtert die Kommunikation von Forschungsergebnissen und -erkenntnissen.

Durch die Integration von AnIML mit Microsoft 365 integriert sich dieser Ansatz einfach in bestehende IT-Infrastrukturen von Unternehmen, die bereits Microsoft-Produkte nutzen.

### Praktischer Einsatz

Die Integration von AnIML mit Microsoft 365 bietet eine Fülle von praktischen Anwendungsfällen und Vorteilen, die Labore und Wissenschaftler in vielerlei Hinsicht unterstützen. Im Folgenden werden einige der konkreten Szenarien beleuchtet, in denen diese Lösung ihre Stärken ausspielt:

- Zugänglichkeit aller Daten: Messdaten werden zentral in einer sicheren Cloud-Umgebung gespeichert und können von verschiedenen Benutzern problemlos abgerufen und bearbeitet werden. Dies fördert die Zusammenarbeit zwischen Forschern, Teams und Abteilungen, sowie mit externen Partnern.
- Interoperabilität über verschiedene Messtechniken hinweg: Die Lösung unterstützt nicht nur AnIML, sondern auch andere offene Formate, die in verschiedenen Messtechniken etabliert sind. Dies ermöglicht eine umfassende Darstellung von Labordaten, unabhängig von der Art der Messungen.
- Unabhängigkeit von proprietärer Software: Die Integration mit Microsoft 365 ermöglicht es Laboren, sich von proprietärer Gerätesoftware zu lösen und die Daten in einer standardisierten Umgebung zu nutzen. Dies schafft eine größere Flexibilität und Unabhängigkeit bei der Datenverwaltung.
- Effiziente Datenauswertung: Die automatische Konvertierung von Gerätedaten und die Integration mit PowerQuery und PowerBI ermöglichen es Forschern und Anwendern, Datenanalysen und Auswertungen mit vertrauten Werkzeugen durchzuführen, ohne auf technische Experten angewiesen zu sein. Dies beschleunigt den



*In der heutigen wissenschaftlichen Landschaft sind offene Datenstandards unverzichtbar, um die Hürden bei der Dateninteroperabilität zu überwinden.*

Prozess der Informationsgewinnung und unterstützt fundierte Entscheidungsfindungen. (Abb. 1)

- Einfache Dokumentation und Berichterstellung: Die Möglichkeit, Chromatogramme, Spektren und andere Daten direkt in Microsoft Word oder PowerPoint einzufügen, erleichtert die Erstellung von Berichten, Präsentationen und Veröffentlichungen. Dies trägt dazu bei, Forschungsergebnisse klar und ansprechend zu kommunizieren. (Abb. 2)

Die Kombination dieser praktischen Anwendungsfälle steigert die Nutzbarkeit der Daten, erhöht die Produktivität und verbessert die Zusammenarbeit. Labore können ihre Forschungs- und Entwicklungsprozesse optimieren und gleichzeitig die Qualität der Ergebnisse verbessern.

#### Unabhängigkeit von proprietärer Software

Eine der bedeutendsten Stärken von AnIML ist die Befreiung von der Abhängigkeit von proprietärer Software. Oft sind Labore an die Nutzung spezifischer Softwarelösungen gebunden, um Daten zu generieren, zu speichern und auszuwerten. Diese Abhängigkeit

kann die Flexibilität einschränken und den Datenaustausch erschweren.

Die Nutzung offener Formate wie AnIML ermöglicht eine nahtlose Interaktion mit verschiedenen Messgeräten und Softwareanwendungen, unabhängig von deren Hersteller. Labore haben die Freiheit, die besten Werkzeuge für ihre Anforderungen auszuwählen, ohne an bestimmte proprietäre Lösungen gebunden zu sein.

Durch die Integration in Microsoft 365 passt diese Lösung nahtlos in die bestehende IT-Landschaft von Unternehmen, die bereits Microsoft-Produkte nutzen. Dies erleichtert die Implementierung und sorgt dafür, dass die Lösung von einer breiten Benutzerbasis angenommen werden kann. Die erweiterte Datenintegration ermöglicht es Laboren, ihre Daten optimal zu nutzen und gleichzeitig von den Vorteilen offener Standards zu profitieren.

#### Fazit und Ausblick

Die Einführung von offenen Datenstandards wie AnIML eröffnet neue Möglichkeiten für Dateninteroperabilität, Zusammenarbeit und datengetriebene Erkenntnisse. Die Integration von AnIML mit Microsoft 365, entwi-

ckelt in Partnerschaft zwischen Splashlake und Microsoft, demonstriert eindrucksvoll, wie solche Standards praktisch und effektiv umgesetzt werden können.

Die Möglichkeit, Daten effizient zu verwalten, auszuwerten und zu kommunizieren, ohne auf umfangreiches technisches Fachwissen angewiesen zu sein, revolutioniert die Art und Weise, wie Labordaten genutzt werden. Dabei kann bestehende IT-Infrastruktur genutzt werden, um Messdaten einfach und schnell organisationsweit bereitzustellen.

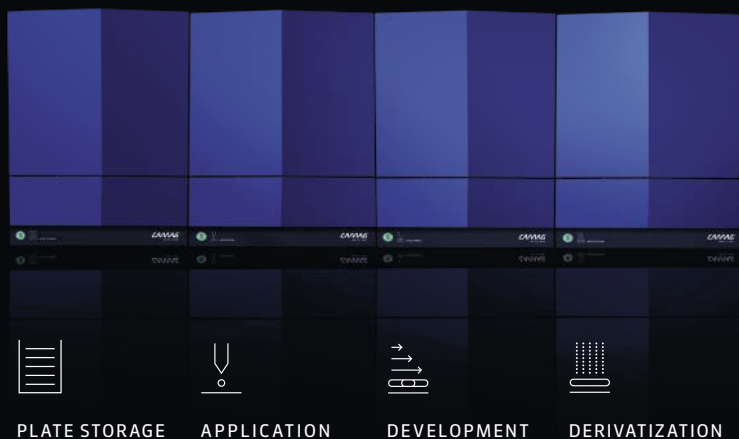
Eine Vorabversion der Integration steht zur Verfügung: <https://www.splashlake.com/365>

#### ● KONTAKT |

Burkhard Schäfer  
splashlake GmbH  
Griesheim, Deutschland  
[burkhard.schaefer@splashlake.com](mailto:burkhard.schaefer@splashlake.com)

**[1]** Onlineversion:  
<https://bit.ly/GIT-Schäfer>

**CAMAG®**

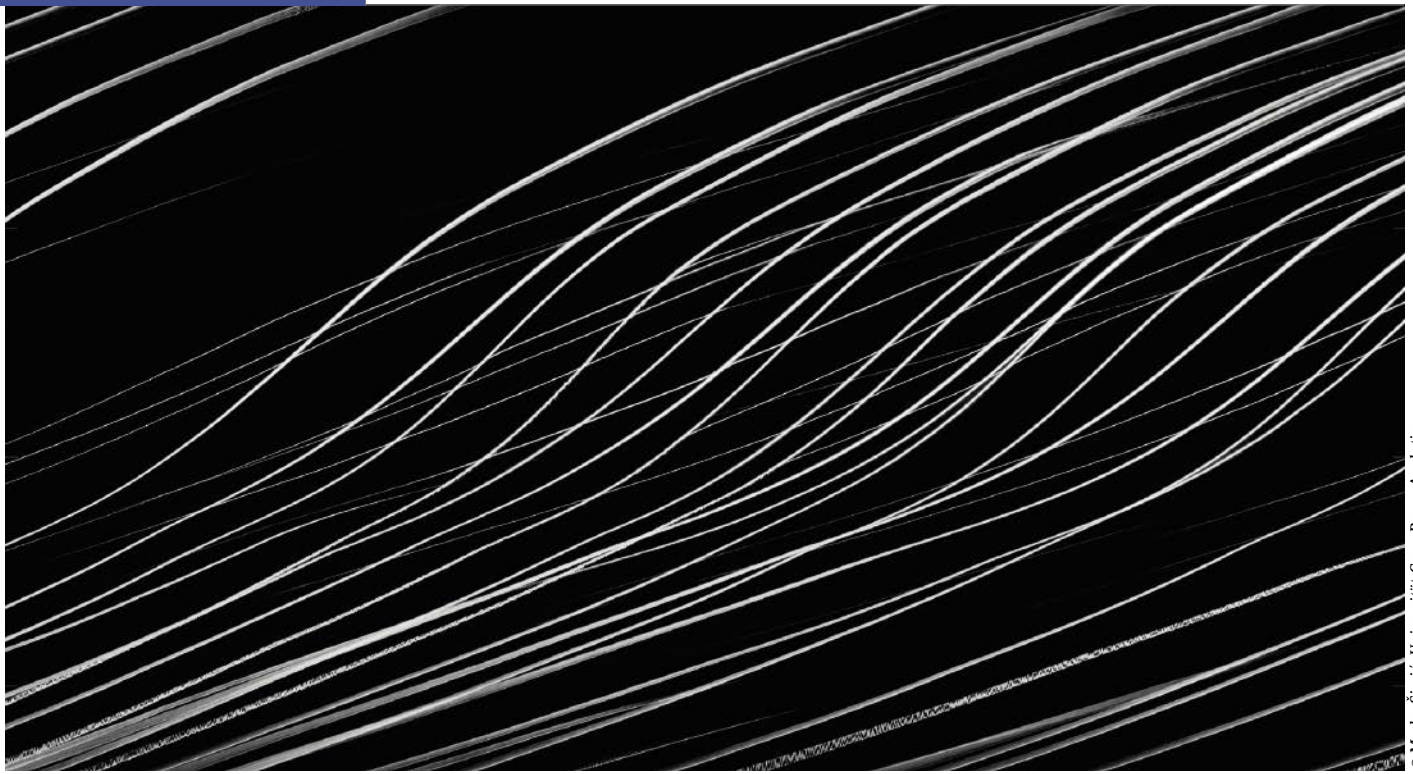


## CAMAG® HPTLC PRO

Das weltweit erste vollautomatisierte HPTLC-System für den Routineeinsatz in der Qualitätskontrolle



Entdecken Sie das volle Potenzial der Hochleistungs-Dünnschicht-Chromatographie auf [www.camag.com](http://www.camag.com)



# Nanopartikel auf der Überholspur

## Optofluidische Kraft Induktion für Echtzeit-Partikelcharakterisierung

Marko Šimić<sup>1,2,3</sup>, Christian Neuper<sup>1,4</sup>, Ulrich Hohenester<sup>2</sup>, Christian Hill<sup>1,3</sup>

**H**ersteller von Produkten auf Nanopartikelbasis sind auf detaillierte Informationen über kritische Prozessparameter wie Partikelgröße und -verteilung, Konzentration und Materialzusammensetzung angewiesen, welche die Qualität des Endprodukts direkt widerspiegeln. Diese Prozessparameter werden in der Regel mit Offline-Charakterisierungsverfahren ermittelt, die kaum die nötige zeitliche Auflösung bieten, um dynamische Veränderungen in einem Prozess zu beobachten. In einer kürzlich veröffentlichten Arbeit wurde das neuartige Messverfahren Optofluidische Kraft Induktion (OF2i) vorgestellt, welches Echtzeit-Partikelcharakterisierung mit Einzelpartikelgenauigkeit und hohem Durchsatz erzielt [1]. Im folgenden Artikel wird das Funktionsprinzip sowie die Anwendung von OF2i am Beispiel einer multimodalen sowie hoch polydispersen Öl-in-Wasser-Lösung demonstriert. Die Ergebnisse zeigen, dass OF2i eine vielseitige Plattform für das Prozessfeedback über ein breites Spektrum von Anwendungen bieten kann.

Nanopartikel spielen eine immer wichtigere Rolle bei der Produktion von Arzneimitteln, Kosmetika, Beschichtungen und in vielen anderen Bereichen der modernen Industrie. Durch geeignete Wahl der

Nanopartikelparameter, wie Partikelgröße, Form und Materialzusammensetzung, können die Produkteigenschaften gezielt angepasst werden. Die zuverlässige Echtzeitbestimmung dieser Parameter innerhalb eines Herstellungsprozesses stellt allerdings auch hohe Anforderungen an die verwendeten Messtechniken.

Setzt man die Größe eines Nanopartikels in Relation zu einem Fußball, so verhält sich das Nanopartikel zum Fußball in etwa wie der Fußball zur Erde. Teilchen im Nanometerbereich lassen sich mit herkömmlicher Lichtmikroskopie nicht mehr präzise charakterisieren, da sie deren Auflösungsvermögen unterschreiten. Konventionelle Messverfahren wie etwa jene, die auf Brownscher Bewegung basieren, haben sich in der Vergangenheit als zuverlässige Offline-Charakterisierungsmethoden für Nanopartikel bewiesen, jedoch ermöglichen diese kaum eine Echtzeit-Charakterisierung, die bei Herstellungsprozessen zunehmend an Bedeutung gewinnt.

Benutzt man Licht als Werkzeug, so kann es für weit mehr als nur zu reinen Beobachtungszwecken eingesetzt werden. Durch optischen Kraftübertrag können Teilchen in einem dynamischen Größenbereich von wenigen Nanometern bis hin zu mehreren Mikrometern optisch eingefangen und mani-

puliert werden. Diese Methode ist als Optische Pinzette bekannt und wurde 2018 mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet.

### Optofluidische Kraft Induktion

An der medizinischen Universität Graz, Österreich, wurde in Zusammenarbeit mit der Universität Graz ein neuartiges Messverfahren „Optofluidische Kraft Induktion“ (OF2i) entwickelt, welches die Methoden der optischen Pinzetten sowie der Mikrofluidik kombiniert, um Größe, Größenverteilung, Konzentration und wenn möglich die Form von Nanopartikeln im Durchfluss mit hohem Durchsatz und in Echtzeit mit Einzelpartikel-Genauigkeit zu bestimmen [1]. OF2i ermöglicht die Untersuchung von dynamischen Prozessen und Partikelsystemen über sehr lange Zeiträume mit einer zeitlichen Auflösung im Sekundenbereich und kann sowohl als online Prozessanalysetechnik (PAT) als auch als Labormessgerät eingesetzt werden (Abb. 1).

Die zu untersuchenden Partikel sind in Flüssigkeit gelöst und werden durch einen mikrofluidischen Kanal innerhalb einer eigens dafür konzipierten Messzelle gepumpt (Abb. 2a). Zudem wird ein Laserstrahl höherer Ordnung, ein sogenannter Vortex-Strahl

in die Messzelle fokussiert, welcher das optische Einfangen einzelner Partikel in transversaler Richtung erzielt. Darüber hinaus bewirken optische Kräfte größenabhängige Geschwindigkeitsänderungen jedes Partikels in Ausbreitungsrichtung des Laserstrahls. Der Einsatz des Vortex-Lasers bietet einen großen Vorteil: Partikel verschiedener Größen werden auf einem ringförmigen Intensitätsprofil eingefangen und können so parallel und mit einem Durchsatz von 4000 Partikel/min vermessen werden.

Indem man nun die Geschwindigkeit einzelner Partikel misst, kann man auf die Größe der Nanopartikel rückschließen. Ein Vergleich dazu wären Segelboote mit unterschiedlicher Segelgröße, die bei gleicher Windstärke unterschiedlich schnell angetrieben werden: Indem man die Geschwindigkeit der Boote misst, kann man auf die Segelgröße rückschließen [2]. Im Fokusbereich des Laserstrahls, dort wo der Strahl die höchste Intensität aufweist, erfahren Partikel die höchste Geschwindigkeitsänderung in der Messzelle. An genau dieser Stelle wird die Geschwindigkeit gemessen und mithilfe eines theoretischen Modells ausgewertet, welches parameterfrei ist und OF2i zu einem kalibrierungsfreien System macht. Das Modell basiert auf den Maxwell-Gleichungen sowie der generalisierten Mie-Theorie und beschreibt die Bewegung einzelner Partikel innerhalb der Messzelle. Somit liefert es die Grundlage für umfangreiche Simulationen [3]. Ein Beispiel hierfür ist in Abbildung 2b gegeben, in der zwei simulierte Partikeltrajektorien dargestellt sind. Hier wird eine weitere Besonderheit der OF2i-Methode ersichtlich: Partikel bewegen sich auf spiralförmigen Bahnen um die optische Achse des anregenden Laserstrahls. Dies liegt einer besonderen Eigenschaft der hier eingesetzten Vortex-Lasermode zugrunde. Neben den optischen Kräften wird zusätzlich ein optisches Drehmoment auf Partikel übertragen, das ein Überholen von unterschiedlich gro-



© Alexander Lejjak, Brave Analytics

Abb. 1: OF2i Prozessanalysergerät (PAT, links) und Laborgerät (rechts) mit Auswerteeinheit.

Ben und schnellen Partikeln ermöglicht, im Prinzip wie auf einer mehrspurigen Autobahn. Dies ebnet in weiterer Folge den Weg zur Vermessung von höchst polydispersen und multimodalen Proben über einen Größenbereich von wenigen zehn Nanometern bis hin zu mehreren Mikrometern.

#### Die Nadel im Heuhaufen

Das neue Messverfahren eignet sich besonders für die Untersuchung sehr niedrig konzentrierter Proben. So wird derzeit in Kooperation mit der Montan Universität Leoben, Österreich, der Austritt von Nano- und Mikroplastik aus Plastikflaschen untersucht. Hier spielt vor allem die Größe und Konzentration eine wichtige Rolle. In Kooperation mit der medizinischen Universität Graz werden molekulare Prozesse untersucht, die aufzeigen sollen, wie Medikamente Kondensat-Formationen modulieren. Das Ziel

ist es, ein tieferes Verständnis über Flüssig-Flüssig-Phasentrennungsprozesse (LLPS) zu erlangen, um Medikamente zur effizienteren Behandlung von altersbedingten Krankheiten zu entwickeln. Hierfür wird die Größenverteilung von Proteinen über die Zeit analysiert.

#### Prozessüberwachung

Im Folgenden wird beschrieben, wie OF2i eingesetzt wird, um die Prozessdynamik einer Öl-in-Wasser-Emulsion innerhalb eines Hochdruck-Homogenisierungsprozesses zu überwachen. Daran wird aktuell mit einem Partner aus der pharmazeutischen Industrie in Richtung vollautomatisierter Echtzeit-Prozessfreigabe gearbeitet. Die zu untersuchende Probe wird online aus dem Herstellungsprozess entnommen, verdünnt und anschließend mit OF2i analysiert. Ziel im ersten Schritt ist es, Verände-

## Thomapren®-EPDM/PP-Schläuche – FDA konform

[www.rct-online.de](http://www.rct-online.de)



### Elastischer Pumpen-, Pharma- und Förderschlauch für höchste Ansprüche

- **High-Tech-Elastomer EPDM/PP:** Temperaturbeständig bis +135 °C, UV-beständig, chemikalienresistent, niedrige Gaspermeabilität
- **Für Schlauchquetschventile und Peristaltikpumpen:** Bis zu 30 mal höhere Standzeiten gegenüber anderen Schläuchen
- **Biokompatibel und sterilisierbar:** Zulassungen nach FDA, USP Class VI, ISO 10993, EU 2003/11/EG



**Reichelt  
Chemietechnik  
GmbH + Co.**

Englerstraße 18  
D-69126 Heidelberg  
Tel. 0 62 21 31 25-0  
Fax 0 62 21 31 25-10  
[rct@rct-online.de](mailto:rct@rct-online.de)



© Marko Šimić, Universität Graz, Brave Analytics

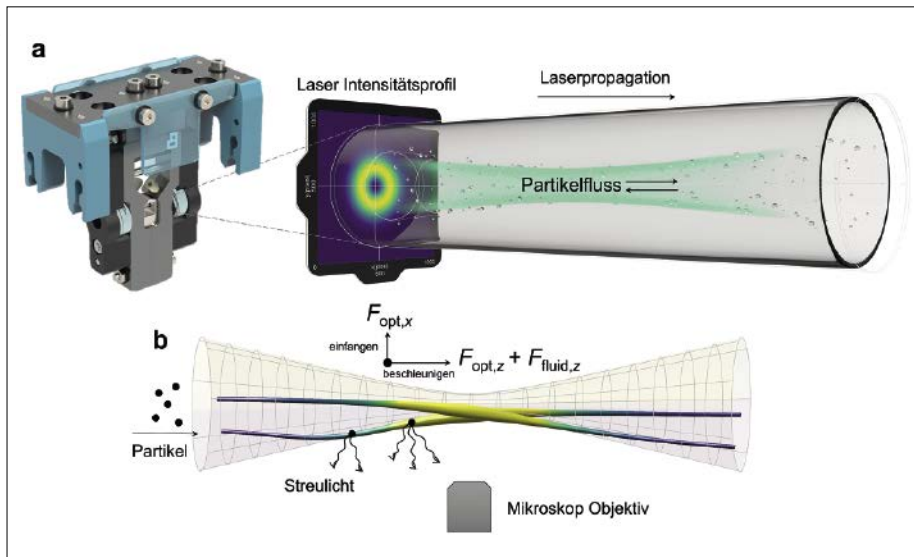


Abb. 2: Schematische Darstellung von OF2i. (a) Messzelle und Kapillare: Die zu untersuchenden Partikel werden durch einen mikrofluidischen Kanal gepumpt und interagieren mit einem schwach fokussiertem Laserstrahl höherer Ordnung. (b) Optische und fluidische Kräfte bewirken Geschwindigkeitsänderung von Einzelpartikeln entlang des Laserstrahls.

© Marko Šimić, Universität Graz, Brave Analytics

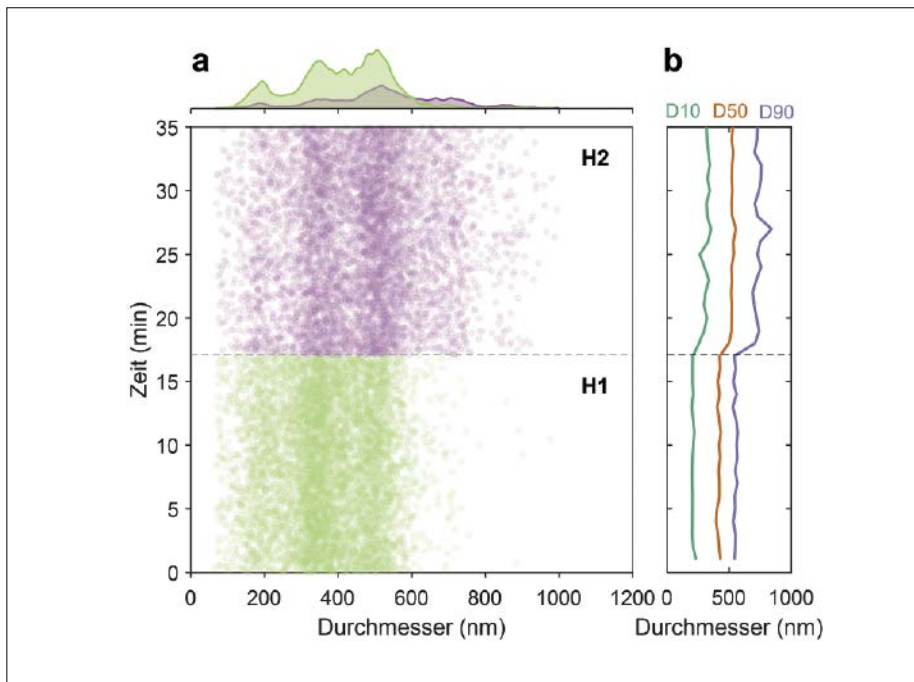


Abb. 3: Kontinuierliche Vermessung einer Öl-in-Wasser-Emulsion: (a) Streudiagramm und Histogramm zu vermessenen Partikeldurchmessern. Über eine Trendanalyse können zwei Homogenisierungszustände (H1, H2) identifiziert werden. (b) Zugehörige D-Werte als Funktion der Zeit, die mithilfe der kumulativen Partikelgrößenverteilung berechnet werden.

rungen von Homogenisierungszuständen im Herstellungsprozess frühzeitig zu erkennen, um Stillstandzeiten sowie Ausschussquoten von Produkten während der Qualitätskontrolle zu minimieren.

Abbildung 3a zeigt die kontinuierliche Vermessung von Partikelgrößen (Streudiagramm) sowie die daraus berechneten Größenverteilungen (volumenbasiert) über einen längeren Zeitraum. Eine Trendana-

lyse ermöglicht die Detektion des Änderungspunktes in der Größenverteilung (strichlierte Linie). Dies erlaubt in weiterer Folge eine Unterscheidung zwischen den Homogenisierungszuständen H1 und H2, wobei H2 durch eine auslaufende Größenverteilung und deutliche geringere Konzentration charakterisiert ist und somit nicht den hohen Qualitätsanforderungen entspricht.

Dieses Ergebnis wird durch D-Werte unterstützt (Abb. 3b, volumenbasiert), welche aus der kumulativen Partikelgrößenverteilung berechnet werden und eine leicht zu interpretierende Größe darstellen. Ein D50-Wert von 500 nm bedeutet beispielsweise, dass 50 % des gemessenen Volumens aus Partikeln besteht, deren Durchmesser < 500 nm beträgt. Am Änderungspunkt zeigen die D-Werte einen deutlichen Anstieg der Partikeldurchmesser innerhalb kürzester Zeit. Dieser lässt sich durch die hohe Zeitauflösung des Systems klar erkennen. Alle gemessenen Größen werden über eine geeignete Schnittstelle als Prozess-Feedbackparameter genutzt, um frühzeitig in den Prozess einzugreifen.

### Ausblick

Zurzeit wird auch daran geforscht, vorwärts gestreutes Licht auszuwerten, welches Information über Größe und Form von sehr niedrig konzentrierten, übergroßen Partikeln (LPC) liefern kann. Zusätzlich wird daran gearbeitet, das Prozessfeedback von OF2i zu erweitern, um spektroskopische Informationen mit Einzelpartikelgenauigkeit zu erhalten. Hierbei wurden bereits erste vielversprechende Ergebnisse am Beispiel von Nanoplastik erzielt. Diese Forschungsarbeiten werden als Teil von Dissertationsprojekten behandelt.

### Zugehörigkeiten

- <sup>1</sup>Brave Analytics, Graz, Österreich
- <sup>2</sup>Institut für Physik, Universität Graz, Österreich
- <sup>3</sup>Lehrstuhl für Medizinische Physik und Biophysik, Gottfried Schatz Forschungszentrum, Medizinische Universität Graz, Österreich
- <sup>4</sup>Graz Zentrum für Elektronenmikroskopie, Graz, Österreich

### ● KONTAKT |

Ing. Dr. Christian Hill  
Brave Analytics GmbH  
Graz, Österreich

Lehrstuhl für Medizinische Physik und Biophysik  
Gottfried Schatz Forschungszentrum  
Medizinische Universität Graz, Österreich

ORCID: 0000-0002-2801-9884  
christian.hill@medunigraz.at

**[1]** Literatur:  
<https://bit.ly/GIT-Hill>

# Struktur-Funktionsstudie einer Indol-Monooxygenase

Enzymoptimierung erlaubt (enantio-)selektive Biokatalyse

Dirk Tischler<sup>1</sup> und Norbert Sträter<sup>2</sup>

Indol ist ein natürlich vorkommender stickstoffhaltiger Heteroaromat. Es ist viel bekannt über die natürliche Bildung, aber der mikrobielle Abbau war lange nicht beschrieben. Es konnte gezeigt werden, dass es von Bakterien mittels Monooxygenasen zu einem labilen Epoxid aktiviert wird. Dies wird über weitere Reaktionen in Anthranilsäure umgesetzt, einem zentralen Intermediat. Findet die Umsetzung nicht statt, wird als Nebenprodukt Indigo, ein blauer, industriell relevanter Farbstoff, gebildet. Die Aktivierung von Indol durch eine Flavoprotein-Monooxygenase ist ein spannendes Thema mit biokatalytischen Anwendungen und es galt einige Fragen, insbesondere zum Mechanismus und zur Selektivität des Enzyms zu klären. So konnte gezeigt werden, dass man die Enzyme überproduzieren und zur selektiven Epoxidierung von Aromaten, wie Styrol und Inden, einsetzen kann. Durch Röntgestrukturanalyse und Computer-Modellierung konnte der Bindemodus des Substrates und des Cofaktors (FAD) aufgeklärt und die Regio- und Enantioselektivität verstanden werden. Es gelang letzteres durch rationales Enzymdesign zu optimieren und mit einer Enzymvariante sehr reines (1*S*,2*R*)-Indenoxid herzustellen. Dies ist eine Vorstufe zur Synthese eines HIV-Proteaseinhibitors.

## Mikrobieller Abbau von Indol

Indol und dessen Derivate sind wichtige Naturstoffe mit verschiedensten biologischen Aktivitäten wie zum Beispiel: Duft, Pigmentbildung, Botenstoff, Hormonbildung, psychoaktiven Eigenschaften, um nur einige zu nennen. Indol selbst kommt im Öl verschiedener Pflanzen vor, so verursacht es den typischen Geruch von Rapsfeldern. Dazu kann man es auch in Steinkohlenteer ebenso in Fäkalien nachweisen. Aufgrund seiner Verwendung in der Parfümindustrie und als Ausgangsverbindung für verschiedenste Synthesen bedarf es neben dem natürlichen Indol auch synthetischer Anstrengungen. Es gibt zahlreiche Routen zu synthetischem Indol, aber die nach Emil

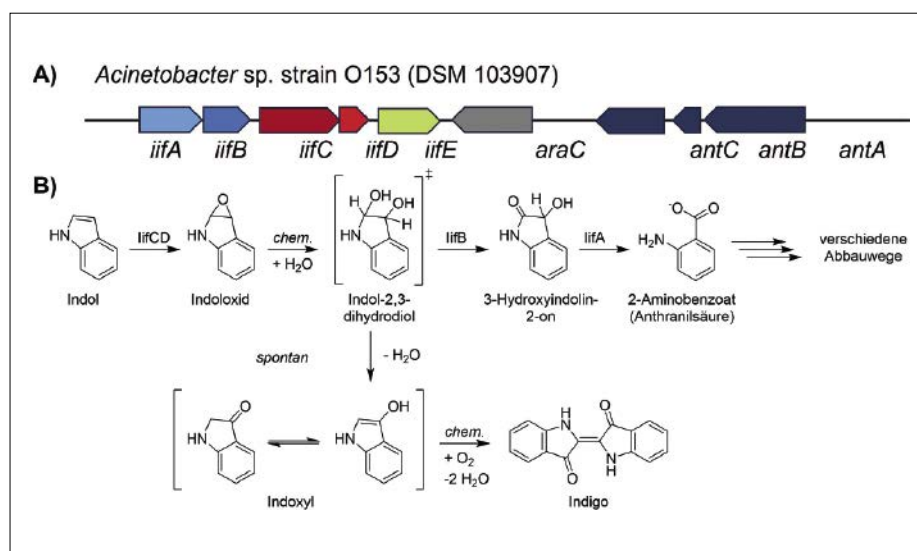


Abb. 1: Mikrobieller Abbau von Indol und Bildung von Indigo. A) Das Gencluster zum Indolabbau von Stamm O153 codiert Enzyme die Indol in Anthranilsäure umsetzen und in direkter Nachbarschaft ist die Anthranilsäure-Dioxygenase codiert. B) Es ist der einleitende enzymatische Indolabbauweg dargestellt und die mögliche Nebenreaktion hin zu Indigo.

Fischer benannte Fischer-Indolsynthese ist wohl die meist genutzte.

Indol kommt also in der Natur vor und wird zudem im Tonnenmaßstab synthetisch produziert, daher ist es nicht verwunderlich, dass Mikroorganismen Indol als Kohlenstoffquelle nutzen können. Interessanterweise war der mikrobiellen Indolabbau lange nicht im Detail verstanden. Es gab zwar zahlreiche Studien, die Indol als mikrobielle Substrate auswiesen, aber in der Regel nur eine oxidative Aktivierung des Indols mit anschließender Pigmentbildung berichteten [1]. Letzteres führt häufig zu Indigo, dem blauen Jeansfarbstoff. Diese Reaktion scheint eine Nebenreaktion im Indolabbau darzustellen. In der Tat wurde 2017 dann ein erster detaillierter Abbauweg von Indol über Anthranilsäure beschrieben [2-4]. Hier führt die sukzessive Aktivität von drei Enzymen zu folgenden Beobachtungen (Abb. 1). Indol wird mit Luftsauerstoff aktiviert, wobei ein Zweikomponenten-Enzym zum Einsatz kommt, das Indol zu einem Epoxid oxidiert, welches autokatalytisch durch Angriff von Wasser in ein Dihydrodiol umgesetzt wird. Darauf folgt

durch eine Oxidoreduktase und eine Cofaktor-unabhängige Oxygenase die Transformation in Anthranilsäure. Eliminiert man diese beiden Enzyme wird aus dem Dihydrodiol Indoxyl gebildet, welches in Gegenwart von Luftsauerstoff autokatalytisch zu Indigo dimerisiert.

Nachdem der Abbau von Indol über Anthranilsäure aufgeklärt und vor allem das erste Enzym des Stoffwechselweges untersucht wurde, konnten einige Hypothesen formuliert werden: 1) Es handelt sich um eine enantioselektive Monooxygenase, wobei der Cofaktor FAD und die aktive Tasche die Selektivität bestimmen. 2) Man kann die Enantioselektivität aufgrund der Aminosäuresequenz vorhersagen und durch Mutationen beeinflussen. Und 3) die Reaktivität lässt sich auf weitere Substrate übertragen, da dieses Enzym sehr ähnlich zu den besser charakterisierten Styrol-Monooxygenasen ist. Styrol-Monooxygenasen leiten den aeroben Styrolabbau ein. Diese Enzyme sind ebenfalls FAD-abhängig und erlauben enantioselektive Epoxidierungen und Sulfoxidierungen [5].

### Strukturelle und mechanistische Details der Indol-Monooxygenase VpIndA1

Zur Charakterisierung des Substratbindemodus wurde die Indol-Monooxygenase aus dem Bakterium *Variovorax paradoxus* EPS kristallisiert, im Folgenden als VpIndA1 abgekürzt [6]. Es gelang die Röntgenstrukturanalyse des Enzyms in Komplex mit Indol und anderen Substraten, die in einem flachen ovalen Hohlraum in der Nähe des reaktiven Isoalloxazinrings des FAD-Cofaktors binden (Abb. 2). Über die erstmalige Beschreibung des Substratbindemodus einer Typ E Flavoprotein-Monooxygenase hinaus war die Rationalisierung des Substratbindemodus mit kraftfeldbasierter Computermodellierung ein wichtiger Schritt zum Verständnis der experimentell charakterisierten Regio- und Stereo-Selektivität von VpIndA1. Dazu wurde ausgehend vom Bindemodus von FAD das reaktive FAD-Peroxy-Zwischenprodukt modelliert. Die Position der Peroxygruppe relativ zu den zu oxidierenden Atomen des Substrates bestimmt dabei die Selektivität des Enzyms. Für VpIndA1 konnte damit die selektive

Substrat	mg <sub>p</sub> mg <sub>E</sub> h <sup>-1</sup>	Enantiomer	ee (%)
Styrol	0,2	S	98,2
Phenylmethylsulfid (PMS)	1,1	S	97,9
p-CH <sub>3</sub> -PMS	0,7	S	> 99
p-CH <sub>3</sub> O-MS	1,6	S	98,9
p-F-PMS	1,7	S	> 99
p-Cl-PMS	1,2	S	> 99
p-Br-PMS	1,3	S	> 99
Phenylvinylsulfid (PVS)	1,2	R	87,3
Ethylphenylsulfid (EPS)	1,6	S	79,6
Benzylmethylsulfid (BMS)	2,6	S	97,4
Diphenylsulfid (DPS)	0,1	n.d.	-
Benzylphenylsulfid (BPS)	0,1	n.d.	-

Tab. 1: Biotransformationsraten und Präferenz zu Enantiomer von VpIndA1 [7].

Bildung von (S)-Methylphenylsulfoxid aus Methylphenylsulfid (>99% Enantiomerenüberschuss ee) verstanden werden (Abb. 2). Weiterhin ist es gelungen, die Stereoselektivität der Epoxidierung von Inden mit der Variante VpIndA1<sup>F191M/F201M/I302V</sup> für die Bildung von (1S,2R)-Indenoxid von 35,1% für

das Wildtyp-Enzym auf 99,8% ee zu steigern. Auch hier lässt sich die Stereoselektivität durch eine Umorientierung des Indens aufgrund der Verengung der Substrattasche in der Nähe der F201L-Mutationsstelle in der Computermodellierung verstehen. Die hervorragende Übereinstimmung der kraft-

WILEY-VCH



## Alle wesentlichen Aspekte

### Abriss der Bierbrauerei

Achte, vollständig überarbeitete und erweiterte Auflage

Ludwig Narziß et al. • 72,90 Euro. ISBN 978-3-527-34036-1

Das Lehrbuch zur Bierbrauerei von Ludwig Narziß ist seit vielen Jahren das Standardwerk auf diesem Gebiet. Das Autorenteam ist für die achte Auflage um drei hervorragende Fachleute auf dem Gebiet der Bierbrauerei erweitert worden. Werner Back, Martin Zarnkow und Martina Gastl (alle Technische Universität München, Weihenstephan) stehen für die kontinuierliche Weiterentwicklung dieses Lehrbuches.

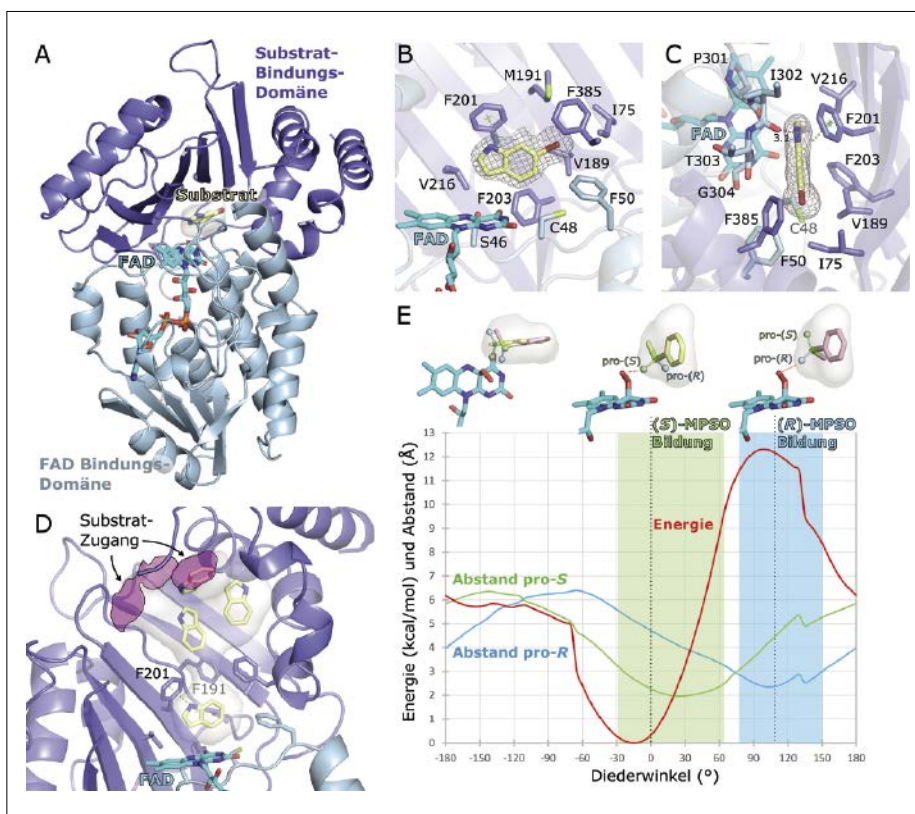
Für Studierende ist das Buch ein kurz gefasster Leitfaden, der jedoch alle wesentlichen Aspekte abdeckt. Bereits im Betrieb tätige Praktiker\*innen erhalten eine Fülle von Anregungen und einen umfassenden Überblick über den heutigen Stand der Brauereitechnologie sowie der naturwissenschaftlichen Grundlagen der Bierbrauerei.



Titeldetailseite  
ansetzen und  
direkt bestellen!

wiley-vch.de/ISBN9783527340361





**Abb. 2:** Substratbindung und Stereoselektivität von *VpIndA1*. (A) Bindemodus des Substrates Indol in der Nähe des FAD-Cofaktors. (B) und (C) Bindemodus von Bromindol in einer vornehmlich hydrophoben Bindetasche. Der Ligand ist sehr gut in der Elektronendichte definiert. Die zu epoxidierende Doppelbindung ist zum FAD-Cofaktor für einen effektiven Sauerstofftransfer positioniert und der Bindemodus ist in Übereinstimmung mit der Bildung von (2*R*,3*R*)-Indoloxid. (D) Bei gebundenem FAD-Cofaktor erfolgt der Zugang zur Substratbindetasche über einen Tunnel, in dem weitere Indolmoleküle bei einer Substratkonzentration von 18 mM im Kristall binden. Diese Bindestellen sind wahrscheinlich für die in Enzymkinetiken beobachtete Substrathemmung bei hohen Substratkonzentrationen verantwortlich. (E) Kraftfeldbasierte Energieberechnungen zeigen, dass die Bildung von (*S*)-Methylphenylsulfoxid auf die deutlich energieärmere Bindung des pro-*S*-Komplexes zurückzuführen ist. Abbildung adaptiert aus [6].

feldbasierten Modellierung mit den experimentellen Befunden ist sicher auch auf die sterische Beschränktheit der kleinen Substratbindetasche zurückzuführen. Für dieses Enzym erscheint ein computergestütztes strukturbasiertes Design von neuen Varianten für maßgeschneiderte Epoxidierungen und Sulfoxidierungen daher vielversprechend. Eine Vergrößerung der Substratbindetasche ermöglichte bereits eine Sulfoxidierung von Benzylphenylsulfid, welches vom Wildtypenzym nicht umgesetzt wird.

### Biotechnologische Anwendung von *VpIndA1*

Die hier untersuchte Flavoprotein-Monooxygenase setzt Indol hochselektiv um und es konnte durch rationales Design keine Optimierung für das natürliche Substrat erreicht werden [6]. Dies verdeutlicht, wie

gut die Natur selektiert und optimiert und deutet auf eine lange Evolutionsgeschichte der Enzyme hin. Aber die Verwandtschaft von *VpIndA1* zu anderen Flavoprotein-Monooxygenasen, den Styrol-Monooxygenasen impliziert, dass unser Enzym auch andere Reaktionen von hohem Wert katalysieren kann. In der Tat konnte schon vorher gezeigt werden, dass dieses Enzym sehr effektiv Sulfoxidationen von Aryl-Alkyl-Sulfiden erlaubt (Tab. 1) [7]. Dazu kam eine gewisse Bandbreite an Substraten, die in Epoxide umgesetzt wurden (z. B. Styrol, Indol, Inden und auch substituierte Styrole; nicht gezeigt). Hier ist vor allem die oben genannte Steigerung der Aktivität und auch Enantioselektivität im Fall der Epoxidierung von Inden zu nennen, was in Zukunft weiterverfolgt werden soll. Das so zugängliche (1*S*,2*R*)-Indenoxid ist ein potenter Synthesebaustein zum Beispiel für einen HIV-Protease-Hemmer.

### Zusammenfassung

Es konnte erstmals eine Struktur einer Indol-Monooxygenase aufgeklärt werden. Es liegen nun strukturelle Informationen zur Bindung des Cofaktors FAD und der Substratbindetasche vor. Auch das Engineering hin zu neuen Selektivitäten war erfolgreich, so konnten Substratgröße und auch Enantioselektivität nach Wunsch gestaltet werden. Kinetische Untersuchungen haben die Aufklärung des Mechanismus untermauert und zeigen Limitationen für die Katalyse auf. Diese Studien ermöglichen die Nutzung von Struktur-Funktionsbeziehungen zur effektiven Biokatalyse. In Kombination mit verwandten Styrol-Monooxygenasen zur *S*- und *R*-selektiven Epoxidierung sollte es nun möglich sein, die Enantioselektivität dieser Enzymklasse nach Wunsch zu designen. Dazu sollten weitere Strukturen der verwandten Enzyme untersucht werden. Auch wird es wichtig sein, die Stabilität zu optimieren und Anwendungen zur Synthese von Feinchemikalien in der industriellen Biotechnologie weiter voranzutreiben.

### Zugehörigkeiten

<sup>1</sup>Mikrobielle Biotechnologie, Fakultät für Biologie und Biotechnologie, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland

<sup>2</sup>Institut für Bioanalytische Chemie, Biotechnologisch-Biomedizinisches Zentrum, Universität Leipzig, Deutschland

### KONTAKT |

Prof. Dr. Dirk Tischler

Mikrobielle Biotechnologie

Fakultät für Biologie und Biotechnologie

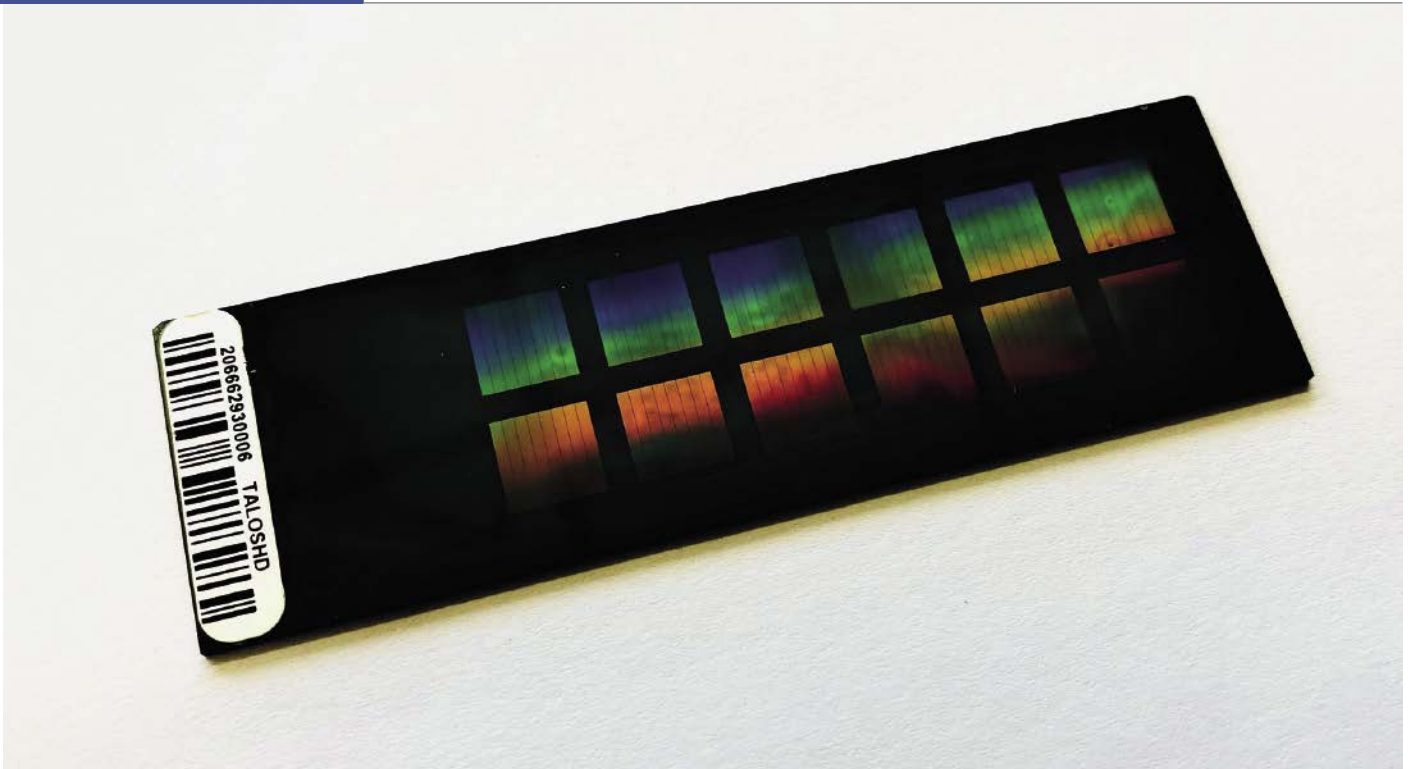
Ruhr-Universität Bochum, Deutschland

ORCID: 0000-0002-6288-2403

dirk.tischler@rub.de



Literatur:  
<https://bit.ly/GIT-Tischler>



© Sina Tönges

# Epigenetischer Fingerabdruck als Herkunftsnachweis von Fleisch

Neue Ansätze für mehr Lebensmittelsicherheit und Tierwohl

Sina Tönges<sup>1</sup>, Florian Böhl<sup>2</sup>, Frank Lyko<sup>3</sup>

**D**as Wissen über die Herkunft eines Produkts, die Haltungsbedingungen und das Wohlergehen eines Tieres spielen für Konsumenten eine zunehmend wichtige Rolle bei der Wahl des Fleisches. Die epigenetische Forschung und bekannte Methoden aus dem Labor könnten zukünftig dafür sorgen, dass ein fälschungssicherer Nachweis gelingen kann. Kürzlich veröffentlichte Studien haben gezeigt, dass verschiedene Umweltbedingungen einen epigenetischen Fingerabdruck in Form von DNA-Methylierungsmustern auf dem Genom verschiedener Nutztiere hinterlassen. Dadurch ist es möglich, die Herkunft und das Wohlergehen der Tiere im Fleisch nachzuweisen. Für die Erkennung und Aufklärung dieser Muster wurde Bisulfit-konvertierte DNA verschiedenster Organismen aus unterschiedlichen Habitaten und Bedingungen mittels verschiedener Protokolle sequenziert und anschließend bioinformatisch analysiert. Für die kommerzielle Nutzung sind diese Methoden jedoch nicht geeignet, da sie zu kostenintensiv und zeitaufwändig sind. Arraybasierte Methoden stellen eine attraktive Alternative dar und können in absehbarer Zeit einen standardisierten Nachweis für die Herkunft von Tierprodukten erlauben.

## Die Rolle der DNA-Methylierung und ihre Nachweismethoden

Die DNA-Methylierung ist ein biologischer Prozess, bei dem Methylgruppen an Cytosinbasen der DNA angefügt werden. Diese Methylgruppen können die Aktivität eines DNA-Abschnitts beeinflussen, ohne die Sequenzabfolge der Basen zu verändern. Befindet sich die DNA-Methylierung in einem

Genpromotor, wirkt sie in der Regel hemmend, in seltenen Fällen auch aktivierend auf die Gentranskription. Die DNA-Methylierung ist eine wichtige epigenetische Veränderung, die in den Genomen von Tieren weithin konserviert ist und sich kontextabhängig verändern kann, auch als Reaktion auf veränderte Umweltparameter [1].

In der epigenetischen Forschung ist der Nachweis von Methylierungsstellen an der

DNA mit Einzel-Basen-Auslösung nicht mehr neu. Moderne Sequenziermethoden und die Bisulfit-Konvertierung ermöglichen eine präzise Aussage über den Methylierungsstatus bestimmter Bereiche der DNA. Entscheidend für den Nachweis der Methylierungsmarkierungen war die Erkenntnis, dass Natriumbisulfit die Fähigkeit besitzt, einen methylierungsabhängigen Polymorphismus in die DNA-Sequenz einzufügen. Dabei deaminiert Natriumbisulfit unmethylierte Cytosin-Basen zu Uracil, während methylierte Cytosine (und ihre oxidierten Derivate) vor der Deaminierung geschützt sind. Eine anschließende PCR-Reaktion wandelt Uracil zu Thymin um, während methyliertes Cytosin als Cytosin erhalten bleibt [2]. Vergleicht man nun das unbehandelte Referenzgenom mit der Natriumbisulfit-behandelten Sequenz, so ergibt sich für jede unmethylierte Stelle eine abweichende Base (Uracil oder nach Amplifikation durch PCR Thymin) im Vergleich zur Referenz, für jede methylierte Stelle die gleiche Base (Cytosin).

Je nach Fragestellung kann nun das gesamte Genom sequenziert und analysiert werden, oder auch nur Teile davon. Die Methylierungssequenzierung des Komplettege-

	WGBS	RRBS	SGBS	Array
Genomabdeckung	Gesamtes Genom	CpG-reiche Regionen	Designspezifische Regionen	Designspezifische Methylierungsstellen
Menge Probenmaterial	10–100 ng aufgereinigte DNA	10–500 ng aufgereinigte DNA	1–3 µg aufgereinigte DNA	100–250 ng aufgereinigte DNA
Proben-vorbereitung*	ca. 1 Woche	ca. 1 Woche	ca. 2 Wochen	3–4 Tage
Analyseaufwand	Hoch	Mittel	Mittel	Niedrig
Kosten pro Probe	ca. 3000 Euro	ca. 600 Euro	ca. 600 Euro	ca. 100 Euro

Tab. 1: Vergleich verschiedener Methoden zur Analyse von DNA-Methylierung. Die Angaben zur Probenvorbereitung und Kosten sind Abschätzungen und beruhen auf Erfahrungswerten. WGBS = Whole Genome Bisulfite Sequencing; RRBS = Reduced Representation Bisulfite Sequencing; SGBS = Subgenome Bisulfite Sequencing. (\*nach DNA-Extraktion inklusive Sequenzieren/Scannen).

noms (Whole-Genome Bisulfite Sequencing, WGBS) lässt, wie es der Name schon andeutet, eine Analyse des gesamten Genoms mit Einzelbasen-Auslösung zu. Diese Methode ist in der Wissenschaft der Goldstandard der Methylierungsanalyse, erfordert aber auch einen enormen bioinformatischen Analyseaufwand, da hier Millionen unterschiedlicher Datenpunkte analysiert werden müssen. Zudem kann diese Methode schnell sehr teuer werden, da für robuste Ergebnisse oft eine mehr als 20-fache Abdeckung des Genoms benötigt wird. Eine kosten- und ressourcenschonendere Methode ist die Bisulfit-Sequenzierung bestimmter Zielregionen. Beispielsweise können durch den Verdau der DNA mit Restriktionsenzymen, gezielt methylierte Regionen angereichert und, nach Bisulfit-Konvertierung, sequenziert werden (Reduced Representation Bisulfite Sequencing, RRBS) [3]. Durch den reduzierten Genomsatz, können sowohl die Sequenzierungskosten als auch der Analyseaufwand deutlich verringert werden. Einem ähnlichen Prinzip folgt auch die Subgenomanalyse mittels biotinierten RNA-Oligonukleotiden. Diese werden spezifisch für die Fragestellung hergestellt und „fischen“ dann die komplementären DNA-Fragmente aus dem gesamten Genom heraus. Der Vorteil hier ist, dass Genome gezielt in dynamischen Bereichen analysiert werden können. Alle drei beschriebenen Methoden benötigen eine Sequenzierung der Proben und unterscheiden sich im Wesentlichen durch die Probenvorbereitung und die damit einhergehende Menge an DNA, welche sequenziert wird (Tab. 1).

Ganz ohne Sequenzierung kommen dagegen Arraybasierte Methoden aus. Zunächst in der Genetik für den Nachweis von Polymorphismen etabliert, können diese Plattformen inzwischen auch Methylierungsmarkierungen identifizieren. Die Elongation von Arraygekoppelten Oligonukleotiden ist eine besonders robuste Lösung für den Nachweis und die Quantifizierung dieser Markierungen [4].

Die weit verbreitete kommerzielle Lösung für menschliche DNA (Illumina EPIC), umfasst aktuell 950.000 Methylierungsstellen. Auch hier wird die Bisulfit-Konvertierung nutzbar gemacht: Der Array fragt die chemisch differenzierten Basen, welche durch die Konvertierung entstanden sind, mit zwei ortsspezifischen Sonden ab, von denen eine für das methylierte Molekül und die andere für das unmethylierte Molekül bestimmt ist. Der Methylierungsgrad der untersuchten Stelle kann durch Berechnung des Verhältnisses der Fluoreszenzsignale von den methylierten zu den nicht methylierten Sonden bestimmt werden. Diese Methode ist sowohl die kostengünstigste als auch diejenige, die mit dem kleinsten Aufwand analysiert werden kann. Ein Nachteil ist jedoch, dass diese Arrays bisher nur für die Humandiagnostik und für die Forschung mit Labormäusen auf den Markt gebracht wurden.

#### Neue Anwendungsgebiete für bekannte Methoden

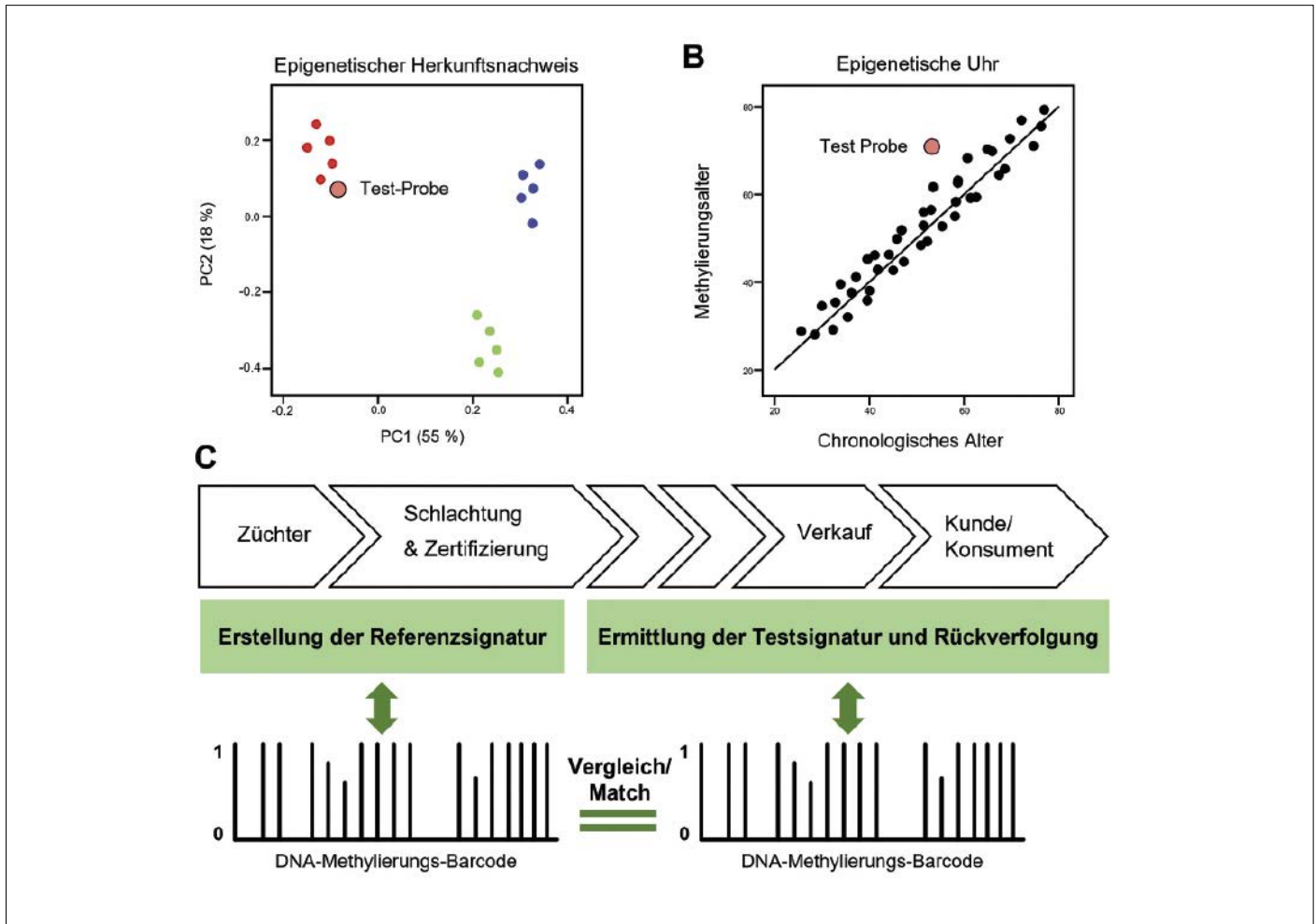
Neueste Forschungen zum Einfluss von Umweltfaktoren auf das Muster der Methylierungsmarkierungen an der DNA eröffnen nun möglicherweise eine neuartige Nutzung außerhalb des wissenschaftlichen Rahmens. Anders als in der Genetik, wo Anpassungsmechanismen erst über Generationen hinweg zum Tragen kommen und deshalb deutlich langsamer sind, sind epigenetische Anpassungsvorgänge dynamischer und schneller [5]. Allerdings können genetische Polymorphismen epigenetische Muster stark beeinflussen. Um diesen Faktor auszuschließen, erfolgten erste Untersuchungen mit dem Marmorkrebs, einem klonalen Flusskrebis mit hoher Anpassungsfähigkeit an verschiedenste Lebensräume. Die Resultate zeigten, dass verschiedene Habitate verschiedene Methylierungsmuster auf der DNA hinterlassen, die für jeden Krebs aus diesem Habitat wieder-

zufinden sind und sich von Mustern anderen Habitaten unterscheiden [6]. Dieses Prinzip konnte dann auch auf andere Tiere übertragen werden, sofern dabei genetische Einflussfaktoren ausgeschlossen wurden. So wurden beispielsweise Gewässer-spezifische Muster bei Lachsen, Farm-spezifische Muster bei Hühnern und Produzenten-spezifische Muster bei Garnelen gefunden [7].

#### Epigenetischer Fingerabdruck lässt fälschungssichere Rückschlüsse auf Herkunft und Wohlergehen von Tieren zu

Immer mehr Konsumenten sind darauf bedacht, über die Herkunft ihrer Lebensmittel und die Bedingungen, unter denen ein Tier gehalten wird, zuverlässig informiert zu werden [8]. Gesicherte Nachweismethoden für komplexe Umweltfaktoren gibt es aber bisher nicht. Mit der Erkenntnis, dass Umwelteinflüsse bestimmte Muster in Form von Methylierungsmarkierungen auf der DNA hinterlassen, lässt sich ein Nutzen für die Lebensmittelsicherheit ableiten. Kennt man das Muster eines Habitats und damit die Herkunft des Tieres, kann überprüft werden, ob unbekannte Proben oder Tiere tatsächlich aus diesem Habitat stammen (Abb. 1). Es kann also am Produkt überprüft werden, ob das Tier tatsächlich dort aufgezogen wurde, wo es laut Verpackungsaufschrift aufgezogen worden sein soll. Werden nun noch Konzepte wie epigenetische Uhren zur Alters- oder Tierwohlbestimmung hinzugezogen, so eröffnen sich fundamental neuartige Möglichkeiten für die Zertifizierung von tierischen Produkten [9]. Um wissenschaftlich zu diesen Erkenntnissen zu gelangen, war es nötig, mit den weiter oben beschriebenen Sequenzierungsmethoden viele und umfangreiche Datensätze für die einzelnen Spezies zu generieren und zu analysieren. Die Nachteile dieser Methoden sind die Kosten, der Zeitaufwand der Probenvorbereitung und die aufwändige Analyse. Zudem sind viele der erhobenen Datenpunkte nicht durch Umweltfaktoren beeinflusst. Hat man die Kontext-abhängigen dynamischen Methylierungsstellen der DNA für die unterschiedlichen Spezies identifiziert, so könnte man diese auf einem spezifisch angefertigten

www.cfm.de  
 Der schnellste Muffelofen der Welt.  
 Feuchtemessung in 2 Minuten.  
 Extraktion, Aufschlüsse, Hydrolysen  
 und Fettsäurebestimmung in der  
 Mikrowelle: einfach und schnell.  
 Gehalte an Fett, Öl, und Eiweiß  
 in nur 3 min.  
 CFM



**Abb. 1:** Epigenetische Fingerabdrücke für die Laboranalyse von Fleischprodukten. (A) Die DNA-Methylierungsanalyse einer Testprobe (großer roter Punkt) zeigt ein Muster, welches den Referenzproben eines bestimmten Betriebs (kleine rote Punkte) ähnelt. Dies kann auf die Herkunft aus einer Quelle mit hohen Tierschutzstandards hindeuten. (B) Die DNA-Methylierungsanalyse einer Testprobe (großer roter Punkt) zeigt ein Methylierungsalter, das höher ist als das chronologische Alter, was darauf hinweist, dass das entsprechende Tier ungesunden Bedingungen ausgesetzt war. (C) Illustration der epigenetischen Rückverfolgung durch den Umwelt-Fingerabdruck. Fleischproben werden in landwirtschaftlichen Betrieben und/oder Schlachthöfen entnommen, um Referenz-DNA-Methylierungssignaturen („Strichcodes“) zu erstellen. Die Testsignaturen können an jedem Punkt der Wertschöpfungskette erstellt und dann mit den Referenzsignaturen abgeglichen werden. Testsignaturen, die mit einer bestimmten Referenzsignatur übereinstimmen, bestätigen, dass die Tiere aus dem/den spezifischen Referenzbetrieb(en) aufgezogen stammen. Umgekehrt zeigen Prüfsignaturen, die nicht mit einer Referenzsignatur übereinstimmen, dass das Tier außerhalb der durch die Referenzprofile repräsentierten Betriebe aufgezogen wurde. Editiert nach [9].

Methylierungsarray abbilden. Dies ermöglicht eine anwenderfreundliche und kostengünstige Analyse der Proben und bietet einen fälschungssicheren Nachweis der Herkunft und des Wohlergehens des Tieres.

## Fazit

Tierwohl und Lebensmittelsicherheit nehmen eine immer größer werdende Rolle bei der Wahl des Produktes ein. Zuverlässige fälschungssichere Nachweismethoden sind aber bisher nicht verfügbar. Der Nachweis epigenetischer Fingerabdrücke mittels Methylierungsarrays eröffnet die Möglichkeit, gesicherte Kontrollen von tierischen Erzeugnissen durchzuführen. Den Weg

dahin bereitete die Grundlagenforschung und die Anwendung etablierter Methoden wie die Methylierungssequenzierung des Kompletengenoms oder die Bisulfitequenzierung von Subgenomen. Für die Analyse von Proben im Lebensmittelbereich sind kostengünstige, schnelle und einfach zu analysierende Methoden notwendig. Arraybasierte Plattformen und darauf angepasste Analysesoftware könnten die Zukunft für solche Anwendungsgebiete darstellen.

## Zugehörigkeiten

<sup>1</sup>Innovation Management, Deutsches Krebsforschungszentrum, Heidelberg, Deutschland  
<sup>2</sup>Creavis, Evonik Operations, Hanau-Wolfgang, Deutschland

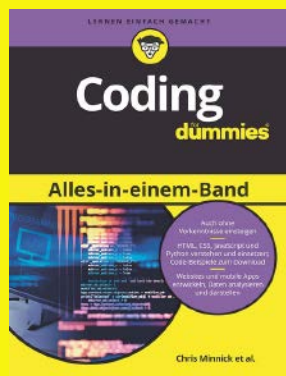
<sup>3</sup>Abteilung Epigenetik, Deutsches Krebsforschungszentrum, Heidelberg, Deutschland

## KONTAKT |

Prof. Dr. Frank Lyko  
 Abteilung Epigenetik  
 Deutsches Krebsforschungszentrum  
 Heidelberg, Deutschland  
 ORCID: 0000-0002-4873-5431  
 f.lyko@dkfz.de

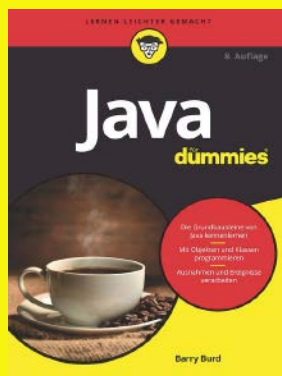
**[1]** Literatur:  
<https://bit.ly/GIT-Lyko>

Es ist einfach mit der Zukunft  
Schritt zu halten und Spaß  
dabei zu haben!



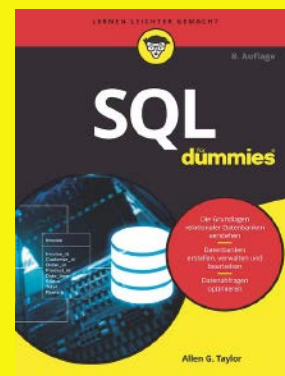
2023. 848 Seiten. Broschur.  
€ 34,-  
ISBN: 978-3-527-72108-5

Wenn Sie Webseiten oder  
mobile Apps entwickeln  
möchten, dann ist dieses  
Buch für Sie gemacht!



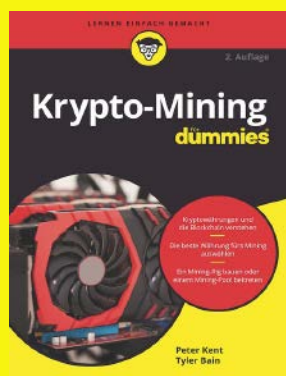
2023. 480 Seiten. Broschur.  
€ 20,-  
ISBN: 978-3-527-72020-0

»Java für Dummies« ist gleich-  
zeitig Lehrbuch und unverzicht-  
bares Nachschlagewerk für alle  
Java-Programmierer.



2023. 480 Seiten. Broschur.  
€ 26,-  
ISBN: 978-3-527-72022-4

In »SQL für Dummies«  
finden Einsteiger alles Wis-  
senswerte rund um die  
Abfragesprache SQL.



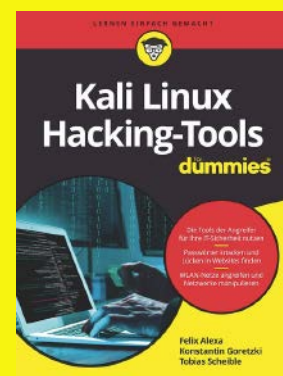
2022. 336 Seiten. Broschur.  
€ 28,-  
ISBN: 978-3-527-72025-5

Hier erfahren Sie von zwei  
Insidern, wie Sie Bitcoin,  
Ethereum, Monero, Litecoin  
und Dash richtig schürfen.



2023. 512 Seiten. Broschur.  
€ 26,-  
ISBN: 978-3-527-72099-6

Mit diesem Buch bringen Sie  
sich auf den aktuellen Stand  
beim Thema »Künstliche  
Intelligenz«.



2023. 416 Seiten. Broschur.  
€ 28,-  
ISBN: 978-3-527-71910-5

Das Buch zeigt Ihnen Schritt  
für Schritt, wie Sie Ihre Sys-  
teme mit Kali Linux auf Herz  
und Nieren prüfen.

Folgen Sie uns auf Facebook und Instagram  
[www.facebook.com/fuerdummies](https://www.facebook.com/fuerdummies)  
[www.instagram.com/furdummies](https://www.instagram.com/furdummies)

[www.fuer-dummies.de](http://www.fuer-dummies.de)

für  
**dummies**<sup>®</sup>



Trinkwasseraufbereitungsanlage  
der Bodensee-Wasserversorgung.

© Bodensee-Wasserversorgung

# Non-Target Screening für die Wasseranalytik

Auf dem Weg zur internationalen Normung

Michael Petri

**N**on-Target Screening (NTS) mittels Hochleistungsflüssigchromatographie (HPLC) kombiniert mit der hochauflösenden Massenspektrometrie (HRMS) hat sich in den letzten Jahren zu einem bedeutenden Werkzeug als Nachweis und zur Identifizierung von organischen Spurenstoffen in der aquatischen Umwelt etabliert. Eine internationale Normung zur Standardisierung des Verfahrens ist der nächste notwendige Schritt, um dem Non-Target Screening als ein wirksames Werkzeug zum Spurenstoff-Monitoring in der Umwelt zu einer noch besseren Akzeptanz zu verhelfen. Die zwei Leitfäden der Wasserchemischen Gesellschaft und des Niederländischen Normungsinstituts sind eine hervorragende Grundlage für eine weltweit gültige Norm zum NTS mittels HPLC-HRMS. Bei der Internationalen Organisation für Normung (International Organization of Standardization, kurz ISO) wurde der Normungsprozess durch Gründung einer Arbeitsgruppe eingeleitet.

## Non-Target Screening in der Wasseranalytik

Seit zehn Jahren wird nun Non-Target Screening (NTS) durch Kopplung von Hochleistungsflüssigchromatographie (HPLC) und hochauflösender Massenspektrometrie (HRMS) erfolgreich für die Überwachung von Grund-, Oberflächen- und Trinkwasser und als Nachweis und zur Identifizierung bisher unbekannter organischer Spu-

renstoffe, inklusive ihrer Metaboliten und Transformationsprodukte in der aquatischen Umwelt eingesetzt, die mit der üblichen Vorgehensweise, der quantitativen Target-Analytik, normalerweise nicht entdeckt worden wären. Universitäten, Forschungsinstitute und Hersteller von Analysensystemen haben durch eine kontinuierliche Forschung und Weiterentwicklung von Analysengeräten und Auswertprogrammen zur Datenanalyse wesentlich dazu beigetragen, das Erkennen und Identifizieren von neuen organischen Spurenstoffen deutlich zu verbessern.

Seit die Analysensysteme mit hochauflösenden Massenspektrometern preiswerter geworden sind, hat NTS mit HPLC-HRMS die Welt der Universitäten und Forschungsinstitute verlassen und wird immer häufiger in Routinelaboratorien zur Überwachung verschiedenster wässriger Proben eingesetzt. Aber ist NTS wirklich bereit für die Routineanalytik? NTS ist immer noch ein sehr herausforderndes Analysenverfahren und es müssen viele Dinge berücksichtigt werden, damit die Ergebnisse verlässlich und vergleichbar sind.

Die Wasserchemische Gesellschaft hat 2019 einen ersten Leitfaden für den Einsatz von NTS mit HPLC-HRMS in der Wasseranalytik veröffentlicht [1]. In diesem Leitfaden wurden erstmalig generelle Voraussetzungen und Anforderungen für den Einsatz von NTS in der Wasseranalytik definiert. 2022 wurde vom Niederländischen Normungsinstitut ein weiterer Leitfaden zum Einsatz von NTS mit Chromatographie und Massenspektrometrie für organische Spurenstoffe in Wasser veröffentlicht [2]. In beiden Leitfäden

wird ein besonderer Fokus auf verschiedene qualitätssichernde Maßnahmen gelegt, um beim Einsatz von NTS in der Wasseranalytik vergleichbare und verlässliche Ergebnisse zu erzielen, was auch durch internationale Laborvergleichsuntersuchungen bestätigt werden konnte [1, 3].

## Non-Target Screening als Untersuchungsmethode

In den beiden Leitfäden werden die Methodik des Non-Target Screening wie folgt beschrieben [1, 2]: Die für das Non-Target Screening genommenen Proben werden nach einer Probenvorbereitung (z.B. Zentrifugation, Filtration, Festphasenextraktion) mittels HPLC-HRMS untersucht. Die Eluenten und HPLC-Säulen müssen je nach Fragestellung und Polaritätsbereich der zu untersuchenden Spurenstoffe und verwendeter Ionisierungsquelle des Massenspektrometers angepasst werden. Die aufgezeichneten Chromatogramme werden mittels einer Peakfinding-Software nach Merkmalen (eng. Features) ausgewertet. Dabei werden auch Isotopenpeaks, Adduktionen und mögliche in-source-Fragmente mitberücksichtigt, so dass alle Signale, die von einer Komponente stammen zusammengefasst werden können. Unter Verwendung der akkuraten Massen der Features können mögliche Summenformeln generiert werden. Verschiedene Online-Datenbanken können für die Interpretation und Identifizierung der Merkmale mit den generierten Summenformeln verwendet werden. Die



Abb. 1: Verlauf des Normenprozesses bei der International Standard Organization (ISO).

Anzahl der möglichen Strukturvorschläge kann durch die Nutzung der zusätzlichen Informationen (Isotopenpeaks, Fragmentenspektren) eingeschränkt werden. Eine Identifizierung eines Strukturvorschlags kann allerdings nur durch die Verwendung von Referenzsubstanzen eindeutig bestätigt werden. In einer Probe können mehrere tausend Features mit möglichen Summenformeln und Strukturvorschlägen erfasst werden, so dass eine eindeutige Strukturzuordnung zu allen Merkmalen einer Probe und deren Identifizierung unmöglich erscheint. Daher ist eine Priorisierung auf relevante Features in einer Probe oder Probenserie durch statistische Methoden, erfasste Metadaten zur Probe und Probenahmestelle und der Vergleich von zeit- und /oder orts aufgelösten Proben eine große Hilfestellung zur Klärung von analytischen Problemstellung [1].

Viele in einer Probe erfassten Merkmale können aber auch durch Kontaminationen verursacht werden. Daher ist eine aufwendige qualitätssichernde Kontrolle aller Analysenschritte und deren Dokumentation von sehr großer Bedeutung um vergleichbare, reproduzierbare und nachvollziehbare Ergebnisse zu erhalten. So müssen beim Non-Target Screening zum Erkennen von möglichen Kontaminationsquellen mehrere Blindwertkontrollen durchgeführt werden: von der Probenahme und Transport (Blindwertmessung zu den Gefäßen und der Umgebung der Messstelle und beim Transport), über die Probenaufbereitung (Blindwertmessungen von Chemikalien und Verbrauchsmaterialien und der Umgebung des Laborarbeitsplatzes) bis zur Messung mit dem Analysensystem (Systemblindwerte

[1, 2]. Aber auch regelmäßige Überprüfungen der Massenkalkulation und Massengenauigkeit, der Wiederfindung mittels isotope markierter interner Standards, verwendeter Lockmassen auf mögliche Störungen und der Robustheit der chromatographischen Trennung und massenspektrometrischen Methode sind von essentieller Bedeutung.

Mit den in den beiden Leitfäden [1, 2] beschriebenen Voraussetzungen und Arbeitsabläufen und den zusammengestellten qualitätssichernden Maßnahmen wurden zusammen mit der weiterentwickelten analytischen Hard- und Software die Grundlagen geschaffen, damit Non-Target Screening für die Wasseranalytik in Routinelaboratorien angewendet werden kann.

#### Non-Target Screening auf dem Weg zur internationalen Norm

In der ISO wurde eine Arbeitsgruppe (ISO/TC 147 / SC 2 / WG 85 „non-target screening“) gegründet, die mit internationalen Experten auf der Grundlage der beiden Leitfäden eine Norm erarbeiten wird. Der Normungsprozess bei der ISO läuft in mehreren Stufen ab und muss innerhalb von 3 Jahren abgeschlossen sein (Abb. 1). Mit einem Vorschlag für einen Normenantrag (New Work Item Proposal, NWIP) wird nach Zustimmung durch die ISO-Mitglieder eine Arbeitsgruppe (Working Group, WG) gegründet und ein Projektführer benannt. Für die Arbeitsgruppe werden die teilnehmenden Experten durch die nationalen Normungsinstitute benannt. Die Arbeitsgruppe erarbeitet ein Arbeitspapier (Working

Draft, WD), der innerhalb der Arbeitsgruppe bis zu einem Komiteeentwurf (Committee Draft, CD) bearbeitet wird. Der Komiteeentwurf wiederum wird anschließend als Entwurf eines internationalen Standards (Draft International Standard, DIS) an alle ISO-Mitglieder verteilt, die über den DIS mit Möglichkeit zur Kommentierung abstimmen. Werden in dem Normentwurf noch technische Änderungen von den ISO-Mitgliedern verlangt, so wird für eine weitere Abstimmung der Schlussentwurf (Final Draft International Standard, FDIS) an die ISO-Mitglieder zur Abstimmung verteilt. Nach der abschließenden Zustimmung wird dann die Norm (International Standard, IS) veröffentlicht. Eine veröffentlichte ISO-Norm kann anschließend in die nationalen Normensammlungen der ISO-Mitglieder integriert beziehungsweise übernommen werden. Ein ISO-Standard für NTS mit HPLC-HRMS wird ein wichtiger Schritt sein, um die Akzeptanz für den Einsatz von Non-Target Screening zur Überwachung von Grund-, Oberflächen- und Trinkwasser zu erhöhen.

#### Zusammenfassung

Die Etablierung von Non-Target Screening zu einem bedeutenden Werkzeug zum Nachweis und zur Identifizierung von organischen Spurenstoffen in der aquatischen Umwelt ist bei vielen Experten bereits anerkannt. Eine internationale Normung zur Standardisierung des Verfahrens ist der nächste notwendige Schritt, um dem Non-Target Screening als ein wirksames Werkzeug zum Spurenstoff-Monitoring zu einer noch besseren Akzeptanz zu verhelfen. Mit den zwei Leitfäden der Wasserchemischen Gesellschaft und des Niederländischen Normungsinstituts wurde eine hervorragende Grundlage für eine weltweit gültige Norm zum NTS mittels HPLC-HRMS geschaffen [1, 2]. Bei der ISO wurde der Normungsprozess durch Gründung einer Arbeitsgruppe (ISO/TC 147 / SC 2 / WG 85 Non-Target Screening) eingeleitet. Die Arbeitsgruppe wird in den nächsten drei Jahren eine internationale Norm für Non-Target Screening in der Wasseranalytik erarbeiten.

#### ● KONTAKT |

Dr. Michael Petri

Qualitätssicherung und Forschungslabor

Zweckverband Bodensee-Wasserversorgung

Sipplingen, Deutschland

dr.michael.petri@bodensee-wasserversorgung.de

[1]

Literatur:  
<https://bit.ly/GIT-Petri>



# Unbekannte Metabolite in Pflanzen identifizieren

## Reverse Engineering Workflow für die Ionenmobilitätsmassenspektrometrie

Franz Mlynek<sup>1</sup>, Markus Himmelsbach<sup>1</sup>, Christian W. Klampff<sup>1</sup>

In diesem Artikel wird ein Arbeitsablauf vorgestellt, welcher die (vorläufige) Identifizierung von Medikament-bezogenen Metaboliten in Extrakten von Pflanzen, welche für die Herstellung von Lebens- und Futtermitteln verwendet werden, erlaubt. Derartige Metaboliten werden gebildet, wenn Pflanzen durch die Bewässerung mit aufbereitetem Wasser mit Resten von Medikamenten in Berührung kommen, die trotz Kläranlage immer noch in sehr niedrigen Konzentrationen im Ablauf enthalten sein können. Der hier vorgestellte Arbeitsablauf kombiniert Informationen aus der „Drift Tube“-Ionenmobilitätsspektrometrie mit denen der Quadrupol-Flugzeit-Massenspektrometrie und ermöglicht so die Identifizierung bisher unbekannter Verbindungen, die aus der Ausgangsverbindung oder ihren Phase-I-Metaboliten gebildet werden.

Die Ionenmobilitätsspektrometer gibt es bereits seit einigen Jahrzehnten. Derartige Geräte werden vor allem im Sicherheitsbereich (Zugangsschleusen für z. B. Flughäfen oder schützenswerte Gebäude) verwendet. In letzter Zeit wurden allerdings vermehrt Geräte, welche die Ionenmobilität mit der (hochauflösenden) Massenspektrometrie koppeln, entwickelt und eingesetzt. Hierbei gibt es mehrere kommerziell erhältliche Ionenmobilitätsmassenspektrometer (IM-MS), wobei der „Ionenmobilitätsteil“ auf unterschiedlichen Prin-

zipien beruhen kann. Dazu gehören unter anderem Drift Tube (DT)-IM-MS, Traveling Wave (TW)-IM-MS und Trapped Ion Mobility Mass Spectrometry (TIMS). Die Größentrennung der Molekül-Ionen (im Ionenmobilitätsteil) erfolgt bei diesen Gerätetypen mittels Zusammenpralles mit einem inerten Puffergas in einem elektrischen Feld. Im Folgenden soll sich auf die Funktionsweise eines DT-IM-MS fokussiert werden. Nach der Ionisierung der Moleküle, z.B. in einer Elektrospray-Ionisationsquelle, erfolgt der Ionentransfer mittels iFunnel zur Drift Tube, die mit Stickstoff gefüllt ist. Die Trennung nach der Größe der jeweiligen Ionen erfolgt aufgrund der unterschiedlichen Häufigkeit des Zusammenpralles von Molekül-Ionen und dem Puffergas. Kleine Ionen (kleiner Kollisionsquerschnitt) prallen weniger oft mit den Gasmolekülen zusammen und bewegen sich dadurch schneller durch die Drift Tube als Molekül-Ionen mit einem großen Kollisionsquerschnitt. Diese Trennung muss diskontinuierlich erfolgen, weshalb vor der Drift Tube, eine Ionenfalle, das sogenannte „Trapping Gate“ verbaut ist. Darin werden die Ionen akkumuliert und in bestimmten Intervallen als Ionenpakete auf die Reise geschickt. Die Ionen dieser Pakete, werden nun der Größe nach getrennt und zur Detektion in ein Quadrupol-Flugzeit (engl. Time of Flight [QTOF])-Massenspektrometer transferiert. Weiters wird die Driftzeit der Molekül-Ionen bestimmt, welche mit-

tels Kalibrierung in den Kollisionsquerschnitt, auch Collisional Cross Section (CCS) genannt, umgerechnet werden kann.

Ein Vorteil der Kopplung von Ionenmobilitätsspektrometrie mit Massenspektrometrie ist, dass diese Art Molekültrennung aufgrund von Ionenmobilität im Millisekundenbereich stattfindet. Damit ordnet sie sich perfekt zwischen der Chromatographie (Sekunden bis Minuten) und der Massenspektrometrie (Mikrosekundenbereich) ein. Somit erhält man zu den für einen Analyten charakteristischen Parametern wie Retentionszeit und Masse-zu-Ladungs-Verhältnis ( $m/z$ ), eine weitere Dimension, den Kollisionsquerschnitt.

Typische Anwendungsgebiete für DT-IM-QTOF-MS sind die Analyse von Strukturisomeren, die Charakterisierung von Proteinstrukturen, Lipidanalytik oder, wie hier vorgestellt, die Identifizierung von Medikamenten-Metaboliten. Für letztere Anwendung wird ein „reverse engineering“ genannter Workflow zur Identifizierung unbekannter Medikamenten-Metaboliten in Pflanzenmatrix beschrieben.

### Verwendung aufbereiteter Abwässer in der Landwirtschaft

Aufgrund des Klimawandels kommt es weltweit zu häufigeren und länger andauernden



den Dürreperioden, welche durch die daraus resultierende Wasserknappheit zu Ernteausfällen mangels ausreichender Bewässerung führen kann. Darum wird, speziell in Ländern mit trockenem Klima, bereits jetzt in der Landwirtschaft vermehrt auf künstliche Bewässerung gesetzt, wobei unter anderem auch aufbereitetes Abwasser als Wasserressource eingesetzt wird. Trotz der vorangegangenen Behandlung in einer Kläranlage kann dieses geklärte Wasser immer noch eine Vielzahl an Verunreinigungen wie zum Beispiel pharmazeutische Wirkstoffe enthalten [1]. Wenn Pflanzen nun mit diesem (natürlich extrem verdünnten) „Medikamentencocktail“ bewässert werden, könnten die Wirkstoffe von der Pflanze aufgenommen, aber auch weiter verstoffwechselt werden [2]. Um die Fragestellung zu klären, ob pharmazeutische Wirkstoffe und deren Metabolite in die Nahrungskette gelangen, bedarf es empfindlicher analytischer Nachweismethoden. Bisherige Studien beschäftigten sich vor allem mit der Aufnahme der Medikamente durch die Pflanzen, wofür diese entweder hydroponisch oder in Feldversuchen angebaut wurden. Bewässert wird entweder mit realem aufbereitetem Abwasser (Konzentration der untersuchten Substanzen im niedrigen ng L<sup>-1</sup>-Bereich), oder künstlich mittels mit Medikamenten versetztem Wasser (bis mg L<sup>-1</sup>-Bereich, vor allem zur Metaboliten-Identifizierung). Die unterschiedlichen Pflanzenteile werden geerntet, extrahiert und die flüssigen Extrakte mit Umkehrphasen – Hochleistungsflüssigkeitschromatographie aufgetrennt und mit einem Massenspektrometer detektiert. Für Zeitstudien, die das Aufnahme-Verhalten der Pflanzen bezüglich des Medikaments und der Verteilung des Medikaments in den einzelnen Pflanzenkompartimenten als Ziel haben, werden (wegen ihrer ausgezeichneten Empfindlichkeit) größtenteils Triple-Quadrupol-Massenspektrometer (QqQ-MS) als Detektoren für die Quantifizierung eingesetzt. Für die Identifizierung möglicher Medikamenten-Metaboliten, werden meist hochauflösende Massenspektrometer verwendet.

#### Identifizierung von Medikamenten-Metaboliten in Pflanzen mittels „Reverse Engineering“ Workflow

Aus Studien ist bekannt, dass Pflanzen genauso wie Säugetiere Medikamente oder andere exogene Substanzen metabolisieren können [2]. Dieser Metabolismus läuft jeweils in drei Phasen ab, wobei Phase I und II gleich sind, aber während bei Säugetieren in Phase III die Ausscheidung der metabolisierten Substanzen stattfindet, baut die Pflanze diese zum Beispiel in der Zell-

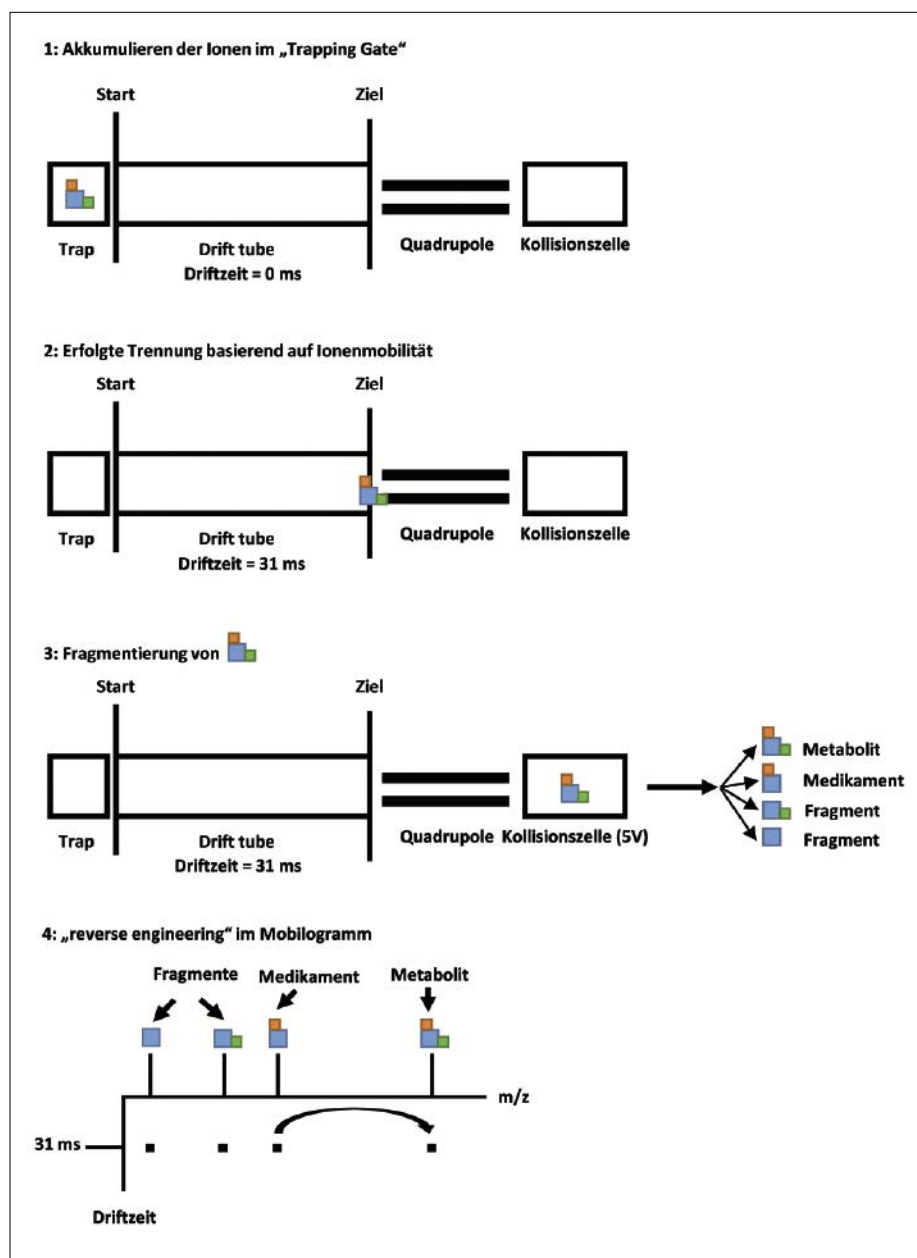


Abb. 1: Schematische Darstellung des „Reverse Engineering“ Workflows zur Identifizierung unbekannter Medikamente bezogener Metaboliten.

wand ein. In Phase I, auch Aktivierungs- oder Transformationsphase genannt, kann eine Oxidation, Reduktion oder Hydrolyse des Moleküls stattfinden, damit beispielsweise reaktive Gruppen wie OH oder NH<sub>2</sub> entstehen. In Phase II, kann das entweder in Phase I aktivierte Molekül oder die ursprüngliche Substanz (sofern schon reaktive Gruppen vorhanden sind) mit polaren Molekülen, wie zum Beispiel Zuckern, kleinen Carbonsäuren oder Glutathion, etc. konjugiert werden. Ziel dieser Phase ist es, die meist lipophilen Substanzen hydrophiler zu machen, wodurch in Phase III eine Ausscheidung bei Säugetieren oder eine Einlagerung in die Vakuole oder der Einbau in

die Zellwand bei Pflanzen erfolgt. Das Wissen über die Phasen der Metabolisierung ist insofern hilfreich bei der Suche nach unbekanntem Medikamenten-Metaboliten, da die Metaboliten meist das eigentliche Medikament, oder eine in Phase I leicht veränderte Grundstruktur, als Grundbaustein haben. Im Zuge von Fragmentierungsexperimenten bei QTOF Messungen mit dem ursprünglichen Medikament, kann Wissen über die charakteristischen Fragmente eines Medikaments gewonnen werden. Im Falle einer Hydroxylierung des Medikaments können diese Fragmente beispielsweise eine um +15,999 Da größere Masse aufweisen, was charakteristisch für den zusätzlichen Sau-

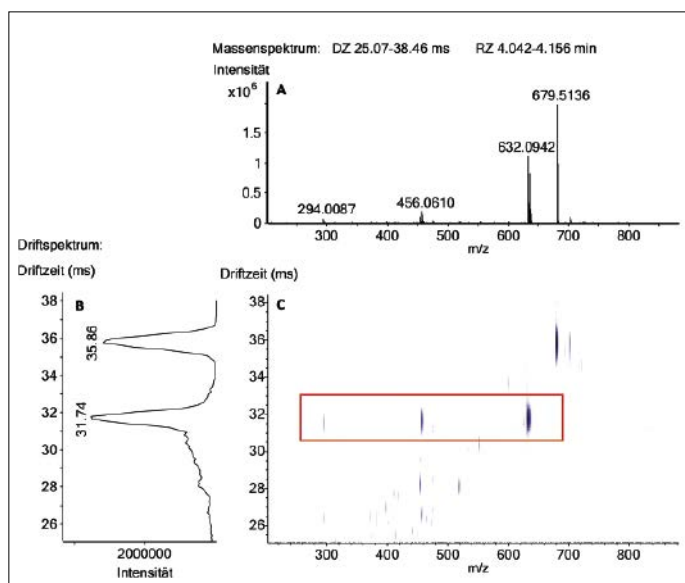


Abb. 2: (A) Massenspektrum für zwischen 4,04 und 4,16 Minuten eluierende Komponenten, (B) Driftspektrum und (C) Mobilogramm. (Abbildung aus [3] entnommen).

erstoff ist. Für die Suche nach diesen Metaboliten hat sich bei der Analyse, der sogenannte „All-Ions“ Ansatz bewährt, wo alle Molekül-Ionen in der Kollisionszelle fragmentiert werden, ohne zuvor einen gewissen Massenbereich im Quadrupol zu selektieren. Nun kann im Massenspektrum nach den bekannten Fragment-Ionen gesucht. Dem als „Reverse Engineering“ bezeichnetem Workflow [3] kommt zugute, dass beim DT-IM-MS-QTOF MS die Drift Tube vor der Kollisionszelle verbaut ist. So können die der Größe nach aufgetrennten Molekül-Ionen in der Kollisionszelle fragmentiert werden. Die daraus resultierenden Fragment-Ionen haben aber dieselbe Driftzeit wie das unfragmentierte Molekül-Ion. Nun kann im sogenannten „Mobilogramm (Driftzeit vs.  $m/z$ )“ nach dem Medikament-Ion und den für ein Medikament bekannten Fragment-Ionen gesucht werden. Eine schematische Darstellung dieses Verfahrens ist Abbildung 1 zu entnehmen. Hierbei werden die Ionen im „Trapping Gate“ vor der Drift Tube akkumuliert (Schritt 1). Das Ionenpaket wird in der Drift Tube nach dem jeweiligen Kollisionsquerschnitt aufgetrennt und die Driftzeit bestimmt (Schritt 2). Die der Größe nach getrennten Ionen werden nun in der Kollisionszelle fragmentiert (Schritt 3). Im Mobilogramm wird nach bekannten Fragmenten oder dem intakten Medikament gesucht und deren Driftzeit bestimmt (Schritt 4). Das intakte Ion des unbekannt Metaboliten und dessen zugehörige Fragmente weisen alle dieselbe Driftzeit auf. Deshalb kann nun im Mobilogramm bei der ermittelten Driftzeit nach  $m/z$  gesucht werden, die größer als das ursprüngliche Medikament sind und somit anhand der

bekannt Fragmenten auf einen unbekannt Metaboliten geschlossen werden.

In Abbildung 2 ist ein typisches Anwendungsbeispiel für diese Vorgangsweise zu sehen. Gezeigt wird, das Massenspektrum (A), das „Drift“-Spektrum (B) sowie das Mobilogramm (d.h. die Auftragung der Driftzeit gegen  $m/z$ ) für eine Substanz, welche mit einer Retentionszeit von 4,1 Minuten aus der HPLC eluiert. Im Massenspektrum lässt sich die Masse für einen Phase I Diclofenac Metaboliten (Diclofenac Lactam hydroxyliert (DCF-Lac-OH)) bei  $m/z$  294.0087 erkennen. Aus dem Mobilogramm können die  $m/z$ -Verhältnisse, welche zu diesem Metaboliten gehören, erkannt werden ( $m/z$  294.0087,  $m/z$  456.0610, und  $m/z$  632.0942). Das intensivste Signal im Massenspektrum ( $m/z$  679.5136) gehört allerdings nicht zu dieser Substanz, wie die unterschiedliche Driftzeit von 35,86 Millisekunden zeigt. Das Signal mit dem höchsten  $m/z$ -Verhältnis, welches zu diesem Metaboliten gehört, ist also  $m/z$  632.0942 und kann dem intakten Molekül zugeordnet werden. Die Signale zwischen  $m/z$  294.0087 und  $m/z$  632.0942 lassen sich durch typische Fragmentierungsreaktionen wie Verlust von Glucuronsäure ( $\Delta m/z$  176.0332) und Zucker ( $\Delta m/z$  162.0523) erklären. Letztendlich wurde zur Bestätigung dieser Annahmen noch ein MS/MS-Spektrum (Abb. 3) mit einer Kollisionsenergie von 10 V aufgenommen.

#### Fazit

Der hier beschriebene „Reverse Engineering“ Workflow erlaubt es mittels HPLC gekop-

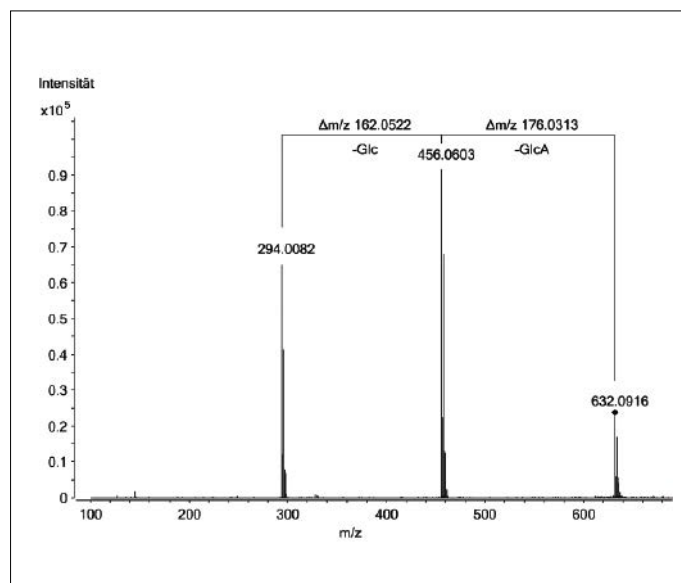


Abb. 3: MS/MS Spektrum des Metaboliten Diclofenac Lactam hydroxyliert konjugiert mit Glukose und Glukuronsäure (DCF-Lac-OH-Glc-GlcA). (Abbildung aus [3] entnommen).

pelt mit DT-IM-QTOF-MS Pflanzenextrakte nach Metaboliten von bestimmten Medikamenten zu durchsuchen, und diese Metaboliten durch eine Reihe von Parametern zu charakterisieren. Diese beinhalten die Retentionszeit (welche Rückschlüsse auf die Polarität der Moleküle erlaubt), den Kollisionsquerschnitt (erlaubt Rückschlüsse auf die 3D-Struktur von Molekülen), die akkurate Masse (erlaubt idealerweise den Vorschlag einer Summenformel) und die Fragmente aus dem MS/MS Spektrum (geben Hinweise auf die Struktur des Moleküls).

#### Zugehörigkeit

<sup>1</sup>Institut für Analytische und Allgemeine Chemie, Johannes Kepler Universität, Linz, Österreich

#### ● KONTAKT |

a.o. Univ. Prof. Mag. Dr. Christian W. Klampfl  
Vorstand des Instituts für Analytische und Allgemeine Chemie  
Leiter der Abteilung für Allgemeine Chemie  
Johannes Kepler Universität Linz, Österreich  
ORCID: 0000-0001-9139-4022  
christian.klampfl@jku.at

[1] Literatur:  
<https://bit.ly/GIT-Kampfl>

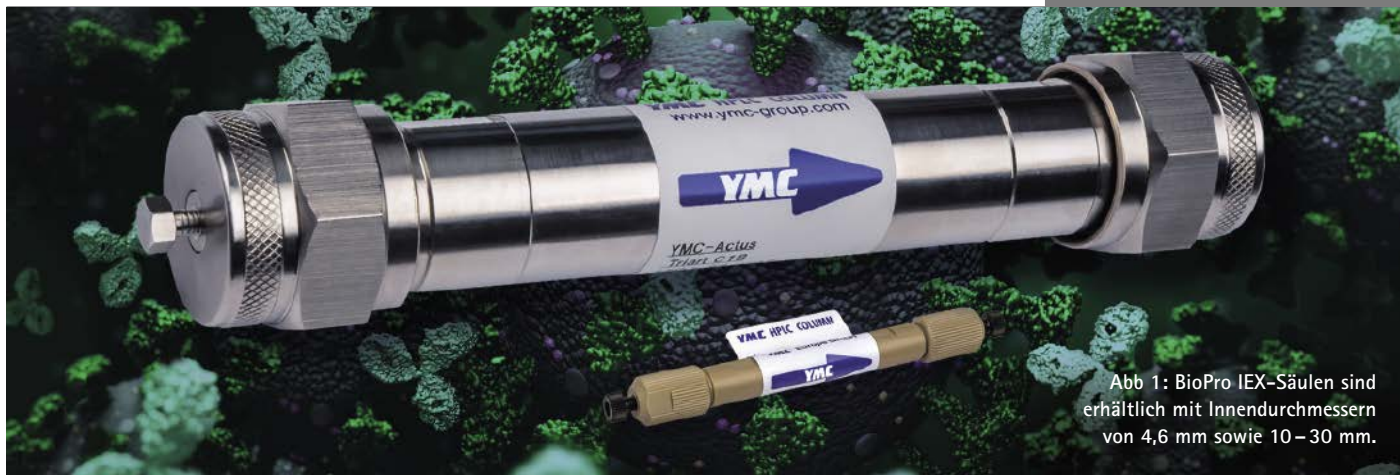


Abb 1: BioPro IEX-Säulen sind erhältlich mit Innendurchmessern von 4,6 mm sowie 10–30 mm.

## IEX-Säulen von YMC – auch verfügbar im (semi)präparativen Maßstab

**I**onenaustausch-Chromatographie-Säulen (IEX) werden vielfach für Methoden in der Bio-QC, insbesondere für monoklonale Antikörper, eingesetzt. Eine der kritischen Anforderungen für jede QC-Methode ist eine verlässliche Lot-zu-Lot Reproduzierbarkeit. Im Gegensatz zu vielen anderen IEX-Säulen auf dem Markt, auch die vielfach als „Standard“ eingesetzten, bieten BioPro IEX-Säulen von YMC diese exzellente Lot-zu-Lot Reproduzierbarkeit. Dazu kommt eine überlegene Auflösung. Diese Eigenschaften machen die Säulen zur ersten Wahl in der Bio-QC.

### Speziell für verschiedene Biomoleküle

BioPro IEX-Säulen sind speziell für die Trennung von Antikörpern (mAbs), Proteinen, Peptiden, Nukleinsäuren und Oligonukleotiden entworfen. Sie zeigen eine höhere Bindungskapazität und Wiederfindung dieser Biomoleküle im Vergleich zu konventionellen IEX-Säulen. BioPro IEX-Säulen

basieren auf hydrophilen Polymer-Beads mit sehr niedriger unspezifischer Adsorption, so dass sekundäre Wechselwirkungen auf ein Minimum reduziert sind.

### Poröse oder unporöse Varianten

Bei den BioPro IEX-Säulen handelt es sich um starke Ionenaustauscher, die als poröse oder unporöse Version verfügbar sind. Die unporösen Austauschsäulen BioPro IEX QF und BioPro IEX SF zeigen außergewöhnlich hohe Effizienzen, so dass sogar kleine Probenvariationen problemlos aufgetrennt und detektiert werden können. Die porösen Typen BioPro IEX QA und BioPro IEX SP bieten hohe Kapazitäten für Trennungen mit hohen Beladungen.

### Ideale Einsatzbereiche

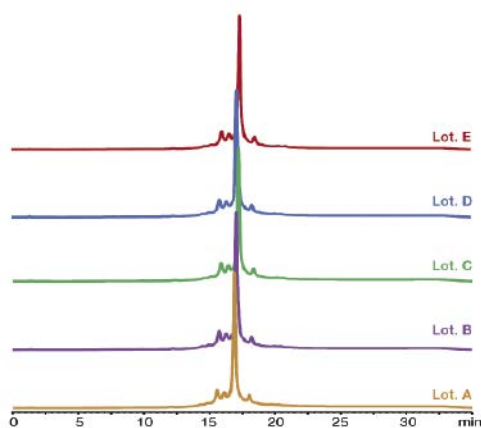
Die unporösen BioPro IEX SF-Säulen mit ihrer starken Kationenaustauscher-Funktionalität sind

insbesondere ideal für die Analytik von Ladungsvarianten von mAbs und können auch bestehende schwache Austausch-Säulen ersetzen. Durch den Austausch ist es oftmals möglich, bessere Ergebnisse in kürzerer Zeit zu erreichen. Die unporösen BioPro IEX QF-Säulen sind hingegen beispielsweise die erste Wahl für die hochauflösende Analytik von Oligonukleotiden verschiedener Längen.

### Säulenoptionen

BioPro IEX-Säulen warten mit hoher Säulenstabilitäten im analytischen und (semi)präparativen Maßstab auf. Sie sind verfügbar mit 4,6 mm Innendurchmesser und Längen von 30 bis 150 mm für analytische Zwecke. Für Aufreinigungen sind Innendurchmesser von 10, 20 und 30 mm mit einer Länge von 100 mm lieferbar. Die analytischen Säulen kommen mit einer PEEK-Hardware, während für die (semi)präparative Säulenhardware standardmäßig Edelstahl zum Einsatz kommt. Optional ist für die großen Innendurchmesser ( $\geq 10$  mm) eine Hardware mit bioinertem Coating verfügbar. Damit ist eine volle Biokompatibilität über alle Dimensionen gewährleistet.

Abb 2: BioPro IEX-Säulen bieten exzellente Lot-zu-Lot Reproduzierbarkeiten (hier gezeigt anhand eines mAbs).



**YMC**  
EUROPE GMBH

### ● KONTAKT |

**Dr. Daniel Eßer**  
Produktmanager Analytische Chromatographie  
YMC Europe GmbH  
Dinslaken, Deutschland  
esser@ymc.de  
www.ymc.de

## Wasseranalyse: Klarheit durch Schwebstoffmessung

Die Analyse von Schwebstoffen eröffnet wertvolle Einblicke in die Güte verschiedenster Gewässer. Ob in kommunalen Wasserwerken, industriellen Anlagen oder Kläranlagen – die Bedeutung der Schwebstoffmessung nimmt stetig zu. Herkömmliche Laborverfahren sind jedoch nicht nur zeitaufwendig und kostspielig, sie liefern zudem lediglich Momentaufnahmen zum Zeitpunkt der Probenentnahme. Hier setzt Umwelt Pollution-Messtechnik an, um eine Lösung zu bieten: Die kontinuierliche Schwebstoffmessung direkt vor Ort im betroffenen Gewässer. Die Geräte der Reihe SSD-1610/20 arbeiten mittels Streu- und Durchlichtmessung. Wasser wird dabei vom Tauchsensordes Geräts angesaugt und von einer LED durchleuchtet. Die Schwebstoffe im angesaugten Wasser absorbieren hierbei einen Teil des Lichts. Die resultierende Abnahme der Lichtintensität wird von einer Photodiode erfasst und in 4-20mA-Signal oder RS485 umgewandelt. Der kompakte Tauchsensord zur



Detektion gepaart mit individuell angepassten Messbereichen und der einfachen Bedienung machen die Messgeräte zu einer zuverlässigen und wartungsarmen Lösung zur kontinuierlichen Schwebstoffmessung.

**Umwelt Pollution  
Messtechnik GmbH  
www.upm-gmbh.de**

Anzeige

## Effiziente und intuitive Laborinventarisierung



Verschaffen Sie sich schnell einen Überblick über Ihr Laborinventar: bei der Bestellung von Reagenzien, beim Einfrieren von Proben, bei der Bereitstellung von Sicherheitsdatenblättern oder bei der Einführung neuer Mitarbeiter. Fluics Connect ist eine Plug & Play-Komplettlösung für die Inventarisierung aller im Labor gelagerten Gegenstände. Mit der mobilen Anwendung drucken Sie Etiketten aus oder scannen QR-Codes, um alle Informationen aus der Online-Datenbank abzurufen

und zu bearbeiten. Mit einem Klick können Sie auch vom Computer aus die Datenbank durchsuchen oder bei der Dokumentation von Experimenten Proben und Reagenzien eindeutig zuordnen. Beginnen Sie noch heute mit der Digitalisierung Ihres Labors und verabschieden Sie sich von handbeschrifteten Proben und unübersichtlichen Excel-Tabellen.

**FLUICS GmbH  
fluics.com**

## Wasserbestimmung für anspruchsvolle Proben



Der TO 7280 ermöglicht durch die Headspace-Ofen-Technik die Trennung des zu titrierenden Wassers aus flüssigen, festen und pastösen Proben. Die Probe wird in einem kleinen Glasgefäß mit Deckel und Septum (Vial) eingewogen und im Ofen auf eine definierte Temperatur erwärmt. Dabei strömt ein trockener

Luft- oder Stickstoffstrom über eine Nadel durch die Probe und nimmt das Wasser in gasförmigem Zustand mit. Dieser Strom wird in das Titrationsgefäß geleitet und das Wasser coulometrisch mit dem Titrator TitroLine 7500 KF trace titriert. Wenn nur wenige Proben am Tag zu vermessen sind (< 10-15), dann ist der halbautomatische Headspace-Ofen TO 7280 die richtige Wahl. Bei höherer Probenanzahl kann das System einfach durch den Probenwechsler TW 7650 ergänzt werden. Dabei wird das komplette Titrationssystem durch die pharmakonforme Software TitrISOFT 3.5XP gesteuert.

**Xylem Analytics Germany Sales  
GmbH & Co. KG  
www.xylemanalytics.com/de**

## Wärmeschutzschläuche als Thermo-Isolierung

Als Spezialist für Schlauchtechnik präsentiert die RCT Reichelt Chemietechnik Schläuche zur Wärmeisolierung. Die geschäumten Kunststoff-Schläuche mit geschlossenen Poren und geringer Wärmeleitfähigkeit werden eingesetzt, um den Wärmetransfer zwischen medienführenden Leitungen und Umgebung maßgeblich zu begrenzen. Als flexible und dehnbare Schutzschläuche lassen sie sich leicht über vorliegende Rohr- und Schlauchleitungen ziehen. Die Isolierschläuche werden beispielsweise aus Polyurethan (PUR) und Silikonkautschuk (VMQ) gefertigt und sind in Nennweiten von 8 bis 93 mm verfügbar. Sie ummanteln etwa Heizrohre sowie Leitungen von Umlaufthermostaten oder Kryostaten im Labor oder in industriellen Anwendungen. Im Fahrzeugbau kommen Wärmeschutzschläuche aus Glasfasergeweben zur Isolierung von Kraft-



und Kältschläuchen zum Einsatz. Und auch im Haushalt trifft man Wärmeschutzschläuche an, wo sie beispielsweise in Elektroherden oder Bügeleisen Kabel vor Hitzeinwirkung schützen. Weitere Informationen sowie eine breite Auswahl unterschiedlicher Schutz- und Isolierschläuche finden Sie im Online-Shop der RCT Reichelt Chemietechnik.

**RCT Reichelt Chemietechnik  
GmbH + Co.  
www.rct-online.de**

## Neues Temperiersystem

Mit dem neuen Presto W58x hat Julabo das bisher leistungsstärkste 1-stufige hochdynamische Temperiersystem im Produktportfolio. Anwendungen mit hohen Leistungsanforderungen können so noch schneller und effizienter temperiert werden. Das Temperiersystem besitzt bei 20 °C eine sehr hohe Kälteleistung von 33 kW und bietet damit über den gesamten Arbeitstemperaturbereich große Leistungsreserven. Insbesondere bei Temperaturen um -30 °C bis -40 °C in Verbindung mit Wasser-Glykol-Gemischen. Die magnetgekuppelte Pumpe ermöglicht eine optimale Anpassung der Pumpenleistung



an die Applikation, auch über größere Entfernungen und Höhen. Ein Erweiterungskit ermöglicht eine drucküberlagerte Temperierung mit Wasser-Glykol bis zu einer Arbeitstemperatur von +150 °C. Für Applikationen, die neben präziser Temperierung einen exakt definierten Volumenstrom des eingesetzten Mediums fordern, kann der Presto W58x zusätzlich mit einem kundenspezifisch angepassten Durchflussregelsystem ausgestattet werden.

**JULABO GmbH**  
[www.julabo.com](http://www.julabo.com)

## PES-Membranen und Spritzenvorsatzfilter

Hahnemühle Life Science hydrophile PES-Membranen haben aufgrund ihrer hohen Porosität, die zu einer sehr guten Flussrate bei wässrigen, aber auch viskosen Lösungen führt, einen sehr guten Durchfluss. Die asymmetrische Membranstruktur kombiniert diesen mit einer sehr guten physikalischen Stabilität in Endgeräten. Aufgrund der geringen Proteinbindung ist die PES-Membran zum Filtern biologischer und pharmazeutischer Lösungen geeignet, ohne den Inhalt durch Adsorption oder Zersetzung zu beeinträchtigen. Die Membranen sind in Durchmessern von 25 mm bis 142 mm, mit Porengrößen von



0,2 µm und 0,45 µm sowie als PES-Spritzenvorsatzfilter verfügbar.

**Hahnemühle FineArt GmbH**  
[www.hahnemuehle.com](http://www.hahnemuehle.com)

## Kompakter Vortex für alle kleinen Probenmengen

Der Reagenzglasschüttler Rotilabo Mini Vortex aus der Reihe Roth Selection ist für Kleingefäße wie Reagenzgläser, Zentrifugenröhrchen und Reaktionsgefäße mit einem Durchmesser von bis zu 30 mm geeignet. Er ist speziell angepasst auf den Einsatz bei geringem Platzbedarf und zum Mischen kleiner Probenmengen und ist damit ein Tool, das auf keiner Laborbank fehlen darf. Die Bedienung mittels Touchfunktion macht die Verwendung sehr komfortabel. Der Reagenzglasschüttlers vibriert sehr leise mit fest eingestellter Drehzahl von 4500 min<sup>-1</sup> und zeigt eine sehr gute Mischwirkung. Die Bewegungsart des Schüttlers ist kreisförmig vibrierend mit einer Schüttelamplitude



von 6 mm. Durch Silikonaufsätze werden die Probengefäße während des Schüttelvorgangs zuverlässig am Rutschen gehindert. Das Gerät besitzt 5 Jahre Garantie. Die Lieferung erfolgt inklusive Steckernetzteil 12 V und 2 Standard-Silikon-Aufsätzen. Die Größe ist B 110 x T 75 x H 130 mm.

**Carl Roth GmbH + Co. KG**  
[www.carlroth.com/de](http://www.carlroth.com/de)

## Automatisierte Zellsortierung

Der autoMACS NEO Separator setzt neue Maßstäbe für automatisierte Zellsortierung. Seine schnelle und schonende Isolierung jeglicher Zellarten macht ihn zum Partner für vielfältige Anwendungen wie Durchflusszytometrie, Funktions-tests oder Omics. Tausende von wissenschaftlich begutachteten Publikationen bestätigen, dass die autoMACS-Technologie die zuverlässigste Methode zur automatisierten magnetischen Zellseparation ist. Jede positive und unberührte Isolation kann durchgeführt werden, um Zielzellen von PBMCs, kultivierten Zellen und dissoziierten Geweben zu trennen. Zusätzlich können Zellen direkt aus Vollblut oder Knochenmark isoliert werden. Es werden über 400 verschiedene



Reagenzien angeboten und das Portfolio wird kontinuierlich erweitert. Nach der automatisierten Zelltrennung stehen sowohl markierte als auch ungekennzeichnete Zellen für weitere Anwendungen zur Verfügung.

**Miltenyi Biotec B.V. & Co. KG**  
<https://www.miltenyibiotec.com>

Mehr aktuelle  
**Produkte** auf...



Wiley  
Analytical  
Science  
Award  
2024

**JETZT**  
zählt Ihre  
Stimme!

WILEY

# Wiley Analytical Science Award 2024: Jetzt abstimmen!

Der Wiley Analytical Science Award 2024 geht in die nächste Runde: Eine Jury aus Experten und Anwendern hat insgesamt zwölf Produkte in den Kategorien „Spektroskopie & Mikroskopie“ und „Separation, Laborautomation & Ausrüstung“ nominiert. Und nun sind Sie gefragt: Lesen Sie eine detaillierte Beschreibung zu jedem Produkt und stimmen Sie für Ihren Favoriten ab: [www.was-award.de](http://www.was-award.de). Die Gewinner in beiden Kategorien werden wir im Herbst bekanntgeben.

## Tschüss Fingerstechen – Nicht-invasive Blutzuckermessung von DiaMonTech

DiaMonTech wurde 2015 in Berlin gegründet und ist ein MedTech-Unternehmen, das eine neuartige Technologie zur nicht-invasiven Messung von Biomarkern entwickelt hat. Das erste Produkt ist ein Blutzuckermessgerät, mit dem das Stechen in den Finger der Vergangenheit angehört. Das Gerät überwacht die Glukosemoleküle in der Haut und bietet dem Benutzer umfassende und genaue Messwerte, die mit invasiven kommerziellen Geräten vergleichbar sind. Mit der Unterstützung von Investoren wie Samsung und einem weltweit tätigen Medizintechnikunternehmen setzt das vielseitig qualifizierte Team diese Technologie nun in ein tragbares medizinisches Produkt, das D-Pocket, um. Die patentierte Technologie nennt sich "photothermische Spektroskopie" und ist im Zusammenhang mit der Blutzuckermessung völlig neu. Sie basiert auf der Absorption von Licht durch die zu messende Substanz. Die Technologie ist durch über 80 angemeldete Patente in allen wichtigen Regionen der Welt (EU, USA, China) geschützt. Mehr als 30 dieser Patente sind bereits erteilt, und DiaMonTech besitzt auch IP-Rechte für das Design der D-Pocket.

DiaMonTech AG  
<https://www.diamontech.de>

Spektros-  
kopie

Mikros-  
kopie

## Sehr großes Sichtfeld und hohe Auflösung auf der Basis photonischer Chips

Chip Nanomaging ist auf die TIRF-Mikroskopie mit ultragroßem Sichtfeld spezialisiert und verwendet photonische Chips mit Wellenleitern, um eine außergewöhnlich homogene TIRF-Beleuchtung zu erzeugen. Dies ermöglicht eine Superauflösung im Millimeterbereich und ein Sichtfeld, das etwa hundertmal größer ist als bei herkömmlichen Techniken. Der normale Glasträger wird durch den photonischen Chip ersetzt, bei dem das evaneszente Feld der Wellenleiter zur Beleuchtung der Probe genutzt wird. Die Probe kann wie üblich beschriftet werden. Die neue Technik eignet sich sowohl für die hochauflösende als auch für die beugungsbegrenzte Mikroskopie mit sehr großem Sichtfeld.

### Innovationen:

- Großes Sichtfeld in Superauflösung, 100-mal größer als bei herkömmlichen Techniken
- Beugungsbegrenzte TIRF-Mikroskopie mit ultragroßem Sichtfeld für Schnitte, lebende Zellen und EVs
- Mehrfarbiges TIRF, das keine Einstellung erfordert
- Außergewöhnlich homogene Lichtverteilung über das Sichtfeld bei TIRF
- Multimodalität: Wechsel zwischen Chip-basierter TIRF und EPI mit derselben Probe und demselben Sichtfeld.

Chip Nanomaging AS  
<https://www.chipnano.com>

## LINCam – Ein Quantendetektor für ultra-empfindliche zeitaufgelöste Bildgebung

LINCam ist ein Einzelphotonenzählsystem für zeitaufgelöste, hochempfindliche Bildgebung vom UV- bis zum nahen Infrarot-Spektralbereich. Es verfügt über einen patentierten pixel- und rauschfreien Sensor mit beugungsbegrenzter Positionsauflösung, 40 ps Zeitgenauigkeit und einem außergewöhnlichen Signal-Rausch-Verhältnis bei extrem schwachen Lichtverhältnissen. In Kombination mit einer gepulsten Lichtquelle verwandelt die LINCam jedes herkömmliche Mikroskop, wie z.B. TIRF-, Lichtblatt- oder Spinning-Disc-Mikroskope, in ein leistungsstarkes Instrument zur Messung von Fluoreszenzlebensdauern. Seine Hauptanwendungen sind FLIM, Einzelmolekül-Imaging, hochauflösende Mikroskopie, markierungsfreie Stoffwechselüberwachung von NADH und FAD, zeitaufgelöste Spektroskopie und Quantenoptik.

**Innovation:** Im Gegensatz zu herkömmlichen CCD- oder CMOS-Kameras arbeitet sie mit einem pixelfreien, patentierten Quantensensor, der aus einer Photokathode, mehrkanaligen Platten zur Bildverstärkung und einer resistiven Anode mit elektrisch isolierten Feldern zur Positionsbestimmung besteht.

Photonscore GmbH  
<https://photonscore.de>

Mikros-  
kopie

## Kategorie A Spektroskopie & Mikroskopie



Ihre Stimme für  
das **beste Produkt:**  
**was-award.de**

### zenCELL owl – Ein Inkubationsmikroskop



Mikros-  
kopie

Lassen Sie Ihre Zellen dort, wo sie hingehören: im Inkubator! Die zenCELL owl ist ein Inkubatormikroskop zur Überwachung von Zellkulturen mit 24 Kameras, das für Langzeitexperimente gebaut wurde. Es führt 24 individuelle Experimente parallel unter denselben stabilen Bedingungen sowie gleichzeitig eine automatisierte Datenanalyse durch, die robuste und zuverlässige Datensätze liefert. Das nicht-invasive und stabile Wachstum von Zellkulturen erhöht deren Stabilität und Reproduzierbarkeit. Dies minimiert den Verlust wertvoller Proben und Ressourcen und hält die Qualität Ihrer Zellkulturen stabil.

**Innovation:** Das zenCELL owl bietet zeit- und ressourcensparende Vorteile und eine höhere Reproduzierbarkeit der Daten durch verbesserte Zellkulturstabilität und Zeitraster-Bildgebung und -Analyse. Es ermöglicht die Parallelisierung von 24 Experimenten, die unter denselben stabilen Bedingungen laufen, reduziert Stressfaktoren und erzeugt robuste und vergleichbare Datensätze, während sie die experimentelle Effizienz mit einem hohen Nutzen-Kosten-Verhältnis erhöht.

innoME GmbH  
<https://zencellowl.com>

Mikros-  
kopie



### Der Nanoimager

Das Nanoimager-Mikroskop kann verschiedene supraauflösende Mikroskopiertechniken und Einzelmolekül-Imaging von fixierten und lebenden biologischen Proben bis hinunter zu 20 nm durchführen, alles in einem kompakten Instrument, das das Leben im Nanomaßstab zeigt. Es hilft Forschern, zelluläre

Dynamik, Proteinverteilung und das Verhalten einzelner Moleküle in Echtzeit zu sehen, zu verfolgen und zu messen.

**Innovation:** Die Innovation des Nanoimagers liegt in seiner Grundfläche, die weniger als ein Blatt A4-Papier beträgt. Es ist stabil und vibrationsfest; ein optischer Tisch oder eine Dunkelkammer sind nicht erforderlich, und es lässt sich leicht in verschiedene Laboreinrichtungen integrieren. Das Mikroskop verfügt über unglaublich leistungsstarke Laser und eine Temperaturregelung, die Einzelmolekül-Lokalisierungsmikroskopie in festen Proben (dSTORM, DNA-PAINT), Einzelpartikelverfolgung und PALM in lebenden Proben, smFRET zur Untersuchung von Proteininteraktionen, TIRF- oder HiLO-Beleuchtung zur Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses, Widefield-Imaging und konfokale Bildgebung für schnellere Ergebnisse ermöglichen.

Oni – Oxford Nanoimaging Ltd.  
<https://oni.bio>

### Verbesserte Erkennung von Mikroorganismen mit AI-basierter automatisierter Mikroskopie

Mikros-  
kopie



Tausende von Unternehmen verlassen sich tagtäglich auf manuelle mikroskopische Methoden zur Zählung von Partikeln und Mikroorganismen, die für die Analyse, das Qualitätsmanagement und die Forschung unerlässlich sind. Bei Camsens wird dieser arbeitsintensive und kostspielige Prozess durch KI und Automatisierung in einen präzisen, zuverlässigen Vorgang verwandelt. Es werden vollautomatische Lösungen zur Identifizierung und Dokumentation von Verunreinigungen in Luft- und Flüssigkeitsproben entwickelt, die innerhalb weniger Minuten von der Probenahme bis zum endgültigen Ergebnis reichen.

**Innovation:** Bei diesem Gerät handelt es sich um ein innovatives, vollautomatisches Mikroskop, das so flexibel konzipiert ist, dass es eine Vielzahl von Probentypen sowohl in Luft als auch in Flüssigkeit scannen kann, darunter Objektträger, McMaster-Objektträger und Petrischalen. Die hochmoderne, KI-basierte Software zeichnet sich durch eine hervorragende Partikelanalyse und -erkennung aus und kann bequem auf die Erkennung neuer Partikeltypen trainiert werden. Dies ermöglicht eine kontinuierliche Erweiterung der Datenbank und eine verbesserte Leistung in verschiedenen Anwendungsbereichen.

Camsens GmbH  
<http://camsens.de>



Ihre Stimme für  
das **beste Produkt:**  
**was-award.de**



Ihre Stimme für  
das **beste Produkt:**  
**was-award.de**

### Hyperschneller Gas-Chromatograph mit thermischem Flussfeldgradienten

Sepa-  
ration



Der Gas-Chromatograph ermöglicht hyperschnelle Zykluszeiten im Sekundentakt dank der Erzeugung eines "thermischen Flussfeldgradienten". Er hat eine hohe Auflösung und einen Peak von +/- 250. Die hohe Retentionszeitstabilität durch einen wassergekühlten Säulenträger, die niedrige Starttemperatur von 25°C und die Widerstandsheizung mit einer geringen thermischen Masse führen

zu einem niedrigen Energieverbrauch. Das Gerät verwendet Standard-Säulenmaterialien und Verbrauchsmaterialien und ist CE-zertifiziert.

**Innovation:** Patentierte 'Flow Field Thermal Gradient'-Technologie. Kein Ofen: Die 4 Meter lange Trennsäule wird in eine widerstandsbeheizte Stahlkapillare eingesetzt. Die Vorteile sind:

- thermischer Gradient, der durch die Erzeugung eines 'Strömungsfeldes' um die beheizte Kapillare herum erzeugt wird: Erhöhung der Strömungsgeschwindigkeit; der Einlass der Säule ist heißer als der Auslass
- Wasserkühlung des Säulenträgers für eine stabile Verweilzeit: der Träger der beheizten Kapillare wird durch Kühlmittelzirkulation auf einer konstanten Temperatur gehalten (unabhängig von der Labortemperatur)

**Hyperchrom GmbH**  
<https://www.hyperchrom.com>

### Miro Canvas System

Miro Canvas ist ein kompaktes, digitales Mikrofluidiksystem, das komplexe Laborprotokolle automatisiert, ohne dass kostspielige Robotertechnik oder eine steile Lernkurve erforderlich sind. Es wurde so konzipiert, dass nahtlos zwischen Protokollen gewechselt werden kann, ohne dass die Automatisierungsparameter und die Assayleistung neu konfiguriert werden müssen. Das System verwendet eine universelle Kartusche, die für eine breite Palette von Arbeitsabläufen verwendet werden kann, einschließlich der Probenvorbereitung für die DNA-Sequenzierung. Es bietet eine Bildschirmführung für den Start eines Experiments, gefolgt von einer echten Walk-away-Automatisierung. Der Miro Canvas ist klein genug, um in einen Rucksack zu passen.

**Innovation:** Der Miro Canvas benötigt nur wenig Platz, keine Programmierung/Konfiguration und ist zu einem Preis erhältlich, der für die meisten Labore erschwinglich ist. Er ermöglicht es Wissenschaftlern überall auf der Welt, schwierige Laborexperimente durchzuführen und DNA- und RNA-Sequenzierungs-Workflows zu etablieren, die bisher nur für sehr wenige Labore möglich waren.

**Integra Bioscience AG**  
<https://www.integra-biosciences.com/global/en>

Labor-  
automa-  
tion



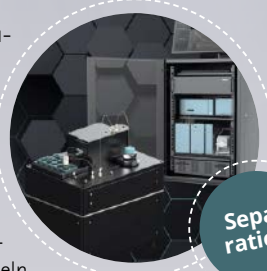
### Brave B-Curious – OF2i Sensor-Plattform

Brave Analytics entwickelt und produziert Prozess-Sensorgeräte für die automatisierte, zeitaufgelöste und Online-Charakterisierung von Nanopartikeln mit Einzelpartikelgenauigkeit. Das Prinzip der patentierten Optofluidic Force Induction Technologie (OF2i) ist die gezielte Beschleunigung und Abbremsung von Nanopartikeln in Flüssigkeiten mittels Laserlicht. Durch die Analyse dieser Muster können statistisch relevante Ergebnisse für Eigenschaften wie Partikelgröße, Größenverteilung, Konzentration und, wenn möglich, Partikelform ermittelt werden.

**Innovation:** OF2i ist als Plattformtechnologie konzipiert und aufgebaut; es kann im Labor eingesetzt und zur Überwachung von Produktionsprozessen erweitert werden und bietet damit die einzigartige Möglichkeit, Partikelgröße, -konzentration und -verteilung während des Produktionsprozesses zu überprüfen, anstatt auf Laborergebnisse zu warten. Derzeit gibt es auf dem Markt kein vergleichbares Produkt mit diesen Möglichkeiten.

**Brave Analytics GmbH**  
<https://www.braveanalytics.eu>

Sepa-  
ration





Ausrüstung



### Der schnellste Muffelofen der Welt: Phoenix Black

Die Hightech-Muffelöfen von CEM, der Phoenix Black und der Phoenix Black SAS, werden für die Trockenveraschung von Kunststoffen, Ölen, Lebensmitteln, Futtermitteln, Getreide usw., zur Bestimmung des Glühverlustes und des Restes eingesetzt.

Auch die Bestimmung der Struktur der Charge, der Schmelz- und Schmelzprodukte, zum Beispiel für die Elementanalyse, sowie Trocknung, Schmel- und Wärmebehandlungen. Im pharmazeutischen Umfeld werden sie für die Bestimmung von Sulfatasche nach europäischen medizinischen Standards eingesetzt. Das DAB-Verfahren wird durch die SAS-Version von nahezu einem ganzen Arbeitstag auf etwa 90 Minuten reduziert. Darüber hinaus können mehrere Proben gleichzeitig verascht werden.

**Innovation:** Die Vorteile dieser Öfen sind eine Verkürzung der Bearbeitungszeit und eine "saubere" Arbeitsumgebung. Das eingebaute Luftabzugssystem entfernt Rauch und Dämpfe automatisch. Was früher mit herkömmlichen Geräten Stunden dauerte, kann mit dem Phoenix-Gerät in wenigen Minuten erledigt werden.

CEM GmbH  
<https://cem.de>

Kategorie B  
 Separation,  
 Laborautomation &  
 Ausrüstung



Ihre Stimme für  
 das **beste Produkt:**  
[was-award.de](https://was-award.de)

### SmartRack

Das SmartRack wurde von Wissenschaftlern und Labornutzern entwickelt. Es gibt eine Vielzahl von Modulkonfigurationen, die den individuellen Anforderungen gerecht werden. Ob Chemie, Biologie, Biochemie, Lebensmittelchemie, Pharmazie oder Medizin, das innovative System verfügt über 100 Halterungen beziehungsweise Module zur Organisation Ihres Laborarbeitsplatzes, die beliebig kombiniert werden können.

**Innovation:** Wertschöpfung ohne Verschwendung: 10% Effizienzsteigerung im Labor. Eine Effizienzsteigerung wird durch die Optimierung der Arbeitszeiten bei der Versuchsdurchführung sowie beim Auf- und Abbau und der Reinigung erreicht und unterstützt LEAN-Management-Modelle in Laboren.

Es ermöglicht eine effizientere Raumnutzung im vorhandenen Bereich und schafft freie Arbeitsflächen. Ferner gewährleistet es die sichere und flexible Bereitstellung und Lagerung von Laborglas und Verbrauchsmaterialien sowie von abarbeitgeräten auf platzsparende Weise.

Better Basics Laborbedarf GmbH  
<https://better-basics-laborbedarf.de>



Ausrüstung

### DC Monitoringmanager

Der Monitoringmanager ermöglicht die präventive und ortsunabhängige Überwachung von sicherheitsrelevanten Parametern an verschiedenen Lagerorten, inklusive der Möglichkeit der Informationsübermittlung, zum Beispiel an eine zentrale Leitstelle zum Schutz von Personal und Waren. Die Kombination aus Software (SaaS) und Hardware ermöglicht eine modulare Online-Überwachung in der Cloud rund um die Uhr, standardisiert zur Kontrolle von Temperaturen, Füllständen, Lüftungsfunktionen, Türstatus oder Rückzugsschutz an Lagerorten oder in besonders sensiblen Lagersituationen, wie beispielsweise Panzerschränken. Die Monitoring-Hardware-Komponenten verfügen zudem über einen potentialfreien Kontakt zur lokalen Anbindung, zum Beispiel an eine Brandmeldeanlage.

**Innovation:** Die Kombination von Sensoren und browserbasierter Software zur Überwachung ist in dieser Form neu.

Die digitalen Zwillinge der Hardwarekomponenten werden von der Software geortet und konfiguriert.

Düperthal Sicherheitstechnik GmbH & Co. KG  
<https://dueperthal.com>



Labor-automation

# GIT BUYERS GUIDE



<https://bit.ly/WAS-buyers-guide>

## Analytik

### Instrumentelle Analytik

**Knick**  
PF 370415 · 14134 Berlin  
Beuckestr. 22 · 14163 Berlin  
Tel.: 030/80191-0 · Fax: -200  
knick@knick.de · www.knick.de  
**Leitfähigkeitsmessgeräte**

**Löser Meßtechnik**  
Remscheider Straße 16  
D-13583 Berlin  
Tel.: 030/8147317-0 · Fax: -1  
www.loeser-osmometer.de  
**Osmometer**

### Mess-, Prüf- und Regeltechnik

**BRONKHORST HIGH-TECH BV**  
info@brnkhorst.com  
www.massflowcontroller.com  
**Durchflusssmess- und Regelgeräte**

### Optische Systeme

**anthos Mikrosysteme GmbH**  
26169 Friesoythe / Germany  
Tel. 04491/938268-0 · Fax -29  
**Photometer, Mikroplattenphotometer,  
Labor-Schutzbekleidung, Reinraum-  
Schutzbekleidung**

### Sensorik

**Knick**  
PF 370415 · 14134 Berlin  
Beuckestr. 22 · 14163 Berlin  
Tel.: 030/80191-0 · Fax: -200  
knick@knick.de · www.knick.de  
**PH-Messgeräte und Elektroden**

## Trenntechnik/Separation

**Hermle Labortechnik GmbH**  
Siemensstr. 25 · 78564 Wehingen  
info@hermle-labortechnik.de  
www.hermle-labortechnik.de  
**Kühlzentrifugen, Zentrifugen**



**Infolabel AG**  
Grossrietstrasse 7  
CH-8606 Nänikon/Uster  
Tel.: +41 44 944 93 00  
Fax: +41 44 730 46 28  
info@funda.ch · www.funda.ch  
**Filtrertechnik**

## Spektroskopie

**Soliton GmbH**, 82205 Gilching  
Tel.: 08105/7792-0 · Fax: -77  
info@soliton-gmbh.de  
**NIR Spektrometer, Raman Spektroskopie,  
Partikelanalyse**

## Temperiersysteme



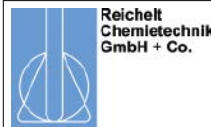
**JULABO GmbH**  
Gerhard-Juchheim-Strasse 1  
77960 Seelbach  
Tel.: 07823/51-0 · Fax: -2491  
www.julabo.com  
info.de@julabo.com  
**Temperiersysteme**

## Laborbedarf/ Verbrauchsmaterial

## Chemikalien/Gase

**CAMPRO SCIENTIFIC GmbH**  
Goerzallee 299 · 14167 Berlin  
Tel.: 030/6290189-0 · Fax: -89  
info@campro.eu · www.campro.eu  
**Stabile und Radio-Isotope**

## Laborbedarf



**RCT Reichelt  
Chemietechnik GmbH + Co.**  
Englerstraße 18 · D-69126 Heidelberg  
Tel: 06221/3125-0 · Fax: -10  
info@rct-online.de · www.rct-online.de  
**Schläuche & Verbinder, Halbzeuge aus  
Elastomeren & Kunststoffen**

**ROLAND VETTER Laborbedarf OHG**  
PF 47 · 72117 Ammerbuch  
Tel.: 07073/6936 · www.rvetter.de  
**Laborhilfsmittel**

## Qualitätskontrolle & Standards

**CAMPRO SCIENTIFIC GmbH**  
Goerzallee 299 · 14167 Berlin  
Tel.: 030/6290189-0 · Fax: -89  
info@campro.eu · www.campro.eu  
**Umweltstandards**

## Laboreinrichtung

### Einrichtung & Medienversorgung

### Laborbau | Systeme

HEMLING.de  
**Laborbau Systeme Hemling  
GmbH & Co. KG**  
Siemensstr. 10 · 48683 Ahaus  
Tel.: 02561/956-860  
Fax: 02561/956-801  
www.laborbau-systeme.de  
**Laboreinrichtungen, Laborabzüge,  
Labormöbel**

### systemceram

KeraLab-Laborkeramik  
**Systemceram GmbH & Co. KG**  
PF 11 55 · 56425 Siershahn  
Tel.: 02623/600-10 · Fax: -790  
info@systemceram.de  
www.systemceram.de  
**Laborbecken, Labortischplatten**

**WEIDNER Laboreinrichtungen GmbH**  
37181 Hardegsen  
Tel.: 05505/94799-0 · Fax: -20  
www.weidner-laboreinrichtungen.de  
**GLOVE-BOX (CNS/Acryl), Laboreinrichtungen**

## Sicherheit

**B-SAFETY GmbH**  
Oststr. 85 · 22844 Norderstedt  
Tel.: 040/538092-70  
www.b-safety24.com  
**Augenduschen**

## Laborgeräte

### Laborgeräte/Maschinen

**Avestin Europe GmbH**  
Tel.: 0621/7245-980 · Fax: -813  
www.avestin.com  
**Hochdruck-Homogenisatoren**



the autoclave company  
**Systec GmbH & Co. KG**  
Konrad-Adenauer-Str. 15  
35440 Linden  
Tel.: 06403/67070-0 · Fax: -222  
info@systec-lab.de  
www.systec-lab.de  
**Autoklaven, Dampfsterilisatoren,  
Medienpräparatoren**

### Pumpen & Vakuumtechnik



**RCT Reichelt  
Chemietechnik GmbH + Co.**  
Englerstraße 18 · D-69126 Heidelberg  
Tel: 06221/3125-0 · Fax: -10  
info@rct-online.de · www.rct-online.de  
**Schläuche & Verbinder, Halbzeuge aus  
Elastomeren & Kunststoffen**

### Probenvorbereitung

**CAMPRO SCIENTIFIC GmbH**  
Goerzallee 299 · 14167 Berlin  
Tel.: 030/6290189-0 · Fax: -89  
info@campro.eu · www.campro.eu  
**Automatisierte Probenvorbereitungs-  
systeme**

## LIMS & Labor IT



**HM-Software**  
Rampenweg 1b  
29352 Adelheidsdorf Deutschland  
Tel: +49(0)5085 9894-0  
sales@hm-software.de  
www.hm-software.de  
**LIMS, Apps, Software, Geräteanbindung**

**Platzieren Sie hier Ihre Formatanzeige!  
Sprechen Sie uns an!**

**GIT LABOR-  
FACHZEITSCHRIFT**

Wiley-VCH GmbH

Boschstr. 12 · D-69469 Weinheim  
Hagen Reichhoff · Tel.: +49 (0) 6201 606 001 · hreichhoff@wiley.com

Sichern Sie sich Ihren Platz  
im Buyers Guide und präsentieren Sie Ihr Unternehmen  
in jeder Ausgabe der  
GIT Labor-Fachzeitschrift!  
Gerne erstellen wir Ihnen ein  
individuelles Angebot.

Abteilung Epigenetik, Deutsches Krebsforschungszentrum	42	Infoteam Software	30
Beratung für Qualitätsmanagement	14	InnoME	56
Better Basics Laborbedarf	57	Innovation Management, Deutsches Krebsforschungszentrum	42
Biotechnologisch-Biomedizinisches Zentrum, Universität Leipzig	39	Institut für Analytische und Allgemeine Chemie, Johannes Kepler Universität	48
Brave Analytics	36, 56	Institut für Physik, Universität Graz	36
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)	20, 24	Institut für Umwelt & Energie Technik & Analytik (IUTA)	6, 15
Camag	35	Integra Bioscience	56
Camsens	55	Julabo	53
Carl Roth	53	Klinkner & Partner	15
CEM	43, 57	Labexchange	Beilage
Center for Organoid Systems, Technischen Universität München	9	Liebherr-Hausgeräte	7
Chip Nanomaging	54	Medizinische Universität Graz	36
CMC <sup>2</sup>	16	Miltenyi Biotec	53
Creavis, Evonik Operations	42	Nürnberg Messe	17
DiaMonTech	54	ONI	55
DiQualis Deutschland	27	Photonscore	54
Düperthal Sicherheitstechnik	57	RCT Reichelt Chemietechnik	37, 52, Beilage
Fakultät für Biologie und Biotechnologie, Ruhr-Universität Bochum	39	Shimadzu Deutschland	23
Falling Walls Foundation	14	Simply Quality	27
Fluics	52	SmartLab Solutions	6
Gottfried Schatz Forschungszentrum, Medizinische Universität Graz	36	Splashlake	33
Graz Zentrum für Elektronenmikroskopie	36	Tintometer	25
GWP Gesellschaft für Werkstoffprüfung	12	Umwelt Pollution-Messtechnik	52
Hahnemühle Fineart	31, 53	Verein Deutscher Ingenieure (VDI)	17
Haus der Technik	4. US	Xylem Analytics Germany	52
HiTec- Zang	29	YMC Europe	11, 51
HM-Software	3	Zweckverband Bodensee-Wasserversorgung	46
Hyperchrom	56		

**IMPRESSUM****Herausgeber**

Wiley-VCH GmbH

**Geschäftsführung**Sabine Haag  
Dr. Guido F. Herrmann**Director**

Roy Opie

**Publishing Director**

Dr. Heiko Baumgartner

**Director – Global Sales, Sciences, Corporate Sales**Dan Nicholas  
Tel.: +1 716 587 2181  
dnicholas@wiley.com**Anzeigenleitung**Vanessa Winde  
Tel.: 06201/606-721  
vanessa.winde@wiley.com**Chefredakteurin**Dr. Christina Poggel  
Tel.: 06201/606-625  
christina.poggel@wiley.com**Stellvertretende Chefredakteurin**Corinna Herbst  
Tel.: 06201/606-752  
corinna.herbst@wiley.com**Redaktion**Dr. Birgit Foltas  
Tel.: 06201/606-760  
bfoltas@wiley.com

Dr. Martin Graf-Utzmann

Tel.: 06201/606-766  
martin.graf-utzmann@wiley.comIsabel Brenneisen  
Tel.: 06201/606-716  
isabel.brenneisen@wiley.comTina Renner  
Tel.: 0162/7718501  
trenner@wiley.com**Freier Redakteur**Dr. Martin Friedrich  
Tel.: 0178/4596064  
editor@redaktionsbuero-friedrich.de**Wiley GIT Leserservice**65341 Eltville  
Telefon: +49 6123 9238 246  
Telefax: +49 6123 9238 244  
E-Mail: WileyGIT@vuservice.de  
Unser Service ist für Sie da von Montag bis Freitag zwischen 8:00 und 17:00 Uhr**Verkauf**Dr. Stefanie Krauth  
Tel.: 06201/606-728  
stefanie.krauth@wiley.comStefan Schwartze  
Tel.: 06201/606-491  
stefan.schwartze@wiley.comHagen Reichhoff  
Tel.: 06201/606-001  
hreichhoff@wiley.com**Herstellung**Jörg Stenger  
Kerstin Kunkel (Anzeigen)  
Ramona Scheirich (Titelgestaltung/Layout/Litho)**Sonderdrucke**Bettina Willnow  
Tel.: 06201/606-770  
bettina.willnow@wiley.com**Wissenschaftlicher Beirat**Prof. Dr. R. van Eldik, Erlangen/Nürnberg  
Prof. Dr. H. P. Latscha, Heidelberg  
Prof. Dr. K. K. Unger, Mainz**Wiley-VCH GmbH**Boschstr. 12  
69469 Weinheim  
Tel.: 06201/606-0  
Fax: 06201/606-793  
git-labor@wiley.com  
analyticalscience.wiley.com**Bankkonten**J.P. Morgan AG, Frankfurt  
Konto-Nr. 6161517443  
BLZ: 501 108 00  
BIC: CHAS DE FX  
IBAN: DE5550110800616151744367. Jahrgang 2023  
Zurzeit gilt Anzeigenpreisliste Nr. 59  
vom 1. Oktober 20222023 erscheinen 8 Ausgaben von  
„GIT Labor-Fachzeitschrift“  
Druckauflage: 25.000  
(IVW-geprüft, 2. Quartal 2023)**Abonnement 2023**8 Ausgaben 115,00 € zzgl. MwSt.  
Einzelheft 16,30 € zzgl. MwSt. und Porto  
Schüler und Studenten erhalten unter Vorlage einer gültigen Bescheinigung 50% Rabatt.  
Abonnementbestellungen gelten bis auf Widerruf; Kündigungen 6 Wochen vor Jahresende. Abonnementbestellungen können innerhalb einer Woche schriftlich widerrufen werden, Versandreklamationen sind nur innerhalb von vier Wochen nach Erscheinen möglich.

Die Mitglieder der Fachgesellschaft Technologies of Life Sciences des Vereins Deutscher Ingenieure (VDI) erhalten die GIT Labor-Fachzeitschrift im Rahmen ihrer Mitgliedschaft.

**Originalarbeiten:**

Die namentlich gekennzeichneten Beiträge stehen in der Verantwortung des Autors. Nachdruck, auch auszugsweise, nur mit Genehmigung der Redaktion und mit Quellenangabe gestattet. Für unaufgefordert eingesandte Manuskripte und Abbildungen übernimmt der Verlag keine Haftung.

Dem Verlag ist das ausschließliche, räumlich, zeitlich und inhaltlich eingeschränkte Recht eingeräumt, das Werk/den redaktionellen Beitrag in unveränderter Form oder bearbeiteter Form für alle Zwecke beliebig oft selbst zu nutzen oder Unternehmen, zu denen gesellschaftsrechtliche Beteiligungen bestehen, so wie Dritten zur Nutzung übertragen. Dieses Nutzungsrecht bezieht sich sowohl auf Print- wie elektronische Medien unter Einschluss des Internets wie auch auf Datenbanken / Datenträgern aller Art.

Alle etwaig in dieser Ausgabe genannten und/oder gezeigten Namen, Bezeichnungen oder Zeichen können Marken oder eingetragene Marken ihrer jeweiligen Eigentümer sein.

**Druck**

westermann DRUCK pva

Printed in Germany  
ISSN 0016-3538**WILEY**

Sichern Sie sich jetzt Ihren  
persönlichen Kennenlern-Rabatt\*  
in Höhe von 50,- €.  
Buchungscod: GIT0923 (gilt bis 31.12.2023)



## SEMINARE ANALYTIK/LABOR

**GC-MS: Von der Ionenquelle bis zum Massenanalysator**  
26. - 27.09.23 in Essen

**Vermittlung der Sachkunde nach § 11 ChemVerbotsV**  
16. - 18.10.23 in Essen  
11. - 13.03.24 in Essen

**Vermittlung der Fachkunde für die Erstellung von  
Sicherheitsdatenblättern**  
17. - 19.10.23 in Essen  
12. - 14.03.24 in Essen

**Basiswissen Chemie**  
06. - 08.11.23 in Essen  
23. - 25.04.24 in Augsburg

**REACH-Beauftragter: Vermittlung der Fachkunde für den  
REACH-Beauftragten**  
07. - 08.11.23 in Essen  
14. - 15.05.24 in Essen

**Gefahrstoffbeauftragter**  
09. - 10.11.23 in Bad Oeynhausen  
14. - 15.05.24 in Essen

**Lagerung von Gefahrstoffen**  
23. - 24.11.23 in Bad Oeynhausen  
15. - 16.05.24 in Essen

**GHS/CLP Basisseminar**  
05. - 06.12.23 in Essen  
05. - 06.03.24 in Essen

**Führungstraining für Laborleiter**  
05. - 06.12.23 in Essen  
18. - 19.06.24 in Essen

**Prüfpflichtige Sicherheitseinrichtungen im Labor:  
Laborabzüge**  
07.12.23 in Essen  
27.02.24 in hdt\* digitaler Campus  
14.05.24 in Essen

**Prüfpflichtige Sicherheitseinrichtungen im Labor und  
sonstigen Arbeitsräumen: Sicherheitsschränke**  
08.12.23 in Essen  
28.02.24 in hdt\* digitaler Campus  
14.05.24 in Essen

**Masterkurs für den fortgeschrittenen GC-MS Anwender**  
11. - 12.12.23 in Essen

**Führungstraining: Vom Mitarbeiter zum Laborleiter**  
12. - 14.12.23 in Essen  
04. - 06.06.24 in Essen

**Auffrischkurs Laborabzüge – Erfahrungsaustausch  
der Sachkundigen**  
29.01.24 in Essen  
23.05.24 in Berlin

**HPLC-MS in der Non-Target und in der Spurenanalytik**  
20. - 21.02.24 in Essen

**Sicherheit im Labor**  
26.02.24 in Essen

**Gefahrstoffe – Sicheres Arbeiten in Laboratorien  
(TRGS-526)**  
21. - 22.03.24 in Essen

IHR ANSPRECHPARTNER:  
**Dipl.-Ing. Kai Brommann**  
Leiter Fachbereich Chemie –  
Brandschutz – Verfahrenstechnik  
Telefon: +49 (0)201 1803-251  
E-Mail: fb5@hdt.de



\* Hinweis: Der Rabatt gilt pro Person nur einmalig für die  
Buchung einer Veranstaltung im angegebenen Aktionszeitraum.

[www.hdt.de/git0923](http://www.hdt.de/git0923)