

## **AK Chemometrik und Qualitätssicherung Jahresbericht 2012**

Der Arbeitskreis hat derzeitig 172 Mitglieder (Stand: 01.10.2012). Mit 13 neuen Mitglieder sowie einem Austritt hat der Mitgliederstand im Laufe des Berichtsjahres leicht zugenommen.

Nach der Neuwahl des Vorstandes fand am Rande der interdisziplinären Doktorandentagung die Konstitution statt. Im Interesse einer effizienten Arbeitsteilung hat Dr. Wolf von Tümpling (Neuwahl) den ersten Vorsitz übernommen und Dr. Jürgen von Frese (Neuwahl) sich zum 2. Vorsitz bereit erklärt. Des Weiteren erklärten Frau Prof. Waltraud Kessler (Wiederwahl) und Dr. Heinrich Kipphardt (Neuwahl) ihre Zustimmung zur aktiven Mitarbeit im Vorstand.

Durch die Erarbeitung des neuen Flyers, maßgeblich durch Dr. von Frese, sowie deren Verteilung wurde die Neuausrichtung des Arbeitskreises publik gemacht.

Der interdisziplinäre Charakter der Chemometrik fand seinen organisatorischen Ausdruck in der bewährten Zusammenarbeit zwischen den AK Chemometrik und Qualitätssicherung, Chemo- und Biosensoren, Elektrochemische Analysenmethoden sowie Prozessanalytik in der Fachgruppe Analytische Chemie und dem Ausschuss für Qualitätsmanagement von Eurolab/D. Nach dem erfolgreichen Start im Jahr 2007 wurde vom 26.-28.02.2012 in Berlin die 6. interdisziplinäre Doktorandentagung durchgeführt. Die etwa 30 Teilnehmer diskutierten in angenehmer und offener Atmosphäre. Bei einer Stadtrallye hatten die Gruppen spannende Aufgaben zu lösen und lernten sich dabei auch über die Arbeitskreise hinaus kennen. Der Vorstand des Arbeitskreises dankt in diesem Zusammenhang der „BAM“-Mannschaft vom AK Prozessanalytik insbesondere Dr. M. Maiwald für die sehr gute Vorbereitung und Durchführung der Doktorandentagung. Die nächste Doktorandentagung ist für den Februar 2013 erneut in Berlin geplant. Interessierte Doktorandinnen und Doktoranden sind zur Teilnahme aufgerufen. Detaillierte Informationen werden auf den Internetseiten der AK veröffentlicht.

Im März 2012 fand in Zusammenarbeit mit dem DIN-Unterausschuss Chemometrie (Obmann: Dr. M. Winterstein, Wessling Laboratorien Oppin) ein Diskusstreffen in Hamburg statt und ein weiteres im November am Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ). Das Ziel der Arbeitsgruppe besteht in der Erarbeitung von Handlungsempfehlungen und Normen für den Praktiker, die in den Deutschen Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung (DEV) veröffentlicht werden. Interessierte Kolleginnen und Kollegen sind herzlich eingeladen mitzuarbeiten. In diesem Jahr wurden die Arbeiten zu einem neuen Schwerpunkt „Prüfung auf Grenzwertverletzung unter Berücksichtigung der Messunsicherheit sowie zeitlicher und räumlicher Variabilität“ weiter bearbeitet. Ein Abschluss ist für 2012 vorgesehen.

Mit Bezug zur Qualitätssicherung hat Dr. H. Kipphardt im Rahmen des 18. Kolloquium EUROLAB-D, Berlin, zum Thema: „Messtechnische Rückführung in der Elementanalytik“ einen Vortrag gehalten.

Unter Leitung von Frau Prof. W. Kessler gemeinsam mit Dr. J. von Frese wurde in Zusammenarbeit mit der DECHEMA vom 11.-13. 6. der Kurs: „Data Mining mit multivariaten Methoden und Support Vector Machines“ abgehalten.

Auf der CAC in Budapest wurde durch Dr. von der Frese eine Keynote lecture gehalten und die Session: Application of Chemometrics to Chromatography and Spectroscopy geleitet. Der zusätzlich von ihm angebotene Kurs "Support Vector Machines Made Easy" fand bei vielen Teilnehmern regen Zuspruch.

Einer Einladung der Karlsuniversität Prag folgend, wurde vom 29.10.-01.11.2012 durch Dr. v. Tümpling ein Kompaktkurs zum Thema: „Quality assurance in analytical laboratories“ gehalten.

Dankbar wurden die Einladungen von Spectaris zum Laborforum am 07.11.2012 in Frankfurt/M. zum Einführungsvortrag von Prof. Dr. Einax sowie zur Diskussionsleitung und der Mitarbeit im Podium des Diskussionsforums durch Dr. von Tümpling und Dr. von Frese und Prof. Dr. Einax wahrgenommen, um u. a. auch auf die Aktivitäten des Arbeitskreises aufmerksam zu machen.

Wolf von Tümpling, Magdeburg und  
Jürgen von der Frese, Utting am Ammersee