



TRENDBERICHT

Analytische Chemie

Von grüner Chromatographie über ultrasensitive Radionukliddetektion bis zu KI-gestützter Spektroskopie – die analytische Chemie entwickelt sich rasant weiter. Neue Trenntechniken, miniaturisierte Sensoren und datengetriebene Verfahren eröffnen Wege zu schnellerer, selektiverer und nachhaltigerer Analytik.

Trenntechniken

In den analytischen Trenntechniken wird Nachhaltigkeit zunehmend wichtiger. Neben der Entwicklung grüner Techniken spielen die Miniaturisierung, die Parallelisierung, die Multidimensionalität und die Entwicklung neuer Koppungstechniken eine Rolle. Ziel ist es, den Informationsgehalt der Analyse zu steigern und gleichzeitig Schnelligkeit und Selektivität zu verbessern.

Nachhaltigkeit

Methodenentwicklungen sowie Methodentransfers erfolgen zunehmend nach den Prinzipien der grünen analytischen Chemie.¹⁾ Sie lassen sich direkt bei der Entwicklung der Methode berücksichtigen und betreffen nicht nur die Trennung selbst, sondern auch die Probenvorbereitung sowie die Detektion. Mithilfe einer selektiven ionenchromatographischen (IC) Trennmethode etablierten Haderlein et al. beispielsweise anstelle der Massenspektrometrie (MS) eine pulsamperometrische Detektion (PAD), die weniger Energie verbraucht, um das Umweltverhalten von Aminopolyphosphonaten zu untersuchen.²⁾ Die Verbindungen finden als Komplexbildner breite Verwendung in Waschmitteln. Die Bestim-

mung von Aminophosphonaten und ihrer Polyphosphonate durch eine Kombination aus Ionenchromatographie und Pulsamperometrie ist sehr empfindlich und verzichtet darüber hinaus auf eine Derivatisierung sowie auf toxische und umweltschädliche Reagenzien; so reduziert sich insgesamt der Chemikalienverbrauch.

Wasser als mobile Phase ist ein probates Mittel, die Chromatographie grüner zu gestalten. In der Umkehrphasen-HPLC kommen jedoch oft binäre Gradienten mit einer organischen Lösemittelkomponente zum Einsatz. Insbesondere der Ersatz von Acetonitril lässt sich mit überkritischer Fluidchromatographie (supercritical fluid chromatography, SFC) realisieren. So wird die wirtschaftlich relevante chromatographische Trennung von Vitamin-A-Acetat-Stereoisomeren und weiteren Retinoiden mit der SFC nicht nur grüner, sondern auch effizienter und robuster.³⁾ Legelli et al. untersuchten hierzu in der industriellen Produktkontrolle den Methodentransfer zwischen SFC und HPLC. Der Vergleich ergab Unterschiede hinsichtlich der Selektivität, auch wenn dasselbe Packungsmaterial verwendet wurde. Für eine robuste Trennung und vollständige Desorption von der stationären Phase muss in der SFC ein hinreichender Rückdruck erreicht werden, den ein Rückdruckregulator

einstellt. Wie sich zeigte, bleiben die molekularen Formerkennungsfähigkeiten der stationären Phase auch während der SFC-Trennung erhalten; die SFC bietet somit eine ergänzende Selektivität zur HPLC. Mit einer um den Faktor drei bis zehn höheren Trenngeschwindigkeit bei gleichzeitig besseren Auflösungen und weniger Abfall bietet die SFC also nicht nur ökologische, sondern auch wirtschaftliche Vorteile.

Miniaturisierung

Miniaturisierte Trennungen haben sich bewährt, um kleinste Proben volumina zu analysieren, den Lösemittelverbrauch zu reduzieren und den Probendurchsatz bei kurzen Trennzeiten zu erhöhen. Belder et al. gelang es, einen Rückdruckregulator (back pressure regulator, BPR) in einen mikrofluidischen SFC-Chip zu integrieren.⁴⁾ Das neue Design zeichnet sich durch μ -Fritten-Haltevorrichtungen für die partikuläre stationäre Phase, einen Pinhole-Emitter – eine Art Lochblende, an der eine Hochspannung angelegt wird, sodass sich ein Elektrospray bildet – und einen verdünnungsfreien BPR aus (Abbildung 1).

Der nL-Volumen-BPR vermeidet eine Analytverdünnung. Schnelle sowie chirale Trennungen sind in weniger als einer Minute möglich. So ließen sich Tocopherole in einer

Kartoffelchips-Probe mit sehr niedrigen Nachweisgrenzen bestimmen. Über die MS-Detektion hinaus war die Detektion mit der Ionenmobilitätsspektrometrie möglich.⁵⁾

Parallelisierung

Ein ideales Werkzeug, um grüne Methoden zu etablieren, ist die Hochleistungsdünnschichtchroma-

tographie (HPTLC). Insbesondere die parallele Analyse ermöglicht einen hohen Probendurchsatz. Morlock et al. sind mit der Methodik „Open source 2 Labs To Go Eco“ Vorreiter beim Entwickeln integrierter HPTLC-Systeme.⁶⁾ Das System besteht aus einem analytischen HPTLC-Verfahren, kombiniert mit einem Bioassay-Labor. Als planare Assays lassen sich diverse Stoffeigenschaften wie Muta-

genität, Zytotoxizität, Neuromodulation/Neurotoxizität sowie antibakterielle und hormonelle Wirksamkeit direkt auf der chromatographischen Platte testen und visualisieren. Abbildung 2 zeigt beispielhaft die Analyseschritte beim Test auf Genotoxizität.

So wird es möglich, unbekannte Schadstoffe in komplexen Produkten zu detektieren und gleichzeitig ihre Wirkung auf Zellen und Rezep-

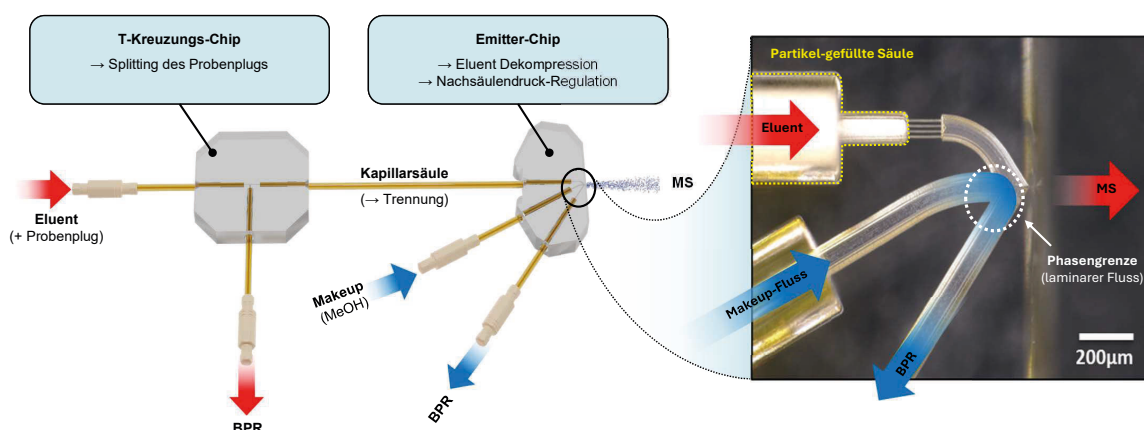


Abb. 1. Aufbau eines Mikrofluidik-Chips der überkritischen Fluidchromatographie (SFC) mit Rückdruckregulator (BPR) und Emitter-Chip zur direkten, totvolumenfreien Kopplung mit der Massenspektrometrie.⁴⁾

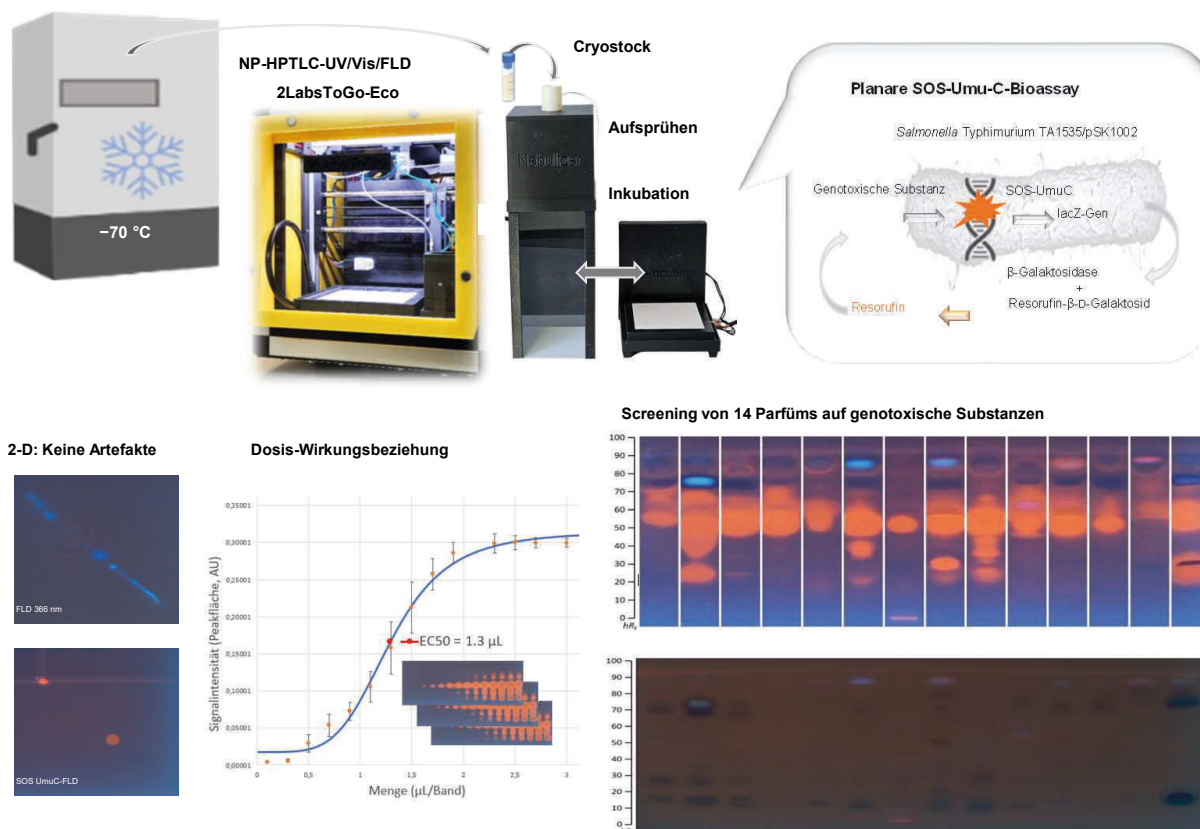


Abb. 2. Kopplung der HPTLC mit einem planaren Bioassay am Beispiel des Tests auf Genotoxizität von Inhaltsstoffen in 14 Parfümpflanzen.⁶⁾

toren zu untersuchen. Durch einen zweidimensionalen HPTLC-Ansatz lassen sich die Selektivität steigern und die Ergebnisse absichern.⁶⁾

Selektivität und Mehrdimensionalität

Bislang ist die HPLC mit der Isotopenverhältnis-MS (isotope-ratio mass spectrometry, IRMS) auf rein wässrige mobile Phasen beschränkt und daher stark limitiert, da der Großteil der etablierten HPLC-Methoden organische und damit kohlenstoffhaltige Lösemittel verwendet. Schmidt et al. entwickelten einen zweidimensionalen Heart-cut-Ansatz und wendeten ihn in einer Pilotstudie für die Isotopenanalyse von Koffein in einer Schmerztablette an.⁷⁾ Über ein Schaltventil wird die ausgewählte Komponente in einer Injektionsschleife zwischengespeichert und dann auf eine zweite Trenndimension überführt, die nur noch reines Wasser als mobile Phase verwendet. Somit lassen sich in der ersten Dimension Trennungen mit organischen Lösemitteln durchführen. In der zweiten Dimension wird das organische Lösemittel vom Analyten getrennt, bevor dieser im HPLC-IRMS-Interface zu CO₂ oxidiert wird. Diese neue 2D-HPLC-IRMS-Methode eröffnet neue Möglichkeiten in den Umweltwissenschaften, in der pharma-

zeutischen Forschung und in der Lebensmittelchemie.

Bei der Analyse komplexer Proben kommen eindimensionale Trenntechniken oftmals an ihre Grenzen. Die Auflösung wird maximal, wenn zwei Trennmodi mit maximalen Selektivitätsunterschieden kombiniert werden. Idealerweise wird dabei das gesamte Chromatogramm aus der ersten auf die zweite Dimension überführt (comprehensive Ansatz). Schmitz et al. entwickelten hierzu einen Ansatz mit einer neu synthetisierten L-Lysin-basierten stationären Silicaphase, die zwei C₁₈-Alkylketten mit eingebetteten polaren Gruppen enthält.⁸⁾ Dabei eignete sich die stationäre Phase in der eindimensionalen LC sowohl für den Umkehrphasenmodus als auch für die hydrophile Interaktionsflüssigkeitschromatographie (HILIC). Beispielsweise ließen sich die β - und γ -Isomere von Vitamin E sowie von Nordihydrocapsaicin und Capsaicin im Umkehrphasenmodus effizient trennen. Daneben ließ sich Ascorbinsäure aus einer Chilimatrix im HILIC-Modus ausreichend retardieren. Auch in der zweidimensionalen Flüssigchromatographie (LCxLC) zeigte sich die hohe Leistungsfähigkeit der neuen Phase mit hoher Orthogonalität der beiden Trennmodi: Hier wurde eine Kräuterlikörprobe getrennt.

Einen neuen mehrdimensionalen Ansatz, um intakte Proteine mit Kapillarelektrophorese zu trennen, stellten kürzlich Neusüß et al. vor. Es gelang, die beiden mikrofluidischen Trenntechniken nano-HPLC und Kapillarzonenlektrophorese-MS (capillary zone electrophoresis mass spectrometry, CZE-MS) direkt miteinander zu koppeln. Dabei wurde ein bestimmter Abschnitt der nano-HPLC-Trennung zwischengespeichert.⁹⁾ Dafür sorgten ein mikrofluidisches Ventil und eine Speicherkapillare; die chromatographische Trennung blieb erhalten. Die nano-HPLCx-CZE-MS-Plattform eröffnet die Möglichkeit, Proteoformen intakter Proteine detaillierter und umfassender zu charakterisieren, als dies ein eindimensionaler Ansatz erlaubt.

All diese Beispiele zeigen, wie dynamisch sich die Trenntechniken entwickeln. Die hier skizzierten Ansätze basieren auf neuen Selektivitäten, auf Miniaturisierung und Parallelisierung und ermöglichen schnelle hochauflösende Trennungen. Nicht zuletzt die Kopplung von Trennungen mit Detektionstechniken wie planaren Bioassays oder der IRMS erlauben einen deutlichen Informationsgewinn.

Heiko Hayen,
Universität Münster

INFO: Analytische Chemie und die Analytica 2026

Dieser Trendbericht wurde möglich durch das Engagement des Vorstands der GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie. Beteiligt waren die jeweiligen Arbeitskreise; den Trendbericht koordiniert hat Günter Gauglitz.

Der Trendbericht Analytische Chemie erscheint alle zwei Jahre parallel zur Analytica Conference, die alle Bereiche der chemischen und biochemischen Analytik abdeckt. In diesem Jahr findet die Konferenz vom 24. bis 26. März im ICM – International Congress Center München statt, parallel zur Messe Analytica. Das Messegelände liegt nur wenige Schritte vom ICM entfernt und präsentiert Neuentwicklungen bei Analysen- und Labortechnik.

www.gdch.de/analyticaconf2026



- 1) F. Pena-Pereira, W. Wojnowski, M. Tobiszewski, *Anal. Chem.* 2020, 92, 10076
- 2) A. M. Röhnelt, P. R. Martin, R. G. H. Marks et al., *Anal. Bioanal. Chem.* 2025, 417, 1581
- 3) M. Legelli, P. Otzen, M. Eberle, M. Wirtz, S. Lamotte, *J. Chromatogr. A* 2025, 1754, 466021
- 4) J. Schwieger, C. Weise, D. Belder, *Anal. Chem.* 2024, 96, 20107
- 5) J. Schwieger, K. Welters, C. Thoben et al., *Anal. Chem.* 2025, 97, 14, 7954
- 6) G. E. Morlock, *J. Chromatogr. A* 2025, 1752, 465946
- 7) S. P. Rockel, R. G. H. Marks, K. Kerpen, M. A. Jochmann, T. C. Schmidt, *Anal. Chem.* 2025, 97, 2991
- 8) Y. Oulad El Majdoub, A. K. Mallik, L. Montero et al., *Anal. Bioanal. Chem.* 2025, 417, 5463
- 9) T. Waldmann, P. T. Kaulich, A. Stolz, A. Tholey, C. Neusüß, *Anal. Chem.* 2025, 97, 42, 23214

Elementanalytik

In der Elementanalytik gewinnt Forschung angesichts neuer Möglichkeiten und Herausforderungen – etwa durch bildgebende Verfahren in den Lebenswissenschaften, PFAS und neue Batteriematerialien – weiter an Bedeutung. Dies zeigt sich auch in der zunehmenden Zahl der Publikationen zu elementanalytischen Techniken (Abbildung 3).

Röntgenfluoreszenzanalyse

Die Röntgenfluoreszenzanalyse (X-ray fluorescence spectroscopy, XRF) bleibt in der modernen Elementanalytik wichtig: Ihre Fähigkeit zur Multielement-, Feststoff- und zerstörungsfreien Analyse bei minimaler Probenvorbereitung macht sie vielseitig einsetzbar. Neben der klassischen Bulk-Analyse werden Varianten wie makroskopische (MA-XRF), Totalreflexions- (TXRF) und Mikroröntgenfluoreszenzanalyse (μ XRF) stetig weiterentwickelt. Trends wie künstliche Intelligenz (KI), nachhaltige Analysestrategien und technologische Fortschritte treiben diese Entwicklungen voran.

KI unterstützt insbesondere die Spektreninterpretation sowie die Analyse komplexer Datensätze und verbessert die Auflösung bildgebender Verfahren. In der MA-XRF von Gemälden liefern große Spektrendatensätze eine ideale Basis für Deep-Learning-Modelle, die klassischen Dekonvolutionsverfahren überlegen sind, Artefakte reduzieren und die quantitative Auswertung verbessern.¹⁰⁾ Ähnliche Ansätze finden Anwendung in der portablen energiedispersiven XRF-Analytik (EDXRF) von Schwermetallen in Böden.¹¹⁾ Die Elementspurenanalyse mit TXRF profitiert vor allem von neuen Probenvorbereitungsmethoden, die Sensitivität, Reproduzierbarkeit und Nachhaltigkeit verbessern. Beispiele sind die pikoliterbasierte Filmbildung, die direkte Aerosolabscheidung für größenfraktionierte Metallanalysen und

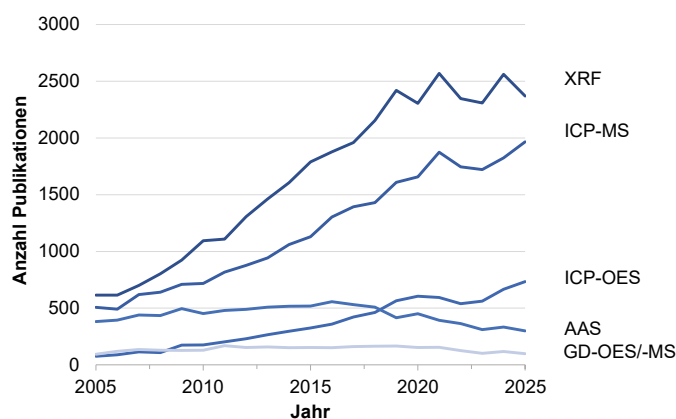


Abb. 3. Publikationszahlen elementanalytischer Techniken. Stand 1.12.2025, Datenquelle: Web of Science, Clarivate. Stichwörteruche in Titel, Keywords und Abstract der Publikationen. XRF: Röntgenfluoreszenzanalyse; ICP-MS: Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma; ICP-OES: Optische Emissionsspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma; AAS: Atomabsorptionsspektrometrie; GD-OES: Optische Glimmentladungs-Emissionsspektrometrie; GD-MS: Glimmentladungsmassenspektrometrie.

die direkte Untersuchung homogener Suspensionen.^{12–14)} In interdisziplinären Forschungsfeldern hat sich die μ XRF als bildgebende Technik etabliert, ist jedoch bei käuflichen Systemen auf 2-D-Abbildungen mit mikrometrischer Auflösung beschränkt. Neuentwicklungen

setzen verstärkt auf mathematische und KI-gestützte Bildoptimierung, Super Resolution und quantitative Rekonstruktion.¹⁵⁾ Zukunftsweisend ist die Entwicklung konfokaler μ XRF-Tischgeräte für zerstörungsfreie 3-D-Analysen inhomogener Proben (Abbildung 4).¹⁶⁾

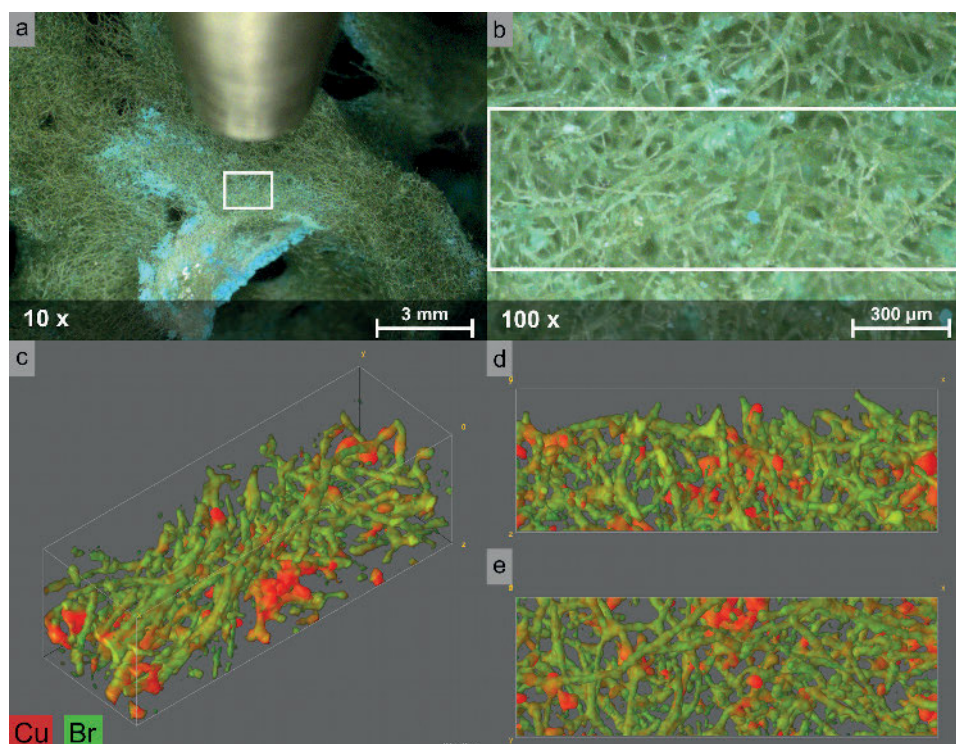


Abb. 4. Ein sponginbasiertes, poröses Mikrofasergerüst aus *Hippospongia-communis*-Badeschwamm wurde nach dem Einlegen in eine Modell-Ammoniak-CuCl-Lösung mit einer Schicht grünen, kristallinen Materials bedeckt (10-fache Vergrößerung (a), 100-fache Vergrößerung (b)), das als Atacamit identifiziert wurde. (c) 3-D-Verteilung, (d) Seitenansicht und (e) Draufsicht der Kupfer- und Bromverteilung im Spongin-Atacamit-Komposit, gemessen in einem Teil der Probe mit den Abmessungen $1,5 \cdot 0,5 \cdot 0,5 \text{ mm}^3$. Graphik: Aus Lit. 16)

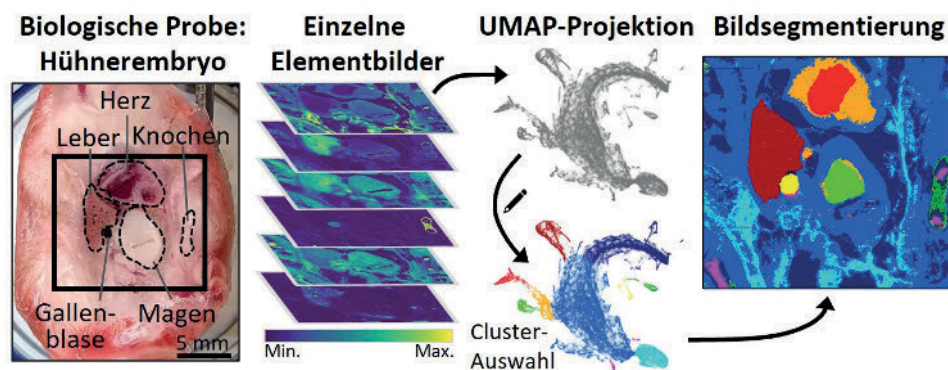


Abb. 5. Bildgebende Elementanalytik eines Hühnerembryo-Torsos mit LA-ICP-TOFMS. Die Datenstruktur der Elementbilder wurde per Uniform Manifold Approximation and Projection (UMAP) in einer 2-D-Projektion visualisiert, was die Segmentierung spektral unterschiedlicher Bildbereiche – etwa verschiedener Organe – ermöglicht.

Abbildung: K. Kronenberg

Induktiv gekoppelte Plasmamassenspektrometrie

In der Elementanalytik ist die Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma (ICP-MS) sowohl eine etablierte Routinemethode als auch aktives Forschungsfeld. Entwicklungen wollen das Portfolio messbarer Analyten erweitern sowie maschinelle Lernverfahren in die Datenverarbeitung einbinden.

Unkonventionelle Analyten rücken in den Fokus: Eine zentrale Rolle spielt Fluor, etwa in der Analyse per- und polyfluorierter Alkylsubstanzen (PFAS), sowohl für Gesamtgehalte als auch in der Speziations- und Einzelpartikelanalytik.^{17,18)} Bislang war bei der ICP-MS nur der positive MS-Modus verbreitet; ein wieder aufgenommener Ansatz nutzt die Bildung negativer Ionen, um Fluor und andere Halogene zu erfassen.¹⁹⁾ Auch Sauerstoff zählt zu den ungewöhnlichen Zielanalyten. Eine neue ICP-MS/MS-Methode kann Sauerstoffisotopenverhältnisse in Wasser bestimmen, was sich zum Beispiel für die Analyse von Eisbohrkernen eignet.²⁰⁾

Parallel dazu gewinnt die ICP-Flugzeitmassenspektrometrie (time-of-flight mass spectrometry, TOFMS) an Bedeutung, da sie umfassende Elementspektren liefert. Beim Verarbeiten von ICP-TOFMS-Daten werden zunehmend maschinelle

Lernverfahren eingesetzt, insbesondere in der Bildgebung durch die Kopplung mit der Laserablation (LA). So wird etwa Uniform Manifold Approximation and Projection (UMAP) zur Bildsegmentierung auf Basis der vollständigen spektralen Information verwendet (Abbildung 5).²¹⁾ Ein weiterer Ansatz nutzt neuronale Netzwerke, um Bilddaten zu interpolieren, wodurch sich größere Objekte in kürzerer Messzeit analysieren lassen.²²⁾

Glimmentladungsspektroskopie

Im Vergleich zu ICP- und Röntgenfluoreszenzanalysetechniken sind die optische Glimmentladungsspektroskopie und die Glimmentladungsmassenspektrometrie (GD-OES und GD-MS) eher Nischentechniken, aber in der Industrie und Materialforschung wichtig. Auch hier laufen Forschung und Methodenentwicklung, und es werden neue Anwendungen erschlossen: So wurde erstmals die GD zur Analyse schwer ionisierbarer neutraler und unfunktionalisierter PFAS in unpolaren Lösungsmitteln eingesetzt, die sich mit der Elektrosprayionisations-MS praktisch nicht detektieren lassen.²³⁾ In der Lithiumbatterieforschung sind GD-OES und -MS bereits seit einiger Zeit im Einsatz. Eine neue Anwendung ist das Monitoring von Verschiebun-

gen im Li-Isotopenverhältnis: Dieses liefert Hinweise auf Alterungsmechanismen bei Ladezyklen.²⁴⁾

Kerstin Leopold, Institut für Analytische und Bioanalytische Chemie, Universität Ulm
Katharina Kronenberg, Universität Münster
Cornel Venzago

- 10) Z. Preisler, R. Andolina, A. Busacca et al., *Sci. Adv.* 2024, 10, eadp6234
- 11) Q. Zhang, F. Li, W. Yang, *J. Anal. At. Spectrom.* 2024, 39, 478
- 12) S. Hampel, F. Sand, D. A. Murcia Gonzalez et al., *Spectrochim. Acta B: Atom. Spectrosc.* 2023, 206, 106716
- 13) C. Crazzolara, A. Held, *Atmos. Meas. Tech.* 2024, 17, 2183
- 14) R. Fernández-Ruiz, *Spectrochim. Acta B: Atom. Spectrosc.* 2025, 229, 107214
- 15) F. Bock, A. Gruber, K. Leopold, H. Bruhn, *J. Anal. At. Spectrom.* 2023, 38, 1021
- 16) K. Heimler, C. Gottschalk, C. Vogt, *Anal. Bioanal. Chem.* 2023, 415, 5083
- 17) R. Gonzalez de Vega, M. Plassmann, D. Clases et al., *Anal. Chim. Acta* 2024, 1314, 342754
- 18) R. Gonzalez de Vega, T. T. Moro, B. Grüner et al., *J. Anal. At. Spectrom.* 2024, 39, 2030
- 19) A. Raab, H. Badiei, J. Feldmann, *J. Anal. At. Spectrom.* 2025, 40, 1689
- 20) S. T. Lancaster, J. Irrgeher, R. Dallmayr et al., *Anal. Chem.* 2025, 97, 20788
- 21) K. Kronenberg, H. Rave, N. Ghaffari-Tabrizi-Wizsy et al., *J. Anal. At. Spectrom.* 2025, 40, 3473
- 22) P. Larkman, S. Vascon, M. Šala et al., *Analyst* 2025, 150, 3408
- 23) V. Müller, D. Bleiner, J. V. Goodwin et al., *J. Anal. At. Spectrom.* 2025, 40, 1700
- 24) B. Batistella, A. Revill, C. Venzago et al., *ChemRxiv* 2025, doi: 10.26434/chemrxiv-2025-5rvlk

Radioanalytik

Ultraspurendetektion von Radionukliden

Die massenspektrometrische Ultraspurendetektion von Radionukliden hat einen enormen Sprung gemacht; Grund sind Optimierungen bei der Triple-Quadrupol-Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma (inductively coupled plasma mass spectrometry, ICP-MS). Indem die Isobare in einer Gasreaktionszelle unterdrückt wird, lassen sich Radionuklide im unteren Femtogrammbereich detektieren.²⁵⁾ Radionuklidgehalte im Atto- und Zeptogrammbereich sind mit der Beschleunigermassenspektrometrie (accelerator mass spectrometry, AMS) detektierbar. Oft sind niedrige Beschleunigungsspannungen (≤ 3 MV) vorteilhaft gegenüber großen Beschleunigeranlagen. So wurde zum Beispiel für Plutonium eine Gesamteffizienz von $> 1\%$ erreicht.²⁶⁾

Radionuklide im mittleren Massenbereich in niedrigsten Konzentrationen macht die Ionen-Laser-Interaktions-Massenspektrometrie (ILIAMS) zugänglich.²⁷⁾ Durch die Deionisation der isobaren Anionen mit einem Laser lassen sich Isobarenunterdrückungen von bis zu 10^{11} erreichen. Neben der bestehenden AMS-Anlage VERA in Wien wird derzeit in Dresden am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) eine universelle AMS-Anlage aufgebaut, welche niedrige Terminalschnnungen zur Effizienzmaximierung mit der Isobarenunterdrückung durch die ILIAMS vereint.^{28,29)} Das Helmholtz Accelerator Mass Spectrometer Tracing Environmental Radionuclides – kurz HAMSTER – wird dieses Jahr in den Regelbetrieb gehen.

Neutronenaktivierungsanalyse

Die klassische instrumentelle Neutronenaktivierungsanalyse (INAA) – und für spezielle Anwendungen die radiochemische Neutronenakti-

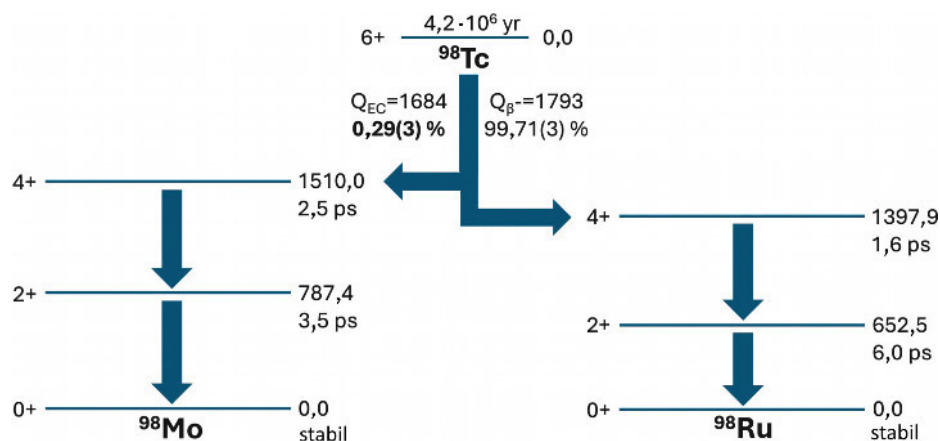


Abb. 6. Aktualisiertes Zerfallsmodell von Tc-98 mit neu gemessenen Verzweigungsverhältnissen.⁴⁰⁾

vierungsanalyse (RNAA) – sind weiterhin gefragt. Anwendung finden sie etwa in Archäometrie, Recyclingforschung, Isotopenproduktion, Batterieforschung und den Lebenswissenschaften. Bei der Analytik mit Neutronen sind bemerkenswerte Entwicklungen das Aufwerten des Neutron Depth Profiling hin zu ausgefeilter räumlich-zeitlich aufgelöster Analyse, die additive Fertigung passgenauer Probenhalter, die KI-gestützte Messdatenauswertung, das Full-Spectrum Least-Squares Fitting sowie stark verbesserte Gamma-Datenkataloge.^{30–36)} Der Ausfall wichtiger Neutronenquellen in den letzten Jahren – etwa am Heinz-Maier-Leibnitz-Zentrum, am Budapest Neutron Centre und am NIST Center for Neutron Research – hat besonders die prompte Gamma-Aktivierungsanalyse (PGAA) sowie die In-beam-Neutronenaktivierungsanalyse betroffen. An der Wiederinbetriebnahme der Anlagen wird intensiv gearbeitet. Es werden auch Konzepte für Instrumente an gepulsten Neutronenquellen entwickelt, welche die an Reaktoren gebundenen Anlagen komplementär ergänzen könnten.

Neuigkeiten auf der Nuklidkarte

In der nächsten Ausgabe der Nuklidkarte wird einem Isotop – dem Technetium-98 – eine weitere Farbe hinzugefügt. Erst kürzlich wur-

de der Zerfall von Tc-98 via Elektroneneinfang zu Mo-98 nachgewiesen, über dessen Existenz schon seit den 1990er Jahren spekuliert wurde, das aber bisher aufgrund der geringen Häufigkeit von Tc-98 nicht nachweisbar war.³⁷⁾ Tc-98 kommt in Tc-99-Proben vor, die sich im Grammbereich erhalten lassen.³⁸⁾ Um die kleine Menge Tc-98 zu messen, muss die β^- -Strahlung von Tc-99 abgeschirmt werden.³⁹⁾ Zusätzlich wurde ein Versuchsaufbau mit vier Paaren N-dotierter hochreiner Germaniumkristalle verwendet, die Koinzidenzmessungen erlauben. Erstellt man dann eine Two-step-cascade-Matrix, indem man die einzelnen Detektoren gegen die Summenenergie der Koinzidenz-Events aufrägt, sind sowohl der β^- -Zerfall als auch der Zerfall via Elektroneneinfang klar ersichtlich. Zusätzlich wurde auch das Verhältnis der beiden Zerfälle mit 0,29(3) % Elektroneneinfang bestimmt und das Zerfallsschema von Tc-98 aktualisiert (Abbildung 6).⁴⁰⁾

Sebastian Fichter, Helmholtz-Zentrum
Dresden-Rossendorf
Christian Stieghorst, TU München
Veronika Rosecker, TU Wien

25) C. Peng, J. Sun, F. Zhang et al., *Anal. Chem.* 2024, 96, 6, 2514

26) M. Hotchkis, K. Richardson, D. Child et al., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* 2025, 568, 165869

27) M. Martschini, D. Hanstorp, J. Lachner et al., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* 2019, 456, 213

- 28) R. Golser, W. Kutschera, Nucl. Phys. News 2017, 27, 29
- 29) A. Wallner, J. Lachner, T. Döring et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B 2025, 570, 165890
- 30) R. Neagu, S. Golenev, L. Werner et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A 2024, 1065, 169543
- 31) K. Gmeling, Z. Schneider, G. Benyács, S. Janik, SAAGAS 28 Book of Abstracts, saagas28.conf.tuwien.ac.at/wp-content/uploads/2025/02/saagas28-bookofabstracts.pdf
- 32) D. Boschmann, C. Stieghorst, D. Knezevic, L. Kari, O. Niggemann, 2024 IEEE 22nd International Conference on Industrial Informatics, proceedings.com/content/077/077739webtoc.pdf
- 33) N. A. Mahynski, D.A. Sheen, R. L. Paul, H. H. Chen-Mayer, V. K. Shen, J. Radioanal. Nucl. Chem. 2025, 334, 4919
- 34) G. P. Lasché, H. H. Chen-Mayer, SAAGAS 28 Book of Abstracts, saagas28.conf.tuwien.ac.at/wp-content/uploads/2025/02/saagas28-bookofabstracts.pdf
- 35) Z. Révay, B. Maróti, SAAGAS 28 Book of Abstracts, saagas28.conf.tuwien.ac.at/wp-content/uploads/2025/02/saagas28-bookofabstracts.pdf
- 36) E. Mauerhofer, N. Ophoven, Z. Illic et al., J. Radioanal. Nucl. Chem. 2025, 334, 3227
- 37) T. Kobayashi, K. Sueki, M. Ebihara et al., Radiochim. Acta 1993, 63, 29
- 38) NEA, The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library, 2009, OECD Publishing, Paris
- 39) E. Browne, J. K. Tuli, Nucl. Data Sheets 2017, 145, 25
- 40) D. Elchine, M. Müller, M. Schiffer, E. Strub, Phys. Rev. C 2025, 112, 044317

Chemo- und Biosensorik

Das Konzept, selektive Erkennungsmoleküle mit Sensormesstechnik auf einem Chemo- oder Biosensor zu integrieren, besticht noch heute und führt immer wieder zu neuen Forschungsfeldern, die industriell relevant sind. Triebfeder ist dabei, dass sich Analysen kosteneffizient, schnell und möglichst autark und vor Ort durchführen lassen.⁴¹⁾ Innovationen lassen sich vor allem im Forschungsfeld der Gesundheitsüberwachung vorantreiben, weil dort viele Fördergelder zur Verfügung stehen. Waren Glucosesensoren die erste Generation und Immunosensoren die dritte Generation

von Biosensoren, stehen bei der fünften Generation künstliche Intelligenz und maschinelles Lernen im Vordergrund; in der sechsten Generation sollen nun holografische Technologien integriert werden.^{42,43)} Biosensoren spielen eine zentrale Rolle in der Präzisionsmedizin, da sie hochspezifische, sensitive Echtzeitdaten liefern, die es möglich machen, medizinische Behandlungs- und Präventionsstrategien auf individuelle biologische Merkmale abzustimmen.⁴⁴⁾ Solche biosensorischen Messkonzepte sind auch in der Lebensmittelüberwachung angekommen und werden im Sinne des One-health-Ansatzes mit Sicherheit zukünftig passgenau in der Präzisionslandwirtschaft zum Einsatz kommen oder für die situative Überwachung der Wasserqualität.^{45,46)} Letzten Endes geht es um das Vernetzen und instantane Auswerten multipler analytischer Sensordaten zusammen mit Metadaten, damit sich Prozesse intelligent steuern lassen. Die Kreativität in der Chemo- und Biosensorforschung wird immer dann befruchtet, wenn Analytiker:innen aus allen Bereichen der Naturwissenschaften mit Ingenieur:innen und Praxisanwender:innen gedanklich zusammenwirken.

Gesundheitsüberwachung

Die Miniaturisierung von Biosensoren ohne fluidische Komponenten ermöglicht das Design tragbarer Biosensoren (wearable biosensors), die den individuellen Gesundheitszustand überwachen.^{47,48)} Dabei spielen elektrochemische Biosensoren eine wichtige Rolle: Sie bestimmen Biomarker in Echtzeit nichtinvasiv auf der Haut.⁴⁹⁾ Wichtig sind dabei hochflexible biokompatible hydrogelmodifizierte Elektroden, die in direktem Kontakt mit menschlichem Gewebe stehen.⁵⁰⁾ So können Biosensoren die Wundheilung verbessern, ohne dass man einen Verband ständig wechseln muss.⁵¹⁾ Das volle Poten-

zial lässt sich aber nur ausschöpfen, wenn einfach herzustellende, kostengünstige Sensortechniken verfügbar sind. Sensoren auf Basis druckbarer elektronischer Materialien bieten eine ideale Plattform: Sie lassen sich mit einfachen Verfahren herstellen, beispielsweise durch Drucken und Beschichten, und sind mit der Rolle-zu-Rolle-Fertigung in hohem Durchsatz kompatibel.⁵²⁾

Metallorganische Gerüstverbindungen

Auch auf der Suche nach kostengünstigen Alternativen zu Enzymen ist die Wissenschaft weitergekommen. Metallorganische Gerüstverbindungen (metal-organic frameworks, MOFs) sind seit der Verkündung des Chemienobelpreises 2025 an Susumu Kitagawa, Richard Robson und Omar Yaghi in aller Munde. MOFs haben Einzug in die Welt der Biosensorik gefunden, weil sie als Nanozyme katalytische Eigenschaften von Enzymen wie Peroxidasen ersetzen können.⁵³⁾ Mit ihrer großen Oberfläche, ihren einstellbaren Porenstrukturen und multifunktionalen Eigenschaften verstärken sie nicht nur optisch-elektrochemische Signalausgaben, sondern lassen sich simultan für die Signaltransduktion nutzen.⁵⁴⁾ Geforscht wird an Biorezeptor-gekoppelten MOF-Sensoren, bei denen die auf der MOF-Matrix immobilisierten Biorezeptoren – etwa Enzyme, Antikörper, Nukleinsäuren und Aptamere – die Analyten in Gegenwart eines Transducors detektieren.⁵⁵⁾

Mikroschadstoffe in der Umwelt

Die zunehmende Präsenz, öffentliche Wahrnehmung und staatliche Regulierung von Mikroschadstoffen wie Arzneimittlrückständen, endokrinen Disruptoren oder Pestiziden im Spurenbereich stellen die traditionelle Wasseranalytik vor Herausforderungen. Klassische Rou-

tinemethoden basieren meist auf Stichproben, in denen die Mikro-schadstoffe zentral mit qualitativ hochwertigen Instrumenten bestimmt werden. Diese Analysen sind inhärent zeitlich und räumlich limitiert sowie kostenintensiv. In der Zukunftsvision einer Point-of-need-Analytik (PON) für das Überwachen der Wasserqualität könnten dezentrale Sensoriksysteme – direkt im Wasserversorgungsnetz, in Kläranlagen und Gewässern implementiert – kontinuierlich, ortsaufgelöst und kostengünstig Daten liefern (Abbildung 7).

Eine Kombination mikrofluidischer Plattformen mit chemo- und biosensorischen Erkennungselementen rückt technologisch in greifbare Nähe.^{56,57} So zeigen Übersichtsarbeiten, dass aptamerbasierte Sensoren durch ihre hohe Selektivität und Stabilität für Umweltmatrizes vielversprechende Kandidaten sind – mit Nachweisgrenzen, die sich zunehmend für reale Wasserproben eignen.^{58,59} Gleichzeitig ermöglichen In-situ-Optiksensoren – basierend auf Fluoreszenz, Absorption oder Streuung – eine hohe Messfrequenz in Gewässern; die Anwendung in dynamischen Umgebungen bringt allerdings noch Herausforderungen bei der Kalibrierung mit sich, aufgrund von Interferenzen mit Matrix und Umweltbedingungen.^{60,61} Für eine reale Umsetzung braucht es dreierlei:

- Die Langzeitstabilität und Fouling-Resistenz der Sensoren muss gewährleistet sein.
- Für Datenvertrauen und Rückführbarkeit sind Mess- und nutzbare Kalibrier- und Qualitätssicherungsprotokolle im Feldbetrieb erforderlich.
- Die Sensorik ist in datengetriebene Ökosysteme zu integrieren: Hochfrequente Rohdaten von Netzsensoren müssen mit Chemometrie und KI-Algorithmen verarbeitet werden, um verlässliche Indikatoren für Betreiber und Regulatoren zu liefern.^{62,63}

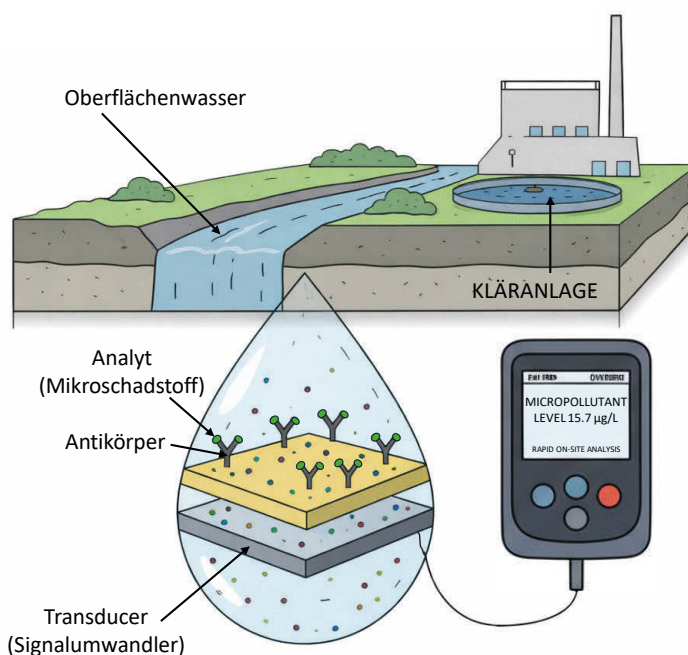


Abb. 7. Immunosenoren für die schnelle Vor-Ort-Analyse von Mikroschadstoffen in der Umwelt und in Kläranlagen.

Bild: KI-Generiert

Sind diese Voraussetzungen erfüllt, entsteht ein hybrides Monitoring-System: Dezentral platzierte PON-Sensoren liefern Echtzeitdaten, die durch klassische Labor-LC-MS/MS-Analysen punktuell als Referenz kalibriert werden. Eine Kläranlage kann dann zum Beispiel bei Stoßbelastungen adaptiv reagieren, industrielle Einleiter können Stoffeinträge transparent melden, und Behörden erhalten ein dichteres Bild der Belastungsdynamik. In dieser Vision entwickelt sich die Umweltanalytik weg vom laborgetriebenen Stichprobenmodell hin zur vernetzten, orts- und zeitaufgelösten Sensorik.

Michael Seidel,

TU München, Garching

Mark-Steven Steiner,

Xylem Analytics, Weilheim

- 41) S. M. N. S. Kumari, X.T. Suryabai, ACS Omega 2024, 9, 48918
- 42) R.K. Talreja, H. Sable, V. Chaudhary et al., ESC Sens. Plus 2024, 3, 041602
- 43) N. S. Shrikishna, R. Sharma, J. Sahoo, A. Kaushik, S. Ghandi, Chem. Eng. J. 2024, 490, 151661
- 44) D. Bhatia, S. Paul, T. Acharjee, S.S. Ramachairy, Sens. Int. 2024, 5, 100257
- 45) S. Nath, Sustainable Food Technol. 2024, 2, 976
- 46) B. A. Taha, N. M. Ahmed, R. K. Talreja et al., ACS Synth. Biol. 2024, 13, 1600

- 47) A. Erdem, E. Eksin, H. Senturk, E. Yildiz, M. Maral, Trends Anal. Chem. 2024, 171, 117510
- 48) S. Rasheed, T. Kanwal, N. Ahmad, B. Fatima, M. Najam-ul-Haq, S. Hussain, Trends Anal. Chem. 2024, 173, 117640
- 49) H. Duan, S. Peng, S. He et al., Adv. Sci. 2025, 12, 2411433
- 50) M. H. Fakhr, I. L. Carrasco, D. Belyaev et al., Biosens. Bioelectron.: X 2024, 19, 100503
- 51) P. Basu, A. Banerjee, P. D. Okoro et al., Adv. Healthcare Mater. 2024, 13, 2401461
- 52) V. Pecunia, L. Petti, J. B. Andrews et al., Nano Futures 2024, 8, 032001
- 53) H. Hou, L. Wang, Y. Gao, J. Ping, F. Zhao, Trends Anal. Chem. 2024, 17, 117602
- 54) Y. Huang, Z. Zhang, C. Huang et al., Coord. Chem. Rev. 2025, 545, 217006
- 55) B. Mohanty, S. Kumari, P. Yadav, P. Kanoo, A. Chakravorty, Coord. Chem. Rev. 2024, 519, 216102
- 56) B. A. AlMashree, W. Almhedi, M. Damiati, Front. Bioeng. Biotechnol. 2024, 12
- 57) M. A. A. Abdelhamid, M.-R. Ki, H. J. Yoon, S. P. Pack, Biosensors 2025, 15, 474
- 58) E. C. Reynoso, P. S. Sfragano, M. González-Perea, I. Palchetti, E. Torres, Chemosensors 2024, 12, 59
- 59) E. C. Okpara, T. O. Ajiboye, D. C. Onwudiwe, O. B. Wojuola, Results Chem. 2023, 5, 100710
- 60) M. Kumar, K. Khamis, R. Stevens, D. M. Hannah, C. Bradley, Front. Water 2024, 6, 1380133
- 61) C. Post, N. Heyden, A. Reinartz et al., Sensors 2022, 22, 4668
- 62) Y. Xiao, Z. Du, Y. Li et al., Sensors 2025, 25, 4945
- 63) S. M. Haque, Y. Umar, A. Kabir, Chemosensors 2025, 13, 268

Elektrochemische Analytik

Die Möglichkeiten der elektrochemischen Analytik hinsichtlich quantitativer Bestimmungen haben sich in den vergangenen Jahren maßgeblich erweitert. Und das auch aufgrund der Miniaturisierung gekoppelter Plattformen: Mikrofluidische Systeme, die Probenströme präzise steuern, verbessern Nachweisgrenzen und Reproduzierbarkeit in komplexen Matrices und wurden vor allem für bioanalytische Aufgaben optimiert.⁶⁴⁾

Daneben ist auch weiterhin die Materialentwicklung ein Treiber für die Leistungsfähigkeit elektrochemischer Sensoren. Zweidimensionale Materialien wie Graphen und MXene, metallorganische Gerüstverbindungen (MOFs) und Übergangsmetallchalkogenide vergrößern die aktive Oberfläche, beschleunigen den Ladungstransfer und verbessern die Selektivität, was die Bestimmungsgrenzen senkt. Diese Fortschritte wirken sich förderlich auf viele Anwendungen aus, von der Spurenanalytik bis hin zu tragbaren Point-of-care-Geräten.⁶⁵⁾

Gleichzeitig setzt sich die Integration modernster digitaler Methoden durch. Mithilfe maschinellen Lernens werden informationsreiche voltammetrische und impedimetrische Datensätze verarbeitet, Interferenzen kompensiert und damit Mehrkomponentenquantifizierungen möglich. Giordano et al. berichten über neue Entwicklungen bei Multi-output-Regression und über robuste Modelle für Echtzeitanalysen.⁶⁶⁾

Wichtig ist auch das Verknüpfen elektrochemischer Messungen mit In-situ- oder Operando-Spektrometrie. Die Weiterentwicklung spektroelektrochemischer Verfahren – insbesondere Schwingungsspektroskopie sowie UV/Vis-Spektrophotometrie – erlaubt es, Zwischenprodukte zeitaufgelöst zu erfassen und so Reaktionsmechanis-

men aufzuklären. So lassen sich elektrochemische Systeme besser quantitativ modellieren.⁶⁷⁾

Auch die additive Fertigung transformiert weiterhin die moderne elektroanalytische Praxis: 3-D-gedruckte Elektroden und Zellen eröffnen frei gestaltbare Geometrien und gewährleisten definierte Stofftransportbedingungen sowie reproduzierbare Oberflächenfunktionalisierung. Dies verbessert die Sensitivität und die Standardisierbarkeit quantitativer Analysen. Aktuelle Arbeiten beschäftigen sich mit Materialien und Druckparametern für klinische und umweltanalytische Anwendungen.⁶⁸⁾ Die geräteseitige Integration schreitet ebenfalls voran: Tragbare und implantierbare elektrochemische Biosensoren agieren als vollständige Geräteplattformen, die Konzentrationen aus Körperflüssigkeiten in Echtzeit liefern. Hier stehen Stabilität, Multiplexing und digitale Anbindung im Fokus der Bemühungen.⁶⁹⁾

Klassische Techniken wie Differenzpuls- und Square-wave-Voltammetrie sowie die elektrochemische Impedanzspektroskopie bleiben zentral, werden jedoch zunehmend automatisiert und in mikrofluidische Systeme integriert, um geringe Probenvolumina, hohe Durchsätze und robuste Kalibrierung zu gewährleisten.^{64–66)}

Auch die Nachhaltigkeit rückt verstärkt in den Blick: Gearbeitet wird an grünen Elektrolyt- und Fertigungsstrategien sowie an der datengetriebenen Qualitätssicherung, um Ressourcenverbrauch, Abfallmengen und Messunsicherheit gleichzeitig zu reduzieren.^{65,68)}

Zusammenfassend zeigt die jüngste Literatur eine konvergente Entwicklung: Neue Materialien, digital gestützte Auswertung und Operando-Techniken werden in miniaturisierte, häufig additiv gefertigte Gerätesysteme integriert. Dies erhöht die Empfindlichkeit, erweitert den linearen Arbeitsbereich und verbessert die Validität quantitativer Analysen von Realproben,

sei es in der biomedizinischen Diagnostik, der Umweltanalytik oder der Prozessanalytik.

Gerd-Uwe Flechsig,
Hochschule für angewandte
Wissenschaften Coburg

- 64) Z. Guan, Q. Liu, C.-B. Ma, Y. Du, *Anal. Bioanal. Chem.* 2024, 416, 4663
- 65) R. Singh, R. Gupta, D. Bansal, R. Bhateria, M. Sharma, *ACS Omega* 2024, 9, 7336
- 66) G. F. Giordano, L. F. Ferreira, Í. R. S. Bezerra et al., *Anal. Bioanal. Chem.* 2023, 415, 3683
- 67) C.-Y. Li, Z.-Q. Tian, *Chem. Soc. Rev.* 2024, 53, 3579
- 68) A. Sharma, H. Faber, A. Khosla, T. D. Anthopoulos, *Mater. Sci. Eng. R Rep.* 2023, 156, 100754
- 69) J. Wu, H. Liu, W. Chen, B. Ma, H. Ju, *Nat. Rev. Bioeng.* 2023, 1, 346

Chemische Kristallographie

Die chemische Kristallographie entwickelt sich rasant weiter und verbindet klassische Strukturaufklärung zunehmend mit der Bestimmung elektronischer Eigenschaften, reaktiver Prozesse und KI-gestützter Algorithmen. Besonders hervorzuheben ist die Elektronendiffraktion (ED), die es durch das Ionic Scattering Factor Modeling (iSFAC) erstmals möglich macht, Partialladungen der Atome direkt aus 3-D-ED-Daten abzuleiten (Abbildung 8).⁷⁰⁾ Dieser Ansatz verfeinert für jedes Atom eine Mischung neutraler und ionischer Streufaktoren und erschließt damit eine neue Ebene experimenteller Information: Neben Atompositionen und thermischen Parametern wird eine genuin physikalische Eigenschaft messbar. Anwendungen auf organische Moleküle, Aminosäuren und Zeolithe zeigen eine hohe Übereinstimmung mit quantenchemischen Berechnungen; die Methode benötigt zudem keine außergewöhnlich hochauflösenden Daten. Damit etabliert sich die Elektronendiffraktion zunehmend

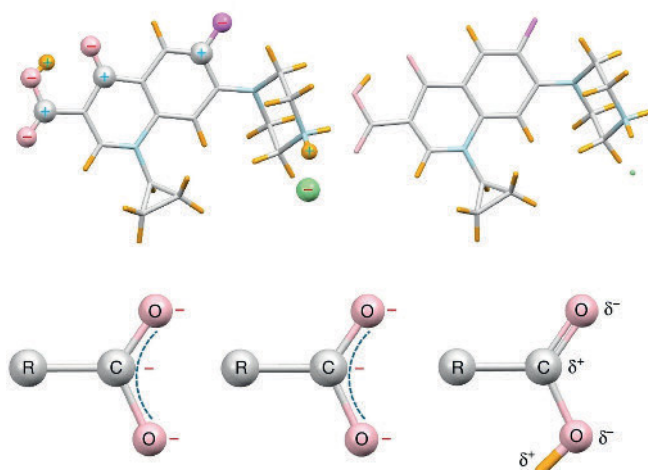


Abb. 8. Oben: Experimentelle Partialladungen aus der iSFAC-Modellierung (Ionic Scattering Factor Modelling; links) im Vergleich zur klassischen Verfeinerung (rechts). Unten: Ladungsverteilungen an Carboxylat- und Carboxylgruppen in Tyrosin (links), Histidin (Mitte) und Ciprofloxacin (rechts). Reproduziert aus Lit. 70)

als Werkzeug zur Analyse der elektronischen Struktur im Kristall.

Eng verwandt damit ist die dynamische Entwicklung der Quantenkristallographie, wie ein Special Issue mehrerer Journals der International Union of Crystallography (IUCr) zeigt.⁷¹⁾ Moderne Methoden wie das Hirshfeld Atom Refinement (HAR), Transferable Aspherical Atom Model (TAAM), Multipolmodelle und die Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM) erschließen ein immer detaillierteres Bild von Bindungssituationen, intermolekularen Kräften und Elektronendichteverteilungen. Die Fortschritte reichen von hochpräzisen atomaren Modellen über verbesserte thermische Bewegungsbeschreibung bis zu quantenchemisch unterstützten Verfeinerungen. Das macht deutlich, wie stark die Verbindung von experimenteller Kristallographie und theoretischer Chemie geworden ist und wie Elektronendichteanalysen zunehmend materialwissenschaftliche und biologische Forschungsfragen beeinflussen.⁷²⁾

Allmählich entwickelt sich auch die Photokristallographie zu einem größeren Forschungsfeld, das lichtinduzierte Prozesse im Festkörper strukturell zugänglich macht. Fortschritte in Laser- und Detektortechnik erlauben es heute, angeregte Zustände und Bindungsänderun-

gen direkt im Kristall zu beobachten – über Zeitfenster von Minuten bis in den Pikosekundenbereich.⁷³⁾ Darauf aufbauend erweitern transparente kristalline „Flasks“, bei denen Einkristalle quasi als Reaktionsgefäße dienen, das Spektrum zu einer echten In-crystallo-Chemie: Photochemische Reaktionen lassen sich im Kristall auslösen und kurzlebige Zwischenprodukte unmittelbar strukturell abfangen.⁷⁴⁾ Dieser Ansatz verbindet zeitaufgelöste Strukturaufklärung mit kontrollierter Reaktivität und etabliert die Photokristallographie zunehmend als Werkzeug, um Mechanismen im Festkörper aufzuklären.

Eine vierte Entwicklung betrifft den Einsatz künstlicher Intelligenz. Ein jüngst vorgestelltes hybrides Phasierungsmodell (phase seeding) liefert grobe, von einem Modell des maschinellen Lernens (ML) erzeugte Phasenschätzungen für rund zehn Prozent der intensiven Reflexe und verbessert damit die Effizienz klassischer Dualspace-Methoden erheblich.⁷⁵⁾ Das Phasenproblem von einer Regression zu einer Klassifikationsaufgabe zu reduzieren steigert die Praktikabilität künstlicher Intelligenz deutlich. Während vollständige ML-Phasierungsmodelle weiterhin durch Datenmengen und Symmetriekomplexität limitiert sind, zeigt das hybride Vorgehen klare Vorteile

bei großen und nichtzentrosymmetrischen Strukturen. Künstliche Intelligenz erweitert damit etablierte Algorithmen, anstatt sie zu ersetzen, und trägt zunehmend zur Automatisierung und Robustheit der Strukturlösung bei.

Anna Krawczuk,
Universität Göttingen
Alexander Pöthig,
TU München

- 70) S. Mahmoudi, T. Gruene, C. Schröder et al., *Nature* 2025, 645, 88
71) journals.iucr.org/special_issues/2025/QCR
72) P. M. Dominiak, A. Martin Pendas, K. Wozniak, *IUCrJ* 2025, 12, 610
73) L. E. Hatcher, M. R. Warren, P. R. Raithby, *Acta Cryst. C* 2024, 80, 585
74) A. Sur, D. C. Powers, *ACS Cent. Sci.* 2025, 11, 834
75) A. O. Madsen, *Acta Cryst. A* 2025, 81, 251

Kulturerbeforschung und Archäometrie

Mit der Infrarotspektroskopie lassen sich hervorragend Materialien kulturhistorischer Objekte charakterisieren. Die räumliche Auflösung herkömmlicher Fourier-Transformations-Infrarot-Methoden (μ -FTIR) bleibt jedoch durch die Beugungsgrenze des Lichts begrenzt. Die nanoskalige Infrarotspektroskopie überwindet diese Limitierung und ermöglicht eine zerstörungsfreie molekulare Analyse mit einer räumlichen Auflösung im Nanometerbereich.

Es wurden mehrere nanoskalige Infrarotspektroskopietechniken entwickelt, mit räumlichen Auflösungen von etwa 20 Nanometern.^{76,77)} Diese umfassen hauptsächlich:

- die Streulicht-Nahfeldmikroskopie (scattering-type scanning near-field optical microscopy, s-SNOM), auch bekannt als Nano-FTIR, und
- die Rasterkraftmikroskopie kombiniert mit Infrarotspektroskopie (atomic force microscopy infrared spectroscopy, AFM-IR).

Beide Methoden kombinieren die Rasterkraftmikroskopie (AFM) mit Infrarotstrahlung, unterscheiden sich jedoch in ihren Detektionsmechanismen: Nano-FTIR erfasst das von nanometergroßen Probenbereichen direkt unter der AFM-Sonde gestreute Licht, während AFM-IR die lokale thermische Ausdehnung misst, welche die Infrarotabsorption der AFM-Sonde hervorruft.

Diese Techniken verbinden die hohe räumliche Auflösung der Rasterkraftmikroskopie mit der chemischen Spezifität der Infrarotspektroskopie und ermöglichen so nanoskalige chemische Bildgebung und Spektralanalysen. Ihre Einsatzgebiete sind vielfältig – darunter Lebenswissenschaften, Polymerforschung, Photonik, Solarenergie, Halbleitertechnik, Biochemie und Pharmazie –, und in jüngerer Zeit kam auch die Kulturerbeforschung hinzu. Die nanoskalige Infrarotspektroskopie erlaubt Identifikationen auf Molekülebene und chemisches Mapping von Zusammensetzungen mit einer räumlichen Auflösung, die herkömmliche Infrarotverfahren bislang nicht erreichen konnten.

Die nanoskalige chemische Charakterisierung von Farbschichten eröffnet in der Kulturerbeforschung neue Einblicke und ermöglicht die Untersuchung zuvor unzugänglicher, komplexer Fragen zu künstlerischen Techniken, Farbrezepturen und chemischer Reaktivität.

Jüngste Studien führten zu bedeutenden Durchbrüchen beim Verständnis der Chemie von Künstlerfarben und ihrer Alterungsprozesse. Beispielsweise deckten Nano-FTIR und AFM-IR die Heterogenität in der Verteilung kristalliner und amorpher Zinkcarboxylate auf – dabei handelt es sich um Abbauprodukte, die während des Trocknens und Alterns entstehen. Zinkcarboxylate wurden dabei sowohl in einem Ölfarbfilm aus dem 19. Jahrhundert nachgewiesen als auch in Farbfilmern aus Zinkweiß

und Bindemitteln, die hergestellt wurden, um das Alterungsphänomen nachzustellen.^{78,79)} Die Erkenntnisse helfen dabei, die Wasserempfindlichkeit solcher Farbsysteme zu verstehen.

Die Techniken lieferten darüber hinaus eindeutige Nachweise für eine lokal begrenzte photokatalytische Zersetzung von Leinölbindemitteln an der Grenzfläche zu Anatas-Titanweiß-Pigmenten.⁸⁰⁾ Unterschiede in der Herstellungsweise von Farben, die sowohl Proteine als auch trocknende Öle enthalten – die vorherrschenden traditionellen Bindemittel –, führen zu komplexen Nanostrukturen und chemischer Heterogenität innerhalb der Farben. Hier haben AFM-IR-Analysen die räumliche chemische Vielfalt sowie die Reaktionswege organischer Komponenten in diesen Materialien mit bisher unerreichter Auflösung aufgeklärt.⁸¹⁾

Mit ihrer Fähigkeit, chemische Zusammensetzung und Reaktivität im Nanomaßstab zu untersuchen, kann die nanoskalige Infrarotspektroskopie unser Verständnis von komplexen Materialien, die für Erhalt und Analyse des kulturellen Erbes von entscheidender Bedeutung sind, weiter vorantreiben.

Ester S. B. Ferreira,

Institut für Restaurierungs- und Konservierungswissenschaft, TH Köln

76) A. Dazzi, C. Prater, *Chem. Rev.* 2017, 117, 5146

77) M. Unger, C. Marcott, *Recent Advances and Applications of Nanoscale Infrared Spectroscopy and Imaging*, In: *Encyclopedia of Analytical Chemistry* [Hrsg.: R. A. Meyers], 2017, 1–26

78) C. Stani, G. Sciutto, G. Birarda et al., *Anal. Chim. Acta* 2025, 1380, 344740

79) X. Ma, G. Pavlidis, E. Dillon et al., *Anal. Chem.* 2022, 94, 3103

80) S. Morsch, B. A. van Driel, K. J. van den Berg, J. Dik, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2017, 9, 10169

81) R. Georgiou, A. Dazzi, J. Mathurin, C. Duce, P. Dietemann, M. Thoury, I. Bonaduce, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2025, 17, 8464

Prozessanalytik

Prozessanalytische Technologien (PAT) unterstützen und ermöglichen Nachhaltigkeit und Transformation der chemischen, pharmazeutischen und biotechnologischen Industrie. Aufgaben für PAT erwachsen aus biobasierten Rohstoffen und Recycling-Substratströmen: Deren Zusammensetzung ist sehr variabel. Grüne PAT bedarf schneller Monitoringmethoden sowie Datenanalyse mit KI.^{82,83)} PAT-Lösungen für Einweg-Batch-Reaktoren in biotechnologischen Prozessen werden zunehmen. Hingegen ist das Potenzial KI-unterstützter Sensornetzwerke noch nicht ausgeschöpft.^{84,85)} Zum 20-jährigen Bestehen des Arbeitskreises Prozessanalytik der Fachgruppe Analytische Chemie in der GDCh wurde im Jahr 2025 ein Sonderband von *Analytical and Bioanalytical Chemistry* veröffentlicht.^{86,87)}

Trennverfahren

Prozessindustriestandorte werden oft als Chemieverbund betrieben. Nebenprodukte oder Abfallströme werden so zu Substraten. Zum Salzrecycling beim Chlor-Alkali-Elektrolyseverfahren werden die organischen Verunreinigungen einer vorgeschalteten Polymerproduktion im ppb-Bereich kontrolliert, da die Verunreinigungen zu Spannungserhöhung oder Beschädigung führen können. Wie gut die Reinigungsschritte funktionieren, wurde mit Ionenchromatographie mit Leitfähigkeitsdetektion und Festphasenextraktion (solid phase extraction-ion chromatography conductivity determination, SPE-IC-CD) online überwacht. Die Kombination lieferte gute Ergebnisse bei komplexen Matrices und niedrigen Analytkonzentrationen; sie war robust und einfach handhabbar.⁸⁸⁾ Allgemein werden schnelle, leistungsfähige Trennverfahren in Kreislaufprozessen und Abwasserströmen an Bedeutung gewinnen.

Schwingungsspektroskopie

Ethanol wurde in einem pharmazeutischen Wirkstoffproduktionsprozess wiedergewonnen. Um die Ethanolqualität nach einem Retenatalkondensator zu überwachen, diente eine Nahinfrarot(NIR)-Transmissions-Durchflusssonde (Abbildung 9), verbunden mit einem NIR-Fourier-Transform-Spektrometer. Die NIR-Analyse steuerte das Rückgewinnungssystem, wobei der Wassergehalt chemometrisch bestimmt wurde. Reduzierte Scope-1-Emissionen, das heißt direkt durch den Produktionsbetrieb verursachte Treibhausgasemissionen aufgrund von Ethanolverbrennung, wurden auf zirka 8800 Tonnen CO₂ pro Jahr geschätzt, Scope-3-Einsparungen, das sind nicht durch den Produzenten verursachte Treibhausgasemissionen, auf zirka 5750 Tonnen CO₂-Äquivalente pro Jahr.^{89,90)}

Um Industrie- und Siedlungsabfälle zu rezyklieren ist es essenziell, Kunststoffarten zu identifizieren und zu trennen. Dafür eignet sich der mittlere Infrarotbereich (MIR) aufgrund seiner Selektivität für Kunststoffe sowie organisches Gewebe, Metalle und anorganische Materialien. Eine schnell scannende MIR-Anordnung mit einer Scangeschwindigkeit von $3 \cdot 10^6$ Pixeln pro Sekunde mit 10 μm Ortsauflösung kann solche Kunststoffe in Abfallströmen charakterisieren und simultan Oberflächen kontrastreich abbilden (Abbildung 10).⁹¹⁾ So lassen sich Partikel, Kunststoffteile und Granulate erkennen und durch einen MIR-Daten-gesteuerten Luftstrom trennen.

Schwingungszirkulardichroismus (VCD) in Kombination mit einem Quantenkaskadenlaser mit externem Resonator (external resonator quantum cascade laser, EC-QCL) und einer verbesserten Stabilisierung liefert gute Signal-Rausch-Verhältnisse bei kurzen Aufnahmezeiten (Abbildung 11).⁹²⁾ So lässt sich die absolute Konfiguration von Molekülen ohne Adjuvantien bestimm-

men, beispielsweise bei der Simulation des Monitorings des Enantiomerenüberschusses von *R/S*-1,1'-bi-2-Naphthol in Lösung.⁹³⁾ Mit EC-QCL-VCD lassen sich auch die Sekundärstrukturen von Proteinen ermitteln und Proteindynamiken beobachten.⁹⁴⁾ So wird VCD anwendbar für das Online-Monitoring.

Abb. 9. Nahinfrarot-sonde im Rohr einer Ethanolrecyclinganlage. Foto: Bayer

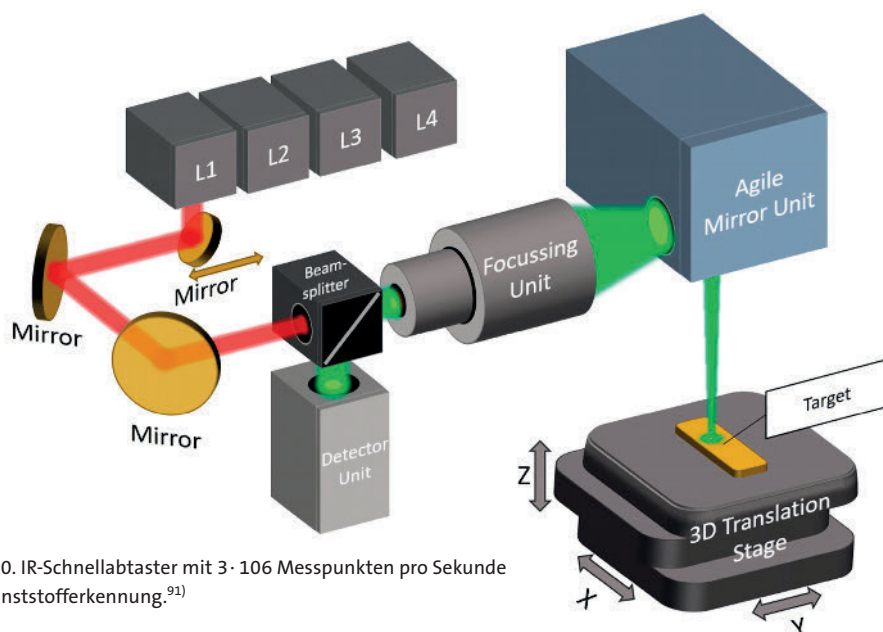
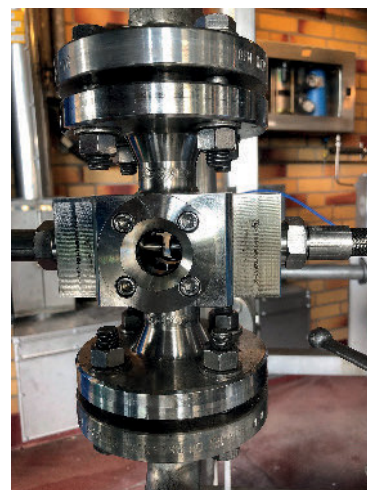


Abb. 10. IR-Schnellabtaster mit $3 \cdot 10^6$ Messpunkten pro Sekunde zur Kunststofferkennung.⁹¹⁾

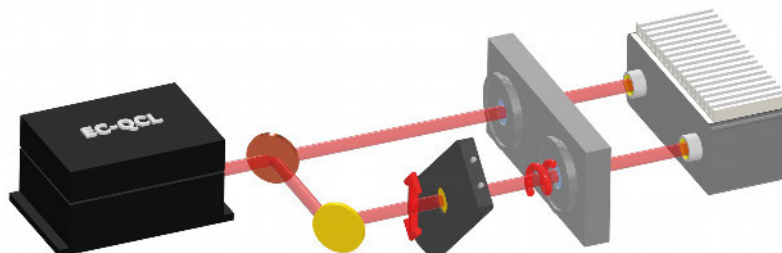
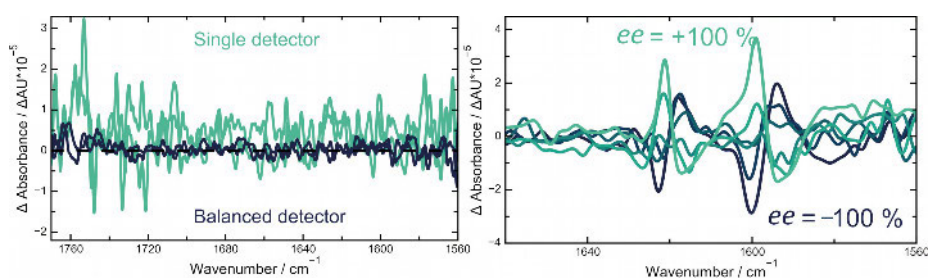


Abb. 11. Instrument für Schwingungszirkulardichroismusmessungen (VCD) mit einem Quantenkaskadenlaser mit externem Resonator als Lichtquelle (EC-QCL, unten). Konventioneller (single) und ausgeglichener (balanced) VCD-Spektralrauschpegel (oben links) und VCD-Spektren von (S)-(-) und (R)-(+)-1,1-bi-2-Naphthol (oben rechts). *ee* = Enantiomerenüberschuss. Graphik: aus Lit. 92)

Single-use-Technologien

Einwegprozesslösungen, auch Single-use-Technologien genannt, bestehen aus vormontierten, sterilen Komponenten, die nach einmaliger Nutzung entsorgt anstatt gereinigt werden. Sie sind hauptsächlich in der Biopharmazeutik bei der Medikamentenherstellung im Einsatz. Die Umstellung zu Einwegtechnologien reduziert Wasser- und Energieverbrauch für die Reinigung und Sterilisation vor Ort.⁹⁵⁾

Inline-Echtzeitüberwachungen senken Kontaminationsrisiken und Materialverbrauch.⁹⁶⁾ Impedanzspektroskopie und kapazitätsbasiertes Zellmonitoring können bei der Überwachung kritischer Prozessparameter eine größere Rolle einnehmen.^{97,98)} In der Biokraftstoffproduktion erhöht die PAT-gesteuerte Fermentationskontrolle die Ethanolausbeute und minimiert gleichzeitig den Rohstoffabfall.⁹⁹⁾ In der Lebensmittelindustrie lassen sich durch NIR-Spektroskopie Zutaten optimieren, Lebensmittelabfälle und Energieverbrauch reduzieren.¹⁰⁰⁾

Katharina Dahlmann,

Hamilton, Domat/Ems, Schweiz

Tobias Eifert, Covestro, Uerdingen

Martin Gerlach, Bayer, Dormagen

Martin Jaeger, HS Niederrhein, Krefeld

Bernhard Lendl, TU Wien

Matthias Rädle, TH Mannheim

- 82) R. J. Pell, L. S. Ramos, B. Rohrback, *J. Chemom.* 2025, 39, e3637
- 83) M. Li, D. Sun, S. Liu, R. Zhao, K. Zhang, *Spectrochim. Acta Part A* 2024, 305, 123517
- 84) Interessengemeinschaft Automatisierungstechnik der Prozessindustrie NAMUR, Technologie-Roadmap der „Prozess-Sensoren 2027+“, 2021, namur.net/fileadmin/media_www/Dokumente/Roadmap_Prozesssensoren_2027.pdf
- 85) AMA Association for Sensors and Measurement, VDI, Sensor Trends 2030. März 2030, S. 107, sensortrends.ama-sensorik.de, Stand 10.04.2025
- 86) T. Eifert, M. Gerlach, K. Dahlmann et al., *Anal. Bioanal. Chem.* 2025, 417, 5583
- 87) T. Eifert, M. Gerlach, K. Dahlmann et al.,

- Anal. Bioanal. Chem.* 2025, 417, 5587
- 88) O. Happel, Y. Schießer, S. Biebert et al., *Vom Wasser* 2025, 123, 3
- 89) J. D. Chea, A. Christon, V. Pierce et al., *Comput. Aided Chem. Eng.* 2019, 47, 199
- 90) T. Schafer, „The Often-Overlooked Benefits Of Recovering And Recycling Your Own Solvents“, *Pharmaceutical Processing World* 2017, pharmaceuticalprocessingworld.com/the-often-overlooked-benefits-of-recovering-and-recycling-your-own-solvents, Stand 06.04.2025
- 91) T. Kümmler, T. Teumer, P. Dörnhofer et al., *Heliyon* 2019, 5, e02442
- 92) D. R. Hermann, G. Ramer, M. Kitzler-Zeiler, B. Lendl, *Anal. Chem.* 2022, 94, 10384
- 93) D. R. Hermann, G. Ramer, L. Riedlsperger, B. Lendl, *Appl. Spectrosc.* 2023, 77, 1362
- 94) D. R. Hermann, G. Ramer, B. Lendl, *Anal. Chem.* 2024, 96, 19363
- 95) M. Ottinger, I. Wenk, J. Pereira, G. John, S. Junne, *Chem. Ing. Tech.* 2022, 94, 1883
- 96) A. Dürauer, A. Jungbauer, T. Scharl, *Biotechn. Bioeng.* 2024, 121, 2347
- 97) T. Nacke, A. Barthel, D. Beckmann et al., *Tech. Mess.* 2011, 78, 3
- 98) C. Alexandros, A. C. Lazanas, M. I. Prodromidis, *ACS Meas. Sci. Au* 2023, 3, 162
- 99) P. Cabaneros Lopez, H. Feldman, M. Mauricio-Iglesias et al., *Biomass Bioenergy* 2019, 127, 105296
- 100) M. Fodor, A. Matkovits, E. L. Benes, Z. Jókai, *Foods* 2024, 13, 3501

Chemometrie

Moderne KI-Methoden eröffnen neue Möglichkeiten, analytische Daten auszuwerten, insbesondere in der Nahinfrarot(NIR)-Spektroskopie. Während klassische chemometrische Verfahren wie die Partielle Kleinste-Quadrate-Regression (PLS) auch bei kleinen Datensätzen robuste Ergebnisse liefern, benötigen KI-Methoden größere Mengen an Referenzdaten, können dann aber mit heterogenen Matrizes umgehen.¹⁰¹⁾ Themen wie Kalibrationstransfer und Modellpflege durch Transfer Learning und Domain Adaptation vereinen klassische Chemometrie und KI.¹⁰²⁾ Zentrale Herausforderungen in der Praxis bleiben Validierung und Probenahme.^{103–108)}

Ein Beispiel für die Anwendung moderner KI in der NIR-Analytik

ist das von Martin Lagerholm von Pertin Instruments vorgestellte Modell zur NIR-Feuchtebestimmung.¹⁰⁹⁾ Ein tiefes, konvolutives neuronales Netz (convolutional neural network, CNN) wurde auf etwa 150 000 NIR-Spektren von Kalibrierproben verschiedener Produkte trainiert – von Sägespänen bis zu Wurstprodukten. Der Vergleich mit PLS und flachen neuronalen Netzen zeigt: PLS bleibt bei klar abgegrenzten Produktgruppen und kleinen Datensätzen die Methode der Wahl, während neuronale Netze ab etwa tausend Proben stabile Vorhersagen auch für heterogene Matrizes liefern. Tiefe CNNs können sehr breite Produktpaletten mit einem einzigen Modell abdecken, sofern genügend viele und vielfältige Kalibrierdaten verfügbar sind. Bei speziellen Anforderungen wie stark variierenden Proben Temperaturen innerhalb eines Produkts sind lokale Modelle weiterhin vorteilhaft. Die Ergebnisse verdeutlichen das Potenzial von Deep Learning in der NIR-Analytik, zeigen aber zugleich, dass ergänzende klassische Methoden weiterhin unverzichtbar sind.

Während große öffentliche Datensätze in anderen Bereichen, etwa der Bildverarbeitung, den Durchbruch leistungsfähiger Modelle ermöglichten, fehlen bisher vergleichbare Ressourcen in der Spektroskopie. Erste Initiativen wie sensAIfood stellen kuratierte NIR-Datensätze bereit.¹¹⁰⁾ Die Simulation physikalischer Störeffekte wie der Mie-Streuung eröffnet weitere Möglichkeiten für eine spektroskopisch relevante Datenaugmentierung.^{107,111–113)} Beides sind wichtige Schritte hin zu größeren Trainingsdatensätzen.

In Zukunft lassen sich möglicherweise Foundation Models, die mit Daten unterschiedlicher Modalitäten, Geräte, Applikationen und Analyten trainiert wurden, mit Few-shot-Learning an neue oder anwendungstypische Einflussfaktoren wie Erntesaison, Standort und weitere anpassen, also mit nur

wenigen neuen Referenzdaten. Modell-Updates und Domain Adaptation sind für neuronale Netze möglich.¹¹⁴⁾ Außer einer sehr viel größeren Datenbasis braucht es für echte spektroskopische Foundation Models aber noch mehr: So ist bislang unklar, welche Architektur langfristig für heterogene spektroskopische Daten optimal ist. Im Unterschied zu beispielsweise den räumlichen Achsen von Bilddaten hat die spektrale Achse physikalisch absolute Bedeutung. Ein Foundation Model sollte unterschiedliche Spektralbereiche interpretieren und auch fehlende spektrale Abschnitte verarbeiten können. Bislang arbeiten auch die KI-Modelle auf vollständig abgedeckten, innerhalb der Anwendung einheitlichen Spektralachsen.

Insgesamt verdeutlicht die aktuelle Forschung, dass tiefe neuronale Netze wie das KI-Modell von Pertin Instruments das Potenzial haben, auch heterogene spektroskopische Daten vorherzusagen. Klassische Verfahren wie PLS sind nach wie vor unverzichtbar, insbesondere bei kleinen Datensätzen spezieller Anwendungen. Zusammen mit modernen KI-Methoden bilden sie ein komplementäres Werkzeug für die chemometrische Praxis. Aber es profitiert nicht nur die Chemometrie von Entwicklungen in der KI, sondern auch umgekehrt: So erweitern Petersen und Kucheryavskiy ein tiefes neuronales Netz für Bilddaten um eine echte Einklassen-Klassifikation.¹¹⁵⁾

Das kürzlich erschienene virtuelle Special Issue der *Trends in Analytical Chemistry* zum Thema Chemometrie behandelt zudem die Modellierung des multivariaten Messfehlers in der Spektroskopie,¹¹⁶⁾ Multivariate Curve Resolution (MCR) mit fehlenden Datenblöcken,¹¹⁷⁾ automatisierte Auswertung von GC-MS-Daten,¹¹⁸⁾ Datenfusion,¹¹⁹⁾ Auswertestrategien für orts aufgelöste Einzelzell-Omics-Daten,¹²⁰⁾ Einklassen-Klassifikation,¹²¹⁾ Ensemble-Modelle¹²²⁾ sowie die Interpretierbarkeit von NIR-Spektren.¹²³⁾

Fazit

- Es gibt Entwicklungen auf der ganzen Breite: von klassischer Statistik der Kreuzvalidierung bis hin zu KI-Modellen.
- Wichtige Dauerbaustellen sind Modellvalidierung und Probenahme: Sie werden in der Anwendung oft vernachlässigt.
- Entwickelt wurden erste tiefe konvolutive neuronale Netze für NIR-Spektren, die breite Anwendungsbereiche abdecken – bislang aber nur für Daten von einem oder wenigen, sehr ähnlichen Spektrometern.
- Spektroskopische Foundation Models brauchen weitere Forschung.

Claudia Beleites, Chemometrix,
Wölferstheim
Joscha Christmann, BASF,
Ludwigshafen

- 101) D. Passos, P. Mishra, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 2023, 243, 105023
- 102) J.-M. Roger, V. F. Diaz, R. Nikzad-Langerodi, *Trends Anal. Chem.* 2025, 191, 118319
- 103) T. Fearn, C. Beleites, J. A. Fernández Pierna et al., *Trends Anal. Chem.* 2025, 192, 118410
- 104) Y. Xu, R. Goodacre, *Trends Anal. Chem.* 2025, 183, 118064
- 105) J. Camacho, A set of rules for model validation, 2025, doi: 10.48550/ARXIV.2511.20711
- 106) S. Bates, T. Hastie, R. Tibshirani, *J. Am. Stat. Assoc.* 2023, 119, 1434
- 107) J. Gajdoš Kljusuric, V. Baeten, A. Koidis, C. Beleites, *Trends Anal. Chem.* 2026, 194, 118528
- 108) DS3077:2024, Representative sampling – Horizontal Standard, *Danish Standard*, 2024
- 109) M. Lagerholm, 3rd sensorfint International Workshop, Faro, PT, 21.3.2024, youtube.com/watch?v=VIUJSusNGDU
- 110) zenodo.org/communities/sensaifood
- 111) U. Blazhko, E. Magnussen, J. Solheim et al., *ACS Omega* 2025, 10, 61710
- 112) A. Kohler, Third Sensorfint International Workshop, Faro, PT, 21.3.2024, youtube.com/watch?v=J2nG0U5JTIY
- 113) A. R. Flanagan, F. G. Glavin, *Sci. Data* 2025, 12, doi: 10.1038/s41597-025-04848-6
- 114) P. Mishra, D. Passos, F. Marini et al., *Trends Anal. Chem.* 2022, 157, 116804
- 115) A. Petersen, S. Kucheryavskiy, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 2025, 256, 105276

- 116) B. Giussani, G. Gorla, J. Ezenarro, J. Riu, R. Boqué, *Trends Anal. Chem.* 2024, 181, 118051
- 117) A. Gómez-Sánchez, C. Ruckebusch, R. Tauler, A. de Juan, *Trends Anal. Chem.* 2024, 179, 117869
- 118) A. Smolinska, S. Pellacani, M. Skawinski, C. Durante, *Trends Anal. Chem.* 2025, 190, 118286
- 119) L. Strani, C. Durante, M. Cocchi et al., *Trends Anal. Chem.* 2024, 180, 117957
- 120) J. Camacho, M. S. Armstrong, L. García-Martínez, C. Díaz, C. Gómez-Llorente, *Trends Anal. Chem.* 2025, 183, 118109
- 121) L. Strani, M. Cocchi, D. Tanzilli et al., *Trends Anal. Chem.* 2025, 183, 118117
- 122) S. Ehsani, P. Weller, H. Parastar, *Trends Anal. Chem.* 2025, 193, 118458
- 123) K. B. Bec, J. Grabska, C. W. Huck, *Trends Anal. Chem.* 2025, 189, 118254

Analytik in der chemischen Industrie

Hohe Energiekosten, harte globale Konkurrenz, veränderte Geopolitik mit Abkehr vom Multilateralismus und schwache Nachfrage – die chemische Industrie in Europa agiert in einem schwierigen Umfeld.¹²⁴⁾ Massive Herausforderungen ereilen uns zudem alle gleichzeitig: rapider Klimawandel, hoher Ressourcenverbrauch und Umweltbelastungen. Aufgrund der ausbleibenden wirtschaftlichen Erholung und einer zunehmend angespannten Lage braucht es dringend Maßnahmen, um insbesondere die Chemieindustrie zu stärken.

Das Chemicals Industry Package (CIP) der EU und der Europäische Aktionsplan für die Chemieindustrie (CIAP) wurden am 8. Juli 2025 veröffentlicht.¹²⁵⁾ Das Paket erkennt die strategische und große Bedeutung der Chemiebranche an; der Aktionsplan legt konkrete Maßnahmen fest, um die globale Wettbewerbsfähigkeit der europäischen Chemiebranche zu sichern, eine starke Produktionsbasis in Europa zu erhalten und sie auszubauen. Die Ziele sollen mit diesen vier Handlungsfeldern erreicht werden:

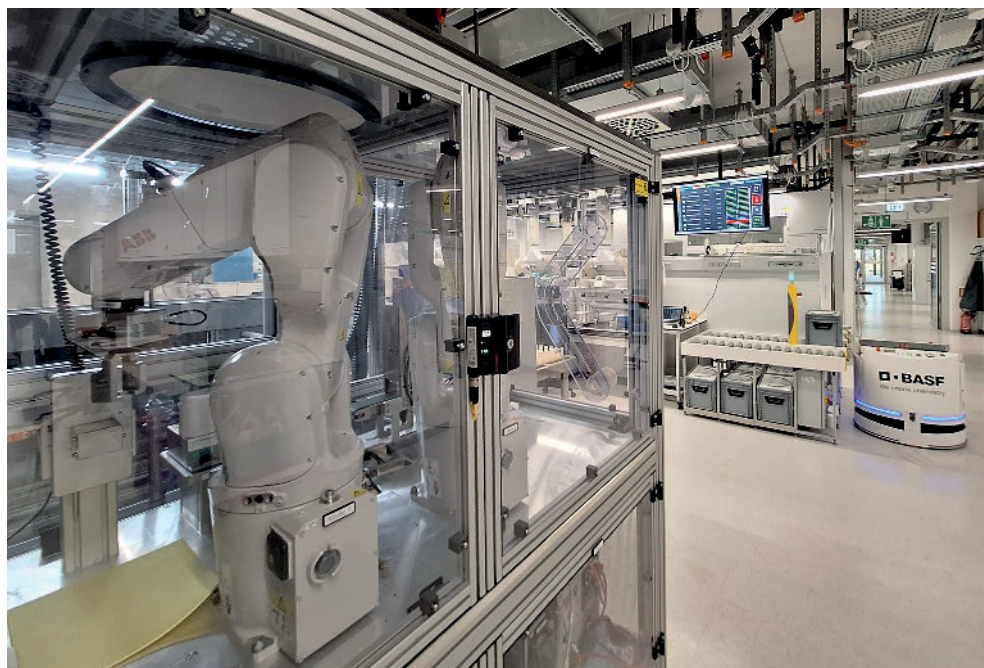


Abb. 12. Modernes Analytiklabor mit automatisierter Probenvorbereitung und -analytik, automatisiertem Proben-transport mit mobilen Robotern und integrierten Dashboards. Foto: BASF, M. Vranceanu

- Stärkung der Resilienz und des globalen Handels,
- Energieversorgung, Dekarbonisierung und Kreislaufwirtschaft,
- Schaffung von Leitmärkten und Förderung von Innovation,
- Vereinfachung und Straffung des regulatorischen Rahmens.

Die chemische Analytik ist innerhalb der Industrie gefragt, zu diesen Zielen beizutragen und die grüne Transformation pragmatisch mitzugestalten. Analytische Daten sind beispielsweise zentraler Bestandteil vieler Produkt- oder Substanzregistrierungen. Sie liefern die Grundlage für toxikologische und ökotoxikologische Studien sowie für die anschließende Gefahren- und Risikobewertung. Kern der regulatorischen Analytik ist es damit, die hohen europäischen Sicherheits- und Umweltstandards zu erfüllen. Dies betrifft unter anderem den Restriktionsvorschlag für die Stoffgruppe der per- und polyfluorierten Alkylsubstanzen (PFAS).¹²⁶⁾ Um die Gesamtheit der Stoffgruppe zuverlässig analytisch zu erfassen, sind neue Methoden zu entwickeln, die robust und schnell bei verschiedenen

Matrizes angewendet werden können. Themen wie die Polymercharakterisierung und die Analytik von Mikroplastik stehen ebenfalls im Fokus – aufgrund von erwarteten oder bereits in Kraft gesetzten Regulierungen.¹²⁷⁾ Die chemische Industrie muss die zugehörigen Daten schnell und zuverlässig generieren können. Konzepte wie „Safe and Sustainable by Design“ und das Verbessern von Recyclingprozessen ermöglichen es, Innovation und die grüne Transformation miteinander zu verknüpfen und beide voranzubringen.¹²⁸⁾

Künstliche Intelligenz und Automatisierung

Schnellere Innovationszyklen sind entscheidend, um den Zeitraum bis zur Markteinführung zu minimieren. Für effizientere, sicherere und fehlerärmere Prozesse braucht es robuste, schnelle (Online-)Methoden und einen hohen Grad an Automatisierung. Dabei eröffnet die Kombination aus flexibler Automatisierung und digitaler Transformation neue Möglichkeiten, die weit

über die klassische Prozessoptimierung hinausgehen.¹²⁹⁾ Moderne KI-Tools sind heute integraler Bestandteil des privaten und des beruflichen Umfelds;¹³⁰⁾ sie werden rasant weiterentwickelt und ermöglichen inzwischen nicht nur die klassische Mustererkennung in großen Datensätzen und die autonome Optimierung von Labor-Screening-Anlagen mit Online-Analytik,¹³¹⁾ sondern sie steuern und optimieren inzwischen auch Produktionsanlagen. Im Labor agieren sie als intelligente Agenten, die gesprochene Labordaten mit Sprache-zu-Text-Funktionen dokumentieren, auswerten und nächste Iterationen vorschlagen.¹³²⁾ Gleichzeitig gewinnen benutzerfreundliche Dashboards und Visualisierungswerkzeuge an Bedeutung, um Prozessüberwachung und -steuerung zu vereinfachen. Die schnelle Einführung neuer digitaler Werkzeuge stellt Organisationen jedoch vor Umsetzungs- und Schulungsaufgaben. Tools und Systeme entstehen scheinbar über Nacht. Das erschwert es, Governance, Training, Security, Troubleshooting und Wartung aufrechtzuerhalten.¹³³⁾ Teams

müssen befähigt werden, diese Instrumente einzusetzen, um die Produktivität zu steigern und Kosten zu senken.

Die Laborautomatisierung hat sich von starren, spezialisierten Lösungen hin zu flexiblen, modularen Systemen entwickelt. Kollaborative Roboter (Cobots) und autonome mobile Roboter (AMRs) sind heute zunehmend Teil moderner Labore und Produktionsstätten (Abbildung 12). Sinkende Cobot-Preise und Low-code-Programmierungslösungen, bei denen sich Anwendungen mit intuitiven grafischen Tools und eingebetteten Funktionen entwerfen und entwickeln lassen, machen die Automatisierung einfacher Aufgaben wie „Pick and Place“ attraktiv. Das demokratisiert die Automatisierung und macht sie für unterschiedliche Laborgrößen zugänglich.¹³⁴⁾ Um Effizienz und Sicherheit in Laboren weiter zu steigern, entstehen zunehmend autonome Analytiklabore. Mobile Cobots machen es möglich, Laborabläufe vollständig zu automatisieren, indem sie Proben zwischen eigenständigen, automatisierten Geräten transportieren.¹³⁵⁾ Ein zentrales Thema dabei bleibt das Standardisieren von Datenformaten, Kommunikationsprotokollen und Schnittstellen: Die vielen Geräte und Softwarelösungen erschweren Integration, Datenaustausch und das Anwenden

von KI-Tools.¹³⁶⁾ Nur mit offenen Standards lässt sich eine nahtlose Integration von Geräten und Systemen in Workflows ermöglichen. Plug-and-play-Lösungen auf Basis gemeinsamer Schnittstellen werden zunehmend zu einem Auswahlkriterium bei Investitionen in neue Geräte.

Die Rolle des analytischen Fachpersonals wandelt sich: Neben klassischem chemischem Know-how sind digitale Kompetenzen, Verständnis für Automatisierung und Datenanalyse gefragt. Die Aus- und Weiterbildung muss interdisziplinär erfolgen, um den Anforderungen der digitalisierten Analytik gerecht zu werden. Die industrielle Analytik steht an einem Wendepunkt: KI, flexible Automatisierung und offene Standards eröffnen neue Chancen, stellen Unternehmen aber auch vor die Aufgabe, bestehende Strukturen und Kompetenzen weiterzuentwickeln. Wer die Herausforderungen aktiv angeht, kann von einer effizienteren und nachhaltigeren Analytik profitieren. Digitalisierung und Automatisierung werden damit zum maßgeblichen Treiber für den Wandel in der industriellen Analytik und prägen die Zukunft der chemischen Industrie. Umso mehr Bedeutung kommt auch der Hochschulausbildung von Analytiker:innen zu: Sie muss Digitalisierung

und Automatisierung berücksichtigen, damit wir international nicht den Anschluss verlieren, sei es in Akademie oder in der Industrie. ■

Kathrin Wolter, BASF
Markus Haider, Wacker

- 124) Cefic, Chemical Trends Report Q3 2025 (January 2024 – October 2025), cefic.org/chemical-trends-reports
- 125) Pressemitteilung EU-Kommission, 8. 7. 2025, ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/de/ip_25_1755
- 126) ECHA, Annex XV Restriction report – Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS), 2023
- 127) Verordnung (EU) 2023/2055 der Kommission
- 128) Cefic, Policy Requirements for a Circular, Competitive and more Autonomous EU Chemical Industry. Positionspapier Juli 2025
- 129) M.R. Boskabadi et al., Curr. Opin. Chem. Eng. 2025, 48, 101150
- 130) Y. Li et al., Front. Chem. Sci. Eng. 2025, 19, 57
- 131) M. Vranceanu et al., „AI-System for Flow Chemistry“, WO 2021/239716 A1, World Intellectual Property Organization, 2021
- 132) L. Beno et al., Sci. Rep. 2024, 14, 29387
- 133) L. Molina, M. Schöpfer, Datenschutz und Datensicherheit – DuD 2025, 49, 24
- 134) T. Teutenberg (Editor), Laboratory of the Future: Building the Digital Transformation, 1. Ausgabe, Wiley-VCH, 2025
- 135) T. Dai et al., Nature 2024, 635, 890
- 136) S. P. Ngan et al., Chem. Eng. Trans. 2025, 120, 301



**Orientieren und vernetzen:
die analytica
conference**

24.–26.03.2026
Messe München

analytica.de/konferenz

Organisiert von
GBM GDCh DGKL

MESSE MÜNCHEN