



Forschungsbericht

Prof. Dr. Michaela Wirtz
2017



**Hochschule
Bonn-Rhein-Sieg**
University of Applied Sciences

Prof. Dr. Michaela Wirtz

*Prof.'in für Chemie, insbesondere
Instrumentelle Analytik und
Physikalische Chemie
&
Institut für Detektionstechnologien*



Hochschule Bonn-Rhein-Sieg

Rheinbach

Von-Liebig-Strasse 20

53359 Rheinbach

Raum A 112

Tel.: +49 2241 865 9723

michaela.wirtz@h-brs.de

An dieser Stelle möchte ich die Gelegenheit nutzen, mich bei allen Mitarbeiterinnen, Mitarbeitern, Kolleginnen und Kollegen sowohl des Fachbereichs als auch denen im Präsidium und der Verwaltung in St. Augustin für die herzliche Unterstützung zu bedanken.

Ich wünsche uns allen eine erfolgreiche Zusammenarbeit.

Rheinbach, im Februar 2017



Foto: Eric Lichtenscheidt

Angewandte Forschung im Dienste einer offenen und sicheren Gesellschaft

*Stoffwissen erlangen, Szenarien
verstehen, Technik entwickeln –
Prozesse, die Ideen erfolgreich in
Produkte umsetzen*

Die Sicherheitsforschung ist ein eigenständiger wichtiger Forschungsbereich und das Thema Zivile Sicherheit – hier die Bedrohungen durch Terrorismus - fester Bestandteil der Hightech-Strategie der Bundesregierung. Für den Standort Deutschland als größten europäischen Industriestaat und Transitland im Zentrum von Europa ist eine umfassende Kompetenz im Bereich der Sicherheitstechnologien - hierzu zählt auch das Themengebiet Detektionstechnologien - von essentieller Bedeutung.

In 2010 wurden verschiedene Forschungsaktivitäten der Hochschule Bonn-Rhein-Sieg im neu gegründeten Institut für Detektionstechnologien (IDT) gebündelt. ***"Gefahren sichtbar machen, Gefahren abwenden"*** ist die Leitlinie unserer Anstrengung in Forschung und Lehre.

Die Entwicklung und Bewertung von neuen chemischen Sensoren und Detektionsverfahren zur Identifizierung und Lokalisierung von Gefahrstoffen und Gegenständen mit Gefahrstoffen - hier insbesondere von Explosivstoffen, Drogen, Minen und Sprengvorrichtungen - ist im Rahmen der Abwehr von Bedrohungen für Personen und Einrichtungen ein zentrales Arbeitsgebiet des Institutes für Detektionstechnologien (IDT).

Umfangreiche Forschungsprojekte auf den Themengebieten Sensorik, Analytik und der Detektion von Explosivstoffen wurden in den zurückliegenden Jahren durchgeführt. Besonders im Bereich der Bewertung von Sensoren und Detektoren sowie der Entwicklung und Anwendung von Verfahren im Bereich der Spurenanalytik konnten spezifische Kernkompetenzen aufgebaut werden.

Zitat: www.h-brs.de/de/idt

weitere Ansprechpartner:

Prof. Dr. Gerhard Holl

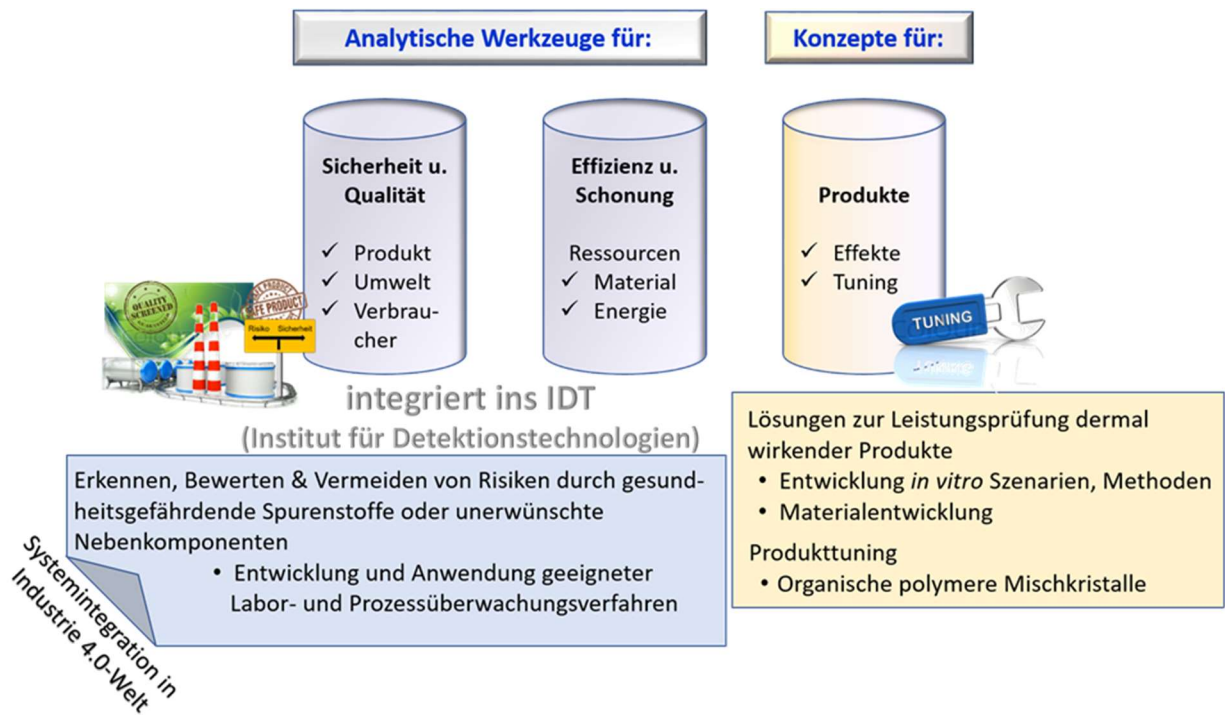
Prof. Dr. Peter-Michael Kaul

Wegweiser

Inhalt

Aktivitätsfelder	1
Forschungsbestrebungen:	2
Laufende Forschungsprojekte 2017:	6
In Planung befindliche Forschungsprojekte:	7
Kooperationspartner	9

Aktivitätsfelder



Forschungsbestrebungen:

Erkennen, Bewerten & Vermeiden von Risiken durch gesundheitsgefährdende Spurenstoffe (Umwelt-, Lebensmittel- und Produktgifte) am Beispiel der Targetanalyten N-Nitrosamine (Abkürzung NNO)

N-Nitrosamine sind organische Stickstoffverbindungen, die unter bestimmten Bedingungen aus nitrosierenden Agenzien und nitrosierbaren sekundären Aminen gebildet werden können. Die Nitrosamine entstehen in technischen Prozessen z.T. unvermeidbar als unerwünschte Nebenprodukte oder Verunreinigungen, häufig im Spuren bis Ultraspurenbereich (ppm bis ppb Level). Sie geraten aufgrund ihres kanzerogenen Potentials immer wieder in öffentliche Diskussionen, u.a. in Nahrungs- und Genussmitteln im Zusammenhang mit Herbizid-verwendung (Glyphosat), in Kosmetika, Bedarfsgegenständen aus Latex (Babynuckel, Luftballons). Für diese Kanzerogene kann kein unmittelbarer, sicherer toxikologischer Schwellenwert abgeleitet werden (BfR, Bundesinstitut für Risikobewertung) und deshalb gilt das Bestreben, zum Schutz der Verbraucher die Exposition gegenüber N-Nitrosaminen so weit wie möglich zu minimieren. Teilweise wird versucht, über Grenzwertdefinitionen den Verbraucherschutz zu gewährleisten. Die Grenzwerte beziehen sich allerdings häufig auf wesentliche und gängige Leitsubstanzen und erfassen in der Regel nicht alle Nitrosamine, die in technischen Prozessen entstehen können. Daher liegt die Verantwortung bei den Herstellern für die Verkehrsfähigkeit ihrer Produkte. Die sichere Einhaltung dieser Grenzwerte sowie die Gewährleistung eines umfassenden Produktschutzes, in dem auch Nitrosamine erfasst und bewertet werden können, die nicht gesetzlich reguliert sind, stellt sowohl Produzenten als auch Testinstitute immer wieder vor analytische Herausforderungen. Die Vielseitigkeit an möglichen Reaktionsbedingungen für eine Nitrosaminbildung in Kombination mit mehr oder minder „risikobehafteten“ Nachweismethoden erschwert erheblich eine erfolgreiche Qualitätssicherung und in noch stärkerem Maße eine zuverlässige Risikovermeidungsstrategie für die Produkthersteller. Die Risikobehaftung liegt einerseits daran, dass sich die Spurengehalte teilweise den bisher etablierten Verfahren in ihrer Nachweisfähigkeit entziehen können, während andererseits auch Überbefunde auftreten können. In den letzten 20 Jahren wurden verschiedene Analyseverfahren für N-Nitrosamine entwickelt und etabliert, spezifische und nicht spezifische Methoden. Die spezifischen Methoden lassen die selektive Bestimmung einzelner, definierter Nitrosamine zu und arbeiten mit hinreichender Empfindlichkeit auch sehr gut in „idealeren, einfacheren“ Probenmatrices (z.B. Wasser oder wässrige Lösungen). In komplexeren, nicht wässrigen Probenmatrices jedoch erfordern die Methoden ein zunehmendes Maß an vorgeschalteter manueller Probenvorbereitung (z.B. Säulenchromatographie, Flüssig-Flüssig Extraktion, Ionen-chromatographie). Dadurch wird die Nachweisempfindlichkeit reduziert, und es steigt erheblich das Risiko falsch negativer Resultate aufgrund sinkender Wiederfindungsraten bis hin zur Unmöglichkeit der Bestimmung. Zudem wächst der Analysenumfang bei gleichzeitig abnehmender Robustheit des Verfahrens. Ein unspezifisches Verfahren, die sogenannte Totalnitrosaminmethode (oder auch ATNC-Methode für = Apparent Total N-nitroso group Content), kann diese Nachteile zwar teilweise lösen, dafür besteht hier aber ein nicht unerhebliches Risiko von falsch positiven Resultaten. Zudem besitzen alle bis dato vorhandenen Verfahren keine Eignung zur direkten Prozessüberwachung in Form von prozessintegrativer Analytik.

An diesen Punkten setzen die geplanten NNO Forschungsvorhaben an mit der allgemeinen Zielrichtung, möglichst universelle, robuste Testsysteme bzw. Verfahren mit breiter Anwendbarkeit und hoher Empfindlichkeit zu entwickeln und diese applikativ auszureifen für den Einsatz in QC Laboren und Testinstituten. Ferner sollen mit solchen Systemen in enger Kooperation mit

Industriepartnern spezifische Bildungsszenarien untersucht werden, um effektive, prozessorientierte Risikopräventionen ableiten zu können. Besonderer Wert wird dabei auch auf eine Integrationsfähigkeit in vernetzte IT Systeme im Kontext der industriellen Digitalisierungsbestrebungen (→ Industrie 4.0) oder digitalisierte Analysenlabore gelegt. Darüber hinaus besteht die Zielsetzung, geeignete Verfahren zur Implementierung in chemische Produktions- oder Logistikprozesse weiterzuentwickeln (Miniaturisierung, Sonden und Sensoren Technologie).

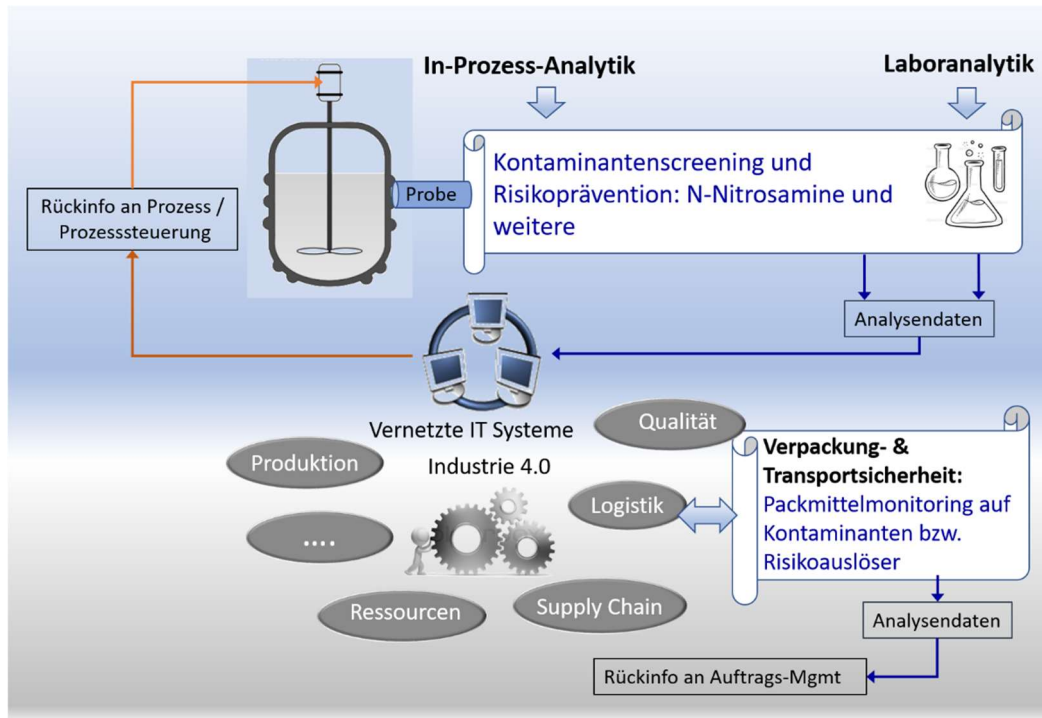


Abb. F&E 1.1: Schematische Einbettung der Spurenanalyse von Kontaminanten wie N-Nitrosamine als Laboranalytik, Prozessüberwachung und Verpackungsmonitoring in die bidirektionale Kopplung der physischen und virtuellen Umgebung im Sinne von Industrie 4.0

Neben den N-Nitrosaminen stehen noch weitere Kontaminanten im Fokus, beispielsweise Mineralölrückstände, PAKs, Pestizide ...

Die Aktivitäten der Spurenanalyse von Kontaminanten werden integriert in die F&E-Aspekte des Instituts für Detektionstechnologien (Gefahrstoffdetektion).

Forschungsbestrebung:

Erkennen, Bewerten & Vermeiden von Risiken durch unerwünschte Nebenkomponenten (Abkürzung NKS)

In nahezu jedem Herstellprozess entstehen neben den Hauptproduktkomponenten auch weitere Nebenkomponenten (NK), die einerseits typisch sein können für das Produkt und den technischen Produktionsprozess sowie andererseits auch atypisch, z.B. bei unvorhergesehenen Prozessbedingungen. Letztere NK können auch z.B. durch Kreuzkontaminationen auftreten in industriellen Prozessen, bei denen Multipurpose Reaktoren zum Einsatz kommen. In der Qualitätskontrolle ist man in der Regel auf die Analyse der produkttypischen Spezifikationen - Haupt- und Nebenkomponenten und den vorhersehbaren Prozesseinflüssen und -änderungen im Rahmen von change control Prozeduren fokussiert. Unvorhergesehene NK liegen häufig außerhalb des Routinebetrieb-Blickwinkels, können jedoch im Produkt selbst oder bei der Weiterverwendung zu unplanmäßigen Qualitätsabweichungen führen. Wenn in GMP-regulierten Umfeldern die Analytik sogar ausschließlich durch Monographien bestimmt wird, kann das Risiko u.U. sogar noch höher sein, da eine Monographiemethode nicht selten einzelne Komponenten überdeckt. Stetig wird in entsprechenden Gremien an der Verbesserung der Monographien gearbeitet, allerdings bei der Vielzahl der Methoden braucht dies einige Zeit. Im Routinealltag von Industrien bleibt für ein systematisches Nebenkomponentenscreening entlang ihres gesamten Produktportfolios und der kompletten Wertschöpfungskette oft keine Zeit. Hier bestehen daher in Kooperation mit der Hochschule, die einen stark applikativen Fokus aufweist und sehr industrienah ausgerichtet ist, für Industriepartner attraktive Möglichkeiten.

Die F&E Vorhaben: Nebenkomponentenscreening - NKS - setzen hier an mit ihren jeweiligen o.a. Zielen. Im engen Kooperationsverbund kann die Methodenentwicklung und das NKS an der Hochschule systematisch erfolgen und die wesentlichen Resultate reintegriert werden in den industriellen Routinealltag.

Forschungsbestrebung:

Lösungen zur Leistungsprüfung dermal wirkender Produkte (Abkürzung DERMA)

Neben dem pharmazeutischen Sektor können auf dem Gebiet dermalen Applikationen auch für kosmetische oder kosmetopharmazeutische Firmen zur Beurteilung der Leistungsfähigkeit ihrer Produkte geeignete, standardisierbare *in vitro* Testsysteme, deren Ergebnisse einer *in vivo* Übertragung standhalten, wichtig sein.

Wichtige Bestandteile solcher Testsysteme sind neben dem Wirknachweis auch die Verfügbarkeit von geeigneten dermalen Modellen/Substraten und geeignete Nachweis-verfahren, die Aussagen über die Produktlokalisierung, -anhaftung und -verteilung machen können. Die Entwicklung von Modellsubstraten auf künstlicher und z.T. natürlicher Basis sowie mit Analyseverfahren zur Produktbeobachtung sind Foki dieser Forschungsbestrebung. Hier bestehen in Anknüpfung zu anderen Arbeitskreisen der Biomaterialforschung und der Werkstoffprüfung an der Hochschule sehr wertvolle weitere Kompetenzen.

Forschungsbestrebung:

Produkttuning: Organische polymere Mischkristalle (Abkürzung OMi)

Die OMi Forschungsvorhaben konzentrieren sich auf die Entwicklung von Produktkonzepten im Bereich organischer Mischkristalle (solid solutions) aus Polymeren auf Basis nachwachsender Rohstoffe. Organische solid solutions sind bereits bei Dispersionsfarbstoffen patentiert. Für Emulgatoren basierend auf veredelten Produkten z.B. auf pflanzlicher Basis könnte man sich ebenso ein patentierbares Potential für Industrien auf dem Agro-, Pharma-, Personal Care- oder Home Care-Sektor vorstellen. In Kooperation mit der Solid Chem GmbH in Bochum und weiterer Industriepartner mit Interesse an den Produktkonzepten wollen wir gemeinsam diese Forschung vorantreiben.

Laufende Forschungsprojekte 2017:

Titel: NNO-Initial

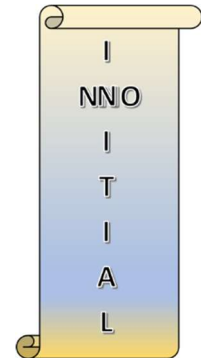
Projektleitung: **Prof. Dr. Michaela Wirtz**

Mitarbeiter: **BSc Gerrit Winter**

Fachbereiche und Institute: Angewandte Naturwissenschaften, Institut für Detektionstechnologien (IDT)

Zeitraum: 01.01.2017-31.12.2017

Förderungsart: Öffentlich - Hochschulstarterförderung HEP2



Das Projekt NNO-Initial beschäftigt sich mit der anwendungsbezogenen Entwicklung eines neuen Verfahrens zur schnellen, selektiven Analytik von N-Nitrosaminen und einer Machbarkeitsstudie zur Eignung der Ionenmobilitätsspektroskopie zur hochsensitiven Detektion von N-Nitrosaminen in verschiedenen Produktmatrices

In Planung befindliche Forschungsprojekte:

NNO-RoSe:

Anwendungsbezogene Entwicklung eines neuen Verfahrens zur schnellen, selektiven Analytik von N-Nitrosaminen

In diesem Projekt soll auf Basis der Machbarkeitsstudie im Rahmen von NNO-Initial zunächst ein sensitives, selektives, nachweissicheres und ökonomisches Analysenverfahren/ Testsystem aufgebaut werden, das auf ein breites Spektrum an Produktmatrices zuverlässig anwendbar ist mit möglichst geringer und hoch automatisierbarer Probenvorbereitung. Diese Technologie soll nachfolgend neben der applikativen Ausreifung insbesondere auch in punkto Robustheit optimiert werden, dass sie problemlos insbesondere von Qualitätskontrolllaboratorien im Schichtbetrieb eingesetzt werden kann. Aber auch für Testinstitute soll das Verfahren eine sinnvolle Ergänzung für den Routinebetrieb darstellen. Parallel wird starker Wert darauf gelegt, eine Integration in eine vernetzte IT Welt im Kontext von Industrie 4.0 oder ein digitalisiertes Analysenlabor zu ermöglichen.

Darüber hinaus sollen mit dem Verfahren Bildungsmechanismen im Ultraspurenbereich selektiv und hochempfindlich untersucht werden, die es nachfolgend erlauben, geeignete Präventionsstrategien zum Produkt- und Verbraucherschutz für Industrie und Behörden ableiten zu können.

NNO-InPro(cess):

Entwicklung von echtzeitfähigen, miniaturisierten Testsystemen oder Sensoren zur In-Prozessüberwachung von chemischen Kontaminanten wie N-Nitrosamine

Auf Basis der Erkenntnisse von NNO-Initial und NNO-RoSe sollen in diesem Projekt echtzeitfähige, miniaturisierte Testsysteme oder Sensoren auf spektroskopischer und/oder spektrometrischer Basis entwickelt werden, die eine intelligente In-Prozessüberwachung hinsichtlich chemischer Kontaminanten zulassen. Neben der Entwicklung soll ebenso die applikative Eignung unter Realbedingungen in enger Kooperation mit interessierten Industrie-partnern getestet werden. Auch hierbei steht wieder die gleichzeitige Implementierbarkeit des Verfahrens in die digitale Industrie 4.0 Welt im Fokus. Die Vision hierbei ist, dass das Produkt während der Fertigung bzgl. seines Gehaltes an toxischen Kontaminanten wie z.B. Nitrosamine den Herstellprozess fortlaufend informiert und die Prozesssteuerung mit entsprechend hinterlegten Risikovermeidungsstrategien darauf reagiert. Dadurch würde mit Blick auf die unerwünschten, toxischen Verunreinigungen eine hohe „first pass quality“ erreicht und folglich kostspielige Produktaufarbeitungen, Produkt-verbrennungskosten vermieden. Solche Testsysteme können und sollten in weiteren Schritten/Folgeprojekten dann zunehmend auf weitere toxische Kontaminanten wie z.B. PAKs, Dioxine, PCBs erweitert werden.

NNO-PMM:

Packmittelmonitoring auf N-Nitrosamine und deren Risikopotentialträgern

Auf Basis der Erkenntnisse der anderen NNO Projekte sollen in diesem Projekt schnelle, miniaturisierte Systeme (handhelds), Sonden oder Sensoren und Verfahren auf spektroskopischer und/oder spektrometrischer Basis entwickelt werden, die im Rahmen der Transportsicherheit in der Packmittelüberwachung/ -kontrolle eingesetzt werden können. Die beste Prävention innerhalb eines Herstellungsprozesses in Bezug auf N-Nitrosamine ist leider wirkungslos, wenn die Transportbehälter durch entsprechende Risikoträger während der Produktlagerung die Bildung der Spurenstoffe initiieren oder katalysieren. Hierbei können Schwächen in der Wiederverwendung nach Reinigung sowie der Fertigungsprozess des Lagerbehälters an sich ein Problem darstellen. Insbesondere Behälter auf Kunststoffbasis können teilweise Risikoträger für eine N-Nitrosaminbildung im Rahmen ihres Fertigungsprozesses mitbringen oder durch starke Adhäsionsfähigkeiten diese Träger entsprechend deponieren. Eine einfach anwendbare und schnelle Technologie zum Präventionsscreening soll hierbei helfen.

Kooperationspartner

Henkel AG & Co KGaA

Abteilung: Zentrale Analytik
Henkelstraße 67
D - 40191 Düsseldorf

Ansprechpartner:
Dr. Matthias Frischmann
Rolf Herrmann

Institut für Energie- und Umwelttechnik e. V.

Bliersheimer Str. 58 – 60
47229 Duisburg
Germany

Ansprechpartner:
Dr. Thorsten Teutenberg
Dr. Jochen Türk

Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung (IFA)

Alte Heerstraße 111
53757 Sankt Augustin

Ansprechpartner:
Prof. Dr. Dietmar Breuer

solid-chem GmbH

Universitätsstraße 136
44799 Bochum

Ansprechpartner:
Prof. Dr. Roland Boese, FRSC
Dr. Carsten Schauerte

G.A.S. Gesellschaft für analytische Sensorsysteme mbH

Otto-Hahn-Straße 15
44227 Dortmund

Ansprechpartner:
Thomas Wortelmann
Dr. Christopher Rosin

Hochschule Hamm-Lippstadt

Instrumentelle und analytische
Sensortechnik

Ansprechpartner:
Prof. Dr. Stefanie Sielemann

