



Chemie, Life Sciences & Biotechnologie

SCHWEIZERISCHER
VERBAND
DIPLOMIERTER
CHEMIKER FH

ASSOCIATION
SUISSE
DES CHIMISTES
DIPLOMÉS HES

À JOUR

Nr. 1/21 | April/Avril 2021

www.svc.ch

Wirtschaftliche Nutzung von Verbrennungswasser

→ Seite 5

Wasser ist überlebenswichtig!

→ Seite 7



75 Jahre

SVC Jubiläumsbroschüre,
demnächst in Ihrem Briefkasten!

**Schweizerischer Verband
Dipl. Chemiker FH**

Chemie, Biotechnologie, Life Sciences

Inhalt

<i>Deutsch</i>	SVC	Das Wort des Präsidenten	4
		Wirtschaftliche Nutzung von Verbrennungswasser (Oxidationswasser) aus Heizungen	5–6
		Wasser ist überlebenswichtig!	7
	Consulting & Education	Beschichtung von Silikonimplantaten zur pharmakologischen Hemmung der Kapselfibrose	8–9
<i>English</i>		Metal complexes for animal feed industry	9–10
<i>Deutsch</i>		Thermokinetisches Modell der Zersetzungsreaktion von Hydroxylamin	11–13
<i>Français</i>	SVC	Le mot du Président	14

Impressum

Das À JOUR erscheint zweimal jährlich als offizielles Bulletin des SVC/À JOUR parait deux fois par an

Schweizerischer Verband diplomierter Chemiker FH/Association suisse des chimistes diplômés HES

Redaktion À JOUR

CH-4000 Basel

www.svc.ch

Chefredakteurin/Rédacteur en chef: Alessandro Urso; redaktor@svc.ch

Übersetzungen/Traduction: Yves Santa Eugenia

Nächste Ausgabe/Prochain numéro: September/Septembre 2021; Redaktionsschluss/Clôture de la rédaction: 30. Juli/Juillet 2021

Nachdruck von Texten nur unter Quellenangabe / Pas de publication des textes sans source d'information

Verantwortlich für den fachlichen Inhalt sind die Autoren der Artikel / Les auteurs des articles sont responsables du contenu spécialisé

Die Einteilung der Sprachen erfolgte nach dem Alphabet / La répartition des langues se fait selon l'alphabet

In manchen Texten wird nur die männliche Anrede verwendet; dies dient dem Lesefluss und soll niemanden diskriminieren /

Dans les textes, seule le genre masculin est utilisé; cela contribue à une meilleure lisibilité et nul ne doit y voir une quelconque discrimination

Beiträge und Feedbacks sind erwünscht. Es besteht jedoch kein genereller Anspruch auf Abdruck. /

Les commentaires et les feedbacks sont les bienvenus. Il n'y a toutefois aucune obligation générale de publication.

Titelbild/image de couverture: Panoramic banner of water drops on blue metal – Bildquelle/Source: AdobeStock/exclusive-design

Das Wort des Präsidenten

Liebe SVC-Mitglieder Liebe SVC-Sympathisanten

Ich freue mich, zusammen mit unserem Redaktionsteam das erste À JOUR des Jahres 2021 zu präsentieren. Denn wir haben Grund zum Feiern! Unser Berufsverband wird dieses Jahr 75 Jahre alt. Wir vom Vorstand hoffen deshalb, im Oktober 2021 unsere Generalversammlung auf der Burg Lenzburg abzuhalten, um dort auch unser Jubiläum gebührend feiern zu können.

Der Schweizerische Verband Dipl. Chemiker FH (SVC) ging ursprünglich aus der im Jahre 1946 gegründeten «Vereinigung diplomierter Chemiker Schweizerischer Techniken (VCT) hervor. Nach mehreren Namenswechseln entstand mit dem SVC der einzige Berufsverband in der Schweiz, der die spezifischen Interessen aller Absolventinnen und Absolventen eines naturwissenschaftlichen Studiums an einer Fachhochschule vertritt.

Ursprünglich als Berufsverband für alle Dipl. Chemikerinnen HTL und Dipl. Chemiker HTL sowie anschliessend Dipl. Chemikerinnen FH und Dipl. Chemiker FH gestartet, bietet der SVC heute nach der Bologna-reform allen Absolventinnen und Absolventen eines naturwissenschaftlichen Bachelor- oder Masterstudiengangs an einer Fachhochschule eine verbandsspezifische Heimat. Sei es in den Vertiefungsrichtungen Chemie, Biotechnologie, Pharmatechnologie, Medizinaltechnologie oder Life Sciences. Und dies über die Sprachgrenzen der Deutschschweiz und der Westschweiz hinweg, um alle Fachhochschulstandorte mit naturwissenschaftlichen Studiengängen einzubeziehen. Aktuell sind dies Sion



(VS), Fribourg (FR), Muttenz (BL) und Wädenswil (ZH).

Nun 75 Jahre später präsentiert sich der SVC mit annähernd 1000 Mitgliedern eigenständig und unabhängig. Um unsere Reichweite als Berufsverband und die Angebote für unsere Mitglieder zu verbessern, wurden wir vom SVC im Jahre 2015 Mitglied von FH Schweiz, dem Dachverband für alle Absolventinnen und Absolventen eines Fachhochschulstudiums.

In den nächsten Jahren wollen wir die Wahrung und die Förderung der Berufs- und Standesinteressen im In- und Ausland aller Absolventinnen und Absolventen eines naturwissenschaftlichen Studiums an einer Fachhochschule verbessern. Wir wollen stärker mit der Industrie, anderen Berufsverbänden, den Wirtschaftsverbänden, den Bran-

chenverbänden, den Fachhochschulen und den Bildungsbehörden in den Kantonen und beim Bund zusammenarbeiten. Wir wollen neben einem neuen Auftritt im Print- und Onlineformat auch den grossen Schritt der Digitalisierung wagen. Dafür sind wir auf der Suche nach neuen Vorstandsmitgliedern.

Ich wünsche viel Spass und Spannung bei der Lektüre unseres neuen À JOUR und hoffe auf eine baldige persönliche Begegnung.

Freundliche Grüsse
**Schweizerischer Verband
Dipl. Chemiker FH (SVC)**

Marc Oliver Bürgi
Präsident

Bildquelle: Marc Bürgi

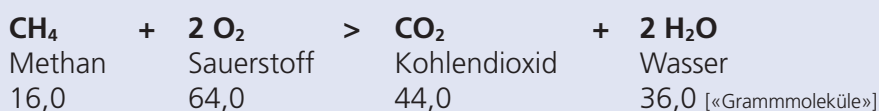
Wirtschaftliche Nutzung von Verbrennungswasser (Oxidationswasser) aus Heizungen

Autor: Ebo Aebischer

Neben Kohlendioxid entsteht bei jeder Verbrennung fester, flüssiger oder gasförmiger Energieträger Wasser. Wird zu Heizzwecken Erdgas verbrannt, dann ist das entstehende Wasser von besonderer Reinheit. Es handelt sich dabei um eine Neubildung von Wasser infolge der chemischen Umwandlung der Reaktanden Methan und Sauerstoff (Synthese). Reinwasser muss je nach Anforderung ansonsten durch Destillation, Ionenaustausch oder durch Umkehrosmose des auf der Erde bereits vorkommenden Wassers bereitgestellt werden.

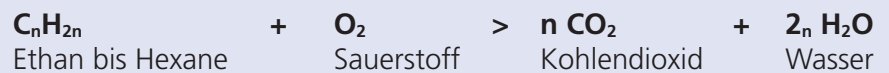
Bei jeder Planung einer neuen Heizungsanlage sollte deshalb die Gewinnung dieses wertvollen Verbrennungswassers (oft fälschlicherweise nur als «Kondensat» bezeichnet) unbedingt in Erwägung gezogen werden.

Bei dem aus Gasheizungsanlagen anfallenden Oxidationswasser handelt es sich immer um reines Wasser, das durch die Verbrennung von (hauptsächlich) Methan entsteht. Das Reaktions- oder Verbrennungsprodukt Wasser entsteht durch die nachstehende chemische Umsetzung:



Die in die Schweiz gelieferten Erdgase bestehen zu ca. 89 bis 95% aus Methan. Weiter enthalten sie als brennbare Kohlenwasserstoffe zwischen ca. 2 und 5% Ethan, ca. 0,5 bis 1% Propan und bis in den

Promillebereich iso-Butan, n-Butan, iso-Pentan, n-Pentan und schliesslich Hexane (ca. 0,01 bis 0,06%). Auch diese Kohlenwasserstoffe verbrennen ausschliesslich zu Wasser und Kohlendioxid:



Rein rechnerisch werden durch die Verbrennung von einem Kubikmeter Erdgas (714 g) rund 1,6 Liter reines Wasser erzeugt. Die Menge des kondensierten Wassers liegt je nach Abgastemperatur der Heizungsanlage bei 1,3 bis 1,5 Litern. Die tatsächlich abgesonderte Menge Wasser ist abhängig von der Rücklaufstemperatur des Heizungswassers, dem Luftüberschuss im Gaskessel und der Grösse der Oberfläche der Nachschaltheizflächen im Gasheizkessel.

In der Übergangszeit von April bis Oktober ist je nach Betrieb der Heizung mit einer sehr viel kleineren Produktion von Verbrennungswasser zu rechnen. In einem Einfamilienhaus kann davon ausgegangen werden, dass zwischen 1500 bis 3000 Liter solchen Reinwassers pro Jahr gewonnen werden können.

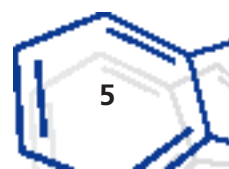
Die Reinheit dieses Wassers hängt unter anderem auch von der Menge an zugesetzten schwefelhaltigen Geruchsstoffen, sogenannten Odoraten, ab sowie – wegen des hohen Lösungsdrucks reinen Was-

sers – davon, aus welchen Materialien die Abgasleitungen und die Leitungen für das Kondensat hergestellt sind. Bei Verwendung von Glas oder geeignetem Plastik für die Leitungen, mit denen das Verbren-

nungswasser («Kondensat») in Berührung kommt, entfällt eine Verunreinigung durch Metallspuren (Aluminium, Chrom, Eisen, Nickel).

Eine Kondensat-Sammelanlage besteht aus dem eigentlichen Sammelbehälter, den Zu- und Ableitungen, einem Siphon und Armaturen. Damit keine Verunreinigungen aus der Luft in die Kondensat-Leitung («Kamin») fallen können, ist das in die Luft führende Rohr («Kamin») entsprechend zu gestalten oder eine grossflächige Haube aus feinmaschigem Kunststoff- oder rostfreiem Stahlgewebe aufzusetzen. Bei der Konstruktion der gesamten Anlage sind dabei die besonderen Sicherheitsanforderungen im Umgang mit Gasheizanlagen zu berücksichtigen. Eine solche Kondensat-Sammelanlage ist als Zusatz zu einer Gasheizung anzusehen und muss vom Hersteller der Gasheizung mit einer Konformitätserklärung der Luftreinhalteverordnung LVR in Betrieb genommen werden.

Kondensate aus Gasheizungen sind schwach sauer (der pH-Wert liegt etwa zwischen 3 und 5). Dies zunächst wegen des bis zur Sättigung gelösten Kohlendioxids, das ja gleichzeitig mit der Bildung von Wasser entsteht. Weiter enthält das Verbrennungswasser von Erd-



gas Spuren von Sulfiten und Sulfaten, die durch die Verbrennung der beigemischten Odorate entstehen. Gegebenenfalls können auch kleinste Mengen an Nitriten und Nitraten enthalten sein.

Bei entsprechend umsichtiger Verwendung der Materialien, mit denen das Wasser von der Entstehung bis zum Auffangen in Berührung kommt, kann damit gerechnet werden, dass die Leitfähigkeit ungefähr zwischen 10 und 300 $\mu\text{S}/\text{cm}$ liegt. (Da das Wassermolekül ein Ampholyt ist, der mit sich selbst reagieren kann [mit Säuren zu H_3O^+ und mit Basen zu OH^-], hat selbst Reinstwasser eine geringe elektrische Leitfähigkeit. Der rechnerische Grenzwert beträgt 0,055 $\mu\text{S}/\text{cm}$ bei 25 °C.

Im Sinne einer besseren Nutzung der Ressourcen ist es angezeigt, das bei der Verbrennung von Erd- oder Biogas gebildete an sich sehr reine Wasser nicht in das Abwas-

ser zu leiten. Es drängt sich deshalb auf, bei der Neuinstallation einer Gasheizung eine geeignete Auffanganlage mit einem Ablassventil (zur Wasserentnahme) und einem Überlauf einzurichten. Auch die Nachrüstung bestehender Gasheizungen mit einer solchen Auffang-Einrichtung für das anfallende Kondensat ist jedenfalls angezeigt.

Das Verbrennungswasser kann ohne weiteres für diverse Anwendungen im Haushalt eingesetzt werden. Dazu gehört unter vielem anderen das Füllen von Luftbefeuchtern und Dampfbügeleisen, die Speisung von Steamern, von Kaffeemaschinen, von Wasserkochern, das Giessen von Topf- und Zimmerpflanzen, die Bewässerung von Hydrokulturen, die Verwendung für Bleiakkumulatoren, das Reinigen von Fenstern und überall dort, wo bisher demineralisiertes oder vollentsalztes Wasser eingesetzt wurde.

Es ist sogar denkbar, dieses Oxidationswasser nach dem Abkochen durch Zusatz eines entsprechenden Mineraliengemisches als Trinkwasser zu verwenden.

Weiter besteht natürlich die Möglichkeit, dieses Verbrennungswasser durch nachgeschaltete weitere Reinigungsschritte bis zu höchsten Reinheitsgraden aufzubereiten. Wegen ursächlich fehlender gelöster Mineralien werden die nachgeschalteten Reinigungsanlagen (Ionenaustauscher, Umkehrosmose) so wenig belastet, dass sie im Vergleich zur Verwendung von Leitungswasser erheblich länger ohne Regeneration betrieben werden können.

Da nach der SWKI-Richtlinie 102-01 jede Heizungsanlage mit vollentsalztem Wasser gefüllt werden muss, bietet sich auch hier die Verwendung von Verbrennungswasser an.

«Dieser Artikel widerspiegelt die persönliche und freie Meinung eines SVC-Mitglieds, sie muss nicht mit dem kollektiven Standpunkt des SVC-Vorstandes übereinstimmen. Der Vorstand hat entschieden, unseren Mitgliedern mit Artikeln im À JOUR eine Plattform zu bieten, wenn es von Interesse für unsere Mitglieder und/oder von wissenschaftlichem Interesse sein könnte. In diesem Sinne bitten wir auch andere Mitglieder, uns entsprechende Artikel von 1 bis max. 4 Seiten zukommen zu lassen.»

Wasser ist überlebenswichtig!

Autor: *Andreas Gitzi*

Die Idee im oben publizierten Artikel «Wirtschaftliche Nutzung von Verbrennungswasser (Oxidationswasser) aus Heizungen» ist grundsätzlich lobenswert. Insbesondere unter dem Aspekt von lokal zunehmender Wasserknappheit durch die aktuell diskutierte Klimaerwärmung und vor allem in Gegenden ohne genügend Wasserressourcen muss zwingend über jede erdenkliche Rückgewinnung von Wasser nachgedacht werden. Der hier gewählte Lösungsansatz wirft allerdings viele Fragen auf.

Fangen wir bei der aufgezählten Nutzung des «Reinstwassers» direkt beim «Produzenten» an. Auf den ersten Blick ist das eine ökologisch optimale Variante. Aber für die Bewässerung von Pflanzen würde es sich aufgrund der geringen Mengen und der fehlenden Mineralstoffe nicht eignen. Auch als Trinkwasser würde es aufgrund des beschriebenen Geruchproblems eher abgelehnt.

Zudem stellt sich die berechtigte Frage, wieso hat diese doch so offensichtliche Idee bisher noch niemand verfolgt?

Auflistung von offenen Punkten:

1. Es geht hier nur um Erdgas- resp. Methan(CH₄)-Heizungen. Diese machen aber, zumindest in der Schweiz und vermutlich auch in den Gegenden mit aktueller Wasserknappheit, nur einen relativ geringen Teil der «verbrannten» Heizstoffe aus.

2. Alle anderen Energieträger, insbesondere die fossilen (Öl, Benzin, Diesel), haben längere C-Ketten und sind deutlich aufwändiger in der Reinigung.

3. Zudem nimmt das Verhältnis C zu H in der homologen Reihe ab. Je länger die Kette, desto weniger Wasser.

4. Dazu kommt, dass Methan bereits als das geringere Problem wahrgenommen wird. Ja, sogar als Teil der Lösung – Stichwort: Erdgas-Fahrzeuge.

5. Kondensierung der Abgase wird heute in jeder modernen Heizung bereits gemacht. Teilweise sogar mit Wärmerückgewinnung.

Allerdings wird das Wasser danach nicht genutzt, sondern abgeleitet in die ARA oder halt in den nächsten Bach. Das Wasser kommt somit auch wieder in den Wasserkreislauf zurück.

6. Auch wenn das Wasser verdampft, kommt es in die Troposphäre und damit in den natürlichen Wasserkreislauf.

7. Es gibt sehr viele kleine Heizungen, die einen Grossteil des Heizstoffs verbrauchen und nur wenige grosse Verbraucher in Wärmeverbunden.

8. Die vielen Fahrzeuge, welche ebenfalls einen Grossteil des Verbrauchs ausmachen, können bei diesem Ansatz nicht berücksichtigt werden.

9. Diese vielen individuellen Anwender brauchen aber in der Regel keine so grossen Mengen an Reinstwasser.

10. Erdgas als Energieträger wird bewusst verunreinigt (Geruch, um Leckagen zu erkennen) und Erdöl ist per se ein dreckiges Gemisch. Eine Reinigung wäre sicher möglich, aber auch sehr aufwändig und

damit im Verhältnis teuer. Dass diese Reinigung mit der erforderlichen einheitlichen Qualität «multi-lokal» erfolgen kann, ist fraglich.

11. Dies erfordert eine effiziente ökologische Sammlungs-Infrastruktur von diesen vielen dezentralen «Produzenten» an einen oder wenige zentrale Orte, wo das Wasser aufbereitet, gelagert und an die Endnutzer von Reinstwasser verkauft sowie dorthin transportiert werden kann.

12. Und das wiederum braucht den Willen und die Motivation der vielen Heizungsbesitzer, das Wasser zu sammeln und abzugeben und damit auch entsprechende Werbung – wie zum Beispiel mit den PET-Flaschen oder Batterien.

Fazit

Als relevante Zielkunden für diese Anwendung bleiben die Industrie mit eigenen grossen Heizanlagen (nur mit Erdgas) und die grösseren Wärmeverbandsanlagen (die aber oft bereits ökologische Heizmaterialien einsetzen, u.a. Holzschnitzel).

Wenn auf die oben skizzierten, offenen Fragen effiziente und ökonomisch vertretbare Antworten gegeben werden können, findet sich gegebenenfalls, im Rahmen von umweltrelevanten Förderprojekten, Unterstützung für die Entwicklung eines funktionierenden Prototyps. Dann würden sich eventuell auch Investoren finden lassen, wenn sie an einen gewinnbringenden Erfolg glauben.

Andreas Gitzi, Risikomanager,
SVC-Vorstand, Kommunikation
und Delegierter FH-Schweiz

Beschichtung von Silikonimplantaten zur pharmakologischen Hemmung der Kapselfibrose



**Mira Witzig, 1997
aus Rüegsauschachen (BE)**

Mein beruflicher Werdegang startete mit einer Ausbildung zur Drogistin EFZ und der Berufsmaturität Fachrichtung Gesundheit und Soziales. Anschliessend absolvierte ich den Bachelorstudiengang Biotechnologie mit der Vertiefungsrichtung Pharmazeutische Technologie an der Zürcher Hochschule für Angewandte Wissenschaften (ZHAW). Die abschliessende Bachelorarbeit «Beschichtung von Silikonimplantaten zur pharmakologischen Hemmung der Kapselfibrose» erarbeitete ich in der Fachgruppe Pharmazeutische Technologie und Pharmakologie der ZHAW unter der Betreuung von Dr. Steffi Lehmann, Dr. Dominik Brühwiler und BSc Andrina Schmid. Zur Krönung meines Abschlusses durfte ich an der Diplomfeier vom 2. Oktober 2020 den SVC-Diplompreis entgegennehmen. Der Masterstudiengang Drug Sciences an der Universität Basel ermöglicht mir, aktuell meinen Interessen zu folgen und mein Wissen weiter zu vertiefen.

Autorin: Mira Witzig

Das beschriebene Projekt steht unter Geheimhaltungspflicht. Es wurde in Zusammenarbeit mit der Universität Zürich (UZH) und dem Universitätsspital Zürich (USZ) durchgeführt. Aus Gründen der Vertraulichkeit wird die Arbeit hier nur summarisch zusammengefasst.

Brustvergrösserungen mit Silikonimplantaten werden einerseits zur medizinischen Brustrekonstruktion, beispielsweise nach Mastektomien infolge bösartiger Tumore bei Krebspatientinnen, andererseits aber auch aus kosmetischen Gründen durchgeführt. Sie gehören zu den in der plastischen Chirurgie am häufigsten vorgenommenen Eingriffen. [1] Trotz diverser Fortschritte in der chirurgischen Operationstechnik und der Beschaffenheit der eingesetzten Silikonbrustimplantate ist der Eingriff nach wie vor mit einer Vielzahl möglicher Risiken verbunden. [2] Als Hauptkomplikation bildet sich in bis zu 50% der Fälle aufgrund einer übermässigen Fremdkörperreaktion gegenüber den Implantaten eine sogenannte Kapselfibrose. Diese geht mit der Entstehung einer kontrahierbaren Bindegewebskapsel einher, welche zu Schmerzen, Festigkeit und Deformierung der Brust führen kann. [3] Um die dadurch verursachte

Reoperationsrate mit allfälligem Implantataustausch zu senken, wurde in dieser Bachelorarbeit die Oberflächenmodifikation von Silikonimplantaten mit antifibrotischen Wirkstoffen untersucht, mit dem Ziel, deren langanhaltende Freisetzung zu ermöglichen und damit die Ausbildung einer fibrotischen Kapsel therapeutisch zu hemmen.

Zur Realisierung des Projektes wurde zunächst eine geeignete Wirkstoff-Beschichtungsmethode für Silikonimplantate etabliert. Die Beschichtungen wurden hinsichtlich mechanischer Beständigkeit geprüft. Verschiedene Wirkstoffkandidaten mit antiinflammatorischer oder antifibrotischer Wirkung zur Hemmung der Kapselfibrose wurden anschliessend in silico bezüglich deren Verwendung in Implantatsbeschichtungen analysiert. Dabei konnten vielversprechende Wirkstoffkandidaten herausgefiltert werden.

Da das Durchführen von Brustvergrösserungen und -rekonstruktionen einer steigenden Beliebtheit unterliegt und daher mit grosser Wahrscheinlichkeit auch künftig zunehmend gefragt sein wird, stellt die Hauptkomplikation der Kapselfibrose ein vermehrtes Problem dar. In diesem Zusammenhang bietet

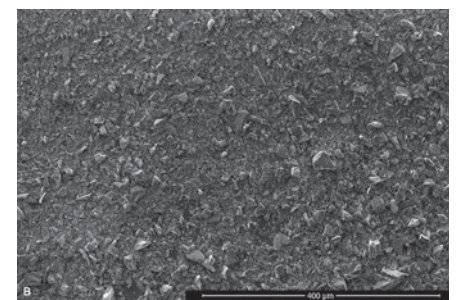
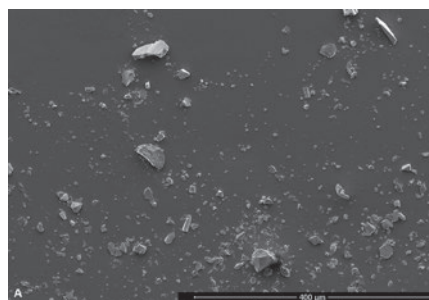


Abb. 1: Silikonbrustimplantat vor (A) und nach der Beschichtung (B) mit einem Wirkstoff-Layer, aufgenommen mittels Rasterelektronenmikroskopie.

der vorliegende Ansatz, diese Komplikation lokal in der Entstehung durch die Funktionalisierung der Silikonimplantate zu hemmen, ein interessantes Potenzial.

Referenzen

[1] International Society of Aesthetic Plastic Surgery. (2018). ISAPS

international survey on aesthetic/ cosmetic procedures. Retrieved from <https://www.isaps.org/wp-content/uploads/2019/12/ISAPS-Global-Survey-Results-2018-new.pdf>.

[2] Shin, B. H., Kim, B. H., Kim, S., Lee, K., Choy, Y. B., & Heo, C. Y. (2018). *Silicone breast implant modification review: overcoming capsular*

contracture. Biomaterials Research, 22(1). <https://doi.org/10.1186/s40824-018-0147-5>.

[3] Riolo Nemecek, J. A., & Young, V. L. (1993). *How safe are Silicone Breast Implants? Southern Medical Journal, 86(8), 932–944.*

Bildquellen: Mira Witzig

Metal complexes for animal feed industry



Maël Cantini, 06.06.1997
from Belfaux FR

I started my carrier with an apprenticeship as a Chemistry Lab Technician with integrated maturity at the School of Engineering and Architecture of Fribourg in 2016. After my apprenticeship, I decided to continue my studies with a Bachelor at the School of Engineering and Architecture of Fribourg. My studies as well as the experience I gained allowed me to deepen my knowledge but also motivate me to continue learning and using the skills I acquired for different projects such as my Bachelor thesis in coordination chemistry, done under the supervision of Prof. Dr. Olimpia Mamula Steiner. I decided to pursue my education with a Master of Science in Environ-

mental Technologies at the FHNW, eager to broaden my horizon by combining both my interests in life sciences and the protection of our environment.

Authors: Maël Cantini, O. Mamula Steiner

Abstract

The aim of this Bachelor thesis was to develop and characterize new Zn(II) heteroleptic complexes containing natural, non-toxic and available organic molecules as ligands. These new compounds should have a better bioavailability, gastric stability, and intestinal release than the classical metal-ligands complexes used in the feed industry and therefore have less environmental impact. In order to achieve this, several molecules derived from compounds already used as additive in the food industry were investigated as potential ligands. New heteroleptic complexes of Zn(II) were characterized in solution (NMR) and solid state (IR).

Introduction

The «trace elements» (Figure 1) are dietary elements that are essential to every living organism but are needed in minute quantities. Consequently, they are crucial in a variety of biological processes influencing animal growth i.e. acting as an enzyme co-factor and participate in the maintenance of the proteins' structure.[1] The supplementation of such compounds is thus wide-

spread in the animal farming to guarantee the livestock a sufficient intake of trace elements.

However, this supplementation causes some nuisances as only a small portion of the metals administered to the livestock is absorbed and the rejected quantity ends up accumulating in the environment. For example, the increasing concentration of such metals is a potential threat for the biotope. Indeed, the microflora of the soils is impacted by these metals and therefore, a high concentration could result in a toxic environment, unsuitable for crop farming.[3, 4] A solution to reduce this environmental impact is to deliver these trace elements as metal complexes (a compound where the metallic cation is bound to organic molecules named ligands), as their absorption is increased in respect to classical inorganic salts like sulfates or oxides.[5]

For instance, our industrial partner with whom we have signed an NDA (non-disclosure agreement) currently offers such patented products and wish to broad their offer with new compounds going beyond the performances of the known commercial molecules. The aim of this work was thus to obtain and characterize heteroleptic complexes ML_1L_2 containing a metallic trace element (M^{2+}) as well as two organic ligands L_1 and L_2 , which could be used as dietary supplementation in animal feeding.

H																	He				
Li	Be															B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg															Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc		Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr			
Rb	Sr	Y		Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe			
Cs	Ba	La	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn			
Fr	Ra	Ac	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og			
				*	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
				**	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

The four basic organic elements
 Quantity elements
 Trace elements
 Suggested biological action

Figure 1: Nutritive elements in the periodic table, according to [2]

Results & discussion

In the frame of this project, several ligands and reaction conditions had to be evaluated. The equilibria of the complexation reactions are influenced by a variety of parameters. The first factor is the affinity between the ligands and the metal cation, which can be represented by a formation constant. Furthermore, the metal's particularities must be considered, its charge and electronic configuration being crucial for its complexation behavior. For the ligands, their pKa and denticity are decisive for the design of new complexes which must be stable at various pH and concentrations during the digestion process. Moreover, they have to be well adsorbed at the intestine level. There are also some technological limitations, the syntheses should be simple, cheap and using water as solvent.[6]

The synthesis of few metal complexes has been attempted, with various combinations of ligands. The formation of the most promising compounds was studied by ^1H and ^{13}C -NMR, as well as FT-IR and MS spectroscopy. For confidentiality limitations, we are not able to give more technical details. Finally, a library of new metal complexes has been obtained and analyzed. Their study will be completed in further projects.

Conclusion and perspective

Ultimately, the biodisponibility of the complexes obtained during this project will have to be determined and compared with other metal complexes already on the market. If the metal's uptake will be improved with these new compounds, then an optimization of the synthesis will be performed. Subsequently, the next step would be to scale-up the synthesis, from grams to kilogram. Lastly, ligands similar to the ones tested in this project should also be considered in order to broaden the spectrum of compounds with potential applications as supplementary diet in the feed industry.

Acknowledgements:

We would like to thank our industrial partner for its constant support and trust as well as Dr. Mike Dentinger from our Institute, ChemTech, for technical support.



References:

- [1] Blencowe, D. K.; Morby, A. P. "Zn(II) Metabolism in Prokaryotes", *FEMS Microbiol. Rev.* 2003, 27 (2–3), 291–311. [https://doi.org/10.1016/S0168-6445\(03\)00041-X](https://doi.org/10.1016/S0168-6445(03)00041-X).
- [2] Ross, A. C. "Modern Nutrition in Health and Disease", 11th ed., Wolters Kluwer Health/Lippincott Williams & Wilkins, Baltimore, USA, 2014.
- [3] Revy, P. S.; Jondreville, C.; Dourmad, J. Y.; Nys, Y. "Le Zinc Dans l'alimentation Du Porc : Oligo-Élément Essentiel et Risque Potentiel Pour l'environnement", *Prod. Anim.* 2003, 16 (1), 3–18. <https://doi.org/10.20870/productions-animales.2003.16.1.3639>.
- [4] McGrath, S. P.; Chaudri, A. M.; Giller, K. E. "Long-Term Effects of Metals in Sewage Sludge on Soils", *Microorganisms and Plants. J. Ind. Microbiol.* 1995, 14 (2), 94–104. <https://doi.org/10.1007/BF01569890>.
- [5] Schlegel, P.; Windisch, W. "Bioavailability of Zinc Glycinate in Comparison with Zinc Sulphate in the Presence of Dietary Phytate in an Animal Model with ^{65}Zn Labelled Rats", *J. Anim. Physiol. Anim. Nutr. (Berl.)* 2006, 90 (5–6), 216–222. <https://doi.org/10.1111/j.1439-0396.2005.00583.x>.
- [6] Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G. "Inorganic Chemistry", 4th ed.; Pearson, Ed.; Prentice Hall: Harlow, England, 2012.

Thermokinetisches Modell der Zersetzungsreaktion von Hydroxylamin



Florian Walthert lebt in Thun und hat seine Ausbildung zum Chemielaborant EFZ im Labor Spiez gemacht. Anschliessend absolvierte er ein Bachelor-Studium mit Schwerpunkt in Analytischer Chemie und Chemie-Ingenieur-Technik an der Hochschule für Life Sciences (FHNW) in Muttenz. Seine Bachelor-Arbeit schrieb er im Bereich der Physikalischen Chemie zum Thema Hydroxylamin-Zersetzung, betreut durch Prof. Dr. Andreas Zogg und Dr. Fabian Meemken. Die Arbeit wurde im Jahr 2020 mit dem SVC-Diplompreis ausgezeichnet.

Autor: Florian Walthert

Abstract

Hydroxylamin ist ein Schlüssel-molekül für einige wichtige chemische Prozesse. Ein Beispiel ist die Synthese von ϵ -Caprolactam, das für die Herstellung von Nylon benötigt wird. Da Hydroxylamin sich thermisch zersetzt, sind sein Transport und seine Lagerung problematisch. Das Ziel dieser Studie war es, die exotherme Zersetzungsreaktion zu untersuchen. Die Wärme der Reaktion wurde in mehreren DSC-

Experimenten gemessen. Bei der Zersetzung werden grosse Mengen an Gasen freigesetzt. Um den Druckanstieg zu messen, wurde ein Explosionsreaktor eingesetzt. Es wurden drei Reaktionshypothesen getestet. Mit Hilfe eines mathematischen Modells konnte eine Hypothese gestützt werden. Der Materialeinfluss auf die Zersetzungsreaktion wurde für PEEK, rostfreien Stahl und Hastelloy C22 untersucht. Aus den DSC-Messungen wurden ein deskriptives kinetisches Modell und eine isokonversionelle Kinetik gewonnen.

Einleitung

Hydroxylamin ist das einfach oxidierte Derivat von Ammoniak. In reiner Form bildet es weisse Kristalle und zersetzt sich thermisch (Ritz et al.). Seit 1908 wird Hydroxylamin industriell hergestellt. Der Herstellungsprozess wurde laufend weiterentwickelt. Was jedoch immer erhalten blieb, ist die Explosionsgefahr, die von der Verbindung ausgeht. Es ereigneten sich zahlreiche Explosionen, wie beispielsweise in den USA bei der destillativen Isolierung, wobei vier Personen starben (siehe Abbildung 1).

Hydroxylamin zersetzt sich auch in wässriger Lösung heftig bei erhöhten Temperaturen. Zusätzlich wirkt sich bekanntlich auch Oberflächenkatalyse auf die Zersetzung aus. Die genauen Prozesse sind jedoch noch weitgehend unbekannt (L.O. Cisneros).

Als stöchiometrische Gleichung der Zersetzungsreaktion von Hydroxylamin wurden drei Vorschläge propo-niert (Mantegazza et al., L.O. Cisneros).

Die basische Reaktionshypothese (Reaktion 1):



Die saure Reaktionshypothese (Reaktion 2):



Die empirische Reaktionshypothese (Reaktion 3):

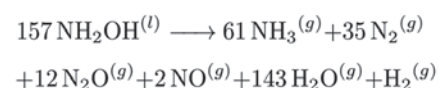


Abbildung 1: Hydroxylamin-Explosion bei Concept Sciences Inc. in Pennsylvania am 19. Februar 1999.

Diese Tatsachen erschweren die Arbeit mit Hydroxylamin im Hinblick auf dessen Herstellung, Transport, Lagerung und Anwendung. Das Ziel dieser Arbeit war die Erarbeitung eines thermokinetischen Modells der Zersetzungsreaktion von Hydroxylamin sowie das Überprüfen der Stoffdaten aus der Literatur.

Experimentelles

Um die Zersetzungsreaktion von Hydroxylamin unter verschiedenen Bedingungen zu messen, wurde ein Explosionsreaktor (300 bar Maximaldruck) an der FHNW Muttenz verwendet. Die Apparatur wurde so modifiziert, dass die Probelösung (wässrige unstabilierte 30% Hydroxylaminlösung) schnell eingesaugt werden kann und während der Zersetzung die Temperatur und der Innendruck gemessen werden können. Die Probelösung gelangt in einen Glaseinsatz in einem Hastelloy C22 Block. Um die Zersetzung in Kontakt mit verschiedenen Oberflächen zu untersuchen, wurde der austauschbare Rührer des Reaktors ausgenutzt. Die Messung erfolgte mit drei verschiedenen Rührer-Materialien, namentlich Hastelloy C22, PEEK (Polyetheretherketon) und Stahl rostfrei.

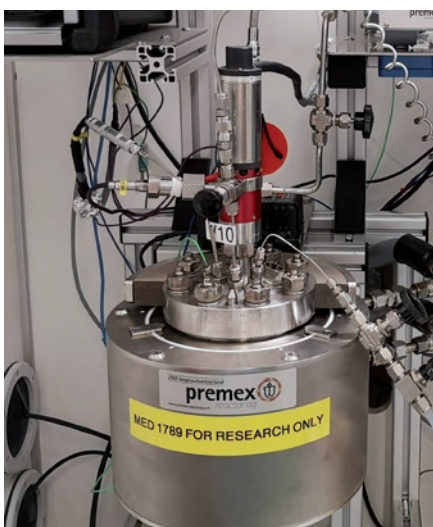


Abbildung 2: Explosionsreaktor zur Druckmessung der Hydroxylamin-Zersetzung bei isoperibolen Bedingungen.

Eine weitere wichtige Datenquelle dieser Arbeit waren DSC-Messungen. Das kinetische Verhalten der Zersetzungsreaktion wurde mit dynamischen (4 K/min) und isothermen Versuchen bei 90 °C, 110 °C, 130 °C und 150 °C durchgeführt. Die Reaktion wurde in verschiedenen Gold- wie auch Stahltiegeln gemessen.



Abbildung 3: Die drei im Explosionsreaktor verwendeten Rührer, die aus Hastelloy C22, PEEK und Stahl rostfrei angefertigt wurden. Durch das Verwenden eines jeweiligen Rührers kann ein Rückschluss auf die Oberflächenkatalyse des Materials bezüglich der Hydroxylamin-Zersetzung gemacht werden.

Resultate

Im Explosionsreaktor wurden isoperibole Versuche bei 110 °C mit circa 30 mL unstabiliertes 30%iger Hydroxylamin-Lösung durchgeführt. Um die Kurven aus verschiedenen Experimenten vergleichbar zu machen, wurde für jedes Experiment für jeden Zeitpunkt die spezifische Gasmenge Γ nach folgender Formel berechnet.

$$\Gamma = (p^V_R)/(RTm_s) \text{ mit } [\Gamma] = \text{mol/kg}$$

wobei

- p Reaktorinnendruck (aufgezeichnete Kurve)
- V_R Reaktorvolumen
- R Universelle Gaskonstante
- T Reaktorinnentemperatur (aufgezeichnete Kurve)
- m_s Probenmasse (bezogen auf die 30%ige Lösung)

In Abbildung 4 wird ersichtlich, dass die Rühreroberfläche einen signifikanten Einfluss auf das kinetische Verhalten der Zersetzungsreaktion hat. Die Verwendung des Stahlrührers führte nach 100 min Verweilzeit zu einer heftigen thermischen Explosion unter kurzzeitig adiabaten Bedingungen. Die Zersetzung in Gegenwart von Hastelloy C22 ist besonders in der Anfangsphase auch schnell, aber trotzdem deutlich langsamer als mit Stahl rostfrei. Der geringste oberflächenkatalytische Effekt ist beim PEEK-Rührer beobachtbar. Die Zersetzung bei 110 °C ist erst nach circa 20 Stunden beendet.

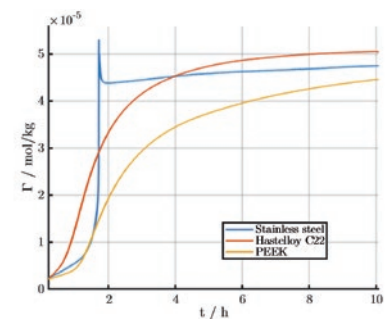


Abbildung 4: Experimentelle Kurven (berechnet aus Druck und Temperatur) der Zersetzungsreaktion von wässriger unstabiliertes Hydroxylamin-Lösung (30%) mit verschiedenen Rührer-Materialien bei isoperibolen Bedingungen (110 °C). Zum Zeitpunkt t = 0 h wurde die Probelösung eingesaugen.

Bei allen Experimenten im Explosionsreaktor sowie in den isothermen DSC-Messungen war ein zeitlich verzögerter Temperatur- bzw. Reaktionsleistungsanstieg erkennbar. Dies spricht für einen autokatalytischen Zersetzungsmechanismus. In den Goldtiegeln ist dieser Effekt jedoch nicht vorhanden. Daraus lässt sich schliessen, dass Gold gegenüber Hydroxylamin inert ist und die Zersetzung einer n-ter Ordnung Kinetik folgt. Das kinetische Triplet für diesen Mechanismus wurde als Reaktionsordnung $n = 0.84$, Aktivierungsenergie $E_A = 63.9 \text{ kJ/mol}$

und Geschwindigkeitskonstante $k_0=3.7 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ (bei einer Referenztemperatur von 298 K) ermittelt. Zusätzlich wurde auf die Messungen die modellfreie Isokonversionsmethode angewandt.

In MATLAB wurde ein thermodynamisches Modell zur Beschreibung der Vorgänge im Explosionsreaktor erarbeitet. Aus sicherheitstechnischen Gründen konnte so im Vorfeld der Versuche der erwartete Explosionsdruck abgeschätzt werden. Unter der Annahme von adiabaten Bedingungen wurde für eine komplette Flüssigphasenzersetzung ein Maximaldruck von 192 bar ermittelt. Für die Simulation der Druckkurven aufgrund der im Experiment gemessenen Temperaturkurven wurde hingegen ein Modell verwendet, das auf den realen Phasengleichgewichten der Komponenten der drei Reaktionshypothesen beruht. Der Vergleich mit den experimentellen Druckdaten zeigt, dass die saure Reaktionshypothese (Reaktion 2) die Realität am genauesten abbildet. Abbildung 5 zeigt als Beispiel das Experiment mit dem PEEK-Rührer.

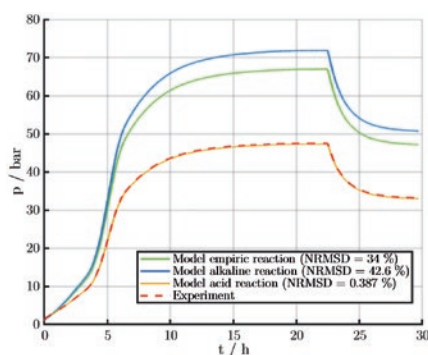


Abbildung 5: Experiment mit PEEK-Rührer bei isoperibolen Bedingungen (110 °C). Die Druckkurven wurden mithilfe eines thermodynamischen Modells aus der gemessenen Temperaturkurve für drei verschiedene Reaktionshypothesen simuliert. Die saure Reaktionshypothese (gelb) ist in enger Übereinstimmung mit der experimentellen Druckkurve (rot).

Aus dieser Erkenntnis kann abgeleitet werden, dass unter den im Explosionsreaktor vorherrschenden Bedingungen die saure Reaktionsgleichung (Reaktion 2) abläuft. Das bedeutet, dass bei der Hydroxylamin-Zersetzung bevorzugt Lachgas und nicht Stickstoff entsteht. Dies war der Fall unabhängig von der Rührerwahl. Daraus kann man schließen, dass die Oberflächenkatalyse einen Einfluss auf die Kinetik der Zersetzungsreaktion hat, jedoch nicht auf deren Thermodynamik.

Fazit

Die vorgestellten Ergebnisse können als Datengrundlage für die sicherheitstechnische Umsetzung von Prozessen mit Hydroxylamin verwendet werden. Die verwendeten Materialien haben einen fundamentalen Einfluss auf das Zersetzungsverhalten von Hydroxylamin. Beim Kontakt mit Stahl rostfrei ist eine stark exotherme autokatalytische Reaktion zu erwarten. Es konnte ebenfalls gezeigt werden, dass diese Reaktion bevorzugt nach der sauren Reaktionshypothese (Reaktion 2) abläuft.

Quellen

- [1] Josef Ritz, Hugo Fuchs, and Howard G. Perryman. «Hydroxylamine». In: *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Ed. by Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. Weinheim, Germany: Wiley-VCH.
- [2] M.A. Mantegazza et al. «Selective Oxidation of Ammonia to Hydroxylamine with Hydrogen Peroxide on Titanium Based Catalysts». In: *Studies in Surface Science and Catalysis*. Vol. 82. Elsevier, 1994, pp. 541–550.
- [3] L.O. Cisneros et al. «Decomposition Products of 50 Mass% Hydroxylamine/Water Under Runaway Reaction Conditions». In: *Process Safety and Environmental Protection* 81.2 (Mar. 2003), pp. 121–124.
- [4] L.O. Cisneros. «Adiabatic calorimetric studies of hydroxylamine compounds». PhD thesis. USA: Texas A&M University, 2002.

Bildquellen

- [1] <https://www.csb.gov/concept-sciences-hydroxylamine-explosion/>
 [2] [3] [4] [5] Florian Walthert

Le mot du Président

**Chers membres de la SVC,
Chers sympathisants de la SVC,**

Je me réjouis de présenter le premier À JOUR de 2021 avec notre équipe éditoriale. Parce que nous avons des raisons de célébrer! Notre association professionnelle a 75 ans cette année. Nous, membres du conseil d'administration, espérons donc tenir notre assemblée générale au château de Lenzburg en octobre 2021 afin de pouvoir y fêter notre anniversaire.

L'Association suisse des chimistes diplômés FH (SVC) est issue à l'origine de l'« Association suisse des chimistes diplômés des technikum » (VCT) fondée en 1946. Après plusieurs change-ments de nom, la SVC, la seule association professionnelle de Suisse qui représente les intérêts spécifiques de tous les diplômés en sciences naturelles d'une haute école spécialisée, a vu le jour.

Initialement créé en tant qu'association professionnelle pour tous les chimistes diplômé/es ETS, puis chimistes diplômés HES, la SVC se propose aujourd'hui suite à la réforme de Bologne, de réunir tous les diplômés d'un Bachelor ou d'un Master en sciences naturelles d'une haute école spécialisée. Que ce soit dans les spécialisations chimie, biotechnologie, technologie pharmaceutique, technologie médicale ou sciences de la vie. Et ceci au-delà des frontières linguistiques de la Suisse alémanique et de la Suisse romande, afin d'inclure toutes les hautes écoles spécialisées avec des cours de sciences naturelles. Actuellement, il s'agit de Sion (VS), Fribourg (FR), Muttenz (BL) et Wädenswil (ZH).



Aujourd'hui, 75 ans plus tard, la SVC se présente avec près de 1000 membres comme une association autonome et indépendante. Afin d'améliorer notre portée en tant qu'association professionnelle et les offres pour nos membres, nous, à la SVC, sommes devenus membre de FH Suisse en 2015, l'organisation faîtière pour tous les diplômés d'une Haute Ecole Spécialisée.

Au cours des prochaines années, nous voulons améliorer la préservation et la promotion des intérêts professionnels et de la branche dans le pays et à l'étranger de tous les diplômés en sciences naturelles d'une haute école spécialisée de sciences appliquées. Nous souhaitons travailler plus étroitement avec l'industrie, d'autres associations professionnelles, des associations économiques, des associations de branches, les hautes écoles spécia-

lisées et les autorités éducatives des cantons et au niveau fédéral. En plus d'une nouvelle apparence en format papier et en ligne, nous souhaitons également faire le grand pas vers la numérisation. Nous recherchons de nouveaux membres du comité à cet effet.

J'espère que vous apprécierez la lecture de notre nouvel À JOUR et j'espère vous voir personnellement bientôt.

Bien cordialement
**Association suisse des chimistes
diplômés HES (SVC)**

Marc Oliver Bürgi
Président

Source des illustration: Marc Bürgi

Beitrittserklärung / Demande d'adhésion

Der/Die Unterzeichnete wünscht, dem SVC beizutreten.
Le/La soussigné(e) désire adhérer à la SVC.

* Diese Felder sind auszufüllen! / * Ces cases sont à remplir impérativement!

Anrede* Titre*	<input type="checkbox"/> Frau/Madame <input type="checkbox"/> Herr/Monsieur	Korrespondenz* Correspondance*	<input type="checkbox"/> Deutsch <input type="checkbox"/> Français
Name* Nom*	_____	Geburtsdatum* Date de naissance*	_____
Vorname* Prénom*	_____	Tel. (Privat)* Tél (Privé)*	_____
Strasse, Nr.* Rue, Numéro*	_____	E-Mail (Privat)* Courriel (Privé)*	_____
PLZ/Ort* C.P./Lieu*	_____		

Mitgliedschaft bei einer FH SCHWEIZ Alumni* Ja/Oui
Affiliation à un FH-Suisse-Devenir* Nein/Non

Student/in* Ja/Oui
Etudiant/e* Nein/Non

Grundstudium (FH)* Cursus de base (HES)*	_____	Diplomjahr* Année de diplôme*	_____
Studienrichtung* Filière de l'étude*	_____	Weiteres Studium geplant resp. gemacht* Autres études suivies / prévues *	<input type="checkbox"/> Ja/Oui <input type="checkbox"/> Nein/Non <input type="checkbox"/> Master <input type="checkbox"/> Anderes / autre

Weiterführendes Studi- um (z.B. Master) Formation Post-grade	_____	Diplomjahr Année de diplôme	_____
--	-------	--------------------------------	-------

- Ich habe die Bestimmungen zum Datenschutz gelesen und bin mit den Nutzungsbedingungen des SVC einverstanden.
J'ai lu la politique de confidentialité et j'accepte les conditions d'utilisation du SVC.
- Ich bin mir bewusst, dass ich mit dieser Anmeldung automatisch auch Mitglied von FH-SCHWEIZ werde und die verschiedenen Angebote der FH-SCHWEIZ nutzen kann.
Je suis conscient qu'avec cette inscription, je deviens automatiquement membre de FH-SUISSE et je peux profiter des différentes offres de FH-SUISSE.

Datum, Unterschrift*
Date, Signature* _____

Jahresbeitrag CHF 100.- / Cotisation annuelle CHF 100.-

(CHF 75.- für FH-SCHWEIZ-Mitglieder / CHF 75.- pour les membres de FH SUISSE)

Während des Studiums sowie im Beitrittsjahr sind SVC-Mitglieder von der Beitragspflicht befreit.

Pendant les études, ainsi que l'année de l'adhésion, les membres de la SVC sont dispensés de cotisation.

Anmeldung per Post an: **Schweizerischer Verband diplomierter Chemiker FH (SVC)**
Découpez le talon d'inscription et **4000 Basel**
l'envoyer à *Achtung: weder Strasse noch Strassennummer eingeben!*

Attention: seule l'adresse ci-dessus est valable! Pas de rue ni de numéro de rue!

oder per Mail an das Mitgliedersekretariat (Adresse auf www.svc.ch/Vorstand). Onlineanmeldung unter www.svc.ch möglich.
Ou par courriel au secrétariat des membres (adresse courrielle sur www.svc.ch/Vorstand). Inscription en ligne sur www.svc.ch.
Sie erhalten umgehend Zugang zum geschützten Mitgliederbereich im Internet und profitieren fortan von unzähligen weiteren Vorteilen als SVC-Mitglied.

Vous aurez immédiatement accès au domaine protégé des Membres sur Internet et vous pourrez ainsi profiter d'innombrables avantages supplémentaires en tant que Membre de la SVC.



Chemie, Life Sciences & Biotechnologie

Schweizerischer Verband
diplomierter Chemiker FH

Association suisse
des chimistes diplômés HES

CH-4000 Basel
www.svc.ch