



GDCh

Gesellschaft  
Deutscher Chemiker

Fachgruppe  
Analytische Chemie

**Neuer Fachgruppenvorstand**

**Analytik bei Merck**

**Jahresberichte der AKs**

Mitteilungsblatt  
1/2020



ISSN 0939-0065



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER



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

Vorsitz 2017-2020  
Prof. Dr. Ulrich W. Scherer  
Mannheim  
u.scherer@hs-mannheim.de

**Arbeitskreis  
Archäometrie**

Vorsitz 2019-2022  
Dr. Stefan Röhrs  
Berlin  
s.roehrs@smb.spk-berlin.de

**Arbeitskreis  
Chemische Kristallographie**

Vorsitz 2017-2020  
Prof. Dr. Iris Oppel  
Aachen  
iris.oppel@ac.rwth-aachen.de

**Arbeitskreis  
Chemometrik &  
Qualitätssicherung**

Vorsitz 2020-2023  
noch nicht konstituiert

**Arbeitskreis  
Chemo- & Biosensoren**

Vorsitz 2017-2020  
Dr. Michael Steinwand  
Owingen  
msteinwand@innovendia.de

**Fachgruppe  
Analytische Chemie**



**Vorstand 2020-2023**

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

Stellvertretender Vorsitz  
Dr. Michael Art  
Darmstadt

Dr. Martin Wende  
Ludwigshafen

Beisitz  
Jens Fangmeyer  
Münster

Dr. Heike Gleisner  
Jena

Prof. Dr. Uwe Karst  
Münster

Dr. Maria Viehoff  
Darmstadt

Prof. Dr. Carla Vogt  
Freiburg

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

Vorsitz 2019-2022  
Dr. Martin Wende  
Ludwigshafen  
martin.wende@basf.com

**Arbeitskreis  
Elektrochemische  
Analysenmethoden (ELACH)**

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

**Arbeitskreis  
Prozessanalytik (PAT)**

Vorsitz 2017-2020  
Prof. Dr. Christoph Herwig  
Wien  
ak-prozessanalytik@gdch.de

**Arbeitskreis  
Separation Science**

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

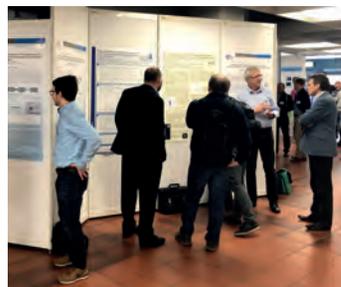
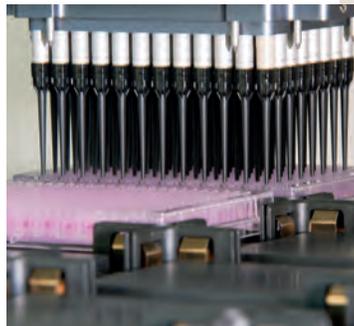
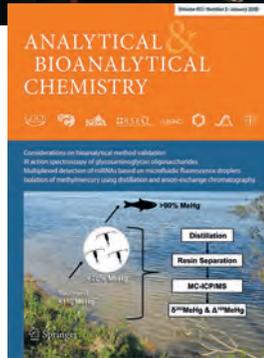
**Industrieforum Analytik**

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

**Mitglieder**

# Inhalt 1/2020

<b>Editorial</b>	4
<b>Aus dem Vorstand</b>	
Neuer Fachgruppenvorstand	5
Vorstandssitzung in Kassel	7
<b>Aus den Arbeitskreisen</b>	
Neues vom AK Prozessanalytik	8
Neue AK-Vorstände	9
<b>Die Jahresberichte der Arbeitskreise</b>	
AK Archäometrie	9
AK ARH	10
AK ChemKrist	11
AK Chemo- und Biosensoren	12
AK Chemometrik u. Qualitätssicherung	13
DAAS	14
AK ELACH	17
Industrieforum Analytik	18
AK Prozessanalytik	19
AK Separation Science	22
<b>Analytik in Deutschland</b>	
Analytik bei Merck	24
<b>Chemie Aktuell</b>	
Molekularer Fingerabdruck	26
Struktur von Naturstoffen	27
Chemikalien in der Umwelt	28
<b>Medien</b>	
ABC in Kürze	29
Neu: Analytical Science Advances	30
<b>Personalien</b>	
Geburtstage	30
<b>Tagungen</b>	
Archäometrie & Denkmalpflege	31
CE-Forum	32
Vorschau: analytica	32
<b>GDCh-Fortbildungen</b>	34
Tagungskalender	35
Impressum	33



## Editorial

### Liebe Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie,

Sie haben im letzten Jahr einen neuen Vorstand gewählt. Einige bekannte Gesichter sind im Vorstand, aber auch einige neue. Ihre Wahl hat eine sehr schöne Diversität gebracht: Wir haben einen Frauenanteil von 50 Prozent, die Hälfte von uns sind unter 50 Jahre alt. Wir kommen aus verschiedenen Hochschulen in Ost und West, aus Großindustrie und von Geräteherstellern. Diese Breite bei den Vorstandsmitgliedern macht es auch, dass wir in unserer konstituierenden Sitzung im Januar viele Ideen sammeln konnten für die nächsten vier Jahre Vorstandsarbeit. Sie reichen von der Stärkung der Arbeitskreise, der Zusammenarbeit mit anderen Fachgruppen und Fachgesellschaften wie der Fachgruppe Lebensmittelchemie und der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie (DGMS), von der Diskussion um Analytik 4.0, der Aufwertung unseres Mitteilungsblatts bis hin zur Hochschulpolitik, in der wir die Rolle der analytischen Chemie im Austausch mit relevanten Gremien stärken wollen.

Ein wichtiges Thema für den Vorstand wird auch die Zusammenarbeit zwischen Academia und Industrie sein. Dies möchten wir über die wissenschaftliche Einbindung der industriellen Analytik auf unseren wichtigsten Veranstaltungen, ANAKON und analytica conference, erreichen, aber auch über ihre Sichtbarkeit während Studium und Promotion bereits für unsere Junganalytiker. Der gesamte Vorstand ist sehr motiviert, junge Analytiker nach der Promotion, gerade auch Berufseinsteiger in Unternehmen, wieder stärker an die Fachgruppe zu binden. Hier wollen wir Angebote entwickeln, um umfassender zu networken und Absolventen als Berufseinsteiger zu stärken. Dieses Networking über die Alters-



Ein neuer Vorstand mit vielen Ideen. Von links: Maria Viehoff, Uwe Karst, Michael Arlt, Carolin Huhn, Martin Wende, Jens Fangmeyer, Heike Gleisner, Carla Vogt. (Foto: C. Kniep)

gruppen hinweg, aber auch über die Grenzen zwischen Großindustrie, Mittelstand, Geräteherstellern, vielleicht auch Behörden ist uns ein großes Anliegen. Wir hoffen, auch die Arbeitskreise der Fachgruppe hier mit einzubeziehen.

In diesem Vorstand gibt es noch zwei Neuerungen. In der Geschichte der Fachgruppe gibt es mit Carolin Huhn nun erstmals eine Vorsitzende. Und das obwohl circa ein Drittel der Fachgruppenmitglieder weiblich sind. Die zweite Neuerung hängt damit zusammen: Um trotz Familie alle Aufgaben wahrnehmen und die Fachgruppe nach außen intensiv vertreten zu können, haben wir mit Michael Arlt und Martin Wende gleich zwei Stellvertreter benannt – Jobsharing in der Vorstandsebene.

Liebe Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie, wir freuen uns auf vier spannende Jahre Vorstandsarbeit mit Ihnen und für Sie. Lassen Sie uns wissen, welche Themen Ihnen noch wichtig sind. Wir freuen

uns über Ideen und Anregungen und Mitarbeit.

Auch danken wir dem alten Vorstand und besonders dem nun ehemaligen Vorsitzenden Joachim Richert für sein Engagement für die Fachgruppe.

Mit herzlichen Grüßen

*Carolin Huhn*

*Michael Arlt*

*Martin Wende*

Carolin Huhn,  
Michael Arlt,  
Martin Wende  
Vorstand der FG Analytische Chemie

---

## Vorstand

---

### Neuer Fachgruppenvorstand gewählt

■ Die GDCh-Fachgruppe Analytische Chemie hat ihren Vorstand neu gewählt. Für die Amtsperiode vom 01.01.2020 bis 31.12.2023 werden die Mitglieder des Vorstands sein:

#### Von der Liste Hochschule / Forschungseinrichtungen:

- Prof. Dr. Carolin Huhn, Universität Tübingen (Vorsitz)
- Prof. Dr. Uwe Karst, Universität Münster
- Prof. Dr. Carla Vogt, TU Bergakademie Freiberg

#### Von der Liste Industrie / freie Berufe:

- Dr. Michael Arlt, Merck (stellvertretender Vorsitz)
- Dr. Heike Gleisner, Analytik Jena
- Dr. Martin Wende, BASF (stellvertretender Vorsitz)

#### Von der Liste Junganalytiker:

- Jens Fangmeyer, Universität Münster
- Dr. Maria Viehoff, Merck

Hier noch einmal die Statements der neuen Vorstandsmitglieder zur Wahl, wie abgedruckt im Mitteilungsblatt 03/2019.

#### Liste Hochschulen/Forschungseinrichtungen

##### Prof. Dr. Carolin Huhn Universität Tübingen

■ Mir ist besonders die Zusammenarbeit mit den Arbeitskreisen wichtig, da hier der Kontakt zu allen Mitgliedern besonders intensiv ist und die fachliche Arbeit stattfindet. In einem gemeinsamen Prozess mit den Arbeitskreisen möchte ich ausloten, wie wir die Fachgruppe gemeinsam gestalten können: Welche Hilfestellungen braucht es, welche Formate können wir gemeinsam angehen? Von Seiten der GDCh gab es in den letzten Jahren Wechsel in der Betreuung der Fachgruppen, sodass ich durch meine lange Mitarbeit im Vorstand sicherstellen möchte, dass aufgebautes Wissen und Informationen erhalten bleiben. Die Unterstützung des Mitteilungsblattes als zentrale Informationsplattform liegt mir weiterhin am Herzen.



##### Prof. Dr. Uwe Karst Universität Münster

■ Die Förderung des Austausches zwischen verschiedenen Methodengruppen und Anwendungsgebieten sehe ich als eine besonders wichtige Aufgabe der Fachgruppe an. Die erfreuliche Tendenz der ANAKON mit deutlich gestiegenen Teilnehmerzahlen geht hier bereits in die richtige Richtung, könnte aber durch gezielte Kooperation mit thematisch benachbarten Fachgesellschaften wie der DGMS, der Lebensmittelchemischen Gesellschaft in der GDCh oder den bioanalytisch orientierten Vereinigungen noch deutlich weiter gesteigert werden.

Daher ist es mir ein Anliegen, besonders durch gemeinsame Tagungen oder Tagungssessions der Fachgruppe und/oder der Arbeitskreise mit anderen Fachgesellschaften auf ANAKON, analytica conference oder Wissenschaftsforum Chemie hierbei Fortschritte zu erzielen. Dasselbe gilt für einen verbesserten Austausch zwischen Hochschulen und Unternehmen, wo die ebenfalls erfreulichen Ansätze (Frühjahrsschule Industrielle Analytik für Masterstudierende) durch eine gezieltere Einbindung



jüngerer Industriekollegen in die Aktivitäten der Fachgruppe erweitert werden sollten, da diese uns nach der Promotion oftmals rasch verloren gehen. Hierzu möchte ich mich dafür einsetzen, Themen mit besonderem Industriebezug (Qualitätssicherung, Prozessanalytik) noch intensiver auf Veranstaltungen der Fachgruppe zu berücksichtigen.

##### Prof. Dr. Carla Vogt TU Bergakademie Freiberg

■ Mir ist es besonders wichtig, dass die analytische Chemie in der Ausbildung an deutschen Universitäten einen hohen Stellenwert behält oder wiedererlangt. Um das zu bewerkstelligen, sind gemeinsame Anstrengungen der in der Ausbildung engagierten Hochschullehrer und der in der Industrie tätigen Chemiker mit Analytikprofil erforderlich. Ich sehe mich hier als Motor, um die Kräfte zu bündeln und mich auf geeigneten Veranstaltungen und in relevanten Gremien um eine Umsetzung zu bemühen.



## Liste Industrie/freie Berufe

**Dr. Michael Arlt  
Merck**

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

**Dr. Heike Gleisner  
Analytik Jena**

■ Als Angestellte einer der großen deutschen Analysengerätehersteller sehe ich mich in der Rolle als Bindeglied und Mittler zwischen den Interessen der Industrie, Behörden und der universitären Forschung. Deshalb möchte ich mich besonders im Interesse der Weiterentwicklung, Testung und Einführung neuer Methoden im Aufgabenfeld der analytischen Chemie engagieren. Im Netzwerk der Fachgruppe Analytische Chemie trete ich besonders für eine intensive Zusammenarbeit von Hochschulen, Industrie und Behörden ein. Ich unterstütze praxisnahe Bachelor-, Master- und Promotionsarbeiten auf dem Gebiet der Analytik und engagiere mich für die Schaffung instrumenteller und gerätetechnischer Voraussetzungen.

**Dr. Martin Wende  
BASF**

■ Nach vielen erfolgreichen Jahren Vorsitz von analytischen Arbeitskreisen möchte ich mich zukünftig als Fachgruppenvorstand noch intensiver um die Belange der analytischen Chemie in Deutschland kümmern. Der Wissenserhalt ist gerade in der analytischen Chemie ein wichtiger Erfolgsfaktor in der Industrie. Ebenso ist die Förderung des analytischen Nachwuchses für den universitären Bereich und die Industrie von hoher Bedeutung und sollte auch weiterhin ein Schwerpunkt der FG bleiben. Den wissenschaftlichen Austausch zwischen den Analytik-Experten, z.B. auf der ANAKON, möchte ich weiter verstärken und den interdisziplinären Austausch zwischen den Arbeitskreisen intensivieren. Ein übergreifendes Thema, mit dem ich mich zurzeit intensiv beschäftige, ist die Weiterentwicklung der Analytik im Zeitalter der Digitalisierung (Stichwort Analytik 4.0, Automatisierung und KI).

*Liste Junganalytiker***Jens Fangmeyer  
Universität Münster**

■ Als Vertreter für die Junganalytiker sind mir besonders die Anliegen der Studierenden an den verschiedenen Universitätsstandorten wichtig. Meine Kommilitoninnen, Kommilitonen und ich sind leider erst spät im Masterstudium durch die Frühjahrsschule Industrielle Analytik auf die Fachgruppe Analytische Chemie aufmerksam geworden, obwohl das Interesse an der analytischen Chemie schon vorher groß war. Aus diesem Grund möchte ich deren Sichtbarkeit in früheren Semestern verbessern, um einen intensiveren Austausch



zwischen Studierenden verschiedener Standorte sowie unterschiedlicher Studierenerfahrungen zu ermöglichen. Zusätzlich zu den Einblicken, die das Chemiestudium gewährt, hatte ich durch meine Ausbildung zum Chemielaboranten die Möglichkeit, die Aufgaben und Tätigkeiten eines analytischen Chemikers in der chemischen Industrie kennenzulernen. Als Vertreter für die Junganalytiker möchte ich daher auch die Präsenz der industriellen Analytik bei den Studierenden verstärken, um auch hier ein intensiveres Networking zu realisieren.

**Dr. Maria Viehoff  
Merck**

■ Die letzten 4 Jahre im Fachgruppenvorstand der Analytischen Chemie haben mir gezeigt, dass die Gemeinschaft unserer Jungmitglieder aus engagierten Analytikern und Analytikerinnen besteht, die ganz unterschiedliche Anforderungen an die Fachgruppe Analytische Chemie stellen. Ein Ziel, das viele gemeinsam haben, ist Teil eines lebendigen Netzwerkes zu sein. Mir ist es wichtig, zusätzlich zu den von den Arbeitskreisen organisierten Doktorandenseminaren Raum für ein solches Netzwerk durch kleine Treffen am Rande aller relevanter Veranstaltungen der Fachgruppe Analytische Chemie zu geben. Auf der anderen Seite umfasst die Gruppe der Junganalytiker Studierende, Doktoranden und junge Berufstätige. Diese Diversität sollte genutzt werden, um zum einen Studierenden die Möglichkeit zu geben, sich ein Bild der unterschiedlichen Berufsfelder innerhalb der analytischen Chemie zu machen, wie es bei Junganalytikertreffen der Fall ist. Zum anderen sollten wir eine Plattform schaffen, auf der das vielleicht schon zu Studienzeiten gebildete Netzwerk auch nach dem Eintritt ins Berufsleben sinnvoll genutzt und gepflegt werden kann. Dafür möchte ich mich engagieren.



### Vorstandssitzung in Kassel

■ Vom 1. bis 2. Oktober 2019 tagte sowohl der enge als auch der erweiterte Vorstand der Fachgruppe in Kassel. Vorstandsvorsitzender Joachim Richert begrüßte alle Teilnehmer.

#### Mitglieder

■ Nach einem in den späten 1990er Jahren startenden Negativtrend entwickelt sich die Zahl der FG-Mitglieder seit 2008 wieder erfreulich positiv. Zum 1. September 2019 verzeichnete die FG knapp 2500 Mitglieder, ein Plus von 106 Mitgliedern (4%) im Vergleich zum 1. Januar 2019. Das Wachstum der letzten Jahre ist hauptsächlich auf studentische Mitglieder zurückzuführen: Allein im Zeitraum Januar bis September traten 78 Studenten der FG bei. Auch alle Arbeitskreise legten in diesem Zeitraum an Mitgliederzahlen zu.

#### GDCh-Wissenschaftsforum 2019 / Fachgruppenpreise

■ Das Analytik-Symposium beim WiFo, das Joachim Richert und Uwe Karst koordiniert hatten, erzielte eine sehr positive Resonanz. Zitate dazu:

- „Die Analytik-Session auf dem WiFo 2019 „Elemente der Analytik“, die Professor Karst und ich moderieren durften, ist sehr erfolgreich gewesen. Zeitweise war der Raum K4/5 rappellvoll! Das hat wirklich Spaß gemacht.“ (Wolfgang Buscher)
- „Der späte Nachmittag war wirklich hervorragend besucht, die anderen Vorträge waren mit akzeptablem Besuch. Wir sollten uns merken, auch in den nächsten Jahren wieder eher Vorträge von allgemeinem Interesse zu bringen, da dies auch die Kollegen aus den anderen Disziplinen anzieht, während unsere Analytikerkollegen ja leider auf dem WiFo weniger vertreten sind.“ (Uwe Karst)

Die Verleihung des Fresenius-Preises an Andrea Sinz und Detlev Belder bei der Eröffnungsveranstaltung erfolgte statt mit den üblichen Laudatios als moderiertes Gespräch/Interview; dieses Format stieß auf großen Zuspruch.

Klaus-Peter Jäckel wurde vor Beginn des von der FG koordinierten Symposiums „Elemente der Analytik“ für sein jahrelanges Engagement bei der Organisation der Frühjahrsschule mit einer gravierten Glastrophäe geehrt.

Die Fachgruppe ermuntert alle Hochschullehrer, würdige Kandidaten für den Absolventenpreis zu melden.

#### GDCh-Wissenschaftsforum 2021 (05. bis 08.09.2021 in München)

■ Laut Vorstandsbeschluss wird sich die Fachgruppe auch 2021 in Form eines Symposiums in die Programmgestaltung einbringen (2 Sessions; vormittags/ nachmittags).

#### analytica conference 2020 (31.03. bis 02.04.2020)

■ Das wissenschaftliche Programm besteht wieder aus 45 Sessions. Erstmals sollen die Poster-Sessions aufgewertet werden, indem an allen drei Konferenztagen in den mittäglichen Vortragspausen (11:30-12:30h) ein gesponsertes Catering geboten wird. Das von Uwe Karst organisierte Hochschullehrtreffen findet am 30. März statt.

#### ANAKON 2021 (Universität Leipzig)

■ Die Fachgruppenkonferenz findet vom 22. bis 25. März im repräsentativen zentralen Hörsaalgebäude der Universität Leipzig statt und wird von Detlev Belder und Thorsten Reemtsma organisiert. Für das Konferenzdinner wurde die Moritz-Bastei angemietet.

#### ANAKON 2023

■ Joachim Richert ruft die bei den letztmaligen Auswahlen nicht zum Zuge gekommenen, noch aktiven Bewerbungen in Erinnerung: Mainz (Nicolas Bings/Thorsten Hoffmann), Salzburg (Christian Huber) und Jena/Magdeburg (Wolf von Tümpling). Alle drei Bewerbungen sind nach wie vor „im Rennen“, mit einer Favorisierung von Salzburg. Der Tagungsort muss spätestens zur ANAKON 2021 entschieden sein.

#### Newsletter

■ Insgesamt soll der Newsletter stärker nach vorne als auf Rückblicke fokussiert sein. Nach wie vor gestaltet es sich allerdings schwierig, ihn mit interessanten Ankündigungen zu füllen. Die Fachgruppe bittet darum, den Newsletter zu unterstützen und geeignete Informationen/Themenvorschläge zu sammeln und weiterleiten.

#### ABC

■ Joachim Richert bittet alle Teilnehmer, wissenschaftliche Beiträge in der Zeitschrift zu veröffentlichen, um der Verantwortung als Mitherausgeber und Miteigentümer gerecht zu werden sowie die wichtige Einnahmequelle aus den ABC-Pachtzahlungen nicht unnötig zu schmälern.

#### Trendberichte 2020

■ Nachdem die Trendberichte der letzten Jahre an die Preisträger der Fresenius Lecture gekoppelt und dementsprechend thematisch oft recht eng gefasst waren, werden sie ab 2020 wieder die gesamte Breite der analytischen Chemie abdecken und sich aus Beiträgen der AKs und des Industrieforums zusammensetzen. Günter Gauglitz koordiniert die Trendberichte und verfasst eine einleitende Übersicht.

#### Arbeitskreise

■ Die Jahresberichte 2019 sind in diesem Mitteilungsblatt veröffentlicht.

#### Bericht aus der EuChemS

■ Die European Chemical Society (EuChemS) ist die chemische Dachgesellschaft auf europäischer Ebene. Sie hat eine Division of Analytical Chemistry (DAC). Martin Vogel ist Mitglied des Steering Committee und GDCh Delegation.

Hauptkonferenz der DAC ist die EuroAnalysis, welche die komplette Breite der Analytik abdeckt („ANAKON“ auf europäischer Ebene). 2019 fand die Euroanalysis in Istanbul mit über 600 Teilnehmern statt. Es gab deutlich mehr Teilnehmer aus Osteuropa und Nahost als aus Europa. 2021 wird die Euroanalysis vom 22. bis 27.

August 2021 in Nijmegen, NL stattfinden, 2023 in Genf, CH. Für 2025 ist Dubrovnik, Kroatien, im Gespräch. Eine mögliche deutsche Bewerbung für 2025 oder 2027 traf im Fachgruppenvorstand auf positive Resonanz.

Allgemein ist Deutschland mit seinen Sommer-/Herbstschulen im europäischen Vergleich sehr gut aufgestellt; manche Länder richten zwar solche Schulen aus, aber zu einem viel höheren Preis.

### Werbeaktion für neue Mitglieder

Die GDCh-Geschäftsstelle führte eine Werbeaktion für die Fachgruppen Makromolekulare Chemie und VCW durch, bei der GDCh-Mitglieder angeschrieben wurden, die sich laut eigenen Angaben für diese Themenfelder interessierten, aber noch kein Mitglied der entsprechenden FG waren. Bei der FG Makromolekulare Chemie lag die Konversionsrate bei 2,8 Prozent, beim VCW deutlich darüber, da diese Fachstruktur jünger ist. Analog dieses Beispiels will auch die Fachgruppe Analytische Chemie potenzielle neue FG-Mitglieder anschreiben. Zudem ist gewünscht, sich in Zukunft zusätzlich mit neuen Themen zu befassen, die auch für die Analytik eine Rolle spielen und zur Gewinnung neuer Mitglieder führen könnten, etwa "omics" und digitaler Wandel.

Zur Schaffung höherer Sichtbarkeit für Analytikbelange bei allen GDCh-Mitgliedern wurde zudem beschlossen, die *Nachrichten aus der Chemie* stärker als Forum zu nutzen, beispielsweise durch die Veröffentlichung von Artikeln im Magazinteil.

### Abschied

Joachim Richert schloss seine letzte Sitzung als Vorsitzender der FG nach acht Jahren Vorstandsarbeit. Martin Vogel dankte ihm im Namen aller Anwesenden für sein Engagement und den äußerst angenehmen Führungsstil.

Die nächste Sitzung des engen und erweiterten Vorstands wird voraussichtlich am 5. und 6. Oktober 2020 in der GDCh-Geschäftsstelle in Frankfurt am Main stattfinden.

*Für das Protokoll  
Joachim Richert  
und Carina Kniep  
(GDCh-Geschäftsstelle)*

## Aus den Arbeitskreisen

### Prozessanalytik – Treiber in der Prozessindustrie



Nicht nur die Medizin und die Pädagogik blicken ganzheitlich auf den Patienten, auch in der Prozessindustrie wenden wir uns dem ganzheitlichen Blick auf den Prozess zu. Wir vergessen dabei nicht unsere Wurzeln und verbessern seit 15 Jahren stetig Methoden und Geräte für die Prozessanalysetechnik durch unseren Dialog zwischen den Forschungsinstituten, den Herstellern und den Anwendern. Wir, das ist der Arbeitskreis Prozessanalytik, der organisatorisch in die Fachgruppe Analytische Chemie eingebunden ist. In der Dechema ist der AK PAT der ProcessNet-Fachgruppe Prozess, Apparate- und Anlagentechnik (PAAT) zugeordnet.

Zum 15. Geburtstag des Arbeitskreises lenkten wir unseren Blick beim diesjährigen Herbstkolloquium bei der Evonik in Marl auf die Prozessanalysenmessstelle in der industriellen Anwendung. Nach PAT 4.0 im Jahr 2018 waren die diesjährigen Schwerpunkte:

- der sinnvolle Probenahmeort
- die zuverlässige und intelligente Probenahme
- die robuste Prozessanalytik
- die Bewertung der Analyseergebnisse
- die intelligenten Wartungsintervalle
- neu entwickelte Prozessgeräte wie Benchtop-NMR, PDW-Spektroskopie, Hyperspectral-Imaging und Kombisensorik.

Die PAT ist zwar als Sensorik für den Prozess ein wichtiges Teilgebiet, aber wirtschaftliche Gewinne sind nur im Zusammenspiel mit der ganzheitlichen Betrachtungsweise der Prozessanlagen zu erzielen. Dies spiegelt sich auch in den Ergebnissen des Ad-Hoc-Arbeitskreises „Modellgestützte Experimentalplanung in Bioprocessen“ sowie in dem Übersichtsvortrag bei der Jahrestagung der PAAT und in den Arbeitskreisen wider (siehe Seite 21):<sup>1,2)</sup>

- „Prozesskontrollstrategien mittels Digitaler Zwillinge“: Digitale Zwillinge repräsentieren vereinfacht den abzubildenden Prozess. Abweichungen zum realen Prozess zeigen sofort, welche Prozessparameter zu ändern sind, um zum optimalen Betriebspunkt und der maximalen Raum-Zeit-Ausbeute zurückzukehren.
- „Rolle von KI in PAT bzw. Rolle von PAT in KI“: KI im Umfeld der PAT. Wer nutzt diese Tools, welche Lösungen sind erfolgreich, wo besteht noch Handlungsbedarf?

In diesen Arbeitskreisen suchen wir immer Fachleute, die uns mit ihrem Wissen unterstützen.

Für unsere jungen Mitglieder veranstalten wir jedes Jahr im Frühjahr ein interdisziplinäres Doktorandenseminar. Im März 2019 nahmen 30 Doktoranden aus Prozessanalysetechnik, Chemo- und Biosensoren, Chemometrie und Qualitätsmanagement und elektrochemischen Analysemethoden in den Räumlichkeiten der BAM teil (siehe Seite 19). Auf unserer Jahrestagung im Herbst zeichnen wir neben den Postern die besten Master- und Doktorarbeiten in der PAT mit Preisgeldern aus. Wir schätzen den Input der jungen Wissenschaftler sehr, die Junganalytiker bilden inzwischen eine Extra-Säule im Arbeitskreis und haben den ehemaligen Dialog zu einem Quattrolog erweitert, was sich auch im vierköpfigen Vorstand widerspiegelt. Für Junginsteiger in die Industrie wie auch klein- und mittelständige Unternehmen werden wir auch wieder ein Einstiegsseminar zum Thema „PAT in der Prozessindustrie“ veranstalten.

Mit welchen Themen gehen wir in die zwanziger Jahre des 21. Jahrhunderts? Der digitale Zwilling wie auch KI, Industrie 4.0 im Sensorik-Bereich, aber auch PAT im Prozess, der ein Teil der Supply-Chain wird, werden uns weiter beschäftigen. Im Mai wird wissenschaftlich stark vom AK PAT beeinflusst die 5th European Conference on Process Analytics and Control Technology (Europact 2020) in Kopenhagen stattfinden.

Das 14. interdisziplinäre Doktorandenseminar 2020 findet vom 15. bis 17. April an der Universität Potsdam statt. In diesem Jahr hat sich die Physikalische Chemie – innoFSPEC als Ausrichter die Möglichkeit gesichert, bei dieser Veranstaltung viele Junganalytiker ins Haus zu holen.

Martin Hajduk & Tobias Eifert  
AK Prozessanalytik

<http://arbeitskreis-prozessanalytik.de>

#### Literatur

- 1) V. Abt, T. Barz, N. Cruz, Ch. Herwig, P. Kroll, J. Möller, R. Pörtner, R. Schenkendorf, *Model-based tools for optimal experiments in bio-process engineering, Current Opinion in Chemical Engineering* 2018, 22, 244. doi: 10.1016/j.coche.2018.11.007
- 2) Ch. Herwig, *Workflows und Nutzen von Digitalen Zwillingen, Jahrestreffen der Process-Net-Fachgemeinschaften PAAT, 4–5. November 2019 in Dortmund.*

## Neue Arbeitskreis-Vorstände gewählt

### AK ELACH

Der Arbeitskreis Elektrochemische Analysemethoden (ELACH) der Fachgruppe Analytische Chemie hat seinen Vorstand neu gewählt. Für die Amtsperiode vom 01.01.2020 bis 31.12.2023 werden die Mitglieder des Vorstands sein:

- Vorsitz: Prof. Dr. Frank-Michael Matysik, Universität Regensburg
- Stellv. Vorsitz: Prof. Dr. Winfried Vonau, Kurt-Schwabe-Institut für Mess- und Sensortechnik Meinsberg
- Schriftführung: Dr. Christoph Kröger, Metrohm, Filderstadt

### AK Separation Science

Auch der Arbeitskreis Separation Science der Fachgruppe Analytische Chemie hat seinen Vorstand neu gewählt. Für die Amtsperiode vom 01.01.2020 bis 31.12.2023 werden die Mitglieder des Vorstands sein:

- Vorsitz: Dr. Martin Vogel, Westfälische Wilhelms-Universität Münster
- Stellv. Vorsitz: Dr. Stefan Lamotte, BASF, Ludwigshafen
- Schriftführung: Dr. Katja Dettmer-Wilde, Universität Regensburg

## Jahresberichte 2019

### AK Archäometrie

Die Mitgliederzahl des Arbeitskreises beträgt unverändert 148 Mitglieder (zum 01.09.2019). Abgänge wurden durch Neueintritte ausgeglichen; 2019 sind drei studentische Mitglieder zu uns gestoßen.

Die Jahrestagung „Archäometrie und Denkmalpflege“ fand vom 10. bis 14. September in Wien mit 90 Teilnehmern statt (siehe Seite 31). Veranstalter war der AK Archäometrie. Die lokale Organisation übernahmen Manfred Schreiner und Rita Wiesinger vom Institut für Naturwissenschaften in der Kunst an der Akademie der Bildenden Künste Wien. Somit ist diese Tagung auch eine Kooperation der GDCh mit der GÖCH: Rita Wiesinger und Manfred Schreiner repräsentieren die Arbeitsgruppe Erforschung und Erhaltung von Kulturgütern in der GÖCH.

Im wissenschaftlichen Komitee der Tagung waren die Vorstände der Arbeitsgruppe Erforschung und Erhaltung von Kulturgütern in der GÖCH und des Arbeitskreises Archäometrie in der GDCh vertreten sowie die Vorstände vom Arbeitskreis Archäometrie und Denkmalpflege der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (DMG) und der Gesellschaft für Naturwissenschaftliche Archäologie und Archäometrie (GNAA). Das Programm umfasste 35 Vorträge und 31 Poster zu Heritage Science. Den größten Teil davon nahmen die Beiträge aus dem Bereich Metall ein. Aus dem Bereich Keramik waren dieses Jahr nur wenige Beiträge eingegangen, wegen der zeitgleich stattfindenden „Shaping Conference“, organisiert in der European Ceramic Society und der Portuguese Ceramic and Glass Society. Die Veranstaltung wurde eingrahmt von einem Vorabendtreffen, einem Empfang der Rektorin der Akademie der Bildenden Künste, Eva Blimlinger, dem Besuch eines Heurigen-Lokals und von einem Abendvortrag durch Markus Wachter, Geschäftsführer von Römerstadt Carnuntum – Archäologischer Kulturpark Niederösterreich. Am Samstag nach der Tagung

Immer am Puls der Zeit ...

Die GDCh bei  

[www.facebook.com/GDCh.de](http://www.facebook.com/GDCh.de) · [www.twitter.com/gdch\\_aktuell](http://www.twitter.com/gdch_aktuell)

gab es eine Exkursion zur Römerstadt Carnuntum. Die Kurzfassungen aller eingereichten Fachbeiträge erschienen gleichzeitig zur Tagung in der Zeitschrift *METALLA* (Bochum; Sonderheft 9, 2019).

Die Mitgliederversammlung des Arbeitskreises fand am 12. September in Wien statt. Die nächste Jahrestagung Archäometrie wird im Frühjahr 2021 in Bochum stattfinden.

Aufgrund des positiven Feedbacks wird versucht, eine kleine Session zu Archäometrie und Denkmalpflege auf der nächsten *analytica conference* (31.03.-02.04.2020) zu organisieren.

Aus den Projektgruppen gibt es keine neuen Aktivitäten zu berichten. Das Konzept der Workshops, die sich gezielt den Herausforderungen bestimmter analytischer Methoden widmet, wurde als positiv bewertet (siehe Jahresbericht 2018 zu „Möglichkeiten und Grenzen der portablen Röntgenfluoreszenzanalytik in der Archäometrie“ in Dresden). Diese Workshops sollen Probleme nicht nur theoretisch ansprechen, sondern wenn möglich konkrete analytische Methoden anwenden und praktische Probleme erörtern.

#### Der Vorstand (Periode 2019 – 2022)

- Stefan Röhrs, Berlin (Vorsitzender): [s.roehrs@smb.spk-berlin.de](mailto:s.roehrs@smb.spk-berlin.de)
- Jürgen Schram, Krefeld (Stellvertretender Vorsitzender): [schram@hs-niederrhein.de](mailto:schram@hs-niederrhein.de)
- Christoph Herm, Dresden (Schriftführer): [herm@hfbk-dresden.de](mailto:herm@hfbk-dresden.de)

*Stefan Röhrs, Berlin*

## AK ARH

### *Analytik mit Radionukliden und Hochleistungsstrahlenquellen*

■ Unser Arbeitskreis gehört mit derzeit 159 Mitgliedern, davon etwa ein Drittel studentische Mitglieder, zu den kleineren Gruppierungen in der GDCh. Wir haben eine doppelte Anbindung an die Fachgruppen Analytische Chemie und Nuklearchemie. Unsere Aufgabe sehen wir in der Vernetzung unserer Mitglieder, im Erhalt der Verfügbarkeit von Hochleistungsstrahlenquellen für die vielfältigen



*Teilnehmer am Seminar für Aktivierungsanalyse und Gammasppektrometrie (SAAGAS) in der TUM (Foto: W. Schürmann, TUM)*

Nutzer und in dem Einsatz dieser besonderen analytischen Techniken in Wissenschaft und Industrie. „Hochleistungsstrahlenquellen“ ist ein Überbegriff für Geräte, die zum Beispiel Neutronen, Ionen- und Elektronenstrahlen sowie Synchrotronstrahlung erzeugen.

#### Seminar SAAGAS

■ Alle zwei Jahre richten wir unser Seminar für Aktivierungsanalyse und Gammasppektrometrie (SAAGAS) aus, das sich insbesondere an den wissenschaftlichen Nachwuchs richtet und Gelegenheit bietet, Vortrags-erfahrung zu sammeln. Im vergangenen Februar fand das 27. Seminar in Garching statt. Mehr als 70 Teilnehmer aus über zehn Ländern nutzten die Plattform für Präsentationen und Fachdiskussionen. Auf dem Programm standen 48 Beiträge, davon 37 Vorträge. Das Seminar wurde eröffnet mit Beiträgen von Richard Henkelmann zur Produktion von Radioisotopen an der Forschungs-Neutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz (FRM II) und von Zsolt Révay zur Analytik mit Neutronen am Heinz-Maier-Leibnitz-Zentrum (MLZ). Die folgenden Sitzungen boten Beiträge zur Instrumentierung und zur Gammasppektrometrie. Einen Höhepunkt bildete am Nachmittag die Präsentation von Gunther Korschinek „Supernova footprint on the doorstep“. Beiträge in deutscher und englischer Sprache wechselten sich ab, ebenso Vorträge von wissenschaftlichem Nachwuchs und etab-

lierten Wissenschaftlern. An dieser Stelle danken wir der Fachgruppe Analytische Chemie für die Reisestipendien, welche die Anreise von jungen Nachwuchskräften unterstützte.

Der wissenschaftliche Teil klang aus mit der Postersitzung mit elf Beiträgen. Das Abendprogramm zeigte im nahe gelegenen ESO-Planetarium *Supernova* eine spannende Reise durch das Universum.

Am zweiten Tag gab es viele Beispiele zur Neutronenaktivierungsanalyse und zur Gammasppektrometrie mit Themen aus der Radioökologie, der nuklearen Forensik, der Charakterisierung radioaktiver Abfälle bis hin zu Simulationsprogrammen. Ein weiterer Höhepunkt war das Conference Dinner im Franziskaner. Krönung war der kurzweilige Abendvortrag von Henning von Philipsborn, der lebhaft radioaktive Alltagsgegenstände präsentierte, mit Anekdoten geschmückt.

Der letzte Seminartag stand ganz im Zeichen der Neutronenaktivierungsanalyse und ihren vielfältigen Anwendungen.

Der Jury fiel es nicht leicht, drei hervorragende Beiträge von Nachwuchswissenschaftlern auszuzeichnen. Nach einer intensiven Diskussion wurden ein erster und drei zweite Plätze vergeben, dotiert mit Preisgeldern der Fachgruppe Nuklearchemie: Den ersten Platz erreichte Markus Trunk (TU München) mit seinem Vortrag „Gaining insight into lithium-ion battery electrodes using

Neutron Depth Profiling at the N4DP instrument at MLZ“. Den zweiten Platz teilten sich Dorian Zok, Leibniz-Universität Hannover, („Chemische und radiochemische Untersuchungen von  $^{106}\text{Ru}$  in Umweltproben“), Lukas Werner, TU München („The N4DP instrument at the PGAA facility of the Heinz Maier Leibnitz Zentrum“) und Thomas Mittersteiner, TU Wien („Neutronenaktivierungsanalyse und Gammaskopie von Kaffee“).

Zum Abschluss des Seminars gab es Besichtigungen des FRM-II am MLZ und des Tandem-Beschleunigers am Maier-Leibnitz-Laboratorium.

Das Seminar wurde unterstützt von sieben Firmen, die in einer Industrieausstellung ihre Geräte und Technologien zeigten. Wir danken allen Sponsoren herzlich für ihr Engagement.

#### ENAAP und RADIATE

Seit etwa einem Jahr ist die Plattform European Neutron Activation Analysis Platform (ENAAP) online.<sup>1)</sup> Diese Initiative im Rahmen der Website [neutronsources.org](https://neutronsources.org) will Nutzern das Angebot an Neutronenquellen transparent machen und die Zusammenarbeit verbessern.

Das Projekt „Research and Development with Ion Beams – Advancing Technology in Europe“ (RADIATE) soll Ionenstrahlen für Analytik und Materialmodifikation für unterschiedliche Nutzergruppen verfügbar machen.<sup>2)</sup> Es wird von 2019 bis 2023 vom Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) koordiniert. 18 europäische Partner stellen ihre Ionenstrahl-Anlagen für Messgäste aus Wissenschaft und Industrie kostenfrei zur Verfügung. Softwareentwicklung und Nachwuchsförderung stehen ebenfalls auf dem Programm des Projekts, das die EU mit rund zehn Millionen Euro fördert.

Ionenstrahlen – also schnelle geladene Teilchen – dienen in diesem EU-Projekt als Werkzeug, um Materialoberflächen gezielt zu verändern oder zu analysieren. „Ziel des Projektes ist es nicht nur, Wissenschaftlern den Zugang zu wissenschaftlichen Großgeräten zu ermöglichen, son-

dern auch zur Wettbewerbsfähigkeit der europäischen Industrie beizutragen“, so der Koordinator Jürgen Fassbender, Direktor des HZDR-Instituts für Ionenstrahlphysik und Materialforschung.

Ionenstrahltechnologien sind aus vielen Bereichen nicht wegzudenken. So gäbe es ohne die Implantation von Fremdatomen in Halbleitermaterialien keine Prozessor- und Speicherchips für Computer, Handys und Digitalkameras. Mit Ionenstrahlen lassen sich zum Beispiel die elektronischen, optischen magnetischen oder mechanischen Eigenschaften von Materialien maßschneidern.

Für die ortsaufgelöste chemische Analyse von Feststoffoberflächen und zur tiefenaufgelösten Schichtanalyse setzen die RADIATE-Partner die Ionenstrahlanalyse (ion beam analysis, IBA) ein. Der GDCh-Arbeitskreis Analytik mit Radionukliden und Hochleistungsstrahlenquellen (ARH) ist in Deutschland kompetenter Ansprechpartner für die IBA. Da sich die IBA in der Regel als zerstörungsfreie Analysemethode durchführen lässt, wird sie gerne eingesetzt für archäometrische Fragestellungen bei Kunst- und Kulturgut oder in der angewandten Forschung, bei der unikalere Proben zu untersuchen sind. Ein weiterer Vorteil der IBA ist, dass sie sich standardfrei als primäre Methode durchführen lässt. Ein typisches Einsatzgebiet ist somit die Analyse von Kalibrationsproben für andere analytische Verfahren, die dadurch die Rückführbarkeit ihrer Analysen gewährleisten können. Prinzipiell lässt sich so das komplette Periodensystem (H bis Aktiniden) in diversen Matrices analysieren.

Die Beschleunigermassenspektrometrie (accelerator mass spectrometry, AMS) steht innerhalb von RADIATE ebenfalls Nutzern kostenfrei über Partner (Universität Wien, MLL München, ETH Zürich) zur Verfügung, ab 2020 auch am HZDR selbst. Die interdisziplinären Anwendungsgebiete des AMS spannen einen Bogen von Astrophysik über Kosmochemie und Geomorphologie bis hin zur Klima- und Umweltforschung.

#### Vorstand

Der Vorstand blickt auf die erste Hälfte seiner Amtszeit zurück und wird in seiner nächsten Sitzung die Strategie für die zweite Hälfte beraten. Die Mitgliederentwicklung ist stabil, dennoch wird überlegt, wie sich weitere Interessenten gewinnen lassen. Darüber hinaus sind die im kommenden Jahr anstehenden Wahlen des neuen Vorstandes vorzubereiten.

Ulrich W. Scherer  
Vorstand AK ARH

#### Literatur

- 1) <https://neutronsources.org/european-naa-platform/home.html>
- 2) Weitere Informationen zu RADIATE, insbesondere zur Antragstellung für einen kostenfreien Zugang zu den Ionenstrahleinrichtungen der Partner: [www.ionbeamcenters.eu](http://www.ionbeamcenters.eu)



#### AK ChemKrist

Ende März fand die 27. Jahrestagung der Deutschen Kristallographischen Gesellschaft (DKG) an der Universität Leipzig statt. Unter den Wissenschaftlern verschiedener Fachrichtungen befanden sich auch über 30 junge Kristallographen in den Anfangsjahren ihrer Karriere. In kurzen Vorträgen stellten sie ihre Arbeiten vor, bevor diese in einer Postersession diskutiert wurden.

2019 ist das Jahr, indem die Zahl der organischen und metallorganischen Kristallstrukturen in der Cambridge Structural Database (CSD) die Ein-Millionen-Schwelle überschritt. Die Größe der Datenbank erlaubt es, komplexe Analysen der hinterlegten Daten durchzuführen. Doch nahezu alle Daten in der CSD basieren auf Röntgenbeugungsuntersuchungen von geeigneten, ausreichend großen einkristallinen Substanzen. Hier setzt eine bemerkenswerte Entwicklung an: Durch die Kombination von geeigneten Detektoren mit einem Transmissions-elektronenmikroskop lassen sich mit Elektronenbeugung inzwischen

atomare Strukturen nanoskaliger Festkörper bestimmen.

Vom 18. bis 20. September fand in Aachen der Workshop „Tipps und Tricks für SHELX“ statt, den der AK6 Molekülverbindungen der DGK gemeinsam mit dem AK ChemKrist der GDCh veranstaltete (siehe MB 04/2019). Am Institut für Anorganische Chemie der RWTH begrüßten Iris Oppelt im Namen des AK ChemKrist und Ulli Englert für die DGK 41 Teilnehmende aus dem In- und Ausland und aus den verschiedensten wissenschaftlichen Karrierestadien – von Studierenden, Promovierenden bis hin zu langjährigen SHELX-Nutzern. Bei Kaffee und Kuchen brachte man zuallererst die Software auf den neuesten Stand, um dann unmittelbar in die Materie einzutauchen. Michael Bolte aus Frankfurt am Main gab einen Abriss über die Verwendung von Constraints und Restraints. Daniel Kratzert aus Freiburg erklärte, wie man mit dem DSR-Programm knifflige und extensive Fehlordnungen elegant und effizient modelliert. Zu guter Letzt zeigte Regine Herbst-Irmer aus Göttingen, wie man am besten an Zwillingsproblematiken herangeht, ohne zu verzweifeln. Zu jedem der Themenblöcke gab es individuell zu lösende Beispiele. Dabei standen die Fachleute engagiert mit Rat und Tat zur Seite. Außerdem war genügend Zeit, um selbst mitgebrachte Problemstrukturen mit den Spezialisten zu diskutieren. Informieren konnten sich die Teilnehmenden auch über die neueste Diffraktometertechnik der Firma Stoe (Jens Meyer), aktuelle Softwareimplementierungen zu asphärischen Verfeinerungsmodellen bei Bruker AXS (Holger Ott) sowie zu derzeitigen und zukünftigen Entwicklungen bei Merck zur Crystal Sponge Methode (Carolina von Eßen).

Dank der DGK, der GDCh und der finanziellen Unterstützung der Stadtsparkasse Aachen war es ein erfolgreicher Workshop. Unser Dank gilt auch den Firmen Stoe, Bruker AXS und Merck, die zusätzlich für das leibliche Wohl in entspannter Atmosphäre sorgten.

*Alexander Pöthig, München,  
AK6, DFG  
und Klaus Merz, Bochum,  
AK ChemKrist*

## AK Chemo- und Biosensoren

■ Der Arbeitskreis Chemo- und Biosensoren hatte wieder ein wissenschaftlich erfolgreiches Jahr. Zu berichten ist über den zweijährlichen Kongress zur Biosensorik, über neue Kooperationen mit anderen Fachgesellschaften, über die Teilnahme im Doktorandenseminar des AK Prozessanalytik und den Anstoß zu einer Diskussion über die Integration der Bioanalytik in den Arbeitskreis.

### Europäisches Biosensorsymposium

■ Eine der wichtigsten Aktivitäten 2019 war die Organisation des 2. Europäischen Biosensorsymposiums in Florenz im Februar (2. EBS). Diese Konferenzserie ist aus den Deutschen Biosensorsymposien hervorgegangen, die seit 1999 im zweijährlichen Rhythmus an wechselnden Standorten in Deutschland stattfanden. Die Austragungsorte waren immer auch Zentren der Biosensorforschung wie München, Tübingen, Potsdam, Regensburg, Bochum, Freiberg, Bad Heiligenstadt und Berlin/Wildau. Der Fokus lag auf jungen Wissenschaftlern, die hier in Vorträgen erste Erfahrungen sammeln und Netzwerke aufbauen sollten. Begleitet wurde dies durch Tutoriumsvorträge, die überblicksartig verschiedene Aspekte der Biosensorforschung beleuchteten. Das Konzept wurde 2017 auf das 1. Europäische Biosensorsymposium übertragen und das wissenschaftliche Komitee auf europäischer Ebene erweitert.

Das Symposium in Florenz, organisiert von Maria Minunni und Francesco Baldini, war ein voller Erfolg: 250 Teilnehmer besuchten die zweitägige Veranstaltung, und das europäische Spektrum war gut vertreten.<sup>1)</sup> Poster-Flash-Präsentationen werteten die Posterdiskussionen auf, und das inkludierte Konferenzdinner für alle Teilnehmer trug bei italienischem Flair und Cuisine zur Idee der „Biosensorfamilie“ deutlich bei. Inhaltlich wurde der Bogen von grundlegenden Untersuchungen zu Erkennungselementen, Transducern und Nanomaterialien über Anwendungsfelder bis hin zur Modellierung gespannt. Der Arbeitskreis Chemo- und Biosensoren

war aktiv im Organisationskomitee des Symposiums involviert.

Das 3. EBS wird im Februar 2021 in Aachen stattfinden – unter Leitung von Michael Schöning und Patrick Wagner. Die Vorbereitung unter Beteiligung des Arbeitskreises hat bereits begonnen.

### Kooperationen mit anderen Fachgesellschaften

■ Der Arbeitskreis hat neue Kooperationen aufgebaut, insbesondere um interdisziplinäre Treffen mit anderen Arbeitsrichtungen zu fördern. Dies trifft zum Beispiel auf die Fachgruppe „Mess- und Sensortechnik“ der Dechema zu. Diese organisiert alle zwei Jahre das multidisziplinäre Dresdner Sensorsymposium, das physikalische, chemische und biologische Sensoren, aber auch Sensorsysteme und Datenmanagement betrachtet. Hier bringt sich die Chemo- und Biosensorik über aktive Mitglieder im wissenschaftlichen Komitee der Tagung ein. 2019 fand im Dezember das 14. Dresdner Sensorsymposium statt.<sup>2)</sup> Neben Industrie 4.0 und Feinstaubmesstechnik waren wichtige Themen insbesondere neue Erkenntnisse zu Herzerkrankungen und Arteriosklerose sowie Enzymaktivitätsbestimmungen. Wir laden alle Mitglieder des AK im Jahr 2021 wieder nach Dresden ein.

### Kooperationen mit anderen GDCh-Arbeitskreisen

■ Eine neue Aktivität betrifft Kooperationen mit der Fachgruppe Elektrochemie der GDCh, die mit anderen Organisationen (DBG, Dechema, AGEF, GfKORR, DGO) seit 2008 das nationale Meeting „Electrochemistry“ im zweijährlichen Rhythmus organisiert. Die Tagung erfreut sich zunehmender Beliebtheit; in Ulm waren 2018 deutlich über 500 Teilnehmer dabei. Dabei sind alle Bereiche der Elektrochemie vertreten, auch die Elektroanalytik und die Biosensorik. Im September 2020 findet die Tagung in Berlin statt, und wir fordern alle Mitglieder des AK auf, Beiträge einzureichen. Wolfgang Schuhmann, Fred

Lisdat und Frank-Michael Matysik zeichnen verantwortlich für die Untersymposien Bioelektrochemie und Elektroanalytik.

Ebenso wird die Teilnahme am Doktorandenseminar des AK Prozessanalytik weiterhin auf feste Beine gestellt, indem der AK bereits im Organisationskomitee mithilft und so das Seminar mitgestaltet. Das nächste Doktorandenseminar wird vom 15. bis 17. April 2020 an der Universität Potsdam stattfinden, am innoFSPEC – Physikalische Chemie unter Leitung von Marvin Münzberg.

### Zukunftsdiskussion zur Bioanalytik

Bei der ANAKON 2019 trafen sich ca. 20 Interessierte der Bioanalytik, um den Bereich innerhalb der Fachgruppe besser abzubilden. Diskutiert wurde ein eigener AK, die Einbindung in den AK Chemo- und Biosensoren sowie mögliche zukünftige Veranstaltungen. Hervorzuheben sind die Symposia von Günther Gauglitz und Antje Baeumner mit dem *Journal for Analytical and Bioanalytical Chemistry (ABC)* auf der *analytica 2020*: „ABC: Bioanalytics I – Nanomaterials in bioanalysis“ und „ABC: Bioanalytics II – Analytics enabling the concept of anywhere care“. Weiteres ist in Planung, wie das Hervorheben der Bioanalytik bei der Frühjahrschule und eventuell sogar ein eigenes Doktorandenseminar „Bioanalytik und Biosensorik“.

### Ausblick

Die Weichen für Aktivitäten im Jahr 2020 sind bereits gestellt: Neben der Planung des EBS in Aachen wird die Diskussion zur Bioanalytik weitergeführt und Gelegenheiten gesucht, die Forschung von AK-Mitgliedern zu präsentieren, etwa auf Spezialsymposien beim ISEAC41 in Regensburg (7. bis 11. September 2020), durch Publikationen in *ABC* und weitere.

Michael Steinwand,  
Antje Baeumner,  
Fred Lisdat

### Literatur

- 1) [www2.chim.unifi.it/vp-334-2nd-european-biosensor-symposium-2019.html](http://www2.chim.unifi.it/vp-334-2nd-european-biosensor-symposium-2019.html)
- 2) <https://dechema.de/dss14.html>

## AK Chemometrik und Qualitätssicherung

Der Arbeitskreis Chemometrik und Qualitätssicherung hat derzeit 230 Mitglieder (Stand: Dezember 2019). Damit hat der Mitgliederstand – wie schon seit vielen Jahren – erneut und stetig zugenommen.

Während der ANAKON in Münster im Frühjahr 2019 fand (wie auch zuvor in Graz und Tübingen) am Rande der Tagung eine Mitgliederversammlung statt, zu der alle Arbeitskreismitglieder herzlich eingeladen waren. Die Anwesenden informierten sich über den Stand der Arbeiten im Arbeitskreis. Die anschließende Diskussion zur Erweiterung der Aktivitäten bestätigte die bisherige Verfahrensweise. Der Vorstand nimmt jedoch jederzeit Anregungen entgegen.

Jürgen W. Einax und Wolf von Tümppling führten unter Mitwirkung der AK-Mitglieder Karl Molt und Simon Prikler erneut einen GDCh-Anwendungskurs durch. Er fand im Juni in Magdeburg statt, unter dem Titel „Chemometrik – Werkzeug in der analytischen Chemie“. Die positive Resonanz der Teilnehmer ist für die Veranstalter Motivation, den Kurs auch 2021 wieder anzubieten.

Im Rahmen der Ausbildung von Toxikologen hielt Wolf von Tümppling im September in der Analytik-Modulwoche an der Universität in Leipzig eine Blockvorlesung zur Chemometrik.

Jürgen W. Einax gab Mitte Oktober an der Universität Leipzig im Rahmen des Aufbaustudiums „Analytik und Spektroskopie“ Blockvorlesungen mit dem Schwerpunkt Chemometrik. Die größtenteils positiven Rückmeldungen der Teilnehmer motivieren, die Aktivitäten fortzuführen. Leider musste Wolf von Tümppling seinen eingeladenen Vortrag zu „Chemometrik – ein nützliches Hilfsmittel zur Aus- und Bewertung von Big Data“ beim Langenauer Wasserforum am 11. und 12. November krankheitsbedingt kurzfristig absagen. Veranstalter und Teilnehmer bedauerten den Ausfall, was ein Indiz für die Aktualität des Themas ist. Es ist geplant, den Vortrag beim nächsten Forum im Jahr 2020 zu halten.

Ende 2019 ging erneut eine Wahlperiode des AK-Vorstands zu Ende. Wolf von Tümppling, der den Vorstand in den letzten acht Jahren leitete, durfte satzungsgemäß nicht erneut kandidieren. Im Ergebnis der Wahl setzt sich der neue Vorstand zusammen aus:

- Dr. Claudia Beleites, Chemometrix, Wölfersheim
  - Dr. Jörg Kraft, Synlab Umweltinstitut LAG
  - Dr. Andrea Paul, Bundesanstalt für Materialforschung, Berlin
  - Prof. Dr. Gerald Steiner, TU Dresden
- Eine erste Vorstandssitzung ist für den April 2020 am Rande der *analytica conference* geplant.

Die Vorstandsmitglieder, die auch dem neuen Vorstand angehören, danken sowohl Simon Prikler für sein Engagement und die geleistete Arbeit in den vergangenen Jahren als auch Wolf von Tümppling für sein langjähriges Engagement als Impulsgeber, Leiter und Koordinator des Arbeitskreises in der letzten Wahlperiode.

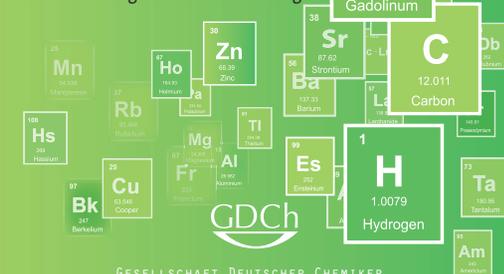
Wolf von Tümppling,  
Jörg Kraft,  
Simon Prikler,  
Gerald Steiner

## Der Karriereservice für Chemie und Life Sciences

Von Chemikern für Chemiker

Nutzen Sie das Netzwerk der GDCh:

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



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER  
[www.gdch.de/karriere](http://www.gdch.de/karriere) • [twitter.com/GDCh\\_Karriere](https://twitter.com/GDCh_Karriere)

## DAAS

## Deutscher Arbeitskreis für Analytische Spektroskopie



■ Das fünfte Jahr seit Gründung war zunächst geprägt vom turnusmäßigen Wechsel des Arbeitskreisvorstands. Am Ende des vierten Jahres nach der DAAS-Gründung und Zusammenlegung der früheren Arbeitskreise A.M.S.El. (Arbeitskreis für Mikro- und Spurenanalyse der Elemente und Elementspezies) und DASp (Deutscher Arbeitskreis für Angewandte Spektroskopie) wählten Ende 2018 die DAAS-Mitglieder einen neuen Vorstand.

Der Arbeitskreis weist nach wie vor eine stabile Mitgliederzahl von 493 auf (Stand: Ende September 2019).

**Neuer DAAS-Vorstand**

Industrievertreter:

- Ulrich Engel, Merck, Darmstadt (Verantwortlicher für das DAAS-Mentoring-Programm)
- Heike Gleisner, Analytik Jena (Schriftführerin)
- Martin Wende, BASF, Ludwigshafen (DAAS-Vorstandsvorsitzender)

Vertreter Akademia:

- Wolfgang Buscher, Universität Münster (stellvertretender DAAS-Vorstandsvorsitzender, Verantwortlicher für den DAAS-Preis und Stipendienvergaben durch den DAAS)
- Carsten Engelhard, Universität Siegen (PR-Arbeit: DAAS-Webseite,

Flyer etc., Newsletter, Veröffentlichungen)

- Kerstin Leopold, Universität Ulm (Verantwortliche für den Bunsen-Kirchhoff-Preis)

Mit der konstituierenden Sitzung am 17. und 18. März in der Geschäftsstelle der GDCh in Frankfurt am Main übernahm der neue DAAS-Vorstand die Amtsgeschäfte. Der vorherige Vorstandsvorsitzende Wolfgang Buscher übergab diese an den neuen Vorstandsvorsitzenden Martin Wende.

**European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry, EWCPs**

■ Vom 3. bis 8. Februar fand die weltweit wichtigste spektroskopische Konferenz in der plasmabasierten Element- und Speziesanalytik unter Beteiligung des DAAS in Pau, Südfrankreich, statt. Die Organisatoren Olivier Donard und Richard Lobinski freuten sich im Vorfeld der Konferenz über die Zusammenarbeit mit dem DAAS. Wieder waren zahlreiche DAAS-Mitglieder auf der EWCPs vertreten.

**26. Anwendertreffen Röntgenfluoreszenz- und Funkenemissionsspektrometrie**

■ Vom 6. bis 7. März fand das Anwendertreffen Röntgenfluoreszenz-

und Funkenemissionsspektrometrie an der Fachhochschule Münster, Außenstelle Steinfurt, statt. Chairman Martin Kreyenschmidt war es wieder gelungen, zahlreiche Firmen für anwendungsnahe Vorträge und eine Industrieausstellung sowie namhafte Wissenschaftler und viele praktische Anwender zu gewinnen. Die Veranstaltung wird seit 2015 als DAAS-Tagung durchgeführt (vorher DASp). Der DAAS-Vorstand war in Steinfurt durch Wolfgang Buscher vertreten, und zahlreiche weitere DAAS-Mitglieder nahmen teil.

**ANAKON**

■ Die ANAKON 2019 fand vom 25. bis 28. März an der Universität Münster statt. Chairmen waren Uwe Karst und Heiko Hayen. Im Rahmen der Konferenz hielt der DAAS traditionell seine Mitgliederversammlung ab, die alle zwei Jahre stattfindet. Weiterhin wurden der von Merck zweijährlich gestiftete DAAS-Preis sowie der jährlich von Perkin Elmer gestiftete Bunsen-Kirchhoff-Preis verliehen.

**CANAS / Anwendertreffen Plasmaspektrometrie / Anwendertreffen GD-Spektrometrie**

■ Das Colloquium Analytische Atom-spektroskopie vom 23. bis 27. September an der TU Bergakademie in Freiberg statt. Chairwoman Carla Vogt vom dortigen Lehrstuhl für Analytische Chemie arbeitete bei den Vorbereitungen der Konferenz eng mit dem DAAS-Vorstand zusammen.

In diesem Jahr fand das CANAS erneut zusammen mit dem Anwendertreffen Plasmaspektrometrie statt, früher eigenständige Veranstaltung an der Universität Hamburg oder der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) in Berlin.

Zusätzlich gelang es, auch das Anwendertreffen Glimmentladungsspektrometrie (GD), alle zwei Jahre vom führenden GD-Experten Volker



Während der DAAS-Mitgliederversammlung stand der Vorstand seinen Mitgliedern Rede und Antwort. Von rechts: Carsten Engelhard (Universität Siegen), Wolfgang Buscher (Universität Münster), Martin Wende (BASF, Ludwigshafen), Kerstin Leopold (Universität Ulm), Ulrich Engel (Merck, Darmstadt), Heike Gleisner (Analytik Jena). (Foto: W. Buscher)

Hoffmann organisiert, mit dem CANAS zusammenzulegen. Das erzielte Synergieeffekte, die für alle Teilveranstaltungen von Vorteil waren. Auch erwartet man dadurch zukünftig eine bessere Zusammenarbeit der verschiedenen Communitys.

Auch in Freiberg nahmen große Teile des DAAS-Vorstands an den Veranstaltungen teil, die nach der BAM-Veranstaltung 2018 noch einmal deutlich an Qualität gewonnen haben. Wissenschaftliche und angewandte Beiträge auf hohem Niveau wurden präsentiert und diskutiert. Um die Teilnahme von Nachwuchsanalytikern zu fördern, vergab der DAAS auch dieses Mal wieder Reise-Stipendien in Form von Reisekostenzuschüssen.

### CSI XLI

■ Vom 9. bis 14. Juni fand in Mexico City das 41. Colloquium Spectroscopicum Internationale statt. Das CSI ist die traditionsreichste internationale Spektroskopikerkonferenz. Die nationale Vertretung Deutschlands stellten der Tradition folgend Mitglieder des DAAS, wobei insbesondere Boris Mizaikoff, Universität Ulm, als German Delegate die deutschen Interessen im Rahmen dieser Konferenzreihe vertrat. Auf Initiative des DAAS-Vorstands gab er eine Interessensbekundung für die Ausrichtung des 44. CSI im Jahr 2025 ab, welche auf positive Resonanz stieß.

Der DAAS-Vorstand wird gemeinsam mit Boris Mizaikoff und weiteren Größen der deutschen analytischen Spektroskopie diese Initiative weiter vorantreiben.

### Mitgliederversammlung

■ Im Rahmen der ANAKON 2019 wurde am 25. März die zweijährliche Mitgliederversammlung des DAAS abgehalten. Auf der Tagesordnung standen Begrüßung, Bericht des Vorstands, Arbeitsschwerpunkte für das laufende Jahr, Verschiedenes. Sämtliche Themen, die während der Mitgliederversammlung diskutiert wurden, sind ebenfalls Gegenstand dieses Jahresberichts.



Den DAAS-Preis überreichten Ulrich Engel (Merck, rechts) und Wolfgang Buscher (Universität Münster) an die Preisträgerin Darya Mozhayewa von der Universität Siegen. (Foto: U. Karst)

### Verleihung des DAAS-Preises

■ Im Rahmen der ANAKON 2019 wurde der von der Firma Merck gestiftete DAAS-Preis an Darya Mozhayewa von der Universität Siegen verliehen. Der Preis zeichnet besonders talentierte, jüngere Wissenschaftler aus und soll für deren weitere berufliche Karriere in der analytischen Spektroskopie hilfreich sein. Der Titel ihrer ausgezeichneten Arbeit lautete: „Separation of Silver Nanoparticles with Different Coatings by Capillary Electrophoresis Coupled to ICP-MS in Single Particle Mode“.

Im Anschluss an die Preisverleihung trug die Preisträgerin im gut gefüllten Hörsaal der Universität Münster die wichtigsten Ergebnisse ihrer prämierten Forschungsarbeiten vor und stieß auf sehr positive Resonanz.

### Laborleiterstammtisch

■ Der DAAS-Vorstand hat eine neue Veranstaltungform entwickelt, um den DAAS sichtbarer zu machen und den Kontakt zu den Anwendern analytisch-spektrometrischer Methoden zu verbessern. Mit einem Laborleiterstammtisch möchte der Vorstand in verschiedenen Regionen Deutschlands kleinere Treffen organisieren, die es den praktischen Anwendern leicht machen, daran teilzunehmen. Am 12. September war Premiere: Es trafen sich ca. 20 Praktiker in Darmstadt und tauschten sich in geselliger Runde aus, wobei der Vorstand bereits einige Einblicke in die industriellen Bedarfe und Wünsche erhielt. 2020 sollen weitere Treffen durchgeführt werden.



Erster Laborleiterstammtisch am 12. September 2019 in Darmstadt (Foto: U. Engel)

## Ausblick auf das Jahr 2020

**27. Anwendertreffen Röntgenfluoreszenz- und Funkenemissions-spektroskopie**

■ Vom 3. bis 4. März 2020 findet in der Fachhochschule Münster, Außenstelle Steinfurt, wieder das traditionelle Anwendertreffen mit begleitender Industrieausstellung statt.

**6. DAAS-Doktorandenseminar**

■ Carsten Engelhard von der Universität Siegen hat angeboten, das DAAS-Doktorandenseminar, das von Doktoranden für Doktoranden organisiert wird, 2020 in Siegen auszurichten. Nach den Veranstaltungen an der ETH Zürich, der Universität Mainz, der Universität Münster, Universität Ulm und dem Helmholtz-Zentrum Geesthacht in den Jahren 2010, 2012, 2014, 2016 und 2018 wird dieses gemeinsame Doktorandenseminar nun zum sechsten Mal stattfinden. Insgesamt werden sich voraussichtlich etwa 20 Doktoranden, 15 Vertreter aus Industrie und Wissenschaft sowie ein professioneller Vortragstrainer an dem Seminar beteiligen. Dieses Verhältnis von Doktoranden zu erfahrenen Analytikern bildet erfahrungsgemäß

eine gute Ausgangsbasis, um sich intensiv auszutauschen und dabei die eigenen Arbeiten in Form von 15-minütigen Präsentationen vorzustellen.

Auch in Siegen werden die Doktoranden in Kleingruppen – betreut von erfahrenen Mentoren – wieder spannende Probleme der analytischen Chemie diskutieren und schließlich in Kurzvorträgen ihre Lösungsansätze präsentieren. Preise für die technisch sowie wissenschaftlich besten Vorträge werden vergeben, und ein geselliges Rahmenprogramm wird wieder für gute Stimmung unter den Teilnehmern sorgen.

**analytica conference 2020**

■ Sie findet vom 31. März bis 2. April in München statt. Der DAAS organisiert wieder eine Session mit dem Titel „Current and Future Challenges in Analytical Spectrometry“. Die Session gliedert sich in drei Teile:

- „Bunsen-Kirchhoff-Award-Session“ (neuer Ansatz zur weiteren Verbesserung der Sichtbarkeit des Bunsen-Kirchhoff-Preises)
- „Nano- and single-particle techniques in analytical spectrometry“
- „Laser and Imaging techniques in analytical spectrometry“

Moderieren und organisieren werden die analytica-Session Kerstin Leopold, Universität Ulm, und Carsten Engelhard, Universität Siegen. Die Planungen sind bereits weit fortgeschritten. Folgende Keynote-Speaker sind angefragt, von denen die meisten auch bereits zugesagt haben:

- Uli Panne, BAM, Berlin
- Jake Shelley, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, NY, USA
- Mario Korte, University of Oviedo, Spanien
- Jörg Feldmann, University of Aberdeen, Schottland
- Jörg Bettmer, University of Oviedo, Spanien
- Uwe Karst, Universität Münster
- Boris Mizaikoff, Universität Ulm
- Johanna Irrgeher, Universität Leoben, Österreich
- Björn Meermann, BfG Koblenz
- Bernhard Spengler, Universität Gießen

**27. ICP-MS Anwendertreffen und Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Massenspektrometrie**

■ Vom 1. bis 4. März 2020 treffen sich die deutschsprachigen Anwender von induktiv gekoppelten Plasma-Massenspektrometern an der Universität Münster. Die Veranstaltung wird zum zweiten Mal mit der DGMS-Tagung zusammengelegt, was Klaus Heumann an der Universität Mainz im Jahr 2006 bereits erfolgreich realisierte. Insgesamt versammeln sich etwa 450 Experten, praktische Anwender sowie Nachwuchsforscher in Münster, um neue instrumentelle Möglichkeiten im Zusammenhang mit der Massenspektrometrie in all ihren Varianten zu diskutieren. Der DAAS unterstützt die Organisatoren bei den Planungen dieser Veranstaltung und zahlreiche DAAS-Mitglieder werden an dieser hochkarätigen Veranstaltung teilnehmen.

**Bunsen-Kirchhoff-Preis 2020**

■ Im Rahmen der analytica conference 2020 wird der zweijährlich ausgeschriebene Preis für bereits ausgewiesene, junge Wissenschaftler verliehen. Diesen Preis stiftete bislang Perkin Elmer mit einem Preisgeld von 3000 Euro.

**Mentoring-Programm**

■ Erinnerung an die Hochschullehrer, sehr gute, fortgeschrittene Doktoranden oder auch Master-Studierende aufzufordern, sich zu bewerben. Weitere Informationen siehe Mitteilungsblatt 01/2018.

**Laborleiterstammtisch**

■ Nach dem erfolgreichen Auftakt im September 2019 sollen 2020 zwei weitere Veranstaltungen dieser Art stattfinden.

*Wolfgang Buscher  
Für den Vorstand des Deutschen Arbeitskreises für Analytische Spektroskopie und  
in Vertretung für den  
Vorstandsvorsitzenden Martin Wende*

Für Neugierige:

## Der GDCh-Newsletter

Nützliche Informationen  
aktuell im 2-Wochen-  
Rhythmus.

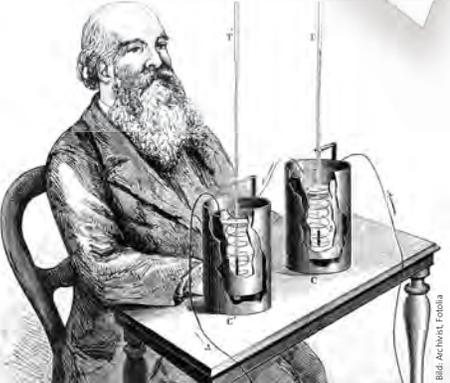


Bild: Archiv, Fotolia

Lesen und bestellen Sie den Newsletter hier:  
[www.gdch.de/newsletter](http://www.gdch.de/newsletter)

## AK ELACH

### Elektrochemische Analysenmethoden

#### Vorstandstreffen

■ Abstimmungen des ELACH-Vorstandes erfolgten im Rahmen des 8. Kurt-Schwabe-Symposiums vom 25. bis 31. Mai.

#### Wissenschaftliche Veranstaltungen

##### ANAKON: Münster, 25.-28. März

■ Eine der vier Vormittagssessions des dritten Konferenztages der ANAKON 2019 war den elektrochemischen Analysenverfahren gewidmet.

Im Eröffnungsbeitrag „Generation of forced convection in the context of scanning electrochemical microscopy“ gab Timo Raith (Regensburg) einen Überblick über Entwicklungen in der elektrochemischen Rastermikroskopie (SECM).

Für die drei nachfolgenden Beiträge stand der Themenkomplex „Kopplung von Elektrochemie-Massenspektrometrie (EC-MS)“ im Mittelpunkt des Programms. Jens Fangmeyer (Münster) sprach über „trapped ion mobility spectrometry (TIMS) as valuable separation tool for electrochemically generated metabolite isomers“. Thomas Herl (Regensburg) stellte elektrochemische Fließzellkonfigurationen und Elektrochemie-Kapillarelektrophorese-Massenspektrometrie-Systeme mit Implementierung von Siebdruckelektroden vor. Abgerundet wurde das Thema der EC-MS-Kopplung durch Lisa Kotthoff (Berlin), die mit der EC-MS die Bildung von Transformationspro-

dukten der veterinärmedizinisch häufig eingesetzten Substanz Monensin untersuchte.

Den abschließenden Vortrag „Polydopamine (PDA)-modified microelectrodes for bio-relevant applications“ hielt Sven Daboss (Ulm), der damit den von Timo Raith im Keynote-Vortrag eröffneten Kreis der ortsaufgelösten Elektrochemie mit miniaturisierten Sensoren schloss.

Die Elektroanalytiksession fand guten Zuspruch und zog phasenweise über 80 Zuhörer in den Hörsaal. Die elektroanalytischen Vortragsbeiträge wurden durch Posterpräsentationen vertieft und erweitert. Erfreulicherweise war im Programm genügend Zeit für Posterdiskussionen vorgesehen, und die Poster wurden während der gesamten Tagungsdauer präsentiert. (Ausführlicher Bericht siehe Mitteilungsblatt 2/2019)

##### 2. Cross-Border Seminar on Electroanalytical Chemistry: Ceské Budejovice/Tschechien, 10. bis 12. April

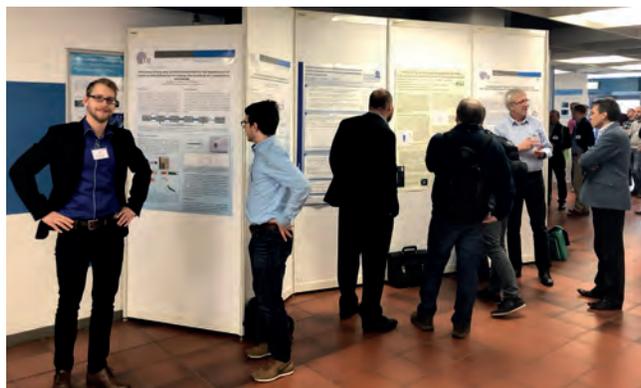
■ Der Arbeitskreis Elektroanalytische Chemie (ELACH) organisierte in Kooperation mit Kollegen der Karls-Universität in Prag im Frühjahr 2019 zum zweiten Mal ein grenzüberschreitendes Doktorandenseminar für Elektroanalytik.

Das erste Cross-Border Seminar on Electroanalytical Chemistry hatte im Frühjahr 2018 in Furth im Wald nahe der deutsch-tschechischen Grenze stattgefunden. Für die zweite Auflage

dieses speziellen Seminarformats fand man mit Ceské Budejovice einen geeigneten Tagungsort auf tschechischer Seite. Für die meisten Teilnehmer ergaben sich zeit- und kostensparende An- und Abreisekonstellationen, die eine effektive Programmgestaltung (zwei Halbtage und ein kompletter Seminartag) ermöglichten. Von den etwa 30 Teilnehmern stellten die tschechischen und deutschen Doktoranden die größten Fraktionen; etwas weitere Anreisewege hatten zwei polnische Teilnehmerinnen auf sich genommen.

Im Mittelpunkt standen 23 Vorträge, die die Grundlage für den wissenschaftlichen Austausch zwischen den in der Elektroanalytik forschenden Doktoranden lieferten. Erfreulicherweise nahmen aus den meisten Arbeitsgruppen auch die wissenschaftlichen Betreuer teil. So kam neben dem erwähnten grenzüberschreitenden Aspekt auch eine angenehme Atmosphäre der integrierenden Grenzüberschreitung über mehrere Generationen der Elektroanalytik hinzu. Weiterhin nahmen einige thematisch verwandte Industrievertreter an der Veranstaltung teil und vermittelten den Doktoranden Einblicke in Firmenstrukturen und mögliche Berufsperspektiven in der Elektrochemie.

Bei den Teilnehmern fand die Veranstaltung sehr positive Resonanz. Herzlicher Dank richtet sich an die Sponsoren der Veranstaltung: Fachgruppe Analytische Chemie, Bayerisch-Tschechische Hochschulagentur (BTHA), Internatio-



Posterdiskussion zur Elektroanalytik auf der ANAKON 2019 (Foto: T. Raith)



Teilnehmer des 2. Cross-Border Seminars on Electroanalytical Chemistry (Foto: S. Skalová)

nal Society of Electrochemistry (ISE) und tschechische Metrohm-Vertretung. Für die Fortführung der Seminarreihe ist für den Zeitraum 15. bis 17. April 2020 ein drittes Cross-Border Seminar on Electroanalytical Chemistry in Furth im Wald ins Auge gefasst.<sup>1)</sup>

### 8. Kurt-Schwabe-Symposium: Split, Kroatien, 27. bis 30. Mai

Der AK ELACH organisierte als Tandemveranstaltung zum 7. RSE-SEE-Symposium das 8. Kurt-Schwabe-Symposium (KSS). Das KSS war der internationalen Forschung in der Elektroanalytik gewidmet. Im Rahmen des KSS gab es einen Plenarvortrag (Ulrich Guth) und zwei Keynote-Vorträge (Jiri Barek und Geza Nagy). Insgesamt waren 12 weitere Vorträge in das Programm integriert. Zudem boten mehrere elektroanalytische Beiträge, die formal dem RSE-SEE zugeordnet waren, Anknüpfungspunkte für Elektroanalytiker. Das bereits am 26. Mai stattfindende Satellitensymposium ermöglichte Doktoranden beider Symposien die aktive Einbindung ins Vortragsprogramm. Der Austausch zwischen den Teilnehmern beider Veranstaltungen war erfrischend. Leider zeigte sich das Wetter in der reizvollen Hafenstadt Split für die Jahreszeit untypisch feucht, was aber einer hohen Präsenz der Teilnehmer während der Vortragsessions zugutekam. Das KSS wurde großzügig von mehreren Industriesponsoren und der Kurt-Schwabe-Stiftung unterstützt.

### Aktivitäten in der Ausbildung in Elektroanalytik

Seit 2017 beteiligt sich der ELACH-Vorstand im Rahmen des Aufbaustudiums Analytik und Spektroskopie in Leipzig mit Vorlesungen zur Elektroanalytik. Diese Aktivität wurde im Jahr 2019 fortgesetzt und im Umfang sogar weiter ausgebaut.

### Vorbereitung von Veranstaltungen im Jahr 2020

- analytica: München, 31.03.2020
- 3. Cross-Border Seminar on Electroanalytical Chemistry: Furth im Wald, 15. bis 17.04.2020

- Electrochemistry: Berlin, 22. bis 24.09.2020

### Mitglieder

Die Mitgliederzahlen des AK ELACH sind stabil (September 2019: 182 Mitglieder; zum Vergleich September 2018: 180 Mitglieder). Das mittlere Alter der Mitglieder liegt gegenwärtig bei 43 Jahren.

### Herzlichen Glückwunsch den Jubilaren des AK ELACH im Kalenderjahr 2019

- 80. Geburtstag: Jürgen Heinze
- 60. Geburtstag: Michael Krausa, Andreas Neudeck

*Frank-Michael Matysik*

*Vorsitzender AK ELACH*

### Literatur

- 1) [http://www-analytik.chemie.uni-regensburg.de/CBSEC/index\\_elach.htm](http://www-analytik.chemie.uni-regensburg.de/CBSEC/index_elach.htm)

## Industrieforum Analytik

Wie üblich begann das Jahr für das Industrieforum mit der Planung der Frühjahrsschule. 2019 gewannen wir als Gastgeber Martin Jäger und Jürgen Schram von der Hochschule Niederrhein in Krefeld. Der Event fand dort vom 11. bis 22. März statt. 31 Studierende von den Unis und Hochschulen Niederrhein, Duisburg-Essen, Leipzig, Aalen, Köln, Münster, Tübingen, Regensburg und München kamen nach Krefeld, um sich in einem bunten Programm aus Fachvorträgen, Vorträgen über soziale Kompetenzen und Bewerbungstipps, aus Exkursionen und Abendveranstaltungen über das Berufsbild eines Analytikers in der chemisch-pharmazeutischen Industrie oder bei Geräteherstellern zu informieren. Wie üblich rekrutierten sich die Referenten aus dem Kreis der deutschsprachigen chemischen Industrie, was einen Einblick in die berufliche Praxis sicherstellt.

Die Exkursionen führten die Studierenden zu den Firmen Currenta und Shimadzu, also auch hier gab es einen Mix zwischen Analytik in der chemischen Industrie und einem Gerätehersteller.

Im Anschluss an die Veranstaltung vermittelt das Industrieforum stets allen erfolgreichen Studierenden, die das möchten, einen Praktikumsplatz in einem der Unternehmen des Industrieforums (plus Lonza, die auch einen Referenten stellen). Die Praktika sind ein Gewinn für beide Seiten: Die Studierenden bekommen einen Einblick in die Arbeitswelt aus erster Hand, und die Unternehmen können sich die Absolventen von übermorgen schon einmal ansehen und Kontakte aufbauen. 2019 vermittelten wir die Rekordzahl von 22 Praktikumsplätzen und boten allen Interessierten einen Platz an.

Das Programm der Frühjahrsschule 2019 organisierte ein Begründer der Veranstaltung: Klaus-Peter Jäckel. Er bat darum, sich aus der Organisation verabschieden zu dürfen. Wir haben Herrn Jäckel für sein außerordentliches Engagement auf dem Wissenschaftsforum in Aachen im September geehrt und ihm so gedankt. Ohne ihn gäbe es die Veranstaltung nicht, die sich inzwischen zu einem festen Programmpunkt im Curriculum der deutschen Hochschulen etabliert hat.

Unser jährliches Treffen fand in diesem Jahr wieder in der GDCh in Frankfurt am Main statt. Am 30. September sprachen wir über die nebenberufliche Ausbildung zum Bachelor und/oder Master und legten fest, eine Benchmarking-Studie bei interessierten Unternehmen starten zu wollen.

Der vor fünf Jahren initiierte Gesprächskreis „GMP“ des Industrieforums traf sich 2019 zweimal und tauschte sich über Erfahrungen in den Punkten Quality Management, ISO 9001 und GMP aus.

Nach fünf Jahren als Sprecher des Industrieforums wird Michael Arlt (Merck) diese Funktion an Joachim Richert (BASF) weitergeben. Die Mitglieder des Industrieforums wählten Joachim Richert einstimmig zum Sprecher.

Die Organisation der Frühjahrsschule übernimmt künftig Eva-Maria Frühauf (Dow Chemicals). Die Organisation des Programms in der Frühjahrsschule übernimmt Michael Arlt.

*Michael Arlt*

## AK Prozessanalytik (PAT)



■ Mit mittlerweile 365 Mitgliedern (im November 2019) hat der Arbeitskreis dieses Jahr den demografischen Auswirkungen Stand gehalten und verzeichnete weiterhin einen Zuwachs. Besonders erfreulich ist dabei der vergleichsweise hohe Anteil an Junganalytikern. Studenten, Auszubildende und Doktoranden mit Interesse an der Prozessanalytik zeigen rege Teilnahme an Events und weiteren Aktivitäten des Arbeitskreises. Dies ermöglicht den wichtigen Wissenstransfer in die nächste Generation der Prozessanalytiker und bietet dieser einen vereinfachten Zugang zur Branche. Mit Tobias Eifert haben wir einen sehr aktiven Junganalytiker im Vorstand etabliert.

Nach langjähriger Mitgliedschaft und reger Aktivität haben sich Bernd Hitzmann und Joachim Mannhardt aus dem erweiterten Vorstand verabschiedet. Wir danken herzlichst für ihr Engagement und wünschen ihnen für ihre Zukunft alles Gute. Neu im erweiterten Vorstand begrüßen wir Andrea Reinhardt (Siemens) aus den Reihen der Hersteller und Vinzenz Abt (Ing.-Büro Vinzenz Abt) als weiteren Vertreter der Junganalytiker.

### Eigene Veranstaltungen

#### Doktorandenseminar

■ Vom 18. bis 20. März fand das 13. interdisziplinäre Doktorandenseminar mit dem Leitthema „PAT and beyond“ in Berlin-Adlershof an der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) statt. Die Veranstaltung organisierten die Arbeitskreise Prozessanalytik, Chemo- und Biosensoren, Chemometrik und Qualitätsmanagement sowie Elektrochemische Analysemethoden. Circa 30 Doktoranden aus ganz Deutschland reisten nach Berlin, um sich über Ergebnisse auszutauschen.

Zum Auftakt hielt Alan Robinson, Principal Process Science Leader bei Syngenta in Basel, den Impulsvortrag „PAT @ Syngenta“. Im Anschluss leiteten Tobias Eifert (Covestro) und Alexander Brächer (Evonik) ein Krea-

tivseminar zu Change Management. Während des Abendessens in den Tagungsräumen führten die Teilnehmer ihre Diskussionen und ihren Austausch fort.

Am zweiten Tag standen Vorträge, eine Poster-Session und ein gemeinschaftliches Abend-Event auf dem Programm. Die Vorträge stammten aus den verschiedensten Disziplinen der PAT. Die Ergebnisse wurden generiert mit NMR, PDW-Spektroskopie, Hyperspectral Imaging, Kombisensorik, Röntgenfluoreszenzsensorik oder

Raman-Spektroskopie. Im Rahmen des Abendprogramms war zunächst zu einem Exit Game im DDR-Bunker eingeladen. Anschließend wurde zu Abend gegessen.

Am dritten Tag folgten weitere Vorträge zu Raman-Spektroskopie und Benchtop-NMR. Gastvorträge rundeten das Ganze ab: Hans Peter Nirmaier (Lonza) sprach zu „Pat @ Lonza – vom Labor in die Anlage“ und Franziska Emmerling (BAM) zu „How to write your Thesis“. Abschließend verkündete Florian



Treffen des erweiterten Vorstands des Arbeitskreises Prozessanalytik. Von links: Werner Worrigen (Yokogawa), Karsten Rebner (HS Reutlingen), Armin Lambrecht (Fraunhofer IPM), Christoph Herwig (TU Wien), Dirk Steinmüller (Knick), Johanna Rühl (Innospec), Andrea Reinhardt (Siemens), Monika Heisterkamp (Endress + Hauser), Simon Kern (S-PACT), Vinzenz Abt (Ing. Büro Abt), Martin Gerlach (Bayer), Jens Nolte (tec5), Joachim Mannhardt (Endress + Hauser). Abwesend waren: Kristina Eisen (Daichi Sankyo), Martin Hajduk (MJH Consulting), Elke Hilscher (KWS Saat), Hanns Simon Eckhardt (tec5), Michael Maiwald (BAM), Florian Aupert (Bayer), Tobias Eifert (Covestro). (Foto: K. Rebner)



Teilnehmer beim 13. Interdisziplinären Doktorandenseminar (Foto: M. Maiwald, S. Kern)



Preisträger beim Doktorandenseminar. Von links: Simon Kern (Organisator), Luise F. Bering (Posterpreis), Katharina Dahlmann (Vortragspreis), Jana Schellenberg (Vortragspreis), Sabrina Janoschek (Vortragspreis), Thomas Schiewe (Vortragspreis), Björn Gutschmann (Vortragspreis), Anne Friebel (Vortragspreis), Florian Aupert (Organisator) (Foto: M. Maiwald, S. Kern)

Aupert die Gewinner der Preise für das beste Poster und die besten drei Vorträge. Luise F. Bering (RWTH Aachen) gewann mit ihrem Poster „Measurement cells for in-line Raman spectroscopy in continuous flow reactors“ den Posterpreis. Katharina Dahlmann, Jana Schellenberg (beide Leibniz-Universität Hannover) und Sabrina Janoschek (Sartorius Stedim Biotech, Leibniz-Universität Hannover) bekamen gleich viele Stimmen und teilten sich den dritten Vortragspreis. Anne Friebels Vortrag (Universität Kaiserslautern) wurde zum zweitbesten Vortrag gekürt. Der diesjährige Preis für den besten Vortrag ging an Thomas Schiewe (Universität Potsdam) und Björn Gutschmann (FG Bioverfahrenstechnik, Technische Universität Berlin) für ihren Tandem-Vortrag „E. coli, R. eutropha and Photon Density Waves“.

### Herbstkolloquium Prozessanalytik

■ Vor 15 Jahren wurde der Arbeitskreis Prozessanalytik als Forum für Anwender, Hersteller und Akademia gegründet. Bereits im Vorfeld zum alljährlichen Kolloquium berichtete (mit etwas Stolz) ein Artikel von der Entwicklung des Arbeitskreises. Die Ausrichtung des Jubiläumskolloquiums lag gemäß Rotationsprinzips bei einem Anwender. So verbrachte man dieses Jahr die Tage

im Feierabendhaus der Evonik nahe des geschichtsträchtigen Chemieparks Marl. Unter „PAT in der industriellen Anwendung – Innovative Prozessanalytik als zentrales Element im Produktlebenszyklus“ fanden sich vom 25. bis zum 27. November etwa 160 Teilnehmern zusammen. Wir danken der Dechema und insbesondere Silke Rumpf für die perfekte Organisation.

Am Montagnachmittag startete die Opening Session. Nach einleitenden Worten teilten sich die Gäste in zwei Gruppen: Die eine Gruppe besichtigte die Acrylsäureanlage, während sich die andere Gruppe im Format eines World-Cafés bei moderierten Diskussionen zu aktuellen Themen austauschte. Nach diesem Kennenlernen klang der erste Abend beim Essen aus.

Verteilt über den Dienstag und Mittwoch fanden die im Fokus stehenden Fachvorträge statt. Über den Lebenszyklus hinweg lauteten die Fragen der vier Vortragsessions „Wozu messen wir?“, „Wie messen wir richtig?“, „Wie messen wir dauerhaft richtig?“ und „Wie messen wir in Zukunft?“

Ein weiteres Highlight waren Posterausstellung und Poster-Slam: Jungforscher stellten ihre Poster zu wissenschaftlichen Arbeiten in kürzester Zeit und hintereinander weg auf dem Podium vor. Im Anschluss



Verleihung des Prozessanalytik-Preises 2019: Tobias Eifert, Martin Gluch, Christoph Herwig (v.l.) (Foto: V. Abt)

diskutierte man diese mit den Vortragenden. Am Veranstaltungsende fand die Verleihung der Posterpreise statt. Auch die Anwendung kam nicht zu kurz: Eine Ausstellung der Hersteller von Prozessanalysetechnik begleitete die Veranstaltung.

Der feierliche Gesellschaftsabend fand in historischer Kulisse der alten Zeche Ewald statt. Dort stärkten die Teilnehmer bis spät in den Abend ihr Netzwerk und philosophierten über die nächsten 15 Jahre des AK PAT.

### Prozessanalytik-Preis

■ Der Prozessanalytik-Preis des Arbeitskreises wird regelmäßig für die beste Qualifizierungsarbeit in der Prozessanalytik im zurückliegenden Jahr vergeben. Die Verleihung erfolgte im Rahmen des Jubiläumskolloquiums am Gesellschafterabend. Preisträger 2019 war Martin Gluch (Covestro), ausgezeichnet für seine hervorragende Masterarbeit zur Automatisierung mit Potenzial zur Mensch-Maschine-Zusammenarbeit. Neben der Urkunde erhält der Gewinner ein Preisgeld in Höhe von 1000 Euro sowie eine zweijährige kostenfreie Mitgliedschaft in der GDCh oder der Dechema.

### Externe Veranstaltungen

■ Hervorzuheben ist der Schulter-schluss mit der ProcessNet-Fachgemeinschaft „Prozess-, Apparate- und

Anlagentechnik" (PAAT). Als Vorsitzender des AK PAT hielt Christoph Herwig (TU Wien) auf dem Jahrestreffen der PAAT vom 4. bis 5. November in Dortmund einen Plenarvortrag. Mit „Workflows und Nutzen von Digitalen Zwillingen“ stellte Christoph Herwig nicht nur den Prozessanalyseteil des AK PAT vor, sondern auch den wichtigen interdisziplinären Austausch. Kai Dadhe (Evonik Technology & Infrastructure) re-vanchierte sich im Namen der PAAT auf dem Herbstkolloquium des AK PAT in Marl. Als Vorsitzender der PAAT berichtete er über „die Relevanz der PAT im Kontext einer ganzheitlichen Digitalisierung verfahrenstechnischer Anlagen“ und präsentierte die PAT als Fundament, um im Kontext der Digitalisierung und Automatisierung den Kreis schließen zu können.

#### Ad-hoc-Arbeitskreise

■ Die derzeitigen Ad-hoc-Arbeitskreise wollen die Einsatzmöglichkeiten von Prozessmodellen und Digitalen Zwillingen – beides wichtige Bausteine der Prozessanalytik bzw. Prozessanalyse – beleuchten und durch Publikationen unsere Meinung als Themenführer verbreiten. Wir platzierten erfolgreich eine Publikation zu der modellgestützten Experimentalplanung in einem hocheingestuften wissenschaftlichen Journal.

Ebenso arbeiten wir derzeit an zwei hochrelevanten Themen, an denen Sie sich jederzeit gerne beteiligen können:

#### 1) Prozesskontrollstrategien mit Digitalen Zwillingen

Die robuste Prozessführung an einem optimalen Betriebspunkt oder einer maximalen Raum-Zeit-Ausbeute ist ein wesentlicher Bestandteil, um Produktstabilität zu sichern und nicht zuletzt um wirtschaftlich konkurrenzfähig zu bleiben. Digitale Zwillinge sind eine vereinfachte Repräsentation des abzubildenden Prozesses, mit der Möglichkeit, im Echtzeit-Abgleich mit dem Prozess Voraussagen über Prozessereignisse zu treffen und den Prozess auf einer Zielfunktion zu kontrollieren. Die Potenziale liegen auf der Hand, aber es bleiben viele Fragen offen:

- Wie erzeugt man effizient Digitale Zwillinge für die Prozessindustrie?
- Wie werden diese in die Echtzeitumgebung implementiert?
- Welche PAT-Messungen, in welcher Präzision und Frequenz sind wirklich nötig?
- Wie wähle ich die richtige Beobachter- und Kontrollstrategie aus?
- Wie erkenne ich, ob der digitale Zwilling noch valide ist? Wie passe ich den Zwilling an den Lebenszyklus an?

#### 2) Rolle von KI in PAT bzw. Rolle von PAT in KI

Künstliche Intelligenz (KI) ist in aller Munde. Der Auftrag des Arbeitskreises Prozessanalytik ist es, solche Trends in das Umfeld der Prozessanalytik einzusortieren. Daher stellen sich zum Beispiel folgende Fragen:

- Wie ist KI verflochten mit prozessanalytischer Technologie (PAT)?
- Wer nutzt es bereits und in welcher Weise?
- Welchen Mehrwert schaffen solche Ansätze heute bereits für Unternehmen?
- Welche Lösungen werden erfolgreich genutzt?
- Welche Voraussetzungen sind für einen erfolgreichen Einsatz maßgeblich?
- Trägt PAT die möglichen Anwendungen von KI in die Unternehmen der Prozessindustrie?
- Welche Probleme mit dem Einsatz von KI in PAT werden erwartet? Wer löst diese?
- Gibt es eine Digital- bzw. Datenstrategie?
- Wann wird es/soll es eingesetzt werden?
- Wer entscheidet in Ihrem Unternehmen über KI?

Die Rolle von PAT vor dem Hintergrund einer sich beschleunigenden Entwicklung von KI-Systemen ist von höchster Relevanz.

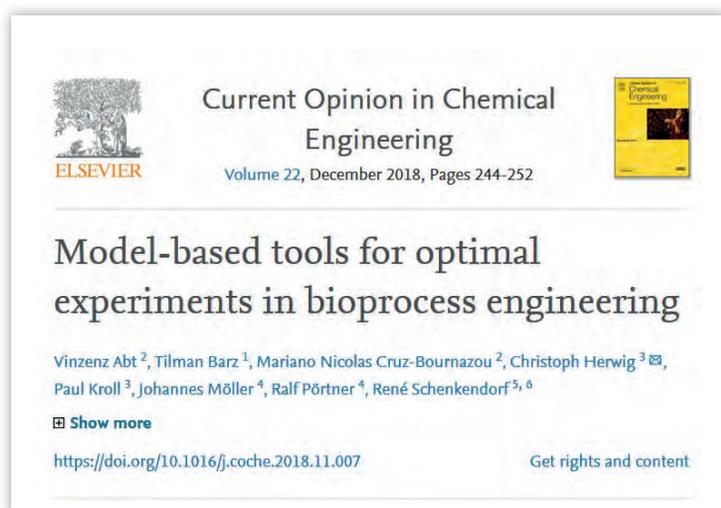
Wenn Sie Interesse haben, in unserer Arbeitsgruppe mitzuwirken, wenden Sie sich an:

Christoph Herwig, E-Mail: christoph.herwig@tuwien.ac.at

#### Ausblick auf das Jahr 2020

■ Die Europact in Kopenhagen ist bereits fixiert für den 18. bis 20.05.2020. Für diese Veranstaltung haben wir 2019 eine Topical Collection zu „Process Analytics and Control Technology“ für die Zeitschrift *Analytical Bioanalytical Chemistry (ABC)* erstellt; sie erscheint im ersten Quartal 2020.

Vinzenz Abt,  
Tobias Eifert  
und Christoph Herwig



Ad-hoc-Arbeitskreis-Resultat zu modellgestützter Experimentalplanung in Current Opinion in Chemical Engineering (doi: 10.1016/j.coche.2018.11.007)

## AK Separation Science

### Sitzung des erweiterten Vorstands

Die Sitzung des erweiterten Vorstands fand anlässlich des 29. Doktorandenseminars am Sonntag, dem 06. Januar im Hessen Hotelpark Hohenroda statt. Teilnehmer waren vom gewählten und erweiterten Vorstand: Carolin Huhn, Michael Lämmerhofer, Frank Steiner, Martin Vogel, Oliver J. Schmitz, Detlev Belder, Uwe Karst und Torsten C. Schmidt.

### Mitgliederversammlung

Die Mitgliederversammlung des Arbeitskreises Separation Science fand im Rahmen der ANAKON 2019 am 25. März um 17 Uhr statt. Während der Mitgliederversammlung wurde insbesondere für die anstehenden Neuwahlen des Arbeitskreisvorstandes für die Amtsperiode 2020 bis 2023 geworben. Die Anwesenden waren sich mehrheitlich einig, dass die Wahl – analog zur Wahl zum GDCh-Vorstand – als Online-Wahl durchgeführt werden soll. Eine Möglichkeit zur Briefwahl soll in jedem Fall bestehen bleiben.

### Tagungen 2019

#### Doktorandenseminar Hohenroda

Das 29. Doktorandenseminar des AK Separation Science wurde im Jahr 2019 zum vierten Mal von der Arbeitsgruppe von Oliver J. Schmitz ausgerichtet. Die Teilnehmerzahl lag bei über 150, sodass die Veranstaltung aufgrund des guten Besuchs wieder in der Hessenhalle stattfand. Die 26 Vortragenden Doktorandinnen und Doktoranden erhielten jeweils ein Reisestipendium in Höhe von 350 Euro vom Arbeitskreis Separation Science. Der Vorstand dankt Kristina Rentmeister, Timo Köhler und Oliver J. Schmitz herzlich für ihr großes Engagement vor und während des Doktorandenseminars. Die Durchführung der Doktorandenseminare in dieser Form war wie in jedem Jahr nur durch das unermüdliche Einwerben von Sponsorengeldern durch die Organisatoren und durch die Unterstützung der Fachgruppe Analytische



Chemie möglich. Ein besonderer Dank gilt auch allen Sponsoren, die das Seminar so tatkräftig unterstützen.

2019 fanden zum dritten Mal zwei Tutorials während des Seminars statt: eines zu „Messung von Analyten in Gasströmen mittels LC-MS durch weiche Ionisierung“, gehalten von Manuel Stephan (Axel Semrau) am Sonntag und eines zu „Demystifying 2-Dimensional Liquid Chromatography (2D-LC)“, gehalten von Stephan Buckenmeier (Agilent Technologies) am Montagmorgen. Der mit 1000 Euro dotierte Ernst-Bayer-Preis 2018 wurde am Montag, dem 07.01. an Ulrich Woiwode (Universität Tübingen) vergeben, für seine Publikation „Imaging Peptide and Protein Chirality via Amino Acid Analysis by Chiral x Chiral Two-Dimensional Correlation Liquid Chromatography“.<sup>1)</sup> Den Inhalt stellte Woiwode den Teilnehmern während seines Preisträgervortrags vor.

Traditionell werden zum Schluss des Seminars die drei besten Doktorandenvorträge gewählt. Die Preisträger des Jahres 2019 waren:

- Platz 1: Ansgar T. Kirk, Leibniz Universität Hannover (Arbeitskreis Zimmermann) mit „Ionenchemie in einem Hochenergie-Ionenmobilitätsspektrometer (HiKE-IMS)“
- Platz 2: Mirjam Skadell, Universität Leipzig (Arbeitskreis Belder) mit „Elektromigrative Trenntechniken in chipbasierten Plattformen mit oberflächenverstärkter Raman-Detektion“
- Platz 3: Tilo D. Schachel, Universität Münster (Arbeitskreis Karst) mit „Detektion und Identifikation von kommerziellen und selbst syn-

thetisierten Sprengstoffen mittels HPLC-MS“.

Die Preisträger freuten sich über Sach- und Einkaufsgutscheine der Sponsoren BGB Analytik, Restek und *Analytical & Bioanalytical Chemistry*/Springer-Verlag sowie über die Förderung eines Konferenzbesuchs durch den Arbeitskreis Separation Science.

Im Jahr 2020 wird die Arbeitsgruppe von Oliver J. Schmitz (Universität Duisburg-Essen) zum fünften Mal die Organisation des Doktorandenseminars übernehmen. Es wird vom 11. bis 14. Januar wieder in Hohenroda stattfinden und aufgrund des 30. Jubiläums um einen Tag mit einer Sonderveranstaltung verlängert. Zum Organisationsteam gehören neben Oliver Schmitz auch Yildiz Danisan und Martin Meyer. Ab 2021 wird die Arbeitsgruppe von Heiko Hayen an der Universität Münster die Organisation übernehmen.

### CE-Forum 2019

Am 11. und 12. Dezember fand das CE-Forum auf dem Agilent Technologies Campus in Waldbronn unter dem Vorsitz von Jens Meixner statt (siehe Seite 32). Mehr als 30 Teilnehmer waren zu diesem Treffen zusammengekommen, das elf Vorträge, acht Poster und einen intensiven Austausch bot. Der Arbeitskreis Separation Science unterstützte die Veranstaltung mit Reisekostenzuschüssen für Nachwuchswissenschaftler. Der besondere Dank des Arbeitskreises geht an Agilent Technologies für die Gastfreundschaft und die Möglichkeit, das CE-Forum auf dem Campus in Waldbronn durchzuführen.

### Preise 2019

#### Ernst-Bayer-Preise 2018 & 2019

Den Ernst-Bayer-Preis 2018 erhielt Ulrich Woiwode (Universität Tübingen, AK Lämmerhofer) beim Doktorandenseminar in Hohenroda im Januar 2019. Der Vorstand hatte sich dafür ausgesprochen, den Ernst-Bayer-Preis auch im Jahr 2019 zu ver-

leihen. Im Auswahlkomitee sind: Detlev Belder, Katja Dettmer-Wilde, Werner Engewald, Helene Faber, Heiko Hayen, Christian Huber, Carolin Huhn, Michael Lämmerhofer, Stefan Lamotte, Christian Neustüß, Torsten C. Schmidt, Martin Vogel, Frank Steiner, Oliver Schmitz und, für die Koordination, Uwe Karst. Die Einreichungsfrist endete am 10. November. Den Ernst-Bayer-Preis 2019 erhält Bernhard Durner (vormals Universität Regensburg, Arbeitskreis Matysik, jetzt: Wacker Chemie, München) für seine Publikation „High-resolution high performance liquid chromatography: Application of a saw tooth gradient for the separation of various polymers“.<sup>2)</sup> Der Preis wird im Rahmen des Doktorandenseminars in Hohenroda im Januar 2020 verliehen.

#### Gerhard-Hesse-Preis

■ In Würdigung des Lebenswerks von Gerhard Hesse, Gründungsvorsitzender des damaligen Arbeitskreises Chromatographie, verlieh der Arbeitskreis Separation Science den Gerhard-Hesse-Preis 2019 im Rahmen der ANAKON an Stefan Lamotte. Er nahm die mit 3000 Euro dotierte Auszeichnung am 27. März vom Vorsitzenden des Arbeitskreises Separation Science in Anerkennung seiner herausragenden wissenschaftlichen Leistungen in der Entwicklung und Anwendung flüssigchromatographischer Methoden und neuer stationärer Phasen entgegen. Während seines Preisträgervortrags „Generische HPLC-Methoden – Nur ein Traum?“ vermittelte Stefan Lamotte den Teilnehmern der ANAKON die Faszination für die Möglichkeiten der HPLC.

#### Stipendien 2019

- Im Jahr 2019 wurden vergeben:
  - 88 Stipendien und Reisekostenzuschüsse für das 29. Doktorandenseminar des AK Separation Science in Hohenroda
  - 10 Stipendien à 500 Euro für die HPLC 2019 in Mailand
  - 8 Reisekostenzuschüsse für das CE-Forum 2019 in Waldbronn

#### Mitglieder

■ Die Mitgliederzahl des Arbeitskreises ist relativ konstant geblieben und lag am 02. Januar 2020 bei 703 (01.01.2018: 695).

#### Neuwahlen zum Vorstand für die Amtsperiode 2020 bis 2023

■ Am 31.12.2019 endete die Amtsperiode des Vorstands des Arbeitskreises Separation Science. Martin Vogel (Westfälische Wilhelms-Universität Münster) hatte seine Zustimmung für eine erneute Kandidatur gegeben. Helene Faber (Currenta) und Oliver Schmitz (Universität Duisburg-Essen) standen nicht mehr zur Verfügung. Als weitere Kandidaten wurden seitens des Vorstands vorgeschlagen: Katja Dettmer-Wilde (Universität Regensburg), Michael Lämmerhofer (Eberhard Karls Universität Tübingen), Stefan Lamotte (BASF, Ludwigshafen) und Matthias Pursch (Dow Deutschland Anlagengesellschaft). Weitere Nominierungen erfolgten nicht.

Im Zeitraum vom 13.11. bis zum 10.12. fand die Vorstandswahl als Online-Wahl statt. Von 728 Wahlberechtigten machten 156 Wahlberechtigte von ihrem Wahlrecht Gebrauch (Wahlbeteiligung: 21,4%). 143 Stimmen wurden online abgegeben, 13 Stimmen per Briefwahl, eine Stimme war ungültig.

Das Ergebnis lautet:

- Martin Vogel – 126 Stimmen
- Stefan Lamotte – 99 Stimmen
- Katja Dettmer – 84 Stimmen
- Michael Lämmerhofer – 76 Stimmen
- Matthias Pursch – 43 Stimmen

Der neue Vorstand des Arbeitskreises, der sich im Rahmen des 30. Doktorandenseminars in Hohenroda konstituieren wird, setzt sich damit zusammen aus den drei Erstplatzierten: Katja Dettmer-Wilde, Stefan Lamotte und Martin Vogel.

*Martin Vogel, Münster  
für den Arbeitskreis Separation Science*

#### Literatur

- 1) *Anal. Chem.* 2018, 90, 7963–7971.
- 2) *J. Chromatogr. A* 2019, 1587, 88–100.

GDCh

GESELLSCHAFT  
DEUTSCHER CHEMIKER

## Inhouse- Kurse



**Profitieren Sie von unserem langjährigen Know-how!**

#### Ihre Vorteile:

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

Tel.: +49 69 7917-364

E-Mail: fb@gdch.de

[www.gdch.de/inhouse](http://www.gdch.de/inhouse)

## Analytik in Deutschland

### Analytik bei Merck: So wird ein 350 Jahre alter Qualitätsgedanke gelebt

„Ich garantiere Ihnen stets die Reinheit meiner Präparate und übernehme jeden Nachteil der Ihnen aus einem verunreinigten Präparat entstehen sollte, ...“ Mit diesem Reinheitsversprechen hat Heinrich Emanuel Merck bereits 1851 die Bedeutung der Analytik bei Merck deutlich gemacht. Die Analytik ist heute wichtiger denn je, um Funktion und Qualität der Produkte sicherzustellen.

Merck unterscheidet zwischen der Freigabeanalytik, also dem Testen auf die Werte in der Spezifikation, einerseits und der Forschungs- und Entwicklungsanalytik (F&E) sowie der Sonderprobenanalytik (Trouble Shooting) andererseits. Während die Freigabeanalytik in den Geschäftsbereichen Healthcare, Performance Materials und Life Science organisiert ist, gibt es für die F&E-Analytik und das Trouble Shooting eine zentrale Einheit namens Analytical Services mit etwa 240 Mitarbeitern. Diese Einheit betreibt Labore, die zumeist primär einen Geschäftssektor und sogar spezifische F&E-Einheiten im Blick haben können. Häufig arbeiten dedizierte Abteilungen und Labore aber auch geschäftsbereichsübergreifend zusammen. Diese Kooperationen stiften Mehrwert, weil so ein Geschäftsbereich selten benötigte Methoden vorhalten kann, die ein anderer Bereich häufiger benötigt.

#### Analytical Services

Was bedeutet das für die Mitarbeiter der Analytical Services? In erster Linie, dass sie einen sehr breiten Überblick über analytische Methoden haben müssen: über solche, die die Einheit selbst anbietet, und über solche, die über ein Netzwerk externer Kooperationspartner zugänglich sind. Ziel ist es, ein Problem mit den geeignetsten Methoden zu lösen – und das können auch diejenigen sein, die das Nachbarlabor betreibt. Selbstverständlich gehört dazu, dass man sich in seinem eigenen Methodenarsenal



Analytiker arbeiten bei Merck in der Qualitätskontrolle, in Forschung und Entwicklung und im Trouble Shooting. (Fotos: Merck)

exzellent auskennt. Während eine Freigabeanalytik durch einen „Fit-for-Purpose“-Ansatz gekennzeichnet ist, geht es bei den Analytical Services darum, die Grenzen der Aussagefähigkeit aller Methoden genau zu kennen und ständig auszuweiten. Ein signifikantes Weiterbildungsbudget stellt dieses hohe Niveau dauerhaft sicher. Um es internen Auftraggebern leicht zu machen, verfolgt die Zusammenarbeit einen „One-Stop-Shop“-Ansatz: Es gibt stets einen Verantwortlichen in Analytical Services, der mit den Auftraggebern kommuniziert und alle Aktivitäten koordiniert. Dass die Auftraggeber von allen Merck-Standorten weltweit kommen, macht die Aufgabe noch vielfältiger und interessanter.

Die Forschung im Bereich Performance Materials bei Merck befasst sich unter anderem mit Hightech-Chemikalien für moderne Displaymaterialien wie Flüssigkristalle und OLEDs (Organic Light Emitting Diodes), mit Effektpigmenten, beispielsweise für Autolacke, und mit Elektronikmaterialien für die Halbleitertechnologie. Forschungsbegleitende Analytik wird dann essenziell, wenn beispielsweise bei einem Merck-Kunden eine Funktionsstörung an einem Flüssigkristall-Display (LCD) auftritt. Das vollständige Display erreicht Analytical

Services; dort wird die auffällige Displaystelle, die zum Beispiel zu einer Verblässung oder Verfärbung des Bildschirms führt, ausgeschnitten. In laborübergreifender Zusammenarbeit wird der betroffene Ausschnitt detailliert mit Elementanalytik, Oberflächenanalytik und chromatographischen Methoden analysiert. Das vermeidet in Zukunft nicht nur Fehlerquellen in der Displayproduktion beim Kunden, sondern kann auch weitere Forschung auf Grundlage der Ergebnisse aufbauen.

Im Bereich Life Science bietet Merck Produkte an, die jeden Schritt der Produktionskette für Pharmaprodukte und Biopharmazeutika abdecken, darunter Artikel zur Forschung in der Molekularbiologie, Reagenzien für die Analytik, Probenvorbereitung, Mikrobiologie, Reagenzien, Chemikalien, Reinstwasser für Labore, aber auch Equipment für biopharmazeutische Produktionsanlagen. Zu den letztgenannten Produkten zählen zum Beispiel Single-Use-Komponenten wie Filter, Verbindungsstücke und Bags (Beutel) für die Zellkultur oder die Lagerung des biopharmazeutischen Produkts beim Kunden. Im Interesse der Prozesskontrolle und Patientensicherheit muss der Hersteller des biopharmazeutischen Produkts sicherstellen, dass keine unkontrol-

lierten Verunreinigungen in das Produkt eingebracht werden, die die Qualität oder Wirksamkeit negativ beeinflussen. Bei den polymerbasierten Single-Use-Komponenten können das so genannte Extractables sein, Substanzen, die aus Materialien durch Flüssigextraktion heraustreten können.

Merck unterstützt die Kunden mit einer umfangreichen Dokumentation, unter anderem von Extractables-Profilen. Diese Dokumentation dient der Information und unterstützt die Risikoanalyse beim Kunden sowie seine Produktregistrierung.

Analytical Services arbeitet mit daran, jedes Produkt für unterschiedliche Worst-Case-Fälle zu untersuchen. Durch laborübergreifende Zusammenarbeit mit elementanalytischen, nasschemischen und chromatographischen Methoden entstehen Extractables-Profile für eine breite Produktpalette.

Healthcare-Produkte von Merck umfassen verschreibungspflichtige Arzneimittel, klassisch chemisch oder biotechnologisch hergestellt. Dieser Bereich bedarf einer Analytik, die einen besonders hohen Sicherheits- und Qualitätsstandard erfüllt, im Sinne der Good Manufacturing Practice. Eine enge Zusammenarbeit zwischen Analytical Services und der pharmazeutischen Forschung findet dabei nicht nur in der Wirkstoffentwicklung statt, sondern auch in Bioanalytik, Biomarkeranalytik, Präformulierung und Formulierungsunterstützung. Um feste Pharmazeutika zu entwickeln, ist die richtige Feststoffform des Produkts ein zentraler Punkt. Hierfür unterstützt die Analytik die Auswahl der Formulierung durch Salz-, Cokristall- und Polymorphscreenings, arbeitet an der Optimierung der Kristallisation mit und untersucht die Eigenschaften jeder Produktstufe mit feststoffanalytischen Methoden.

Mit der Sonderprobenanalytik bietet Merck eine zeitnahe Aufklärung und Ursachenforschung unbekannter Partikel oder Verunreinigungen in Merck-Produkten. Partikel in Pharmazeutika beispielsweise müssen schnell identifiziert werden. Das ge-

schieht nach Isolierung der Partikel vor allem mit mikroskopischen und oberflächenanalytischen Techniken. Um die Ursachen zu klären, wird zusätzlich analysiert, welches die Quelle der Verunreinigung war. Stammen die Partikel aus dem Verpackungsmaterial? Handelt es sich um Abrieb während der Produktion? All das untersuchen qualifizierte Mitarbeiter dieses Bereiches und tragen so zu einer schnellen und nachhaltigen Lösungsfindung bei.

Analytical Services begleitet den gesamten Lebenszyklus eines Produkts von der Forschung über die Entwicklung bis hin zur Kundenbetreuung nach dem Verkauf. Durch diese zentrale Einheit stehen dem Kunden nachträgliche Dienstleistungen zur Verfügung.

#### Freigabeanalytik

■ Die produktionsnahe Freigabeanalytik (Quality Control, QC) ist organisatorisch in den Geschäftsbereichen Performance Materials, Healthcare oder Life Science angesiedelt und wird von den Geschäften verantwortet und geführt. Die Einheiten sind je nach Aufgabenstellung Teil der Integrated Supply Chain und somit direkt in die Produktions- und Kundenauftragsprozesse eingebunden. Artikelstammdatenpflege (z.B. Mindesthaltbarkeiten und Spezifikationsparameter), Chargenfreigabe und Zertifikaterstellung gehören ebenso dazu wie die lückenlose Verfolgung und Steuerung der Qualität während Produktion, Aufreinigung und Verpackung. Hierbei definiert man mit den Produktionsbetrieben zusammen In-Prozess-Untersuchungen und analysiert zum Teil im kontinuierlichem Schichtbetrieb (24/7).

In der Regel sind die QC-Abteilungen nach Produktgruppen, die sich über Produktart und -einsatz definieren, in produktverantwortliche Labore eingeteilt. Diese „federführenden“ Labore analysieren eigenständig viele Parameter, die für das Produkt qualitätsentscheidend sind. In den meisten Fällen handelt es sich hierbei um weniger komplexe Analysen, die sich im Routinebetrieb effizient durchführen lassen. Analysengerätehersteller ha-



*Gaschromatographiegeräte gehören inzwischen zur Ausrüstung vieler Quality-Control-Labore.*

ben aber in den vergangenen Jahren durch Hard- und Software-Optimierungen der Systeme dafür gesorgt, dass die QC-Labore auch anspruchsvollere Analysen durchführen können. GC- und HPLC-Systeme, immer häufiger gekoppelt mit einfachen Massenspektrometern, finden ganz selbstverständlich ihren Einsatz neben Titratoren und Geräten zur Bestimmung des Trocknungsverlustes, die klassische Betriebskontrolllabore schon immer eingesetzt haben. Diese Systeme werden häufig dediziert und redundant für eng begrenzte Analyseaufgaben genutzt.

Kann das freigebende Labor mit seinen Mitteln nicht alle notwendigen Parameter zum Qualitätsnachweis darstellen, greifen die Geschäftseinheiten auf die zentrale Einheit Analytical Services zurück, die gezielt Fragen auch im Rahmen der Produktfreigabe beantworten kann. Hier ist auch der Routineeinsatz von investitionsintensiven Methoden wie der NMR-Spektroskopie zur Strukturbestätigung möglich, da sich hier Geräte für alle Geschäftseinheiten vorhalten und auslasten lassen. Das beauftragende QC-Labor legt den Auftragsrahmen fest: Wie lange darf eine Analyse dauern, zu welchem Preis wird die Leistung auf das Produkt verrechnet und welches Qualitätssystem (ISO, GMP o.ä.) ist anzuwenden? Das Messlabor bei Analytical Services übernimmt dabei die Verantwortung über erzeugte Daten bezüglich Richtigkeit und Rückführbarkeit inklusive der Dokumentation. Das freigebende Labor in der Geschäftseinheit führt diese Daten mit den eigenen

Messungen zusammen und verantwortet die Chargenqualität sowie den vollständigen Freigabeprozess.

Je nach Produkt müssen die QC-Labore auch die analytischen Methoden und deren Durchführung vordefiniert und dabei Kundenvereinbarungen oder gesetzliche Vorgaben beachten. Dass solche Vorgaben eingehalten werden, stellen regelmäßige interne Audits und die Zusammenarbeit mit der ebenfalls dezentralen Qualitätssicherungseinheit (Quality Assurance, QA) sicher. Kunden und Behörden überprüfen in regelmäßigen Kundenaudits bzw. Inspektionen die Qualität von Waren und Prozessen. Wie schon in der forschungsbegleitenden Analytik fordert die Qualitätskontrolle von Medikamenten (Wirkstoffen, Hilfsmitteln und Fertigprodukten) den höchsten Qualitätsstandard bei Nachvollziehbarkeit, Dokumentation, Änderungsmanagement und analytischen Methoden. Das Regelwerk dazu findet sich in nationalen und internationalen anweisenden Textsammlungen, wie der Ph.Eur. (Pharmacopoea Europaea), der USP (United States Pharmacopoeia) und anderen Quellen. Diese regeln die anzuwendenden analytischen Tests häufig sehr detailliert und setzen auch entsprechende Qualifikationen voraus. Zum Beispiel dürfen Arzneimittel nur von einer sachkundigen Person (Qualified Person, QP) freigegeben werden; die Gesetzestexte regeln genau, welche Ausbildung und Berufserfahrung diese Qualifikation benötigt. Qualitätsmanagementsysteme steuern die Einhaltung der Regelwerke im Unternehmen, sind für alle Mitarbeiter verbindlich und wirken in alle Unternehmensbereiche hinein. Ob Produktion, Forschung und Entwicklung, Analytik oder Verwaltung – dass die Regelwerke und Auflagen eingehalten werden, stellt die Qualität und Anwendbarkeit der Produkte sicher.

Das Tätigkeitsfeld eines Analytikers bei Merck ist so spannend und vielfältig wie die Produkte, die das Unternehmen anbietet.

Maria Viehoff,  
Michael Arlt,  
und Ulrich Engel  
Merck – Analytical Science

## Chemie Aktuell

### Unverwechselbarer molekularer Fingerabdruck

*Ein neuartiges Lasermesssystem erkennt kleinste Veränderungen in der molekularen Zusammensetzung von Organismen.*

■ In Organismen zirkulieren die verschiedensten Arten von Molekülen. Der Stoffwechsel lässt in den Zellen ständig neue Moleküle entstehen, die auch in die Umgebung, etwa in das Blut, abgegeben werden. Eines der großen Ziele der Biomedizin ist es, diesen Molekülmix detailliert zu erfassen und so Auskunft über den Zustand des Organismus zu gewinnen. Denn auch entartete Zellen wie etwa Krebszellen im menschlichen Körper produzieren ganz charakteristische Moleküle. Sie sind oft ein erster Hinweis auf eine Erkrankung.

Das Problem dabei ist: Es gibt bisher nur äußerst wenige bekannte solcher Indikatormoleküle, die meist ohnehin in nur äußerst geringer Konzentration im Blut zirkulieren. Dementsprechend schwer ist es, sie nachzuweisen. Biomediziner gehen aber davon aus, dass es sehr viele solcher molekularen Krankheitssignaturen in verschiedensten Molekülklassen wie Protein-, Zucker- oder Fettderivate gibt. Die große Herausforderung ist es, sie umfassend und genau genug mit einer einzigen Methode zu detektieren.

Um diesem Ziel näher zu kommen, hat ein interdisziplinäres Team aus Physikern, Biologen und Datenwissenschaftlern des Labors für Attosekundenphysik (LAP) der LMU und des Max-Planck-Instituts für Quantenoptik unter der Leitung von Ferenc Krausz, Inhaber des Lehrstuhls für Experimentalphysik/Laserphysik, ein neues Laser-Messsystem entwickelt. Mit seiner Hilfe ist es möglich, Fingerabdrücke der molekularen Zusammensetzung biologischer Proben jeglicher Art in Form von Infrarotlicht zu erhalten. Die Technologie arbeitet mit einer bisher noch nie erreichten Empfindlichkeit und kann für jede Biomolekülklasse eingesetzt werden.



*Joachim Pupeza (links) und Marinus Huber arbeiten an dem neuen Lasersystem. (Foto: Thorsten Naeser/MPQ)*

Das System basiert auf Technologien, die im Labor für Attosekundenphysik entwickelt wurden. Das neue Laserspektrometer, gebaut vom Team um den Physiker Joachim Pupeza, beruht auf der Emission extrem starker Infrarot-Laserpulse über ein breites Spektrum im infraroten Wellenlängenbereich, die nur Femtosekunden dauern. Das Prinzip dahinter: Moleküle werden durch die ultrakurzen Infrarot-Laserpulse zum Schwingen angeregt. Die Lichtpulse wirken auf die elektronisch gebundenen Teilchen ähnlich wie ein kurzer Hammer Schlag auf eine Stimmgabel. Danach schwingen die Moleküle selbstständig weiter und senden dadurch kohärentes Licht mit charakteristischen Wellenlängen/Frequenzen aus. Die neue Technologie detektiert dabei die gesamte schwingende Lichtwelle. Jede molekulare Verbindung schwingt bei bestimmten Eigenfrequenzen und trägt damit einen wohldefinierten Anteil zur detektierten Lichtwelle bei. Hier kann sich kein Molekül mehr verstecken.

„Wir haben mit unserem Laser nun einen breiten Wellenlängenbereich im Infrarot, von sechs bis zwölf

Mikrometern, für die Anregung von Molekülen abgedeckt“, erklärt Marinus Huber, Co-Erstautor der Studie und Mitarbeiter im Team von Biologin Mihaela Zigman, das im Labor für Attosekundenphysik ebenfalls an den Experimenten beteiligt war. „Andererseits etwa die Massenspektrometrie gewährt uns diese Methode Zugang zu allen Molekültypen, aus denen biologische Proben zusammengesetzt sind“, erklärt Zigman.

Die kurzen Laserpulse zur Molekülanregung bestehen aus nur wenigen Schwingungen des Lichts. Das System erreicht dabei eine zweimal höhere Strahlungsbrillanz, also Dichte an Photonen, als konventionelle Synchrotrons, in denen bisher Strahlung für ähnliche Molekularspektroskopie erzeugt wurde. Zudem ist die Infrarotstrahlung räumlich und zeitlich kohärent. Alle physikalischen Parameter zusammen sind verantwortlich für die extrem hohe Sensitivität des neuen Lasersystems. Somit können auch sehr kleine spezifische Molekülkonzentrationen detektiert und damit der „molekulare Fingerabdruck“ sehr genau erstellt werden. Die neuen physikalischen Parameter ermöglichen es nun erstmals, wasserhaltige lebende Proben, die bis zu 0,1 mm dick sind, mit Infrarotlicht zu durchleuchten und dadurch mit bisher nicht dagewesener Empfindlichkeit zu analysieren. In ersten Experimenten mit der neuen Technologie hat das LAP-Team bereits eine ganze Reihe unterschiedlichster Proben untersucht.

„Diese präzise Messung von Veränderungen in der molekularen Zusammensetzung von Körperflüssigkeiten eröffnet neue Möglichkeiten für Biologie und Medizin und könnte künftig insbesondere in der Frühdetektion von Krankheiten Anwendung finden“, sagt Zigman.

Quelle: MPG/LMU

Originalveröffentlichung:

I. Pupeza, M. Huber, M. Trubetskov et al, „Field-resolved infrared spectroscopy of biological systems“, *Nature* 2020, 577, 52.

doi: 10.1038/s41586-019-1850-7

## Atomare Struktur von Naturstoffen schneller und präziser bestimmen

■ Naturstoffe spielen bei rund 60 Prozent aller zugelassenen Arzneimittel eine Rolle. Pflanzen, Pilze und festsitzende Meeresorganismen sind besonders vielversprechende Quellen, weil viele von ihnen eine chemische Abwehr gegenüber Feinden besitzen. Doch potenzielle Wirkstoffkandidaten zu identifizieren, ist eine Herausforderung. Forscher müssen zunächst die Struktur und Stereochemie des Moleküls genau bestimmen.

Neben der Röntgenbeugungsmethode, die jedoch nur für die wenigen kristallisierbaren Moleküle anwendbar ist, nutzen Chemiker zur Strukturbestimmung üblicherweise die Kernspinresonanz-(NMR-)Spektroskopie. Hierbei kommt neuerdings dem NMR-basierten Parameter „Residual Chemical Shift Anisotropy“ eine wichtige Bedeutung zu. Studien der letzten zwei bis drei Jahre haben gezeigt, dass sich mit diesem Parameter die Struktur und Stereochemie der organischen Moleküle sehr exakt bestimmen lässt. Allerdings werden dafür Apparaturen benötigt, die nicht in jedem Labor vorhanden sind. Hinzukommen zeitaufwändige Analysemethoden bei der Datenauswertung.

### Vereinfachte Methode führt zu präziseren Ergebnissen

■ Nun haben Forscher vom Leibniz-Forschungsinstitut für Molekulare Pharmakologie (FMP) eine neue Methode entwickelt, mit der sich die Residual Chemical Shift Anisotropy sehr viel einfacher und besser messen lässt. An der Arbeit, die jetzt im *Journal of the American Chemical Society* publiziert wurde, waren außerdem Kooperationspartner aus China (Institute of Oceanology, Chinese Academy of Sciences und South Central University for Nationalities) und Brasilien (Universidade Federal de Pernambuco) beteiligt.

„Mit der Entwicklung unserer NMR-basierten Methode kann die Stereochemie von neuartigen Naturstoffen genauer und effizienter bestimmt werden“, sagt Han Sun vom FMP, die die Studie leitete. „Außerdem ist die Methode sehr leicht anzuwenden, so dass sie

von jedem Chemiker genutzt werden kann.“ Für die Untersuchung werden die Naturstoffe mit einem frei verkäuflichen Peptid der Sequenz AAKLVFF zusammengebracht. Aufgelöst in Methanol wandeln sich die Peptide in Flüssigkristalle um, wodurch sie den Naturstoffen eine schwache Orientierung im Magnetfeld geben. „Durch diese bestimmte Orientierung können wir den Parameter Residual Chemical Shift Anisotropy der Moleküle messen, der uns wiederum präzise Informationen über deren Struktur und Stereochemie liefert“, beschreibt Chemikerin Sun das neue Verfahren.

### Exotischen Naturstoff aus dem Ozean analysiert

■ Für die Arbeit haben die Forscher einen noch unerforschten Naturstoff genutzt: Spiroepicoccin A wurde von den chinesischen Kooperationspartnern aus im Ozean lebenden Mikroorganismen isoliert. Der aus über 4500 Metern Meerestiefe stammende Stoff besitzt nur wenig Wasserstoffatome an seinen Stereozentren und war damit eine Herausforderung für etablierte NMR-Methoden. Doch dank der neuen Messmethode wurde seine Struktur und Stereochemie eindeutig aufgeklärt. „Auch wenn wir mit unserer Methode bislang nur die relative und nicht die absolute Stereochemie messen können, haben wir mit unserer Arbeit einen wichtigen Beitrag zur vereinfachten Bestimmung von herausfordernden Naturstoffen erbracht“, sagt Sun. Pharmafirmen hätten schon Interesse angemeldet, „denn das Verfahren beschleunigt die Entwicklung neuer Medikamente. Und das ist auch unser Ziel.“

Quelle: Leibniz-Institut für Molekulare Pharmakologie im Forschungsverbund Berlin (FMP)

Originalveröffentlichung:

X. Li, L.-P. Chi, A. Navarro-Vázquez et al, „Stereochemical Elucidation of Natural Products from Residual Chemical Shift Anisotropies in a Liquid Crystalline Phase“, *Journal of the American Chemical Society* 2019.

doi: 10.1021/jacs.9b10961

## Chemikalien in der Umwelt: die Mischung im Fokus

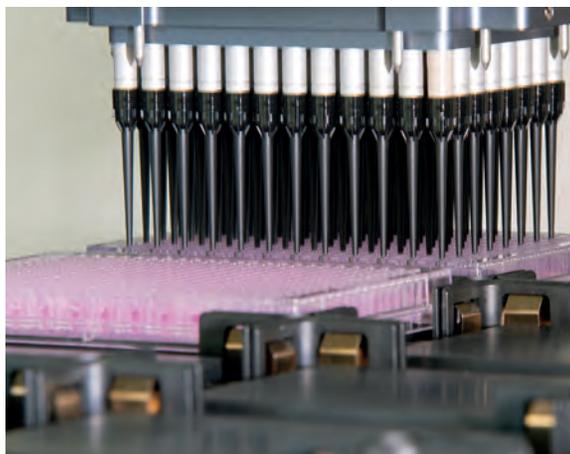
*Kombinierte chemisch/bioanalytische Methoden können Chemikalienmischungen effizient beschreiben*

■ Ein in *Science* erschienener Übersichtsartikel stellt methodische Ansätze vor, mit denen Chemikalien, die in komplexen Mischungen von Bedeutung sind, isoliert, charakterisiert und verfolgt werden können. Eine Kombination von chemischen und bioanalytischen Methoden sei dazu am besten geeignet, schreibt ein internationales Forscherinnen-Team unter Leitung von Umwelttoxikologin Beate Escher vom Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ).

Der derzeitige Ansatz, mit dem das Gefahrenpotenzial von Chemikalien bewertet wird, beruht auf relativ wenigen Einzelkomponenten. Mittlerweile weiß man aber, dass Mensch und Umwelt einem Cocktail von zehntausenden Chemikalien ausgesetzt sind. Nur ein Bruchteil davon wurde bislang identifiziert; die Wirkung auf biologische Systeme sowie die Rolle von einzelnen Chemikalien und Abbauprodukten im Cocktail ist weitgehend unklar. Zudem wächst die Zahl neu registrierter Chemikalien rasant an: Von 20 Millionen im Jahr 2002 auf 156 Millionen im Jahr 2019. Das alles macht es schwierig, Ursache-Wirkungs-Beziehungen aufzudecken, und verlangt nach neuen Denkmodellen und methodischen Ansätzen.

In ihrem Review fassen die Autorinnen um Beate Escher vom UFZ deshalb Technologien zusammen, die sich eignen, Chemikalien in komplexen Mischungen zu identifizieren und ihre Wirkungen zu erfassen. Zudem bewerten sie deren Möglichkeiten und Grenzen.

Die Publikation macht deutlich, dass es nicht nur um analytische Methoden geht – auch das „Was“ und „Wie“ der Probenahme und -Aufbereitung entscheidet über den Erfolg der Analytik. Gemeinsame Ansätze für diverse Probenarten – von Wasser und Boden bis Blut oder Gewebe – erlauben, die Ergebnisse später zu vergleichen. Als besonders innovativ werden u.a. spezielle Wischtücher oder Silikonarmbänder



Automatisierte  
Pipettierplattform  
für Hochdurchsatz-  
Biotests (Foto:  
B. Tiedemann)

hervorgehoben, die die persönliche Exposition von Menschen mit Schadstoffen erfassen können.

Die Möglichkeiten der chemischen Analytik haben sich mit der Entwicklung und der Zugänglichkeit der hochauflösenden Massenspektrometrie (HR-MS) extrem verbessert. Gekoppelt mit weiteren Technologien können damit zehntausende Signale in biologischen und Umweltproben nachgewiesen werden. Sie ist auch die Basis für ein „Verdachtsscreening“ zur Identifizierung unbekannter Chemikalien in komplexen Mischungen. „Das versetzt uns u.a. in die Lage, neue problematische Schadstoffe in der Umwelt zu erkennen“, so Beate Escher. „Aber alle Stoffe können wir damit niemals erfassen. Auch Stoffe unterhalb ihres Detektionslimits und unterhalb ihrer Effektschwelle können zum Risiko beitragen.“

Die Forscherinnengruppe empfiehlt daher ergänzend zur chemischen Analytik bioanalytische Werkzeuge, die bei der Bewertung der Toxizität von Abwasser und Sedimenten insbesondere Mischeffekte erfassen können. Traditionell wurden dafür In-vivo-Biotests mit ganzen Organismen durchgeführt, deren Nachteil u.a. ein geringer Probendurchsatz war. Mit der Weiterentwicklung zellbasierter In-vitro-Biotests eröffnen sich nun weitere Möglichkeiten – sie können Tierversuche ersetzen und sind für

Hochdurchsatzroboter geeignet. Durch die Ergänzung der hochauflösenden Massenspektrometrie mit bioanalytischen Werkzeugen lassen sich Informationen über die Auswirkungen aller Chemikalien in einer Probe gewinnen. Die Kombination dieser beiden Werkzeuge habe laut Escher das Potenzial, die Umweltüberwachung zu revolutionieren. Auch aus diesem Grund wurde am UFZ die Technologie-Plattform CITEPro (Chemicals in the Environment Profiler) aufgebaut. Sie erlaubt die Vorbereitung und Testung von Proben mit analytischen und bioanalytischen Hochdurchsatzverfahren. Doch CITEPro ist mehr als reine Hardware. Es ist ein Konzept, um das Exposom zu charakterisieren – also die Gesamtheit aller Umwelteinflüsse zu erfassen, denen ein Individuum lebenslang ausgesetzt ist. Dazu gehören externe Faktoren (Chemikalien in der Luft, im Wasser oder in der Nahrung) und interne Komponenten, die ein Organismus als Reaktion auf verschiedene Belastungen produziert.

Quelle: Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH (UFZ)

Originalveröffentlichung:  
B. I. Escher, H. M. Stapleton, E. L. Schymanski,  
“Tracking Complex Mixtures of Chemicals in our  
Changing Environment”, *Science* 2020.  
doi: 10.1126/science.aay6636

### ABC in Kürze

Neuigkeiten rund um Analytical and Bioanalytical Chemistry

#### Neues von Springer Nature und Projekt DEAL

■ Springer Nature und die Max Planck Digital Library (MPDL) Services (im Namen von Projekt DEAL) haben den Vertrag für die bisher weltweit größte Open-Access-Vereinbarung unterzeichnet. Seit dem 1. Januar 2020 können Wissenschaftler und Studierende aus Deutschland Open Access (OA) bei Springer Nature veröffentlichen und erhalten Lesezugriff auf die Zeitschrifteninhalte des Verlags. Dieser Meilenstein ermöglicht Korrespondenzautoren mit einem Sitz an über 750 deutschen Einrichtungen, auch in ABC Open Access zu publizieren. Diese Beiträge erreichen mehr Leser und werden häufiger zitiert als Nicht-OA-Artikel. Wir freuen uns auf Ihre nächste Einreichung.

#### Neues von ABC

■ Anfang Januar war es wieder so weit: ABC begrüßte ein neues International Advisory Board, das die Zeitschrift bis Ende 2022 unterstützen wird. Um stets unterschiedliche Sichtweisen, Fachgebiete und Geographien in diesem Gremium zu versammeln und so die Entwicklung der Zeitschrift kontinuierlich voranzutreiben, wechselt alle drei Jahre die Zusammensetzung des Boards. Den ausgeschiedenen Mitgliedern danken Herausgeber und Redaktion an dieser Stelle für ihre Mitwirkung, den neuen Mitgliedern gilt unser herzliches Willkommen. Die jetzt 62 Mitglieder repräsentieren 22 Länder. Neu aus den deutschsprachigen Ländern hinzugekommen sind: Oliver Hayden (DE), Gunda Koellensperger (AU) und Kevin Pagel (DE). Die vollständige Liste aller Mitglieder finden Sie in jedem Heft sowie auf der neu gestalteten Homepage von ABC ([www.springer.com/abc](http://www.springer.com/abc)) unter Journal

Updates – Meet ABC's outstanding International Advisory Board.

Ab sofort sind bei ABC „Paper in Forefronts“ sowie die „ABC Highlights“ für einen Zeitraum von acht Wochen ab Heftzuordnung frei zugänglich. „ABC Highlights“ sind Beiträge, deren Autoren persönlich von den ABC-Herausgebern eingeladen wurden. Die Kategorie „Paper in Forefront“ erreichen Research Paper, die im Verlauf der Begutachtung als außergewöhnlich gut bewertet wurden.

#### Neues von den ABC-Herausgebern

■ Dieses Mal präsentieren wir ein Editorial von ABC-Herausgeber Gérard Hopfgartner zu Methodvalidierung in der Bioanalytik: „Bioanalytical method validation: How much should we do and how should we document?“ (<https://link.springer.com/article/10.1007/s00216-019-02334-8>)

#### ABC unterwegs

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

- Pittcon 2020 in Chicago, USA (1.-5. März)
- analytica in München (31. März – 3. April)
- Europt(r)ode XV (Conference on optical, chemical sensors and biosensors) in Warschau, Polen (5.-8. April)
- ISCC 2020 (42nd International Symposium on Capillary Chromatography & 15th GCxGC Symposium) in Riva del Garda, Italien (24.-29. Mai)

Auch die ABC-Herausgeber sind während der analytica conference in München aktiv: Maria Moreno Bondi, Luigi Mondello und Sabine Szunerits halten Vorträge; außerdem sind Sie herzlich zu den folgenden Sessions

eingeladen, organisiert u.a. von Günter Gauglitz bzw. Antje Baeumner in Zusammenarbeit mit der Fachgruppe:

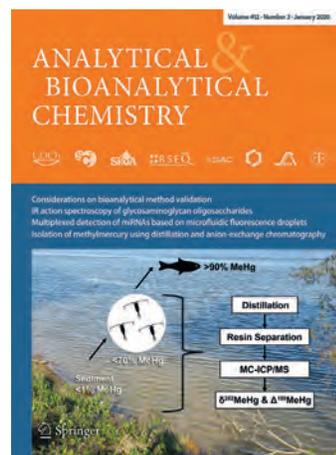
- „ABC: Model-based process design and control“ am 31. März (Co-Chair: Michael Maiwald)
- „ABC: Digital Analytical Sciences“ (Co-Chair: Ulrich Panne), „ABC: Bioanalytics I (Nanomaterials in BioAnalysis)“ und „II (Analytics Enabling the Concept of Anywhere Care)“ am 1. April

ABC sponsert zahlreiche Posterpreise und wünscht allen Teilnehmern viel Glück.

#### Neues aus den Rubriken

■ Das neue Jahr beginnt mit einem neuen Rätsel aus der Reihe der Analytical Challenges, der „Gas weighing challenge“ (<https://link.springer.com/article/10.1007/s00216-019-02168-4>)

Einreichungsdatum für die Lösung zu diesem Rätsel von Lukas Flierl, Olaf Rienitz und Axel Pramann ist der 1. April. Alle Beiträge der Rubrik einschließlich der Lösungen sind unseren Lesern frei zugänglich.



Das Cover des Hefts 412/3 mit einer Graphik aus dem Artikel von Tylor J. Rosera et al. (doi: 10.1007/s00216-019-02277-0)

**ABC ist social**

■ Verpassen Sie keine Nachrichten und Informationen zu ABC und folgen Sie unserem Twitter-Account: @AnalBioanalChem. Bei Redaktionsschluss hatte ABC bereits über 1200 Followers.

**Themenschwerpunkte**

■ Die ersten zwei Themenschwerpunkte des Jahres 2020 in ABC waren:

- „Advances in Process Analytics and Control Technology“, (Gastherausgeber Christoph Herwig) und
  - „Current Progress in Lipidomics“ (Gastherausgeber Michal Holcapek, Gerhard Liebisch und Kim Ekroos).
- Alle ABC-Ausgaben und Topical Collections finden Sie online unter <https://link.springer.com/journal/volumesAndIssues/216>. Der Klick auf „Browse Volumes & Issues“ führt zur Übersicht über die ABC-Hefte („Volumes“), zu den noch keinem Heft zugeordneten Beiträgen („Online First“) sowie zu den Themenschwerpunkten („Topical Collections“). Mitglieder der Fachgruppe Analytische Chemie greifen über den Mitgliederbereich „MyGDCh“ auf den gesamten Online-Inhalt von ABC zu.

*Herzliche Grüße aus der ABC-Redaktion  
Nicola Oberbeckmann-Winter  
Managing Editor ABC, Springer  
(ORCID iD 0000-0001-9778-1920)*

**New Journal: Analytical Science Advances**

■ Analytical Science Advances – ASA – is a new open-access journal published by Wiley-VCH, which will debut in 2020. Intended to cover all fundamental and applied aspects of analytical sciences – including interdisciplinary and newly emerging areas – ASA aims to advance and rapidly disseminate the latest analytical research and discoveries. Authors can submit analytical articles from any field of science, including biomedical, bioanalytical, biotechnological, clinical, environ-

mental, food, green chemistry & sustainability, industrial, nutrition, pharmaceutical, polymer and omics sciences. We will also consider any aspect of analytical science, such as sampling, sample preparation, separation sciences, mass spectrometry, spectroscopy, imaging analysis, data mining, statistics, micro & nanoscale systems, high throughput technologies, software solutions, trace analysis, sensors, surface analysis and diagnostics.

ASA will publish communications, full articles, reviews, minireviews, tutorials, applications notes, data descriptors and perspectives. Please see the Author Guidelines for more information on the manuscript types.

ASA is a fully open-access journal and the copyright is retained by the authors. All articles published will be immediately free to read anywhere in the world. Publication is supported through article pro-

cessing charges (APC), which, dependent on the authors' country, may be paid centrally by the authors' institution. Several countries (including Germany, Hungary and Norway) have an agreement with Wiley, which means that the APC may be covered when the corresponding author is from a participating institute.

ASA is committed to and expects Data Sharing and Open Data Standards for reporting storage and exchange of analytical data by its authors.

Please note that ASA will offer free open access publishing throughout 2020.

*Sebastian Eeltink,  
Christoph Steinbeck,  
Dietrich Volmer  
Editors-in-Chief*

<https://onlinelibrary.wiley.com/journal/26285452>

---

**Personalia**

---

**Geburtstage**

Wir gratulieren unseren Mitgliedern, die im zweiten Quartal 2020 einen runden Geburtstag feiern und wünschen alles Gute:

**Zum 60. Geburtstag**

Tobias Reich, Mainz  
María Josefa Freiría Gándara, O Porriño, Spanien  
Bernhard Spengler, Gießen  
Walter Vetter, Stuttgart  
Gerhard Thielert, Sigmaringen  
Gerhard Lammel, Mainz

**Zum 65. Geburtstag**

Jürgen Friesel, Recklinghausen  
Detlef Schulze-Siebert, Augsburg  
Werner Sambol, Radolfzell

**Zum 70. Geburtstag**

Emil F. Pai, Toronto, Kanada

**Zum 75. Geburtstag**

Willfried Dulson, Wermelskirchen  
Heiner Kühn, Leipzig  
Ludwig Kotz, Markt  
Roland Boese, Essen

**Zum 80. Geburtstag**

Hans Hartl, Berlin  
Wolf-Henning Böhmer, Neuenkirchen  
Ingo Venn, Recklinghausen  
Christof Hesse, Erlangen

**Zum 85. Geburtstag**

Wolfgang Riepe, Zell am Moos, Österreich  
Johannes Tilch, Berlin  
Wilhelm Ecknig, Berlin

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

### Jahrestagung Archäometrie und Denkmalpflege

11. bis 14. September 2019 in Wien, Österreich



Teilnehmer der Jahrestagung Archäometrie und Denkmalpflege genießen in Wien die Sonne auf den Stufen des Veranstaltungsorts. (Foto: E.-G. Hammerschmid)

Die Jahrestagung Archäometrie und Denkmalpflege fand in Wien an der Akademie der Bildenden Künste statt. Das Programm hatte ein wissenschaftliches Komitee zusammengestellt, bestehend aus Mitgliedern der Gesellschaft für Naturwissenschaftliche Archäologie (Archäometrie e.V.), dem Arbeitskreis Archäometrie und Denkmalpflege der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft und des Arbeitskreises Archäometrie der GDCh. Besonderer Dank für die Organisation vor Ort gebührt den Kollegen der GÖCH, Rita Wiesinger und Manfred Schreiner, von der Arbeitsgruppe Erforschung und Erhaltung von Kulturgütern und der Akademie der Bildenden Künste Wien – Institut für Naturwissenschaften in der Kunst.

Circa 90 Teilnehmer aus den Bereichen Chemie, Restaurierung, Denkmalpflege, Archäologie und Kunstgeschichte besuchten die Tagung. 35 Vorträge und 31 Poster widmeten sich den Themen Denkmalpflege und Restaurierung, Metalle, Keramik, Glas und Glasuren, Stein, Biomaterialien sowie Pigmente und Malerei. Beiträge zur Keramik waren dieses Jahr etwas weniger stark vertreten als üblich, da zeitgleich eine andere internationale Veranstaltung zu archäologischer Keramik stattfand. Die meisten Beiträge gab es zum Thema Metall. Erfreulich

war, dass sich verhältnismäßig viele Vorträge den Entwicklungen von analytischen Methoden und den spezifischen Herausforderungen widmeten, welche die Erforschung von Kulturerbe mit naturwissenschaftlicher Analytik mit sich bringt.

Am letzten Tag der Veranstaltung wurden die Posterpreise vergeben. Der erste Posterpreis ging an Vilma Ruppene, Ulrich Schüßler und Andreas Simnacher für das Poster: „Marmora aus dem römischen Deutschland: Vorkommen, Abbau und Verwendung“. Daneben wurden zwei zweite Plätze vergeben, an Hieronymus Hölzig, Lennart Günzel, Sebastian Blanke, Gert Klöß: „Phase composition of mineral filler of historical Shellac records“ und an Marc Holly, Christoph Herm, Jürgen Schram: „Alles im grünen Bereich?! – Die Konservierung von Farbstoffsammlungen“.

Der Tagungsband mit den Kurzfassungen der Beiträge wurde im Sonderheft 9, 2019 der Zeitschrift *METALLA* veröffentlicht. Das Rahmenprogramm der Veranstaltung bestand aus einem Empfang der Rektorin der Akademie der bildenden Künste Wien, Eve Blimlinger, einem Gesellschaftsabend in einem Heurigen sowie einer Abschlussexkursion zur Römerstadt Carnuntum. Der AK Archäometrie hielt auch dieses Jahr

seine Mitgliederversammlung während der Jahrestagung ab. Zudem fand eine gemeinsame Versammlung zusammen mit der Gesellschaft für Naturwissenschaftliche Archäologie (Archäometrie e.V.) und dem Arbeitskreis Archäometrie und Denkmalpflege der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft statt. Während dieser Sitzung regten einige Teilnehmer an, die Tagung in Zukunft in einem veränderten Rhythmus durchzuführen. Bisher fand die Tagung im 18-Monate-Rhythmus statt; einige Anwesende schlugen vor, die Tagung in einem festen Zwei-Jahres-Abstand im Frühjahr stattfinden zu lassen, da die bisherigen Frühjahrstagungen immer etwas besser besucht waren. Andererseits kommt der kürzere Rhythmus Master-Studierenden und Doktoranden zugute, da diese in der entsprechend kurzen Phase ihrer Masterarbeit bzw. weiteren wissenschaftlichen Tätigkeit so häufiger die Möglichkeit haben, ihre Arbeiten vorzustellen. Die Entscheidung zum Tagungsrythmus soll auf der nächsten Tagung gefällt werden, basierend auf einer Abstimmung aller Mitglieder der betroffenen Vereinigungen. Der AK Archäometrie hat dazu seine Mitglieder zu einer Abstimmung aufgerufen. Auf der gemeinsamen Versammlung wurde ebenfalls beschlossen, die nächste Jahrestagung Archäometrie und Denkmalpflege im Frühjahr 2021 am Deutschen Bergbau-Museum in Bochum stattfinden zu lassen.

Stefan Röhrs,  
Berlin

#### Anmerkung des Herausgebers:

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

## CE-Forum

11. bis 12. Dezember 2019 in Waldbronn

■ 2019 fand das CE-Forum auf dem Campus von Agilent Technologies statt. Host und Organisator vor Ort war Jens Meixner von Agilent, unterstützt von Gerard Rozing (Karlsruhe). Agilent Technologies unterstützte das Forum; es war somit für die Teilnehmer kostenlos. Agilent bot auch an, die Produktionsstätte von Analysegeräten zu besichtigen, die Elektrophorese einsetzen.

Das CE-Forum findet jährlich unter der Verantwortung des AK Separation Science statt und richtet sich an Wissenschaftler und Anwender der Kapillarelektrophorese (CE). Bei dem Treffen werden neue Erkenntnisse aus der Theorie, Resultate aus der Praxis, Methodenentwicklungen und neue Anwendungen vorgestellt. Auch das diesjährige Forum setzte die Tradition fort, eine Plattform zu sein, bei der Masterstudenten, Doktoranden und junge Forscher ihre Arbeiten vorstellen und mit den anderen Teilnehmern ihre Ergebnisse und ungelöste Fragen diskutieren.

Teilnehmer kamen aus den Arbeitsgruppen Neustüß (FH Aalen), Wätzig (TU Braunschweig), Huhn (Universität Tübingen) sowie von der BAM (Berlin) und vom Institut für Chemische Technologie (Fraunhofer, Berghausen). Daneben waren auch einige Vertreter der Pharmaindustrie aus Basel dabei, von der Arbeitsgruppe Gäs (Charles University Prag) und Mitarbeiter von Agilent.

Es wurden elf Arbeiten in einem Vortrag präsentiert und acht Poster. Abgerundet wurde das Programm mit

zwei Keynote-Präsentationen von Herman Wätzig (TU Braunschweig) über Affinitäts-CE und von Jana Steflava (Charles Universität Prag) über lizenzfreie Software für die Simulation von CE-Trennungen.

Bei den Kurzpräsentation von Postern probierte man einen neuen Ansatz aus: Gruppen von jeweils drei bis vier Postern wurden in einer Nische aufgestellt. Jeder Autor hatte etwa drei Minuten Zeit, sein Poster einer Gruppe von anderen Teilnehmern vorzustellen und Fragen zu beantworten. Diese Gruppe wanderte an den Posternischen entlang. Alle Teilnehmer fanden dieses Verfahren sehr effektiv und interaktiv. Allerdings wurde klar, dass jede Gruppe einen Moderator braucht, der die Diskussion führt, die Zeit im Auge behält und die Gruppe zur nächsten Nische führt.

In der abschließenden Diskussion gab es einen breiten Konsens, das CE-Forum jährlich zu veranstalten. Der Termin sollte vor Beginn der Herbstvorlesungen sein. Das jetzige Format mit Vorträgen, Übersichtsvorträgen (Tutorials) als Keynotes, Posterpräsentationen und einem informellen abendlichen Treffen sollte beibehalten bleiben. Erfreulicherweise hat sich bereits ein Veranstalter als Gastgeber und Organisator für das CE-Forum 2020 bereiterklärt.

Im Namen des AK Separation Science bedanke ich mich bei Agilent Technologies für die Bereitschaft, Gastgeber und Organisator für das CE-Forum 2019 zu sein.

Gerard Rozing  
Rozing.com Consulting  
Karlsruhe

<http://2019.ce-forum.org>



Teilnehmer beim CE-Forum 2019 (Foto: G. Rozing)

## Vorschau

### analytica und analytica conference

31. März bis 3. April 2020 in München

■ Weltweit arbeiten Forscher an leistungsstarken Batterien für die Energiewende. Moderne Analysetechnik ist dabei unverzichtbar. Die analytica rückt daher neue Geräte und Methoden für die Batterieforschung in den Mittelpunkt.

Lithium-Ionen-Akkus stecken in Elektroautos, Smartphones und vielen anderen mobilen Geräten. Jedoch haben sie einige Nachteile – von bedenklichen Inhaltsstoffen wie Kobalt über die Entflammbarkeit bis zur Selbstentladung. Forscher weltweit arbeiten daher an der Optimierung von Lithium-Ionen-Batterien oder entwickeln Alternativen wie Natrium-Ionen-Akkus. Dafür brauchen sie modernste Analysemethoden.

„Viele Gerätehersteller haben die Dringlichkeit in der Batterie- und Energieforschung erkannt und ihre Systeme entsprechend spezifiziert“, erklärt Susanne Grödl, Projektleiterin analytica bei der Messe München. Die analytica präsentiert die gesamte Bandbreite an Analysensystemen, die zur Weiterentwicklung der Stromspeichertechnik beitragen.

#### Technologien für bessere Batterien

■ Wer bessere Batterien entwickeln möchte, muss die Vorgänge im Innern der Zelle verstehen. Die Alterung des Elektrolyten, jenes leitfähigen Mediums zwischen den beiden Elektroden, beispielsweise ist entscheidend für die Sicherheit, Lebensdauer und Leistungsfähigkeit eines Akkus. Vor allem mit spektroskopischen Methoden sowie mit der Kopplung aus Chromatographie und Massenspektrometrie untersuchen Forscher, welche unerwünschten Substanzen bei der Elektrolytalterung entstehen. Basierend auf diesem Wissen werden stabilere Elektrolyte und neue Elektrolytadditive entwickelt.



Die letzte analytica fand 2018 statt. (Foto: Messe München)

Die Elektroden verändern sich ebenfalls im Laufe der Zeit. In Lithium-Ionen-Akkus etwa können sich auf der negativen Elektrode astartige Fortsätze aus Lithium, sogenannte Dendriten, bilden. Sie gelten als Auslöser von internen Kurzschlüssen und Akku-Bränden. Mikroskopische Methoden – von der Lichtmikroskopie bis zur extrem hochauflösenden Rasterkraftmikroskopie – machen Dendriten sichtbar und liefern Hinweise für die Entwicklung von sicheren Batterien. Auch oberflächensensitive Techniken wie die ATR-FTIR-Spektroskopie und das Raman-Imaging identifizieren Veränderungen und Ablagerungen auf den Elektroden.

Darüber hinaus braucht die Batterieforschung Geräte, die physikalische Parameter bestimmen. Oberflächenmessgeräte etwa helfen beim Design der Elektroden, denn große Elektrodenoberflächen steigern die Akku-Kapazität und ermöglichen eine schnelle Aufladung. Mit Kalorimetern wiederum lässt sich die Wärmeabgabe von Batterien untersuchen, die mit der Selbstentladung zusammenhängt.

Welche Analysenmethode sich bei einer Fragestellung am besten eignet, erfahren Interessierte auf der analytica. Geräte für die Batterieforschung bieten Bruker, Metrohm, Thermo Fisher Scientific, Shimadzu und viele weitere Aussteller an.

#### analytica conference

Das wissenschaftliche Programm der analytica conference gestaltet das Forum Analytik, zusammengesetzt aus der GDCh, der Gesellschaft für

Biochemie und Molekularbiologie (GBM) und der Deutschen Gesellschaft für Klinische Chemie und Laboratoriumsmedizin (DGKL).

Ein Schwerpunkt der Konferenz liegt auf analytischen Kopplungstechniken und Datenmanagement. Wie lässt sich eine große Menge analytischer Daten effizient bearbeiten? Und welche Rolle spielt Künstliche Intelligenz zum Beispiel bei medizinischen Analysen? Die Referenten geben einen Überblick über neuartige Methoden, Verfahren und Techniken. Die Vorträge konzentrieren sich auf aktuelle Entwicklungen zu Themen wie Chromatographie und Massenspektrometrie sowie Datenverarbeitung. Mit seiner Expertise zum aktuellen Thema Feinstaub leitet unter anderem Ralf Zimmermann, Helmholtz-Zentrum

München – Deutsches Forschungszentrum für Gesundheit und Umwelt, Sessions zu neuesten Entwicklungen in der hochauflösenden Massenspektrometrie. Weitere Sessions mit Experten wie Michael Rychlik, Technische Universität München, thematisieren den Einsatz von modernen Methoden in der Lebensmittelanalytik.

Die analytica conference findet im ICM – Internationales Congress Center München, auf dem Messegelände, statt. Der Eintritt ist für Besucher der analytica kostenfrei. Der Gemeinschaftsstand des Forums Analytik befindet sich in Halle B2, Nr. 505.

Quelle: Messe München / GDCh

[www.gdch.de/analyticaconf2020](http://www.gdch.de/analyticaconf2020)  
[www.analytica.de/konferenz](http://www.analytica.de/konferenz)

#### Impressum

Herausgeber:  
 Vorstand der Fachgruppe  
 Analytische Chemie in der  
 Gesellschaft Deutscher Chemiker  
 PO-Box 900440  
 60444 Frankfurt/Main  
 c.kniep@gdch.de  
 Telefon: 069 7917–499  
[www.gdch.de/analytischechemie](http://www.gdch.de/analytischechemie)

Redaktion:  
 Brigitte Osterath  
 Am Kalkofen 2  
 53347 Alfter  
[mitteilungsblatt@gmx.net](mailto:mitteilungsblatt@gmx.net)

Grafik: Jürgen Bugler

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

Bezugspreis im Mitgliedsbeitrag  
 enthalten

Erscheinungsweise: 4 x jährlich

ISSN 0939–0065

**Redaktionsschluss Heft 02/2020:**  
**01.06.2020**

Beiträge bitte an die Redaktion

## GDCh-Fortbildungen

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

20. März 2020, Frankfurt am Main

**Wechselwirkungschromatographie und gekoppelte chromatographische/spektrometrische Methoden in der Polymeranalytik**, Grundlagen und Anwendungen (Kurs 397/20)

Leitung: Dr. Wolfgang Radke

24. – 25. März 2020, Frankfurt am Main

**Polymeradditive**, Unentbehrliche Komponenten zur Stabilisierung von technischen Kunststoffen und Lacken sowie zur Modifizierung ihrer Eigenschaften (Kurs 04/20)

Leitung: Dr. Christoph Kröhnke

23. – 27. März 2020, Krefeld

**Anwenderkurs kosmetische und pharmazeutische Emulsionen**, Rohstoffauswahl, Herstellung, Stabilitätsprüfung (Kurs 591/20)

Leitung: Prof. Dr. Andrea Wanninger

23. – 24. April 2020, Frankfurt am Main

**Strategisches Management**, Kursmodul zum Geprüften Wirtschaftschemiker (GDCh) (Kurs 878/20)

Leitung: Prof. Dr. Frank Blümel

27. – 28. April 2020, Frankfurt am Main

**Chemie 4.0: Was kommt konkret auf mich zu?** (Kurs 978/20)

Leitung: Dr.-Ing. Wolfram Keller

28. April 2020, Frankfurt am Main

**Patente in der Praxis**: Chancen und Risiken sowie Tipps und Tricks, Effiziente Zusammenarbeit mit Patentanwälten (Kurs 968/20)

Leitung: Dr. Gerhard Auer

4. – 5. Mai 2020, Frankfurt am Main

**Big Data** – Grundlagen, Methoden und praktische Umsetzung (Kurs 642/20)

Leitung: Prof. Dr. Uwe Kehrel

5. – 6. Mai 2020, Frankfurt am Main

**SOP-Intensivtraining und QS-Dokumentation**, Für den Durchblick im QM-Dschungel. Kursmodul zum Geprüften Qualitätsexperten GxP Plus (GDCh) (Kurs 529/20)

Leitung: Dr. Stephan Walch

6. – 7. Mai 2020, Frankfurt am Main

**Qualitätsverbesserung und Kostenreduzierung durch statistische Versuchsmethodik**, Design of Experiments (DoE) (Kurs 960/20)

Leitung: Dipl.-Math. Sergio Soravia

8. Mai 2020, Frankfurt am Main

**Design of Experiments (DoE)**, Workshop (Kurs 592/20)

Leitung: Dipl.-Math. Sergio Soravia

18. – 19. Mai 2020, Frankfurt am Main

**Rechnungswesen, Jahresabschlussanalyse**, Kursmodul zum Geprüften Wirtschaftschemiker (GDCh) (Kurs 879/20)

Leitung: Prof. Dr. Andreas Del Re

25. – 26. Mai 2020, Frankfurt am Main

**Notfall- und Krisenmanagement bei Bränden, Explosionen, Stoffaustritten und Todesfällen**, Aus der Praxis für die Praxis (Kurs 936/20)

Leitung: Dr. Martin Schnauber

16. – 17. Juni 2020, Frankfurt am Main

**Aufgaben und Verantwortung des Laborleiters, Arbeitsschutz in der Chemie-, Pharma- und Lebensmittelindustrie** (Kurs 980/20)

Leitung: Dr. Gitta Weber

22. – 25. Juni 2020, Nürnberg

**Einführung in die HPLC**, Basiskurs mit Experimenten (Kurs 308/20)

Leitung: Prof. Dr. Birgit Götzinger

30. Juni 2020, Frankfurt am Main

**Die Blockchain-Technologie in der Chemieindustrie**: Einführung und Anwendungsfälle, Handlungshilfe zum Einsatz von Blockchain für Führungskräfte in der Chemiebranche (Kurs 874/20)

Leitung: Felix Green

24. August – 25. September 2020, Online

**E-Learning: NMR-Spektrenauswertung**, Grundlagenkurs (Kurs 505/20)

Leitung: Prof. Dr. Reinhard Meusinger

1. – 30. September 2020, Online

**E-Learning: Medizinprodukte gesetzskonform planen, entwickeln und erfolgreich zulassen** (Kurs 589/20)

Leitung: Dr. Dietmar Schaffarczyk

---

## Tagungen 2020

---

25.-28.03., Köln, D: **22. Frühjahrssymposium des JungChemikerForums der GDCh** (mit Session zur analytischen Chemie), Webseite: [www.jcf-fruehjahrssymposium.de](http://www.jcf-fruehjahrssymposium.de)

31.03.-03.04., München, D: **analytica und analytica conference**, Webseite: [www.analytica.de](http://www.analytica.de)

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

05.-08.04., Saint Malo, FR: **MSB 2020 – 36th International Symposium on Microscale Separations and Bioanalysis**, Webseite: [www.msb2020.com/index.php](http://www.msb2020.com/index.php)

14.-18.04., Lissabon, PT: **14th European Fourier Transform Mass Spectrometry Workshop**, Infos: <https://tinyurl.com/vtzgnz7>

15.-17.04., Potsdam, DE: **14. interdisziplinäre Doktorandenseminar** des AK Prozessanalytik der FG ACh, Webseite: <http://arbeitskreis-prozessanalytik.de/2020/01/30/doktorandenseminar-2020>

20.-21.04., Berlin, DE: **International Conference & Expo on Advances in Chromatography & HPLC Techniques**, Webseite: <https://chromatography.pharmaceuticalconferences.com/>

08.-20.5., Kopenhagen, DK: **Europact20**, Webseite: <https://dechema.de/europact2020.html>

18.-20.05., Potsdam, D: **Wasser 2020**, Webseite: [www.gdch.de/wasser2020](http://www.gdch.de/wasser2020)

24.-29.05., Riva del Garda, IT: **RIVA 2020 – 44th International Symposium on Capillary Chromatography (ISCC) & 17th GCxGC Symposium**, Webseite: [www.chromaleont.it/iscc](http://www.chromaleont.it/iscc)

15.-17.06., Dresden, D: **9. RCA-Workshop**, Webseite: [www.vkta.de/en/events/rca-workshop-2020](http://www.vkta.de/en/events/rca-workshop-2020)

20.-25.06., San Diego, USA: **HPLC 2020 – 50th International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques**, Webseite: [www.hplc2020-usa.org](http://www.hplc2020-usa.org)

21.-26.06., Courmayeur, IT: **18th Chemometrics in Analytical Chemistry Conference**, Webseite: <https://cac2020.sciencesconf.org>

21.-26.06., Manchester, USA: **Nanoscale Science and Engineering for Agriculture and Food Systems – Gordon Research Conference**, Webseite: [www.grc.org/nanoscale-science-and-engineering-for-agriculture-and-food-systems-conference/2020](http://www.grc.org/nanoscale-science-and-engineering-for-agriculture-and-food-systems-conference/2020)

24.-26.06., Warschau, PL: **European Symposium on Atomic Spectrometry 2020**, Webseite: [www.esas2020.uw.edu.pl](http://www.esas2020.uw.edu.pl)

28.06.-03.07., Newport, USA: **Bioanalytical Sensors – Gordon Research Conference**, Webseite: [www.grc.org/bioanalytical-sensors-conference/2020](http://www.grc.org/bioanalytical-sensors-conference/2020)

02.-15.07., Kielce, PL: **International Summer School for Emerging Analytical Professionals**, Webseite: [www.msc-euromaster.eu](http://www.msc-euromaster.eu)

29.08.-04.09., Rio de Janeiro, BR: **23rd International Mass Spectrometry**, Webseite: [www.imsc2020.com](http://www.imsc2020.com)

06.-09.09., Lecce, IT: **Euroensors XXXIV**, Webseite: [www.euroensors.net/euroensors-xxxiv](http://www.euroensors.net/euroensors-xxxiv)

06.-11.09., Sydney, AUS: **15th International Conference on Accelerator Mass Spectrometry (AMS-15)**, Webseite: <https://ams15.ansto.gov.au>

07.-11.09., Regensburg, D: **International Conference Series on Environmental & Food Monitoring (ISEAC-41)**, Webseite: [www.iseac-conferences.org](http://www.iseac-conferences.org)

21.-25.09., Budapest, HU: **ISC 2020 – 33rd International Symposium on Chromatography**, Webseite: <http://isc2020.hu>

23.-25.09., Berlin, D: **Electrochemistry 2020**, Webseite: [www.gdch.de/electrochemistry2020](http://www.gdch.de/electrochemistry2020)

16.-18.11., Shanghai, CN: **analytica China**, Webseite: [www.analyticachina.com](http://www.analyticachina.com)

---

## Tagungen 2021

---

22.-25.03., Leipzig, D: **ANAKON 2021**

20.-24.06., Düsseldorf, D: **HPLC 2021**, Webseite: [www.hplc2021-duesseldorf.com](http://www.hplc2021-duesseldorf.com)

22.-27.08., Nijmegen, NL: **EuroAnalysis 2021**, Webseite: [www.euroanalysis2021.nl](http://www.euroanalysis2021.nl)



Messe München  
Connecting Global Competence



## ANALYTICA CONFERENCE 2020

Über 170 hochrangige internationale Wissenschaftler berichten in rund 180 Vorträgen, was moderne Methoden in der Analytik, den Life Sciences, der Biotechnologie und in der Medizin leisten, wo sie eingesetzt werden und wo ihre Grenzen liegen: [analytica.de/konferenz](https://www.analytica.de/konferenz)

Organisiert von:



**analytica**  
conference

31.03. – 02.04.2020 | *analytica conference*  
Messe München | ICM