



**Institut für Wasserchemie und  
Chemische Balneologie**

**Lehrstuhl für Hydrogeologie,  
Hydrochemie und  
Umweltanalytik**

**Jahresbericht**

**1999**



Impressum:  
Institut für Wasserchemie und Chemische Balneologie  
Lehrstuhl für Hydrogeologie, Hydrochemie und Umweltanalytik  
Technische Universität München  
Marchioninstr. 17

81377 München

Redaktion: Dr. Thomas Baumann

---

## Vorwort

10 Jahre ist das Institut und der Lehrstuhl nunmehr unter der nicht mehr so neuen Leitung. Viele Vorsätze konnten verwirklicht werden, andere (wenige) erwiesen sich als Traum, der einer Realisation harret.

Die Mannschaft selbst hat hervorragend mitgezogen. So konnte trotz Verhafteten am vorgegebenen Auftrag, nämlich für die bayerischen Kurorte tätig zu sein, ein weites Szenario im Rahmen der Messtechnikentwicklung zum gesamten Wasserkreislauf, so in etwa könnte man die gegenwärtige Widmung des Arbeitsinhaltes charakterisieren, aufgebaut werden. Inzwischen ist das Institut und der Lehrstuhl nicht nur im Bereich der Wasserchemie eine feste Größe, sondern national und international besonders im Feld der Analytischen Chemie bekannt. Die hervorragende Ausstattung des Instituts hat dazu wesentlich beigetragen und umgekehrt wieder neue Kräfte und Mitarbeiter mobilisiert und aktiviert.

In diesen zehn Jahren sind weit über 30 Millionen Mark Drittmittel in internem kompetitiven Tun akquiriert worden. Übrigens ohne Controlling etc. seitens Dritter. Das Institut und der Lehrstuhl haben frühzeitig erkannt, dass ein Anlegen der Maßstäbe, wie sie etwa bei Evaluierungen des Wissenschaftsrates von wissenschaftlichen Einrichtungen üblich sind, auch für die interne Vorgehensweise äußerst nützlich sind. Daher wird z.B. zunehmend auch auf Publikationen in hochrangigen Zeitschriften geachtet.

10 Jahre Institut und Lehrstuhl bedeuten auch, dass 60 Doktoranden und 81 Diplomanden erfolgreich ihre Qualifikationsarbeiten beenden konnten. Rund 250 Veröffentlichungen sind die Ausbeute, die den Ruf des Instituts und des Lehrstuhls weiter festigten.

Es gilt, das Erreichte zu sichern. Baulich, personell und sächlich haben wir einen gewissen Endzustand erreicht, dessen Funktion es nun zu erhalten gilt. Wir treten somit in die Phase ein, in der es zu entscheiden gilt, was über Bord geschmissen werden muss und welchen Zukunftsfragestellungen man sich widmen sollte. Die Breite der am Institut bearbeiteten Themen ist enorm. Vieles davon war durch Forschungsverbünde vorgegeben. Analytische Chemie im Umweltbereich kann sich nur noch der leisten, der sich auch aus anderen Arbeitsbereichen zu alimentieren weiß. Und deshalb war und ist die bisherige Breite der Forschungsthemen auch, so merkwürdig das klingen mag, ein Garant für Forschungsfreiheit.

Eine gewisse Zukunftsperspektive haben Themen, die so komplex sind, dass sie gegenwärtig von nationalen und internationalen Forschungsorganisationen zu Förderschwerpunkten erhoben wurden. Dazu zählen: Hochparallele Sensorik auf dem Chip; schnelle Screeningtechniken zur Prozessführung, Zuwendung zu höhermolekularen Analyten, Entwicklung neuer Lichtquellen für die Spektroskopie, Kolloidsysteme in Wasser und Luft sowie tomographische Charakterisierung natürlicher Kompartimente.

Trotz der bescheidenen Kräfte des Instituts bzw. des Lehrstuhls haben wir bei einigen dieser Themen durchaus eine Vorreiterrolle übernommen.

Dies wäre nicht möglich ohne substantielle Förderung. Dank daher den regionalen, nationalen und internationalen Förderern! Besonders zu nennen ist wieder der Freundeskreis des Instituts, der allein uns in den letzten 5 Jahren 180.000 DM zuwenden konnte. Dafür sind wir besonders dankbar.



---

Im letzten Jahr verstarb Dr. Wilhelm Regnet. Viele Jahre verkörperte er die gewissenhafte subtile Art der balneologischen Wassercharakterisierung. Genauso sorgfältig wurden von ihm zahlreiche Chemielaboranten ausgebildet. Sein Wirken wird auch in Zukunft nicht vergessen werden.

Wie jedes Jahr soll dieser Jahresbericht einen Einblick in unsere aktuelle Arbeit ermöglichen.

Ich danke den Institutsangehörigen herzlichst für Ihre engagierte Mitarbeit und erbitte dieselbe für die kommende Zeit.

München, März 2000

Univ.-Prof. Dr. R. Nießner  
Ordinarius und Institutsvorstand

# 1 Forschung

## 1.1 Hydrogeologie

### 1.1.1 Exothermer Stoffumsatz in MVA-Schlackedeponien

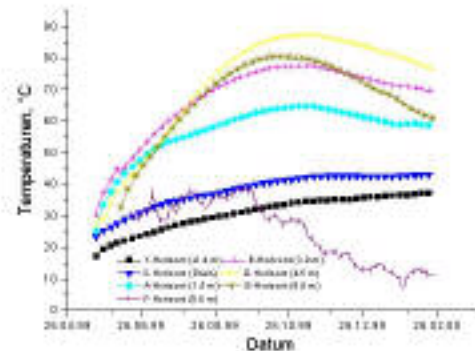
Förderung: BayFORREST F158

Im Rahmen des Pilotprojektes E 38 wurde zur Klärung der Temperaturentwicklung im Deponiekörper ein Messprofil (Profil E 38) eingerichtet. Im Projekt F 158 erfolgte ein weiterer Profileinbau (Profil 2). Im Gegensatz zu Profil 1, das in mehreren Zeitabschnitten geschüttet wurde, erfolgte der Einbau des zweiten Profils innerhalb 2 Tagen. Die Gesamtmächtigkeit beider Profile beträgt jeweils ca. 10 m. Im ersten Profil wurden 9, im zweiten 10 Messhorizonte eingerichtet. Ein Vergleich beider Profile zeigt einen anfänglich ähnlichen Temperaturanstieg. Allerdings ist der Temperaturgradient des Profils 2 in allen Horizonten höher als in Profil 1. Im Profil 1 wurde eine Maximaltemperatur von 85,6 °C im Kern der Deponie (G-Horizont) gemessen. Die Temperaturen an der KDB überschritten nach einer Lagerungszeit von ca. 13 Monaten die für die Langzeitstabilität der Kunststoffdichtungsbahn (KDB) kritische Temperatur von 40°C und bewegen sich seither konstant über diesem Wert. Nach 16 Monaten Lagerungszeit war eine Stagnation im Temperaturverlauf zu erkennen. Im Profil 2 liegt das derzeitige Temperaturmaxima bei 87 °C im Kern der Deponie (F-Horizont), wobei noch keine Stagnation des Temperaturverlaufs zu erkennen ist. Da die Schüttung dieses zweiten Profils mit einem Alter von nur fünf Monaten noch recht jung ist, können wir an dieser Stelle noch keine weitgehende Bewertung der Temperaturentwicklungen im Vergleich zu Profil 1 abgeben.

Um den Temperaturentwicklungen auf der Schlackedeponie näher auf den Grund gehen zu können, wurden im Sommer 1999 eine Reihe von Containerversuchen gestartet. Auch hier sind infolge von exothermen Prozessen Temperaturanstiege zu beobachten.

Im Rahmen des Forschungsprojekts F158 wurden im Zeitraum vom 23.-26. August 1999 fünf Kernbohrungen in der Nähe des Profils 1 niedergebracht (jeweils 8 m Gesamtlänge). Untersuchungen des Wassergehaltes der Bohrkerns zeigen, dass infolge der Aufstauwirkung der kapillarbrechenden Drainageschicht der Wassergehalt von der Oberfläche nach unten hin erst zunimmt, um dann zum Kern der Deponie abzunehmen.

Zur Klärung der Temperaturentwicklung und der kausalen Zusammenhänge mit den Alterationsprozessen in der Schlacke wurden umfangreiche chemische und mineralogische Untersuchungen des frischen und gealterten Schlackematerials durchgeführt. Neben der Röntgendiffraktometrie, der Polarisationsmikroskopie, der Rasterelektronenmikroskopie und der Röntgenfluoreszenzspektroskopie kamen die Ramanmikroskopie, die Atomabsorptionsspektrometrie und die Ionenchromatographie zum Einsatz. Um die Alterungsprozesse in den Schlacken zu studieren, wurde unter verschiedenen Bedingungen gealtertes Schlackenmaterial beprobt. Zur Untersuchung kamen das aufgeschüttete Schlackematerial des Schlackebergs und die Bohrkerns der Kernbohrung. An den Schlacken konnten folgende Alterationsprozesse aufgezeigt werden: Lösungsreaktionen, Glaskorrosion, Hydratationsreaktionen, Oxidationsreaktionen, Kalklöschung, Sulfidverwitterung und Verfestigungsreaktionen. Die Temperaturstagnation in Profil 1 deutet auf eine Abnahme der exothermen Prozesse im Schlackematerial hin. Mineralogische Untersuchungen zeigen jedoch, dass selbst zwei Jahre alte Schlacken



aufgemahlen noch reaktives Potential für exotherme Reaktionen besitzen. Vermutlich hemmt bzw. verlangsamt die Ausbildung von Reaktionssäumen um die Schlackepartikel allmählich die fortschreitenden Reaktionsabläufe. Werden diese Reaktionssäume durch die Probenaufbereitung (z.B. Brechen, Aufmahlen) verletzt, so werden neue reaktive Oberflächen freigelegt; die exothermen Prozesse können wieder einsetzen.

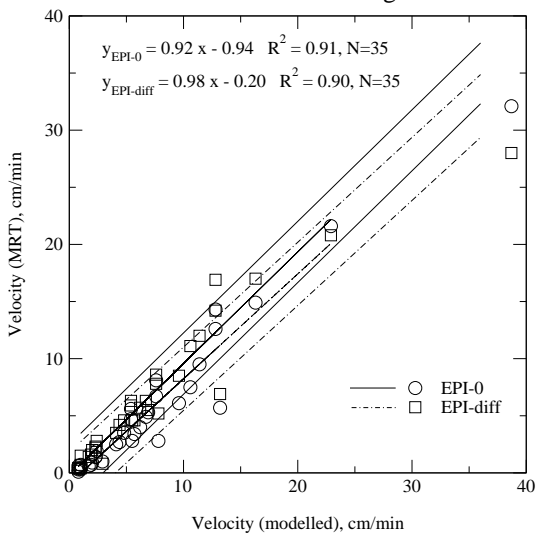
Ergänzend zu den oben angeführten Untersuchungen erfolgten mehrere Gasuntersuchungen am Profil 1 der Deponie Großmehring. Dabei wurden erhöhte Gehalte an Wasserstoff, Kohlendioxid und Methan nachgewiesen. Die Wasserstoffentwicklung ist auf die Korrosion von Aluminium, Zink und Eisen zurückzuführen. Die Kohlendioxid- und Methanentwicklung lässt auf die Anwesenheit von Bakterien schließen.

(R. Klein, C. Speiser)

### 1.1.2 Messung der Fließgeschwindigkeit in porösen Medien mit der Kernspintomographie

*Förderung: Eigenmittel*

Die Geometrie des Porenraums – Durchmesser der Poren, Länge der Poren und Verbindung der Poren miteinander – entscheidet darüber, ob ein Grundwasserleiter gut oder schlecht durchlässig ist, oder wie sich das Wasser räumlich ausbreitet. Ebenso wichtig ist die Bestimmung der Aufenthaltsdauer des Wassers im Porenraum, also der Fließgeschwindigkeiten in der Einzelpore, um die Wechselwirkungen von gelösten Schadstoffen mit der Matrix oder den Transport von Kolloiden zutreffend beschreiben zu können. Obwohl sich die Bedeutung des Porenraums in nahezu jeder theoretischen Abhandlung der Hydrogeologie manifestiert, sind die Möglichkeiten zur direkten Messung der Eigenschaften des Porenraums spärlich.



Zur Visualisierung von Gewebestrukturen wird in der Medizin schon länger die Magnetresonanztomographie (MRT) eingesetzt. Anwendungen außerhalb der Medizin sind (noch) selten. Fließvorgänge führen im MRT dazu, dass sich die angeregten Protonen aus dem Messvolumen entfernen und somit das Signal abgeschwächt wird. Im medizinischen Sektor wird der Bereich der meßbaren Geschwindigkeiten von 1 bis 10 cm/s, also deutlich über den im Grundwasser auftretenden Geschwindigkeiten, angegeben. Daneben existieren aber auch Anwendungen zur Messung von Diffusionsprozessen. Dynamische Prozesse können mit der MRT grundsätzlich in Echtzeit gemessen werden. Die Aufnahme von Zeitreihen ist nicht notwendig. Für die Applikation im hydrogeologischen Umfeld sind in der Regel keine Kontrastverstärker nötig. Diese Eigenschaften lassen die Technik für die Anwendung im hydrogeologischen Umfeld als sehr geeignet erscheinen.

Der Zusammenhang zwischen den gemessenen und den, auf Basis des Darcy'schen Gesetzes, berechneten Fließgeschwindigkeiten ist in der Abbildung dargestellt. Die Übereinstimmung ist sehr gut. Sehr hohe Fließgeschwindigkeiten führen prinzipbedingt zu einer starken Abnahme der Signalintensität. Unter den vorliegenden Bedingungen lassen sich Geschwindigkeiten bis 25 cm/min messen. Dieser Bereich umfaßt die unter natürlichen Bedingungen auftretenden Geschwindigkeiten. Bei extrem ungleichförmiger Porenverteilung wurde eine Beeinflussung der Messung durch Teilvolumeneffekte festgestellt, die durch eine geringere räumliche Auflösung der Flußmessungen ausgeglichen werden kann.

Die vorgestellte Methode erlaubt die zerstörungsfreie, räumlich hoch aufgelöste Messung dynamischer Prozesse in porösen Medien. Neben den dargestellten hydrogeologischen An-

---

wendungen, ist die Magnetresonanztomographie auch in der Lage, einen detaillierten Einblick in die Prozesse bei der Wasseraufbereitung (Filtereffekte) oder bei der Bodensanierung (elektrokinetische Sanierungsverfahren, Grundwasserzirkulationsbrunnen) zu geben.

*(T. Baumann)*

### **1.1.3 Grundwassererschließung**

Die im August 1998 im Staatsbad Bad Steben begonnene Erschließung eines Kohlensäuerlings bzw. von Thermalwasser am Hemplabühl TB1 wurde im Februar 1999 bei 845 m Tiefe eingestellt. Geophysikalische Bohrlochmessungen durch das Niedersächsische Landesamt für Bodenforschung Hannover, jetzt Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben GGA, erbrachten zwar wesentliche wissenschaftliche Erkenntnisse in Bezug auf Gesteinslagerung, -zusammensetzung und -art, jedoch konnten keine Hinweise auf offene Klüftung im unmittelbaren Bohrumfeld gewonnen werden.

Bei einer maximalen Wassertemperatur von 13,7 °C und einer Ergiebigkeit von 1 l/s (Absperrung der Bohrung betrug nur 50 m) betrug die Gesamtmineralisation lediglich 247 mg/l ohne Besonderheiten ( $\text{CO}_2 < 30 \text{ mg/l}$ ). Durch erneute Luftbildinterpretationen wurden ab Juni 1999 zwei weitere Versuchsbohrungen VB2 und VB3 auf 128 m bzw. 210 m Tiefe abgeteuft.

VB3 erwies sich als optimal, sie liegt direkt in einem intensiv tektonisch gestörten Bereich hoher Wasserergiebigkeit. Auch die geophysikalischen Untersuchungen – Gravimetrie (Ing. Büro Dr. Ernestson) – bestätigten den Bohrpunkt als optimalen Erschließungsort für einen "Thermalsäuerling". Anfang Dezember 1999 wurde in unmittelbarer Nähe von VB3 der Bohrpunkt für eine weitere Tiefbohrung (VB3A) auf ca. 800 m festgelegt. Im Jahre 2000 wird sich zeigen, ob das gesteckte Ziel erreicht werden kann.

Weitere Untersuchungsschwerpunkte zur Mineralwassererschließung lagen in Siegsdorf, wo letztlich Vorschläge zu Brunnenbau und -ort gemacht wurden, bis jetzt jedoch noch nicht verwirklicht wurden, und in Löberschütz/Jena.

*(M. Baumann)*

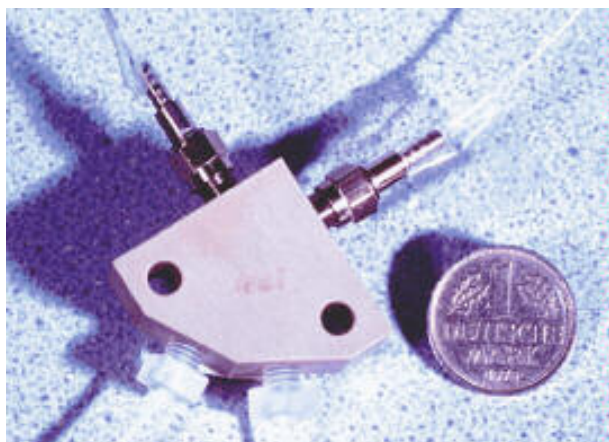
## 1.2 Hydrochemie

### 1.2.1 On-line-Detektion wassergelöster Schwermetalle mittels laserinduzierter Fluoreszenzspektroskopie und FIA

Förderung: BMBF

Kooperation: Prof. U. Förstner, Arbeitsbereich Umweltschutztechnik der TU Hamburg-Harburg

Im Rahmen des australisch-deutschen Kooperationsprojekts „Entwicklung Aktiver Barriere-Systeme (ABS) zur Minimierung der Schadstoff-Freisetzung aus kontaminierten Sedimenten“ wird ein On-line-Monitoring wassergelöster Schwermetalle ermöglicht werden. Für die Erprobung eines Aktiven Barriere-Systems im Feldmaßstab soll ein stark mit Schwermetallen belastetes Sediment in einem abgeteilten Abschnitt, ein so genanntes „Enclosure“, des Schwelwasserdeponie-Sees Vollert-Süd bei Leipzig eingebracht und die Installation und Wirksamkeit einer aktiven Barriere getestet werden.



Zur Beobachtung der Mobilisierung wurde ein in den vergangenen Jahren entwickeltes, mobiles Sensorsystem an die im Feldversuch zu erwartenden Bedingungen angepasst und entsprechend modifiziert. Das Detektionsprinzip basiert auf faseroptisch geführter, laserinduzierter Fluoreszenzspektroskopie an geeigneten Metall-Ligand-Komplexen. Das System besteht aus einer Anregungs- und einer Detektionseinheit sowie aus einem Sensorarray mit fünf Fließzellen (s. Abbildung), die zusammen mit den Reservoirs für Reagenzien und Spül-Lösung, einem Abfallbehälter, einer Schlauchpumpe und fünf Ventilen in einem weiteren Gehäuse untergebracht sind. Die Anregung erfolgt durch einen Stickstoff-Laser, dessen Strahl in ein Glasfaserbündel eingekoppelt und zum Sensorarray geleitet wird. In die Reagenzienströme, welche geeignete Liganden enthalten, deren Fluoreszenzeigenschaften sich durch Komplexbil-

dung mit Schwermetallen ändern, wird jeweils ein definiertes Probenvolumen injiziert. Die in den Fließzellen erzeugte Fluoreszenz wird über ein zweites Faserbündel zum Detektionsmodul geleitet. Der Einsatz einer CCD-Kamera, die mit einem Spektrograph gekoppelt ist, ermöglicht dabei die simultane Detektion der Änderungen der Fluoreszenzeigenschaften in den einzelnen Fließzellen. Als wesentliche Vorteile des Sensorarrays sind der modulare Aufbau, die kleinen Abmessungen sowie das geringe Gewicht bei hoher mechanischer und chemischer Belastbarkeit zu nennen.

Das im Sommer 2000 einzubringende Sediment wurde eingehend charakterisiert und das Mobilisierungsverhalten der enthaltenen Schwermetalle unter verschiedenen Bedingungen untersucht. Für den Feldversuch kann prognostiziert werden, dass neben Eisen und Mangan insbesondere Zink, Cadmium, Nickel und Kupfer in erheblichen Mengen mobilisiert werden, woraus sich die simultane Detektion der genannten Metalle als analytische Aufgabe ergibt.

(H. Prestel, J. Zhang)

### 1.2.2 Photokatalytische Wirkung von Aerosolpartikeln

Förderung: Bayerischer Forschungsverbund „Erhöhte UV-Strahlung in Bayern: Folgen und Maßnahmen“ FORUV

Im Rahmen dieses Projektes soll der photokatalysierte Abbau von Umweltschadstoffen an natürlich deponierten Aerosolpartikeln untersucht werden. Der Prozess der Photokatalyse kann wie folgt beschrieben werden: Die elektronische Bänderstruktur eines Halbleiters ist durch das höchste besetzte Energieband (Valenzband, vb) und das niedrigste unbesetzte



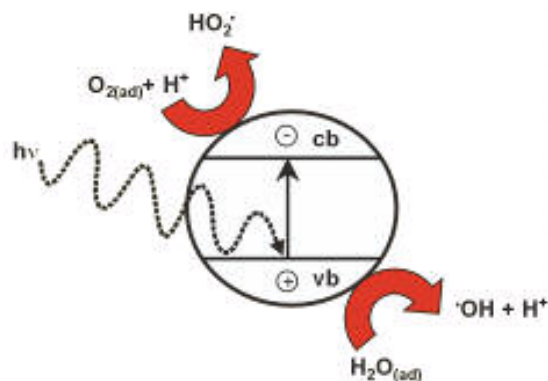
Energieband (Leitungsband, cb), die durch eine Energielücke getrennt sind, charakterisiert. Absorbiert der Halbleiter Photonen, deren Energie größer oder gleich der Energielücke ist, werden Elektronen in das Leitungsband angeregt und es bildet sich ein Elektronen-Überschuss im Leitungsband und Elektronenlöcher im Valenzband. Diese Elektronen-Loch-Paare können rekombinieren oder an der Oberfläche mit Elektronendonoren bzw. Elektronenakzeptoren, wie in der Abbildung anhand von adsorbiertem Wasser und Sauerstoff gezeigt, reagieren. Die entstehenden Radikale reagieren schnell, z.B. mit Schadstoffen, während der Halbleiter unverändert aus der Reaktion hervorgeht.

Im Rahmen dieses Projektes werden Aerosolpartikel auf Filterproben (PM<sub>2,5</sub> und PM<sub>10</sub>) bzw. „dry only“-Niederschlagssammlern in München-Großhadern gesammelt und charakterisiert. Dabei soll insbesondere die Elementzusammensetzung mittels totalreflektierender Röntgenfluoreszenzspektroskopie und Atomabsorptionsspektroskopie bestimmt werden. Des Weiteren sollen die Partikel raster-elektronenmikroskopisch betrachtet werden.

Die photokatalytische Wirksamkeit der deponierten Partikel soll anhand der Bildung von Radikalen untersucht werden. Besondere Aufmerksamkeit wird auf die sehr reaktiven OH-Radikale gelegt. Zur Detektion der OH-Radikale soll eine geeignete Screening-Methode mit hohem Partikeldurchsatz entwickelt werden. Es ist geplant, die Radikale selektiv mit Fängermolekülen abzufangen, diese mit Farbstoffen zu derivatisieren und eine fluoreszenzspektroskopische Detektion anzuschließen. Zum Vergleich mit den gesammelten Partikeln sollen auf diese Weise auch spezielle Halbleiter, die als Photokatalysatoren bekannt sind, z.B. TiO<sub>2</sub>, charakterisiert werden.

Darauf aufbauend soll eine mögliche Schädigung der Oberfläche, beispielsweise von Blättern, auf der die Partikel natürlich deponiert werden, untersucht werden.

(M. Lackhoff)



## 1.3 Bioanalytik 1

### 1.3.1 Human-Biomonitoring: Immunologische und chromatographische Bestimmung von PAK-Metaboliten im Urin

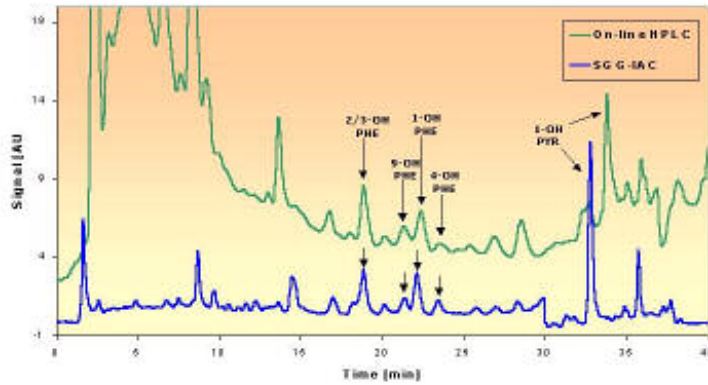
*Förderung: Eigenmittel*

*Kooperation: GSF Neuherberg (Prof. Kettrup)*

In vorangegangenen Untersuchungen wurde die Anwendbarkeit eines ELISA für die Bestimmung der PAK-Metaboliten-Ausscheidung (als Indikator für die PAK-Belastung eines Menschen) im Urin geprüft. Als Referenzmethode wurde die HPLC eingesetzt. In jeder der untersuchten Urinproben (N = 20) sowohl der Kontroll- als auch der exponierten Gruppe (Straßenarbeiter) wurden PAK-Metabolite nachgewiesen. Signifikante Unterschiede ergaben sich nur zwischen Rauchern (höhere Ausscheidungsraten) und Nichtrauchern. Dabei wurden mit dem ELISA neben dem vielfach verwendeten Leitparameter 1-Hydroxypyren noch weitere PAK-Metaboliten erfasst. Höhere Kreuzreaktivitäten wurden v.a. zu verschiedenen hydroxylierten Phenanthrenen festgestellt, die auch traditionell mit der HPLC nach Voranreicherung mit einer speziellen Vorsäule (Kieselgel mit Cu-Phthalocyanin modifiziert) erfasst werden können.

In einer neuen Studie sollte nun untersucht werden, ob die verfügbaren Antikörper auch für eine Affinitätsanreicherung von PAK-Metaboliten (erhöhte Selektivität), gefolgt von der chromatographischen Auftrennung (HPLC) verwendet werden können (Immunextraktion ±

HPLC). Die Probandengruppe umfasste 20 beruflich nicht exponierte Personen (10 Raucher, 10 Nichtraucher). Zur Herstellung des Immunoaffinitätsträgers wurden die polyklonalen PAK-Antikörper im Sol-Gel-Verfahren in eine Glasmatrix einpolymerisiert. Die enzymatisch hydrolysierten PAK-Metaboliten-Konjugate (Konjugationsprodukte mit Glucuron- bzw. Schwefelsäure) wurden über den Immunadsorber angereichert, die gebundenen PAK-Metaboliten mit einem geeigneten Lösungsmittel eluiert und anschließend der HPLC-Bestimmung zugeführt.



Als Vergleich wurde wiederum die traditionelle HPLC-Analysenmethode nach Voranreicherung der Metabolite mit einer „Phthalocyaninsäule“ durchgeführt (on-line HPLC). Beide Methoden lieferten ähnliche Ergebnisse, allerdings waren die Chromatogramme nach vorangehender Immunextraktion weitaus „sauberer“, d.h. Matrix-Störpeaks waren kaum noch auszumachen (siehe Abb.) Neben den gut identifizierbaren monohydroxylierten Pyren- und Phenanthren-Metaboliten treten noch weitere Peaks auf, die mit hoher Wahrscheinlichkeit ebenfalls Abbauprodukte von PAKs darstellen. An deren Identifizierung wird gegenwärtig gearbeitet. Auch in dieser Studie wurde

bei Rauchern eine signifikant erhöhte PAK-Ausscheidung festgestellt, wobei sogar ein Zusammenhang (Trend) mit der Anzahl der gerauchten Zigaretten ausgemacht werden konnte. (G. Maier, M. Schedl)

### 1.3.2 Anwendung von Immun- und Kopplungstechniken für die Bestimmung niedermolekularer Analyte in Umweltproben

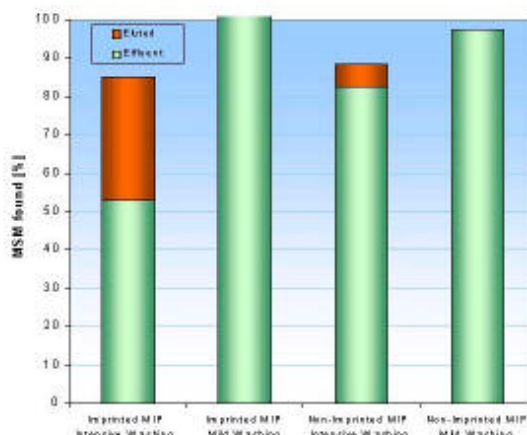
Förderung: DAAD

Kooperation: CID-CSIC Barcelona (Dr. Bayona), Universität Paris (Prof. Haupt)

Im zweiten Abschnitt des Projektes ging es um die Bestimmung des Herbizides Metsulfuronmethyl. Dieses Pestizid gehört zur Klasse der Sulfonylharnstoffe, die nur in sehr geringen Mengen (g/ha) angewandt werden. Wenn es um die Analyse von Umweltproben geht, kann auf eine Anreicherung deshalb nicht verzichtet werden. Üblich ist die Verwendung von Adsorberharzen, die jedoch häufig zu unerwünschten Störpeaks führen (Matrixeffekte).

Als Alternative soll die Verwendung selektiverer Medien für die Anreicherung geprüft werden. Dabei handelt es sich um (1) Immunadsorber und (2) molekulare Imprints (MIPs, künstliche Antikörper). Der Immunadsorber wurde im Sol-Gel-Verfahren hergestellt. Es wurden verschiedene MIPs synthetisiert, wobei sowohl das zum Imprinten verwendete Templat, die relativen Mengen von Templat und funktionellem Monomer, als auch unterschiedliche Porogene zum Einsatz kamen. Als ein entscheidender Parameter für die Funktion (Einsatzbarkeit) der MIPs erwies sich die gründliche Reinigung nach deren Präparation, wobei zu drastische Bedingungen auch zur Zerstörung, und damit zum völligen Verlust der Analyt-Bindung führen können. Im Gegensatz zum Immunadsorber (biokeramischer Träger) muss bei Verwendung von MIPs (organische Polymere) mit einem höheren Untergrund (unspezifische Bindung des Ziel-Analyten) an die Trägermatrix gerechnet werden, der z.B. durch Wahl eines geeigneten Inkubationsmediums (geeignetes organisches Lösungsmittel in einer bestimmten Konzentration) in Grenzen gehalten werden kann. Die Bestimmung von Metsulfuronmethyl wurde mit der HPLC durchgeführt. Die Untersuchungen sind noch nicht abgeschlossen.

(P. Bou Carrasco, S. G. Sire)



### 1.3.3 Bestimmung von Sulfonylharnstoff-Herbiziden mittels Kapillarelektrophorese

Förderung: Eigenmittel

Die Kapillarelektrophorese (CE) ist eine Mikroseparationstechnik, die einige praktische Vorteile gegenüber konventionellen chromatographischen Trennmethode besitzt. Sie liegen in der einfacheren, schnelleren und billigeren Analytik, geringere Mengen an Probe und organischen Lösungsmitteln sind notwendig, die Kosten der Kapillaren sind sehr gering und die Methodenentwicklung geht relativ schnell. Nachteilig ist, dass die sehr kleinen Injektionsvolumina von nur wenigen Mikrolitern eine geringe konzentrationsbezogene Nachweisempfindlichkeit bedingen. Diese ist zu hoch für den Spurenkonzentrationsbereich. Daher ist gewöhnlich eine vorherige Aufkonzentrierung der Proben notwendig. Eine Spurenanalytik im umweltrelevanten ppb- oder ppt-Bereich kann somit nur mit Hilfe von geeigneten Probenanreicherungsmethoden und/oder empfindlicheren Detektoren durchgeführt werden. Als solche stehen gängige off-line-Anreicherungstechniken wie die Flüssig-Flüssig-Extraktion, die Solid-Phase-Extraktion, aber prinzipiell auch die Affinitätsextraktion zur Verfügung. Daneben gibt es spezielle CE-spezifische on-line Konzentrierungstechniken.

Sulfonylharnstoffe wurden am Anfang der 80er Jahre auf den Markt gebracht. Sie sind seit 1986 in der Bundesrepublik zugelassen. Eine direkte Bestimmung dieser polaren und schwach sauren Herbizide mit der Gaschromatographie ist aufgrund der geringen Flüchtigkeit und der thermischen Labilität nicht möglich, allerdings nach Derivatisierung. Bestimmungen von Sulfonylharnstoff-Herbiziden mittels CE (CZE bzw. MEKC) sind nur wenige bekannt. Es ist das Ziel des Forschungsvorhabens, eine leistungsstarke CE-Trennmethode unter Einbeziehung einer geeigneten Anreicherungstechnik für eine ausgewählte Gruppe von Sulfonylharnstoffen (Multimethode) zu entwickeln.

(N. Escobedo)

#### 1.3.4 Automatisiertes Immunoassay-System zur kontinuierlichen Überwachung der Lufthygiene und seine Anwendung auf die Luftverschmutzung und Aero-Allergene

Förderung: Europäische Union

Kooperation: Institut Pasteur (Paris), Medizinische Universität Pecs, Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik (Prag)



Die Luftgüte ist einer der fundamentalen Faktoren, die Einfluss haben auf die menschliche Gesundheit und somit auf die Lebensqualität. Die Beeinträchtigung dieses Gutes erfolgt auf vielfältige Weise: Auf der einen Seite stehen Emissionen durch Verkehr und Industrie, und auf der anderen Seite ist in zunehmendem Maße eine Sensibilisierung der Bevölkerung gegenüber natürlicher luftgetragener Substanzen wie Pollen und Pilzsporen (allgemein Allergene) zu verzeichnen. Das Wissen über die Auswirkungen dieses „Schadstoffcocktails“ auf den Menschen ist noch lückenhaft. Es wird jedoch vermutet, dass manche Schadstoffgemische ein höheres gesundheitsschädigendes Potential besitzen (toxisch, allergiefördernd) als aus der Summe der Einzelkomponenten zu vermuten wäre. Zur Klärung dieser Frage ist es unabdingbar ein Instrumentarium zur Hand zu haben, das ein schnelles und regelmäßiges Monitoring einer breiten Palette an umweltrelevanten Stoffen ermöglicht.

Das Fernziel dieser Kooperation ist die Entwicklung einer automatischen Messeinheit, die in regelmäßigen Abständen Aerosolproben nimmt und diese mit immunologischen Verfahren auf bestimmte Inhaltsstoffe untersucht. Zu den zahlreichen Vorarbeiten, die von den einzelnen Projektpartnern erbracht werden müssen gehört das Sammeln von Aerosolproben, Erarbeiten einer Extraktionsmethode, Analyse und Identifizierung relevanter Inhaltsstoffe und schließlich die Produktion von Antikörpern gegen relevante Verbindungen.

Unser Beitrag erwächst aus der vorhandenen Expertise über das Sammeln und Analysieren von Aerosolen. So wurden im ersten Jahr des Projekts zahlreiche Aerosolproben an einer verkehrsreichen Kreuzung in München – sowohl mit einem Low-volume- als auch mit einem High-volume-Sammler – genommen. Verschiedene Extraktionsmethoden wurden hinsichtlich ihrer Eignung zur Extraktion von PAKs und für eine spätere Automatisierung untersucht. Der Analytik mittels HPLC auf PAKs wurden Untersuchungen mit einem PAK-ELISA gegenübergestellt. Trotz der Berücksichtigung der Kreuzreaktivitäten zu 15 weiteren PAKs kam es im Schnitt zu einer dreifachen Überbestimmung. Parallel zu den Messungen erfolgte die Entwicklung eines ELISA mit hoher Selektivität für Benzo[a]pyren, zunächst mit polyklonalen Antikörpern und in Kürze mit mAbs.

(T. Scharnweber)

### 1.3.5 Entwicklung und Anwendung von Mikrohybridisierungsverfahren für Untersuchungen zu Vorkommen und Aktivität von Mikroorganismen bei der biologischen Abwasserbehandlung

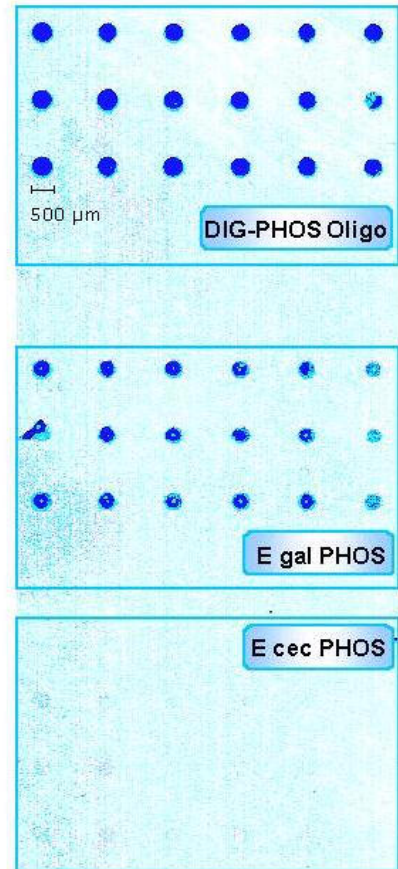
Förderung: DFG (SFB 411)

Kooperation: Lehrstuhl für Mikrobiologie der TUM (Prof. Schleifer)

Eine Anlage zur biologischen Abwasserbehandlung bedarf der ständigen Überwachung und Optimierung. In diesem Gemeinschaftsprojekt im Rahmen des SFB 411 sollen detaillierte Informationen über die Populationsstruktur und Aktivität der im Biofilm vorhandenen Mikroorganismen gewonnen werden. Durch Anwendung von Hybridisierungstechniken und dem Einsatz des Mehrfachsondenprinzips (multiple DNA-Sonden unterschiedlicher Spezifität) wird eine hohe Zuverlässigkeit der Identifizierung garantiert. Als Zielsequenz wird dabei die komplette rRNA verwendet, da die ribosomale RNA von einer Vielzahl von Mikroorganismen bereits in verschiedenen Datenbanken „kartographiert“ ist und sowohl taxon- als auch gruppenspezifische Basensequenzen enthält. Neben der konventionellen reversen Hybridisierung soll mit der Entwicklung eines kompetitiven Hybridisierungsassays die Anwendbarkeit neuartiger Testformate geprüft werden.

Um das Mehrfachsondenprinzip effektiv einzusetzen, muss ein hoher Probandendurchsatz garantiert sein, da mit einer Probe mehrere Reaktionen mit den jeweiligen Sonden durchgeführt werden müssen. Durch die Verwendung von konventionellen 96-well-Mikrotiterplatten (MTP) wird diese Voraussetzung erfüllt. Auf einer Platte kann durch eine flexible Belegung mit DNA-Sonden unterschiedlicher Spezifität und durch Variation der Hybridisierungsbedingungen ein „Fingerabdruck“ des jeweiligen Mikroorganismus erstellt werden. Durch die Verwendung von MTP ergeben sich weitere Vorteile: alle Schritte sind leicht automatisierbar, eine Standard-ELISA-Labora-ausrüstung (Washer, Plattenreader, Probenvorbereitungsgeräte) kann verwendet werden und die Hybridisierungsbedingungen können leicht beeinflusst werden. Im ersten Projektabschnitt wurden wichtige Testparameter optimiert. Eine geeignete modifizierte Plattenoberfläche wurde nach Prüfung verschiedener Plattentypen ausgewählt und die Immobilisierungsbedingungen für die Capture-Oligos verbessert. Dabei konnte die eingesetzte Menge an Capture-Oligos und Proben-DNA schrittweise reduziert werden. Bei ersten Versuchen mit einem kompetitiven Test konnten bereits wichtige Erkenntnisse zur Optimierung dieses neuartigen Hybridisierungsformates gewonnen werden. Eine weiterer Schritt zur Miniaturisierung ist mit der Detektion von Modell-DNA im Chip-Format gelungen. Dabei wurde die reverse Hybridisierung auf einem geeigneten Trägermaterial durchgeführt. Die Kopplung der Oligos erfolgte analog zum Mikrotiterplattenverfahren. Durch diese Methode können mehrere hundert Sonden auf einer sehr kleinen Fläche immobilisiert (Spotgröße ca. 300  $\mu\text{m}$ ) werden, die Identifikation eines Mikroorganismus gelingt daher mit noch größerer Sicherheit. Darüberhinaus wird in zukünftigen Arbeiten die Effizienz des verwendeten Materials mit anderen möglichen Trägern (z.B. epoxidierte oder silanisierte Glaschips) sowie kommerziell erhältlichen modifizierten Supports verglichen werden.

(M. Schedl)





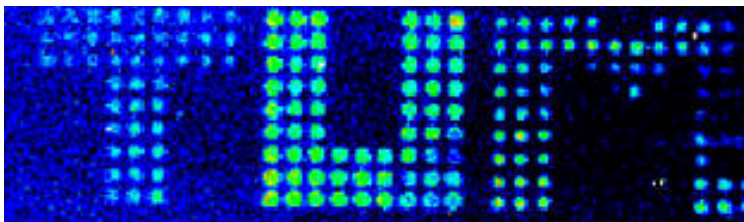
## 1.4 Bioanalytik 2

### 1.4.1 Entwicklung eines Immunoassay-Arrays zur Detektion und Quantifizierung von allergenspezifischem Immunglobulin E

Förderung: Technische Universität München

Kooperation: Klinik für Dermatologie und Allergologie am Biederstein, München

Am Institut für Wasserchemie und chemische Balneologie der TUM wurde in den letzten drei Jahren ein hochparalleles Biosensorsystem für die Wasseranalyse entwickelt, mit dem es möglich ist, mehrere Analyten gleichzeitig zu vermessen. In folgender Abbildung ist eine PASA-Messung von 3-Analyten dargestellt:



Nach der Messung liefert die CCD-Kamera Aufnahmen wie im Bild gezeigt. Da z.B. der Buchstabe T aus vielen Einzelpunkten besteht und diese hohe Redundanz nicht erforderlich ist, bleibt die Anwendung des PASA-Systems in der Wasseranalytik noch lange Zeit reagenzlimitiert, d.h. es stehen nicht genügend viele Antikörper zur Verfügung. Anders stellt sich die Situation auf dem

Allergiesektor dar, wo bereits viele verschiedene Allergenreagenzien kommerziell erhältlich sind. Jeder einzelne helle Fleck (Spot) könnte für ein spezielles Allergen stehen, d.h. man könnte bei einem Patienten ohne größeren Aufwand an Zeit und Geld mehrere Hundert verschiedene allergene Substanzen ermitteln.

Im Rahmen einer Diplomarbeit wurde daher zunächst untersucht, ob das PASA-System für die Allergiediagnostik prinzipiell anwendbar ist. Als Immunochips für die PASA-Tests wurden Mikroskopieobjektträger aus Glas eingesetzt, deren Oberfläche zunächst noch derivatisiert werden mußte. Dazu wurden unterschiedliche Silanisierungsmethoden untersucht. Die Allergene erwiesen sich dabei im Gegensatz zu den bei der Bestimmung des Gesamt-IgE-Gehaltes eingesetzten Anti-Human-IgE-Antikörpern als zu klein, um an eine mit Trimethylchlorsilan hydrophobierte Oberfläche fest adsorbieren zu können. Für die Bestimmung des allergenspezifischen IgE-Gehaltes mußten die Allergene daher kovalent an die Trägeroberfläche gekoppelt werden. Für die kovalente Ankopplung der Allergene an die Oberfläche wurden die Glasträger zunächst mit 2-(Aminoethyl)-3-aminopropyl-methyldimethoxysilan aminosilaniert und anschließend mit Quadratsäuredimethylester, Suberinsäure-N-hydroxysuccinimides-ter und Glutaraldehyd aktiviert. Dadurch erhält man auf der Oberfläche reaktive Carbonylgruppen, an die die Aminogruppen der  $\epsilon$ -Lysin-Gruppen des Allergens angreifen können. Die Immobilisierung der Allergene war aber aufgrund inhomogener Oberflächen nicht sehr reproduzierbar. Als weitere Probleme konnten das Auftreten von unspezifischer Bindung, Reagenzienverschleppung durch Waschschrte und unzureichendes Auswaschen der Reagenzien aus der PASA-Anlage beobachtet werden. Prinzipiell ist eine Immobilisierung verschiedenster Allergene auf Glasoberflächen und eine anschließende Vermessung des Biochips mit der PASA-Anlage möglich, es müssen aber noch zahlreiche Optimierungen durchgeführt werden. Diese Testoptimierungen sollen nun im Rahmen einer Promotionsarbeit durchgeführt werden. Es soll eine geeignete Oberfläche für die kovalente Ankopplung möglichst vieler Allergene auf einer Oberfläche gefunden werden. Zudem sollen Parameter wie Sensitivität, Nachweisgrenze und Reproduzierbarkeit der mit der PASA-Anlage durchgeführten Allergietests ermittelt werden. Durch eine Kooperation mit dem Klinikum für Dermatologie und Allergologie am Biederstein in München können die mit der PASA-Anlage durchgeführten Tests zudem hinsichtlich der klinischen Relevanz überprüft werden.

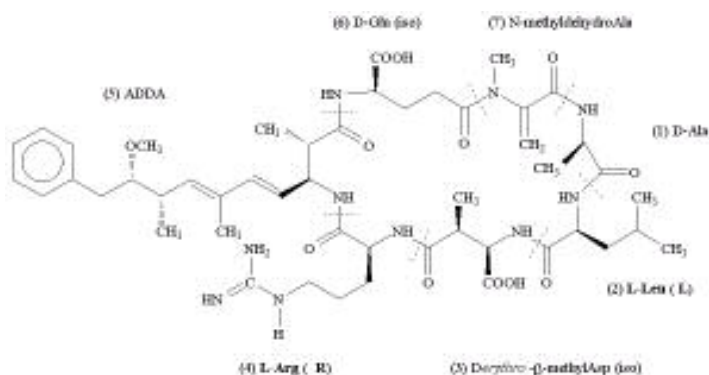
(B. Fall)

## 1.4.2 Entwicklung von schnellen immunologischen und massenspektrometrischen Methoden zur Kontrolle von Algentoxin-Kontaminationen im Trinkwasser

Förderung: BMBF

Kooperation: Deutsch-Australische Kooperation, AWQC Adelaide (Prof. Bursill)

Einige Algenarten, die zu der in Süßwasser lebenden Gattung der Cyanobakterien gehören, können extrem giftige Toxine (z.B. Microcystine) produzieren. Diese Naturstoffe besitzen ein cyclisches Peptidrückgrat, bestehend aus sieben Aminosäuren und wirken als nicht-kompetitive Inhibitoren der Protein-Phosphatasen in der Leber. Da die Microcystine sowohl akut toxisch sind (LD<sub>50</sub>: 50-500 µg/kg bei der Maus i.p.) als auch chronisch als Tumorpromotoren wirken, sind selbst Spuren dieser Substanzen für die Trinkwasseranalytik relevant. Im Rahmen des laufenden Projekts werden sowohl immunologische Schnelltests als auch strukturanalytisch instrumentelle Verfahren zur Analytik der Microcystine entwickelt. Die Kombination dieser beiden



Methoden ist notwendig, da es viele Vertreter dieser Stoffklasse gibt (mehr als 50 bisher charakterisierte Microcystine) und sehr wenige davon als analytische Standards zur Verfügung stehen. So ist einerseits eine sichere Summenanalyse notwendig, die auch bisher nicht charakterisierte Microcystine nachweisen kann, andererseits ist eine Identifizierung der Toxine zur Bewertung des Problems sehr hilfreich.

Die Entwicklung eines Summentests für Microcystine wird durch die Herstellung von Breitbandantikörpern gegen diese Stoffklasse gewährleistet. Es werden Antikörper hergestellt, die entweder die allen Microcystinen gemeinsame Aminosäure ADDA (s. Abb.) oder sowohl ADDA als auch den Peptidring erkennen.

Als Referenzanalytik und als strukturanalytische Methode wird die Massenspektrometrie eingesetzt. Das Massenspektrometer setzt sich aus einer Elektrospray-Ionenquelle und einem Flugzeit-Massenanalysator zusammen. Mit dieser Technik lassen sich die Microcystine schonend ionisieren und dank des eingesetzten Massenanalysators über einen großen Massenbereich empfindlich detektieren. Da die Probe in Lösung in das Massenspektrometer eingeführt wird, können die Microcystine entweder als Mischung oder chromatographisch getrennt nachgewiesen werden.

(A. Zeck)

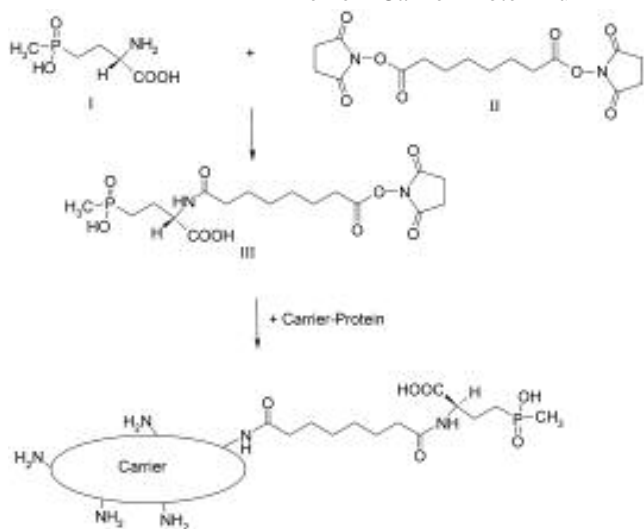
## 1.4.3 Entwicklung eines Glufosinat-Immunoassays

Förderung: AgrEvo

Die wachsende Bedeutung des Herbizides Glufosinat macht die Entwicklung von kostengünstigen analytischen Screening-Methoden sinnvoll. So könnte die konventionelle besonders zeit- und kostenintensive Screening-Analytik durch Immunoassays ersetzt werden.

Vorbedingung für die Entwicklung eines Glufosinat-Immunoassays ist die Herstellung von hochaffinen Antikörpern im Serum von Versuchstieren. Die Stimulation der Versuchstiere – in diesem Fall Mäuse – erfolgt dabei mit mehreren Injektionen eines strukturell geeigneten Immunogens. Die Immunogensynthese geht dabei vom L-Glufosinat (I) aus. Nach Reaktion

der Amino-Gruppe mit einem homo-bisfunktionellen NHS-Ester (II) und Isolierung des hydrolyseempfindlichen Glufosinat-C8-NHS-Esters (III) per HPLC erfolgt die Umsetzung mit einem Carrier-Protein zum Immunogen.



Die veränderte Struktur des Immunogens am Amin- Stickstoff führt jedoch zu einer stärkeren Affinität der Antikörper gegen N-acylierte Glufosinat-Derivate. Dies lässt sich ausnutzen, indem man vor der Analyse die Probe acyliert und so die Affinität steigert. Dabei bietet sich eine enzymatische Acetylierung mittels des natürlichen PAT-Enzyms an. Durch Anwendung dieser Immunisierungs-Methode konnten im Mäuse-Serum bereits Acetyl-Glufosinat bindende Antikörper nachgewiesen werden. Durch Fortsetzung der Immunogen-Injektionen wird jedoch noch eine Reifung der Antikörper angestrebt.

Mit Metallkationen bildet Glufosinat stabile Komplexe. In Boden und Wasser liegt Glufosinat somit höchstwahrscheinlich komplexiert vor. Um einen Immunoassay zu entwickeln, der Glufosinat direkt, d.h. ohne vorherige Derivatisierungsschritte detektieren kann, müssen zur Antikörperentwicklung Haptene verwendet werden, welche strukturell

die Möglichkeit zur Komplexbildung haben.

Das Hapten wird zur Immunisierung durch reduktive Aminierung an die Lysinreste eines Trägerprotein kovalent gebunden. Die Synthese eines solchen Immunogens stellt hohe Anforderungen an die Auswahl der Schutzgruppen. So darf zum Beispiel die Schutzgruppe an der Aminofunktion erst nach der Kopplung entfernt werden, damit keine intramolekulare Reaktion des Aldehyds mit dem Amin stattfinden kann. Zudem muss die Abspaltung nicht nur am Immunisierungsprotein, sondern auch bei der Tracersynthese an der Peroxidase, ohne Zerstörung der Enzymaktivität stattfinden können. Hier bietet sich die Verwendung einer enzymatisch abspaltbaren Schutzgruppe an.

(C. Wersching, M. Diemer)



## 1.5 Laserspektroskopie

### 1.5.1 Asymmetrische Fluß-Feldflußfraktionierung zur Fraktionierung aquatischer Kolloide

Förderung: BayFORREST F26 F2

Im Mittelpunkt dieses Projekts steht die physikalische und chemische Charakterisierung von Hydrokolloiden und ihr Potential als Transportvehikel für anthropogene Schadstoffe in natürlichen Aquiferen. Neben umweltrelevanten Fragestellungen spielt die Charakterisierung von kolloidalem Material auch bei Analytik und Qualitätskontrolle in Forschung und Industrie eine wichtige Rolle. Die Bestimmung von kontinuierlichen Größenverteilungen verschiedener polymerer und partikulärer Materialien ist nur mit wenigen Methoden möglich. Bedingt durch die meist geringen Partikelkonzentrationen in natürlichen Wässern benötigt man neben einer leistungsfähigen Methode zur Größenfraktionierung der Kolloide auch eine empfindliche Detektionsmethode für Partikel.

Die asymmetrische Fluß-Feldflußfraktionierung (AF<sup>4</sup>) ist eine leistungsfähige analytische Methode zur qualitativen und quantitativen Größenbestimmung von polymerem und partikulärem Material. Die Methode nutzt die unterschiedlichen Diffusionskoeffizienten verschieden grosser Partikel zur Fraktionierung und Bestimmung der hydrodynamischen Durchmesser. Die Auftrennung erfolgt in einem Trennkanal unter Einwirkung eines Querflusses senkrecht zur Flußrichtung des Analyten. Damit ist es möglich, direkt die Größenverteilung der Kolloide in einer Probe zu bestimmen. Proben geringer Konzentration können direkt im Trennkanal um zwei bis drei Größenordnungen angereichert werden. Die Nachweisgrenzen hängen von der verwendeten Detektionseinheit ab. Je nach Probe kann die AF<sup>4</sup>-Anlage mit verschiedenen Detektoreinheiten betrieben werden (z.B. gängige HPLC-Detektoren wie: UV/Vis-, RI-, Fluoreszenz-, Light Scattering-Detektoren). Auch Off-line Analytik einzelner Fraktionen ist möglich, wie z.B. AAS oder TRFA.



Weiteres Ziel ist die Entwicklung einer geeigneten Detektoreinheit. Teil der Arbeit ist der Aufbau, die Charakterisierung und Anwendung eines photothermischen Partikeldetektors, der den Effekt der Thermischen Linse (TL) mit hoher Empfindlichkeit zur Bestimmung der reinen Absorption einer Probe nutzt. Die gängige UV/Vis-Spektroskopie zeigt bei Partikeldetektion, vor allem für Partikel < 50 nm, eine starke, durch Lichtstreuung hervorgerufene Größenabhängigkeit der Detektionsempfindlichkeit. TL-Spektroskopie als laserspektroskopische Methode nutzt einen gepulsten Stickstofflaser mit 337 nm bzw. einen Nd:YAG Laser mit 266 oder 532 nm zur Anregung der Probe in einer Durchflußküvette und detektiert zeitaufgelöst die Aufweitung eines He/Ne-Laserstrahls, verursacht durch die in der Probe ausgebildete Thermische Linse. Man erhält ein der Absorption in der Probe proportionales Signal.

Die Arbeiten dieses Themas umfassen den Vergleich der Größenverteilungen von Huminkolloiden aus Sickerwässern verschiedener Deponien und die quantitative Bestimmungen von Kolloidgehalten in verschiedenen Wässern. In Kopplung mit TRFA-Detektion erhält man größen aufgelöste Informationen über an Huminstoffe komplexierte Schwermetalle. Die Bestimmung der Durchlässigkeit von natürlichen und künstlichen Aquiferen für Modellkolloide gibt Aufschluss über Migrations- und Sorptionsverhalten von umweltrelevanten Kolloiden in Abhängigkeit ihrer Größe. Die eingesetzten PS-Latex-Standardkolloide in den Größen von 17 nm bis 1 µm dienen als dabei als Sonden. Eine ähnliche Methode wird auch zur Charakterisierung von Filtrationsvorgängen mit Membranfiltern angewandt.

(A. Exner)

## 1.5.2 Multidimensionale Fluoreszenzspektroskopie mit faseroptischen Sensoren zur On-line und In-situ Bestimmung polycyclischer aromatischer Kohlenwasserstoffe in ölbelasteten Wasser- und Bodenproben

Förderung: Laser 2000, BMBF

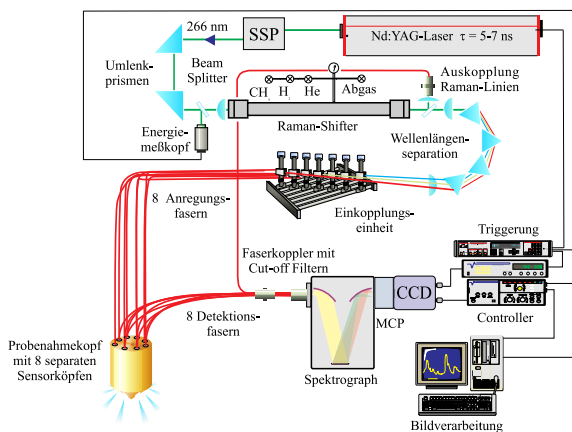
Kooperation: LaVision, Göttingen

Die Fluoreszenzspektroskopie ist eine empfindliche Methode zur Bestimmung anthropogener Schadstoffe in der Umwelt. Im Mittelpunkt dieser Arbeit stehen die kanzerogenen und mutagenen polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffe (PAK), die aus unvollständigen Verbrennungsprozessen entstehen bzw. Bestandteile von Mineralölprodukten sind. Zur schnellen Vor-Ort-Bestimmung wurde ein faseroptisches Sensorsystem, basierend auf der laserinduzierten Fluoreszenzspektroskopie, für den Feldeinsatz entwickelt. Mit Hilfe von statischen Emissionsspektren, wie sie bei bisherigen Detektionssystemen verwendet wurden, können die PAK aufgrund ihrer breiten und konturlosen spektralen Charakteristika in komplexen Matrices nicht bestimmt werden. Insbesondere bei ölhaltigen Bodenproben zeigen die Fluoreszenzspektren eine erhebliche Abhängigkeit von der Anregungswellenlänge. Mit dem entwickelten System können weitere Informationen durch eine räumlich getrennte, simultane Anregung mit verschiedenen Wellenlängen gewonnen werden. Durch die zeitaufgelöste Beobachtung der Emission ergibt sich eine 4-dimensionale Informationsmatrix, die sich aus Anregungs-, Emissionswellenlänge, Fluoreszenzintensität und Zeit zusammensetzt.

Das mobile Sensorsystem basiert auf einem Raman-Shiftter, der von einem Nd:YAG-Laser bei 266 nm gepumpt wird. Durch stimulierte Raman-Streuung (SRS) an einer Methan-Wasserstoff-Mischung können simultan bis zu 30 verschiedene, kohärente Anregungswellenlängen zwischen 240 nm und 500 nm mit Pulsenergien zwischen einigen 100  $\mu\text{J}$  und mJ erzeugt werden (FWHM: 4 - 6 ns). In dem realisierten System werden zur Anregung der Fluoreszenz acht verschiedene Wellenlängen mittels eines speziellen Interfaces in Glasfaserkabel eingekoppelt und zum eigentlichen Sensorkopf geführt. Analog wird die Fluoreszenzemission von der Probe (Boden oder Wasser) faseroptisch zu einem Imaging-Spektrographen geleitet. Acht separate Spektren von den jeweiligen Sensoren werden dort räumlich getrennt auf eine intensivierete CCD-Kamera abgebildet. Die Bestimmung der Fluoreszenzlebensdauer erfolgt durch das Verschieben des zeitlichen Beobachtungsfensters mit dem Bildverstärker. Die bisher erzielten Nachweisgrenzen in wässriger Lösung liegen für verschiedene PAK im ng/l-Bereich, im Boden im Bereich von einigen mg/kg Bodentrockenmasse. Öle lassen sich mit dieser Methode mit Verfahren der Mustererkennung grob nach ihrer Herkunft klassifizieren. Ebenso wurde diese Analysetechnik auf Aminosäure- und Kunststoffproben angewandt. Zur Datenverarbeitung und -analyse werden z. Zt. multidimensionale chemometrische Methoden, wie z. B. PARAFAC und Multi-way-PCA an diese Fragestellung adaptiert.

Interessante Zusatzinformationen werden durch die Kombination dieses Meßverfahrens mit der Hochleistungsdünnschichtchromatographie (HPTLC) erhalten. Dazu wurde ein zeitsparendes und somit kostengünstiges Verfahren zur Analytik von Ölrückständen in Bodenproben entwickelt. Dabei konnten absolute Nachweisgrenzen in der Größenordnung von pg (PAH) auf der HPTLC-Platte erzielt werden.

(R.Düsing)



### 1.5.3 On-line-Charakterisierung von Kunststoffrecyclaten aus Elektronikschrott mit laserinduzierter Plasmaspektroskopie

Förderung: BayFORREST F 134

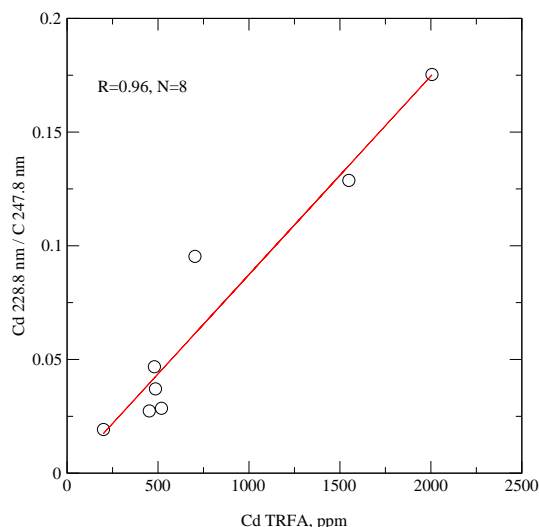
Kooperation: Lehrstuhl für Kunststofftechnik, Universität Erlangen-Nürnberg; Lehrstuhl für Anorganische Chemie, Universität Erlangen-Nürnberg; Institut für Radiochemie, TU München

Ziel des vorgestellten Projektes ist der Einsatz der laserinduzierten Plasmaspektroskopie (LIPS) für die elementspezifische On-line-Analyse von Kunststoffrecyclaten aus Elektronikschrott. Diese Prozesskontrolle ist für die Qualitätssicherung der Recyclate notwendig und zur Überwachung ihres Schwermetallgehaltes, der gesetzlich limitiert ist. Für den Bereich industrieller Kunststoffabfälle existiert jedoch zur Zeit kein geeignetes Verfahren.

LIPS ist eine elementspezifische Methode zur Untersuchung beliebiger Proben. Dazu wird ein intensiver, gepulster Laser (hier ein Nd:YAG-Laser bei  $\lambda = 266$  nm) auf die zu untersuchende Probe fokussiert, so dass ein Teil der Probe verdampft und in dem entstandenen Plasma atomisiert bzw. ionisiert wird. Nach Abklingen der unspezifischen Rekombinationsstrahlung kann typischerweise nach einer Mikrosekunde durch eine wellenlängenselektive und zeitaufgelöste Beobachtung der charakteristischen Emissionslinien die Identifikation und Quantifizierung der elementaren Zusammensetzung erfolgen. Die Methode erlaubt damit gleichzeitig Aufschluss und Analyse der Probe, und eignet sich gut für Überwachungs- und Kontrolleinrichtungen an industriellen Anlagen. Die Arbeiten konzentrieren sich auf typische Thermoplaste (z.B. ABS, PS, PPO). Zielanalyten sind vor allem die metallischen Komponenten von Zusätzen (Pb, Cd, Cr, Ti, Sb, Zn, Al, Ba), sowie Halogene aus Flammschutzmitteln (Cl, Br). Für diese Analyten wurde eine begleitende Referenzanalytik etabliert und validiert. Sie beruht auf dem Lösen/Suspendieren der Kunststoffe in geeigneten organischen Lösungsmitteln und Untersuchung durch Totalreflektierende Röntgenfluoreszenzanalyse (TRFA).

Die Ergebnisse wurden mit einer zweiten unabhängigen Methode (Neutronenaktivierung) überprüft und bestätigt. LIPS-Messungen an einem Probensatz von 100 zufällig ausgewählten Kunststoffrecyclaten haben das Potential der Methode für die gesetzten Ziele bestätigt. Für alle angestrebten Metalle wurden lineare Kalibriergeraden mit ausreichenden Nachweisgrenzen erhalten. Interferenzen werden durch den Einsatz eines hochauflösenden Echelle-Spektrometers vermieden oder durch Normierungsmethoden beseitigt. Eine Messkampagne mit einem mobilen Laborprototypen zu On-line-Untersuchungen an einem Doppelschneckenextruder ist in Vorbereitung. Durch Einbeziehen der Ergebnisse in die Prozesssteuerung ist eine Ausschleusung von belastetem Material möglich.

(H. Fink)

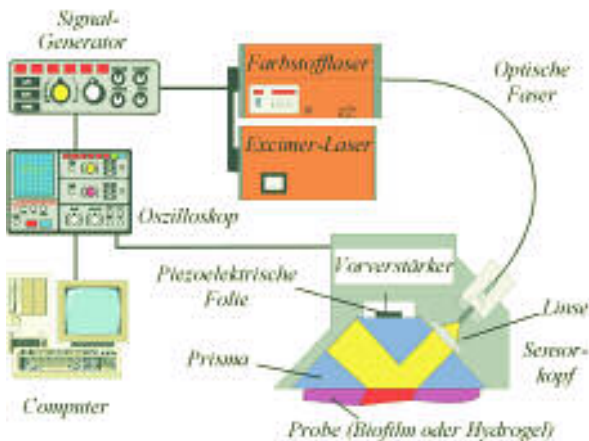


### 1.5.4 Tiefenaufgelöste Photoakustische Spektroskopie an Biofilmen

Förderung: DFG (SFB 411)

In der biologischen Abwasserreinigung werden die am Abbau organischer Verunreinigungen beteiligten Mikroorganismen häufig in Form von Biofilmen an geeigneten Füllkörpern immobilisiert. Im Rahmen dieses Projektes wurde ein photoakustisches Sensorsystem entwickelt, das die tiefenaufgelöste Analyse solcher Biofilme ermöglicht.

Kurze Laserpulse ( $4.5 \pm 0.1$  ns) durchlaufen die Probe und werden in Abhängigkeit von der chemischen Zusammensetzung absorbiert. Die absorbierte Energie wird durch strahlungslose Relaxationsprozesse in Wärme umgewandelt. Die daraus resultierende thermische Volumenexpansion führt zur Ausbildung einer akustischen Welle, welche mittels einer piezoelektrischen PVDF-Folie detektiert wird. Das photoakustische Signal wird verstärkt und von einem Oszilloskop aufgezeichnet. Das Sensorsystem erlaubt in Verbindung mit einem semiempirischen Inversionsalgorithmus die tiefenaufgelöste Bestimmung der Lichtverteilung in der Probe. Durch Korrektur mit dem LAMBERT-BEERschen Gesetz lassen sich daraus für nichtstreuende Proben die entsprechenden Absorptionskonstanten ableiten. Biofilme stellen jedoch stark streuende Medien dar, in denen die Lichtverteilung erheblich vom LAMBERT-BEERschen Gesetz abweicht.



Daher wurde ein Monte-Carlo-Programm entwickelt, das die Lichtverteilung in homogenen, streuenden Proben simuliert. Durch Anpassen der Simulationsergebnisse an experimentell ermittelte Lichtverteilungen ließen sich Anisotropiefaktoren, Absorptionskoeffizienten und Streukoeffizienten von homogenen Proben bestimmen. Das entwickelte Verfahren wurde mit Proben verifiziert, deren Absorptions- und Streueigenschaften genau bekannt waren. Mit dem beschriebenen Verfahren wurden die optischen Parameter einer homogenen Biofilmprobe (Mikroorganismen-Gemisch mit 8.62 % Trockenmasse) bestimmt. Es konnte gezeigt werden, dass Biofilme schwach absorbierende und stark streuende Medien darstellen, in denen die vorwärts gerichtete Streuung dominiert. Darüber hinaus wurde das Wachstum eines Biofilms auf der Sensoroberfläche durch photoakustische Messungen verfolgt. Die Massenverteilung

innerhalb des Biofilms konnte in erster Näherung bestimmt werden. Nach 40tägigem Wachstum stellte sich ein stationärer Zustand ein. Die Zelldichte an der Sensoroberfläche entsprach in diesem Fall einer Trockenmasse von etwa 11 %. Zur Untersuchung von Stofftransportvorgängen wurden Hydrogelschichten als nichtstreuende Modellsysteme für Biofilme eingesetzt. Der Transport eines Farbstoffes wurde durch photoakustische Messungen verfolgt. Durch Anpassen der theoretischen Funktionen an die experimentellen Daten konnten die entsprechenden Stofftransportkoeffizienten bestimmt werden.

(T. Schmid, C. Kopp)

## 1.6 Aerosolchemie

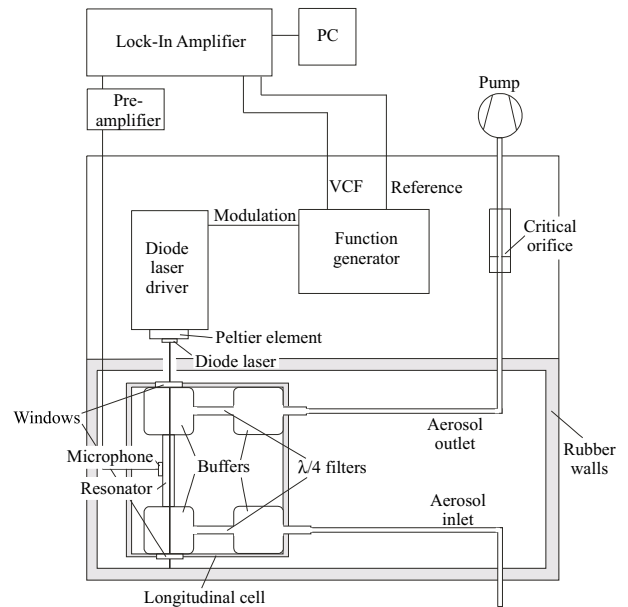
### 1.6.1 Entwicklung eines photoakustischen Sensorsystems zur Messung von Rußaerosolen in der Atmosphäre

Förderung: BMBF

Das vom Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie geförderte Projekt beinhaltet die Entwicklung eines photoakustischen Sensorsystems zur Messung von Rußaerosolen in der Atmosphäre. Die Anforderungen an das Messgerät sind eine Nachweisgrenze von weniger als  $1 \mu\text{g m}^{-3}$  schwarzen Kohlenstoffs, ein mobiler Aufbau mit sofortiger Messwerterfassung und Auswertung (on-site) und eine hohe Zeitauflösung (real-time).

Der am Lehrstuhl bereits entwickelte Vorläufer des photoakustischen Rußsensors (PASS) diente als Basis für die nachfolgenden Untersuchungen. Das Prinzip der photoakustischen Rußbestimmung beruht auf der Absorption von monochromatischem Licht durch schwarze Rußpartikel, die diese Energie anschließend in Form von Wärme wieder abgeben. Moduliert man die Lichtquelle mit einer konstanten Frequenz, so bildet sich eine stehende Schallwelle aus. In einem akustischen Resonator lässt sich diese Schallwelle durch ein Mikrophon detektieren und die induzierte Spannung ist proportional zur Massenkonzentration des Analyten. Eine Selektivität resultiert aus der Wahl einer bestimmten Anregungswellenlänge bei der nur schwarzer Kohlenstoff Photonen absorbiert, so dass andere atmosphärische Gase oder Aerosole die Messung nicht beeinflussen. Aus diesem Grunde wurde eine Hochleistungs-Laserdiode mit einer Emissionswellenlänge von 680 nm ausgewählt und in das bestehende System integriert. Ferner wurden die optischen Elemente vereinfacht, um eine höhere Stabilität des Sensors zu erreichen, ohne dabei an Empfindlichkeit einzubüßen. Das Kernstück des Sensors, die akustische Resonanzzelle, wurde ebenfalls ausgetauscht. Die neue (longitudinale) Resonanzzelle zeichnet sich durch ein kleines Volumen aus, das sowohl eine hohe Empfindlichkeit als auch eine gute Zeitauflösung garantiert. Der modifizierte Sensor wurde mit künstlich erzeugtem Rußaerosol kalibriert und hinsichtlich Nachweisgrenze, Zeitauflösung, Querempfindlichkeit und Stabilität charakterisiert. Bei einer gewählten Zeitauflösung im Bereich von wenigen Minuten lässt sich eine Nachweisgrenze von ca.  $50 \text{ ng Ruß pro m}^3$  erreichen. Eine Zeitauflösung von weniger als einer Sekunde ist ebenfalls möglich, wobei sich die Nachweisgrenze etwas verschlechtert (ca.  $0.5 \mu\text{g/m}^3$ ), was für dynamische Messungen (z.B. Abgasmessungen) aber mehr als ausreichend ist.

Querempfindlichkeiten zu anderen atmosphärisch vorkommenden Stoffen, wie etwa Kochsalz- oder Ammoniumsulfatpartikel,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{O}_3$  oder Sauerstoff, konnten bei atmosphärisch relevanten Konzentrationen nicht beobachtet werden. Lediglich Wasserdampf absorbiert bei einer Anregungswelle von 680 nm genügend Licht, so dass sich ein photoakustisches Signal ausbildet. Dieses Problem kann aber auf verschiedene Arten behoben werden. Durch Trocknen des Aerosols lässt sich Wasserdampf selektiv vor einer Messung abtrennen oder das photoakustische Signal von Wasserdampf wird nach Abtrennen des Rußaerosols durch einen Partikelfilter gemessen und das erhaltene Signal anschließend vom Gesamtsignal subtrahiert. Eine weitere Möglichkeit bieten Laserdioden mit Emissionswellenlängen (z. B. 780 nm), bei



---

denen Wasserdampf kein Licht absorbiert.

Bei der Bestimmung von Rußaerosolen mit Partikeldurchmessern kleiner als  $1 \mu\text{m}$  wurde keine Größenabhängigkeit der Bestimmungsmethode beobachtet. Bei großen Partikeln ( $> 1 \mu\text{m}$ ) verringert sich jedoch die Empfindlichkeit des Sensors, was aber nur bei Laborexperimenten problematisch sein dürfte, da in der Atmosphäre kaum reine Rußpartikel in diesem Größenbereich vorliegen, sondern mit verschiedensten anderen Spezies koaguliert sind. Die Bestimmung des Rußgehaltes in Mischpartikeln ( $> 1 \mu\text{m}$ ) stellt jedoch kein Problem dar, da die Primärpartikelgröße  $< 50 \text{ nm}$  ist.

(L. Krämer, Z. Bozoki)

### 1.6.2 Chemische Charakterisierung und Quellidentifizierung atmosphärischer Aerosole

*Förderung: Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV)*

*Kooperation: Fraunhofer-Institut für Toxikologie und Aerosolforschung, Hannover*

In diesem Projekt wurde die chemische Zusammensetzung von Luftstaubproben untersucht, mit dem Ziel, die Quellen der Partikelimmission zu identifizieren und zu quantifizieren. Dazu wurden geeignete analytische Methoden für Elemente, Ionen, polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAKs) und elementaren Kohlenstoff (EC) etabliert bzw. an die geplante Probenahme angepasst. Für die Elementanalytik mittels Totalreflexions-Röntgenfluoreszenzanalyse (TXRF) wurden die Filterproben direkt auf dem Probenträger durch Kaltplasmaveraschung aufbereitet. Dabei wurde erstmals synthetischer Saphir als Probenträgermaterial eingesetzt, das auch die Bestimmung von Silizium in Aerosolproben erlaubt, was mit konventionellen Aufschlussmethoden und Probenträgern nicht möglich ist. Für die Analytik der Ionen wurde die entsprechende VDI-Richtlinie an die gegebenen Filtergrößen und -materialien angepasst und die Probenvorbereitung bis zur Injektion der Probe in den Ionenchromatographen optimiert. Für die Analytik der PAKs wurden literaturbekannte Probenvorbereitungsmethoden kombiniert und adaptiert, um die zu untersuchenden PAKs mit optimaler Wiederfindung von den Filtern zu extrahieren. Außerdem wurde die HPLC-Trennung für die zu untersuchenden PAKs auf einer neuen Trennsäule optimiert und die Dauer eines Laufs auf ein Drittel der Zeit verkürzt. Für die EC-Analytik wurde die entsprechende VDI-Richtlinie an die gegebene Filtergröße angepasst. Folgende Nachweisgrenzen bezogen auf das probierte Luftvolumen wurden erreicht:

Elemente:  $0.01 \text{ ng/m}^3$  für Se bis  $0.3 \mu\text{g/m}^3$  für Si;

Ionen:  $0.02 \mu\text{g/m}^3$ ;

EC:  $0.1 \mu\text{g/m}^3$ ;

PAKs:  $0.03 \text{ ng/m}^3$  für BkF bis  $0.09 \text{ ng/m}^3$  für BghiP.

Mit den vier etablierten Verfahren wurden jeweils ca. 800 Luftstaubproben aus drei je vierwöchigen Messkampagnen analysiert. Die erhaltenen Ergebnisse wurden mittels eines Faktoranalyseverfahrens (PCA+SMCR) untersucht. Damit konnten trotz der jeweils relativ kurzen Messzeit drei Quellen für alle drei Messkampagnen identifiziert werden: Eine Quelle, die als Straßenstaub/Staub bezeichnet werden kann, eine Quelle, die das eingetragene Aerosol durch Ferntransport und atmosphärische Umwandlungsvorgänge umfasst, und eine Quelle, welche die Emissionen aus dem Kfz-Verkehr und anderen Verbrennungsvorgängen einschließt. Zudem wurde in der Winter-Messkampagne eine weitere Quelle identifiziert, die die Verbrennungsprodukte von Kohlefeuerung umfasst. Es konnte gezeigt werden, dass mit den verwendeten analytischen Methoden und rechnerischen Auswerteverfahren die Identifizierung und Quantifizierung verschiedener Quellbeiträge zur Aerosolpartikelimmission möglich ist.

(M. Theisen)



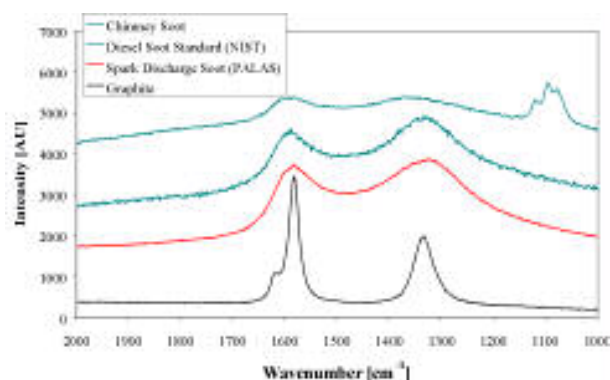
### 1.6.3 Ramanspektroskopische Untersuchung von Schwebstaubinhaltsstoffen auf Filtermedien

Förderung: DFG

Kooperation: Lehrstuhl für Laseranwendungstechnik der Universität Bochum (Prof. G. Schweiger)

In diesem Projekt werden ramanspektroskopische Methoden zur Analyse der chemischen Zusammensetzung von Filterproben atmosphärischer Aerosole entwickelt. Bei den Kooperationspartnern an der Universität Bochum wird derzeit ein Ramanspektrometer entwickelt, das speziell auf die nachweisstarke und zerstörungsfreie Analyse von Aerosolfilterproben ausgelegt ist (hohe Signalintensität bei geringer thermischer Belastung der Probe).

Unterdessen werden am IWC Testmessungen mit verschiedenen Filtersubstraten (Glasfaser, Polycarbonat, Metall etc.) und Aerosolkomponenten durchgeführt, um die Grundlage für eine qualitative und quantitative Auswertung der erhaltenen Spektren zu schaffen. Dabei wird ein Ramanmikroskop mit drei alternativen Laseranregungswellenlängen eingesetzt (514 nm, 633 nm, 780 nm). Erste Versuchsreihen konzentrieren sich auf die Charakterisierung verschiedener Rußsorten bzw. graphitähnlicher Substanzen, wobei auch mit dem Institut für Troposphärenforschung (IFT) in Leipzig zusammengearbeitet wird. Ziel dieser Untersuchungen ist die Quellzuordnung und Quantifizierung der schwarzen Kohlenstofffraktion atmosphärischer Partikel. Darüber hinaus sollen auch andere Substanzklassen und Gemische untersucht werden (anorganische Salze etc.). Die Ramanspektren von Graphit und verschiedenen Rußen, aufgenommen mit dem Ramanmikroskop bei einer Laseranregungswellenlänge von 633 nm, sind in der folgenden Abbildung dargestellt (Reihenfolge von oben: Kaminruß, Dieseluß, Funkengeneratorkruß, Graphit). (A. Sadezky)



### 1.6.4 Prozesstudien zum Einfluss von Spurengasen auf die physikalischen und chemischen Eigenschaften ausgewählter Modellaerosole

Förderung: BMBF Aerosolforschungsschwerpunkt

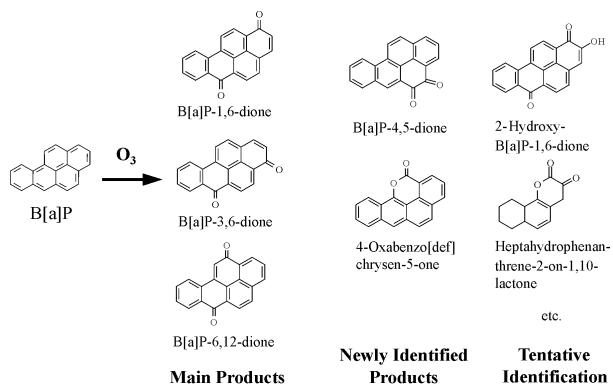
Kooperation: Institut für Analytische Chemie, TU Wien (Prof. Grasserbauer)

Polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAKs) sind in der Atmosphäre weit verbreitet. Sie entstehen hauptsächlich durch unvollständige Verbrennung von Biomasse und fossilen Brennstoffen und treten als Bestandteil von Ruß- bzw. Verbrennungsaerosolpartikeln auf. Da diese Partikel in den menschlichen Atmungsorganen deponiert werden können, und da einige PAKs und deren Abbauprodukte ein hohes kanzerogenes, mutagenes und allergenes Potential aufweisen, sind sie von großer lufthygienischer Bedeutung. Zudem können polycyclische aromatische Verbindungen (PACs = PAKs + Derivate) an der Oberfläche von Rußpartikeln die Bildung oder den Abbau reaktiver Spurengase durch heterogene Reaktionen und die Aktivierung der Partikel als Wolkenkondensationskerne, ihre atmosphärische Verweilzeit und damit ihre indirekten und direkten klimatischen Effekte beeinflussen. Die Reaktivität der meisten PACs ist jedoch weder im Hinblick auf die Produktzusammensetzung noch im Hinblick auf die Reaktionskinetik ausreichend gut charakterisiert, um eine zuverlässige Extrapolation auf atmosphärische Bedingungen zu erlauben.

In diesem Projekt wird der Abbau von B[a]P adsorbiert auf Funkengeneratorkrußaerosolpartikeln durch O<sub>3</sub> und NO<sub>2</sub> untersucht. Die Ergebnisse zur relativ langsam ablaufenden Nitrie-

rungsreaktion wurden bereits im Jahresbericht 1998 vorgestellt. 1999 konzentrierten sich die Untersuchungen auf die deutlich raschere Ozonolysereaktion. Zur Identifizierung und Quantifizierung der Reaktionsprodukte in den Filterproben der Laborexperimente und verschiedener anderer PACs in atmosphärischen Realproben wurden geeignete analytische Methoden entwickelt und optimiert (LC-APCI-MS, GC-HRMS etc.).

Damit konnten zahlreiche bislang unbekannte Reaktionsprodukte mit unterschiedlichen funktionellen Gruppen nachgewiesen und in einigen Fällen auch eindeutig identifiziert werden (Carbonyle bzw. Chinone, Phenole, Lactone, organische Säuren etc.). Einige der eindeutig oder versuchsweise identifizierten Spezies sind in der folgenden Abbildung dargestellt. Die Reaktionskinetik des Abbaus von B[a]P auf Ruß durch Ozon wurde mit beschichteten Funkengeneratorrußaerosolen in einem Rohrreaktor unter laminaren Strömungsbedingungen untersucht. Ratenkoeffizienten pseudo-erster Ordnung wurden bei Ozonkonzentrationen zwischen 30 ppbv und 3 ppmv gemessen. Für die heterogene Reaktion ergibt sich aus den Messdaten eine Reaktionswahrscheinlichkeit von  $>10^{-5}$ , was für B[a]P an der Oberfläche von Rußpartikeln eine atmosphärische Lebensdauer von nur wenigen Minuten bedeutet.



Ein weiterer Projektschwerpunkt liegt in der Wechselwirkung von Aerosolpartikeln mit Wasserdampf. Bei der Untersuchung von NaCl- und PbS-Kondensationsaerosolen wurde mittels Tandem-Differential-Mobilitäts-Analyse (TDMA) bereits bei geringen relativen Feuchten eine Restrukturierung fraktaler Partikel, verbunden mit einer deutlichen Abnahme des Mobilitätswahrscheinlichkeits beobachtet.

(T. Letzel, L. Krämer, C. Schauer, U. Pöschl)



### 1.6.5 Optimierung des Deponiebetriebes unter besonderer Berücksichtigung des siliziumhaltigen Gas/Partikelanteils im Deponiegas

Förderung: BayFORREST F162

Biogase, die in Hausmülldeponien oder Kläranlagen entstehen, werden unter Energienutzung verbrannt. Dabei bereiten bestimmte Gasspurenstoffe, z. B. Siloxane, Probleme durch Ablagerungen von  $\text{SiO}_2$  und Abriebserscheinungen an den Verbrennungseinrichtungen (siehe Abbildung). Im Rahmen des Projektes sollten daher Siliziumspeziesmessungen in Deponiegasen und Verbrennungsabgasen durchgeführt, sowie Möglichkeiten zur Abreicherung von Siloxanen in Biogas aufgezeigt werden.

Für Biogasmessungen war am Institut ein neuartiges Analysensystem entwickelt worden (Kanisterprobenahme, Kryofokussierung, parallele Detektion durch Atomemissionsspektroskopie und Massenspektrometrie). Damit konnten aus verschiedenen Deponien im Biogas bis zu  $50 \text{ mg/m}^3$  Siliziumverbindungen (cyclische und offenkettige Dimethylsiloxane und Trimethylsilanol) nachgewiesen werden. An der Mülldeponie Augsburg/Nord erfolgte ein Monitoring bestimmter organischer Gasspurenstoffe (BTEX, Alkane, Terpene, LHKW, Siloxane) über einen Zeitraum von 9 Monaten. Dadurch sollten die Parameter für ein verstärktes Siliziumaufkommen im Deponiegas ermittelt werden. Es zeigte sich eine recht gute Korrelation zwischen der Si-Konzentration und dem Gehalt an den genannten Gasspurenstoffen. Allerdings konnte keine Abhängigkeit des Siloxanaufkommens von Parametern wie Gastemperatur, Gasfördermenge, Methangehalt oder der Umgebungstemperatur beobachtet werden. Zur Zeit erfolgen auch Partikelmessungen im Verbrennungsabgas des Gasmotors. Dazu werden die Partikel auf Polycarbonatfiltern abgeschieden, die Si-Bestimmung erfolgt mittels TXRF- und REM/EDX-Analytik.

In Laborversuchen erwies sich Silicagel als sehr effizientes Adsorbiermaterial für gasförmige Siliziumverbindungen. Es zeigte sich, dass das beladene Silicagel sehr gut thermisch zu regenerieren war, was in der Praxis durch heißes Motorabgas erfolgen könnte. Silicagel wird häufig zur Trocknung von Gasen eingesetzt, und auch an einem Münchner Klärwerk ist ein Silicageltrockner installiert. An diesem Trockner konnte eine nahezu quantitative Abreicherung der im feuchten Klärgas enthaltenen Siloxane beobachtet werden. Zur Zeit erfolgen weitere Untersuchungen an Gasaufbereitungsanlagen (Trockner, Entschwefelungsanlagen) verschiedener Deponien und Kläranlagen.

(M. Schweigkofler)



### 1.6.6 Photoakustische Detektion von Holzschutzmitteln in Holzabfall

Förderung: Bayer. Staatsministerium für Landesentwicklung und Umweltfragen E37

Pentachlorphenol (PCP) ist ein Fungizid, das zwischen den fünfziger und achtziger Jahren im Holzschutz eingesetzt wurde. In der Zwischenzeit ist es als gefährliche Umweltchemikalie erkannt worden, die aufgrund ihrer hohen Stabilität überall in der Umwelt verteilt ist. Obwohl die Verwendung von PCP in den meisten Industrieländern verboten ist, gibt es immer noch hohe Mengen davon in Bauholz, Möbeln und Altholz.

In diesem Projekt soll ein Analysengerät entwickelt werden, mit dessen Hilfe eine schnelle Detektion von PCP möglich ist. Das Schema des entwickelten Systems ist in der Abbildung dargestellt. Das System basiert auf einer Probenahme mittels Thermodesorption, gefolgt von

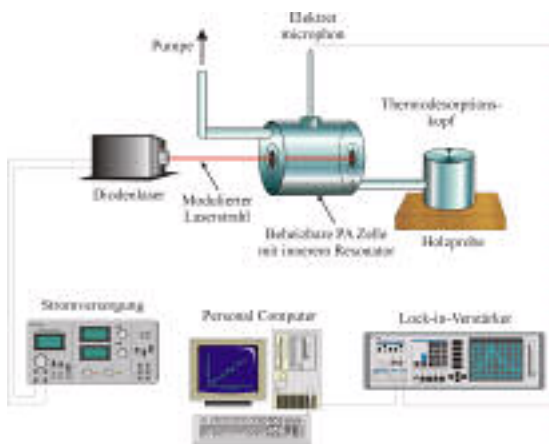
einer lasergestützten photoakustischen (PA) Detektion. Die Thermodesorption erfolgt durch Oberflächenerwärmung der Holzproben mittels einer Halogenlampe. Die desorbierten Moleküle werden in eine resonante PA-Zelle gesogen, in der sie durch einen amplitudenmodulierten Laserstrahl angeregt werden. Um ein Auskondensieren von PCP an den Wänden der PA-Zelle zu vermeiden, wird die PA-Zelle bei einer Temperatur von 220 °C betrieben. Die Anregung des PCP erfolgt durch einen Diodenlaser mit externem Resonator. Er ist mit einer Ausgangsleistung von 2 mW in einem Bereich von 1,41 bis 1,48  $\mu\text{m}$  durchstimmbare. Das Absorptionsmaximum von gasförmigen PCP liegt bei 1,44  $\mu\text{m}$  ( $6930,4 \text{ cm}^{-1}$ ).

Das Laserlicht wird mit einer Frequenz moduliert, die der Resonanzfrequenz des inneren Resonators entspricht. Die Grundschnwingung der Resonanzfrequenz des inneren Resonators nimmt bei 220 °C einen Wert von 4800 Hz an. Bei dieser Frequenz wird eine optimale Verstärkung des akustischen Signals erreicht, welches mit Hilfe eines kleinen Elektretmikrophons gemessen wird.

Das gemessene Signal wird mit Hilfe eines Vorverstärkers um den Faktor 1000 verstärkt, bevor es zu einem Lock-in-Verstärker gesendet wird. Die PA-Zelle wird mit einem konstanten Gasfluß von 1 L/min betrieben. Dieser Gasfluß gewährleistet ein schnelles Messen und reduziert zugleich Wechselwirkungen des Analyten mit den Zellwänden. Verunreinigungen werden durch den Gasstrom ständig abgeblasen und können daher die Messungen nicht dauerhaft stören.

Die Nachweisgrenze wurde durch Kalibration der Apparatur mit sechs verschiedenen, auf Holzproben adsorbierten PCP-Mengen (100 bis 500  $\mu\text{g}$ ) ermittelt. Bei einem Regressionskoeffizienten von  $R^2 = 0,98$  ( $n = 6$ ) kann ein deutlich linearer Zusammenhang zwischen aufgetragener PCP-Menge und dem detektierten Signal aufgezeigt werden. Bei dem bisherigen Stand der Arbeiten ist eine Oberflächenkonzentration von 10  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$  nachweisbar. Dies entspricht einer Konzentration von etwa 43  $\mu\text{g}$  PCP pro kg Holz (ppm).

(H. Beck, Z. Bozoki)



### 1.6.7 Entwicklung und Anwendung eines Lichtwellenleiter-Multiplexers in faseroptisch geführten Sensorsystemen

Förderung: DFG (SFB 411)

Es wurde ein Konzept für den Aufbau optischer Signal-Multiplexer für eine effiziente und verzerrungsfreie Lichtübertragung in faseroptisch geführten Sensorsystemen entwickelt, nach dem die Lichtwellenleiter bei den Schaltvorgängen biege- und torsions-entlastet werden. Anschlagfreies Umschalten der Lichtwellenleiter ohne ihre dynamische Deformation ermöglicht hohe Übertragungseffizienz und Reproduzierbarkeit der Lichtleistungsübertragung bei unverändertem Puls- und Strahlenprofil, was für optische Messungen zu analytischen Zwecken besonders wichtig ist.

Auf Grundlage des entwickelten Konzeptes wurden zwei sich nach ihren Funktionen und Aufbauten unterscheidende LWL-Multiplexer gebaut und charakterisiert: der LWL-Multiplexer 1 und der LWL-Multiplexer 2.

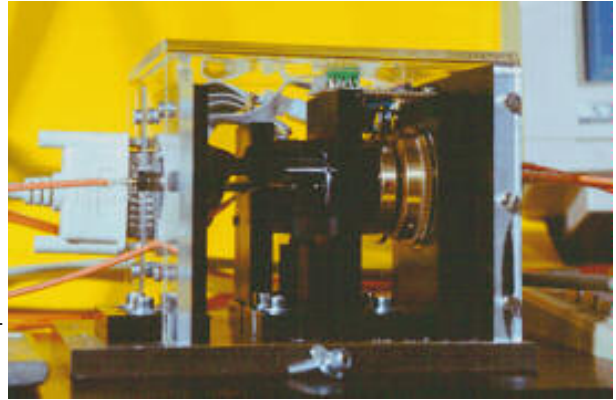
Der LWL-Multiplexer 1 wurde für ein Messsystem mit faseroptisch geführten photoakustischen Sensoren an einem Bioreaktor entwickelt und enthält einen optischen Eingang und 10 optische Ausgänge, damit das Licht eines Lasers mehreren photoakustischen Sensoren zur Anregung einer akustischen Welle zugeführt wird.

---

Der LWL-Multiplexer 2 wurde für die laserinduzierte Fluoreszenzspektroskopie entwickelt und weist zwei optische Eingänge und  $2 \times 7$  optische Ausgänge auf, wodurch jedem Sensorkopf gleichzeitig das Anregungslicht von einem Laser zugeführt und das angeregte Fluoreszenzlicht zum Photodetektor zurückgeleitet wird.

Zum Erreichen einer optimalen Lichtübertragungseffizienz beim Betrieb in einem Sensorsystem, z.B. mit angeschlossenen Fluoreszenz- oder photoakustischen Sensoren, wurde ein System für automatische Justierung der beiden LWL-Multiplexer entwickelt. Zusätzlich wurde eine Optimierung der optischen Verbindungsstellen sowie der Motorsteuerung durchgeführt.

Es wurde ein Messsystem mit den faseroptisch geführten Transmissionszellen und He-Ne-Laser als Lichtquelle aufgebaut, in dem der LWL-Multiplexer 2 integriert wurde. Das Messsystem ermöglicht kontinuierliche Konzentrationsmessungen an mehreren Messstellen im Dauerbetrieb mit on-line Erfassung und Analyse der Messergebnisse und automatischer Kontrolle der Schaltvorgänge. Für die Fluoreszenzmessungen wurde der LWL-Multiplexer 2 im Rahmen der elektrokinetischen Bodenbehandlung zur Charakterisierung des Stofftransports mit Fluoreszenztraser-Modellsunstanzen eingesetzt. Langfristig besteht das Ziel, durch elektrokinetische Bodenbehandlung die Schwermetallionen aus den kontaminierten Böden zu entfernen.



Die entwickelte LWL-Multiplexer 1 und 2 sollen für Fluoreszenz- bzw. photoakustische Sensorik für on-line Prozess-Überwachung und -Steuerung eingesetzt werden. Die entwickelten LWL-Multiplexer können ausserdem sowohl in der optischen Nachrichtentechnik, als auch in verschiedenen anderen optischen Messsystemen verwendet werden.

(L. Kasarjan)

---

## 2 Publikationen

### 2.1 Originalarbeiten

- Achtnich, C., P. Pfortner, M. Weller, R. Niessner, H. Lenke and H.-J. Knackmuss; Reductive Transformation of Bound Trinitrophenyl Residues and Free TNT during a Bioremediation Process Analyzed by Immunoassay. *Environ. Sci. Technol.* 33 (1999) 3421-3426
- Beenen, A. and R. Niessner; Development of a Photoacoustic Trace Gas Sensor System Based on Fiber-optically Coupled NIR Laser Diodes. *Appl. Spectrosc.* 53 (1999) 1040-1044
- Beenen, A. and R. Niessner; Trace Gas Analysis by Photoacoustic Spectroscopy with NIR Laser Diodes. In: *Photoacoustic and Photothermal Phenomena*, F. Scuderi and M. Bertolotti (Editors), American Institute of Physics (1999) 211-213
- Exner, A., B. Seidel, W. Faubel, U. Panne and R. Niessner; Characterization of Hydrocolloids by Asymmetric Flow Field-Flow Fractionation (AF4) and Thermal Lens Spectroscopy. In: *Photoacoustic and Photothermal Phenomena*, F. Scuderi and M. Bertolotti (Editors), American Institute of Physics (1999) 87-89
- Fröschl, B. and R. Niessner; Evidence for Tri- and Tetranitrobenzo[a]pyrene Formation under NO<sub>2</sub> Excess. *Fres. Environ. Bull.* 8 (1999) 463-470
- Heiß, C., M. Weller and R. Niessner; Dip-and-read Test Strips for the Determination of TNT in Water. *Anal. Chim. Acta* 396 (1999) 309-316
- Hulpke, H., H. Koch und R. Nießner (1999) *Römpp-Lexikon Umwelt*, Georg Thieme-Verlag, Stuttgart, 926 Seiten
- Kallinger, G. and R. Niessner; Laboratory Investigation of Annular Denuders as Sampling System for the Determination of Aliphatic Primary and Secondary Amines in Stack Gas. *Mikrochimica Acta* 130 (1999) 309-316
- Knopp, A., D. Knopp and R. Niessner; ELISA Determination of the Sulfonylurea Herbicide. Metsulfuron-Methyl in Different Water Types. *Environ. Sci. Technol.* 33 (1999) 358-361
- Knopp, D., M. Schedl, S. Achatz, A. Kettrup and R. Niessner; Immunochemical Test to Monitor Human Exposure to Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: Urine as Sample Source. *Anal. Chim. Acta* 399 (1999) 115-126
- Koeber, R., J. Bayona and R. Niessner; Determination of Benzo[a]-pyrene Diones in Air Particulate Matter with Liquid Chromatography Mass Spectrometry. *Environ. Sci. Technol.* 33 (1999) 1552-1558
- Kopp, C. and R. Niessner; Depth Resolved Photoacoustic Measurements with Pulsed Excitation. In: *Photoacoustic and Photothermal Phenomena*, F. Scuderi and M. Bertolotti (Editors), American Institute of Physics (1999) 27-30
- Kopp, C. and R. Niessner; Depth-resolved Determination of the Absorption Coefficient by Optoacoustic Spectroscopy within a Hydrogel. *Anal. Chem.* 71 (1999) 4663-4668
- Kopp, C. and R. Niessner; Optoacoustic Sensor Head for Depth Profiling. *Applied Physics B* 68 (1999) 719-725
- Kopp, C., A. Petzold and R. Niessner; Investigation of the Specific Attenuation Crosssection of Aerosols Deposited on Fiber Filters with a Polar Photometer to Determine Black Carbon. *J. Aerosol Science* 30 (1999) 1153-1163
- Kotzick, R. and R. Niessner; The Effects of Aging Processes on Critical Supersaturation Ratios of Ultrafine Carbon Aerosols. *Atmos. Environ.* 33 (1999) 2669-2677

- 
- Köllensperger, G., G. Friedbacher, R. Kotzick, R. Niessner and M. Grasserbauer; In-situ AFM Investigation of Aerosols Exposed to Different Humidities. *Fres. J. Anal. Chem.* 364 (1999) 296-304
- Letzel, T., E. Rosenberg, R. Wissiack, M. Grasserbauer and R. Niessner; Separation and Identification of Polar Degradation Products of Benzo[a]pyrene with Ozone by Atmospheric Pressure Chemical Ionization - Mass Spectrometry After Optimized Column Chromatographic Clean-Up. *J. Chromatogr. A* 855 (1999) 501-514
- Letzel, T., U. Pöschl, E. Rosenberg, M. Grasserbauer and R. Niessner; In-source Fragmentation of Partially Oxidized Mono- and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Atmospheric Pressure Chemical Ionization Mass Spectrometry Coupled with Liquid Chromatography. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 13 (1999) 2456-2468
- Loos, R. and R. Niessner; Analysis of Atrazine, Terbutylazine and Their N-Dealkylated Chloro and Hydroxy Metabolites by Solid-phase Extraction and Gas Chromatography - Mass Spectrometry and Capillary Electrophoresis-Ultraviolet Detection. *Journal of Chromatography A* 835 (1999) 217-229
- Loos, R., A. Gahr, L. Weil and R. Nießner; Anwendung des Adsorberpolymers Lewatit EP 63 zur Trinkwasseraufbereitung im Vergleich zur Aktivkohle. *Vom Wasser* 92 (1999) 117-135
- Neuhauser, R., B. Ferstl, U. Panne and R. Niessner; Design of a Low-cost Detection System for Laser-induced Plasma Spectroscopy (LIPS). *Rev. Sci. Instrum.* 70 (1999) 3519-3522
- Neuhauser, R., U. Panne and R. Niessner; Laser-induced Plasma Spectroscopy (LIPS): A Versatile Tool for Monitoring Heavy Metal Aerosols. *Anal. Chim. Acta* 392 (1999) 47-54
- Neuhauser, R., U. Panne and R. Niessner; On-line-Monitoring von Schwermetallaerosolen: Von Laborstudien zu industriellen Anwendungen. *VDI-Berichte* 1443 (1999) 131-140
- Neuhauser, R., U. Panne, R. Niessner and P. Wilbring; On-line Monitoring of Chromium Aerosols in Industrial Exhaust Streams by Laser-induced Plasma Spectroscopy (LIPS). *Fres. J. Anal. Chem.* 364 (1999) 720-726
- Nießner, R.; Laser- und Antikörper-basierende Meßtechniken in der Umweltanalytik. *Nachr. Chem. Techn. Lab.* 47 (1999) 1029 - 1031
- Scharnweber, T., D. Knopp und R. Nießner; Erprobung von Immunadsorbern für organische Schadstoffe im Niederschlagswasser. (1999) In: Ermittlung atmosphärischer Stoffeinträge in den Boden. Herausgegeben von der LfU Baden-Württemberg, Karlsruhe S. 91-111
- Schweigkofler, M. and R. Niessner; Determination of Siloxanes and VOC in Landfill Gas and Sewage Gas by Canister Sampling and GC-MS/AES Analysis. *Environ. Sci. Technol.* 33 (1999) 3680-3685
- Schütz, A., M. Weller and R. Niessner; A Novel Method for the Determination of a PCB Sum Value by Enzyme Immunoassay to Overcome the Cross-reactivity Problem. *Fres. J. Anal. Chem.* 363 (1999) 777-782
- Schütz, A., M. Winklmair, M. Weller and R. Niessner; Selection of Hapten Structures for Indirect Immunosensor Arrays. *Fres. J. Anal. Chem.* 363 (1999) 625-631
- Schütz, A., M. Winklmair, M. Weller and R. Nießner; Multianalyte Detection with an Affinity Sensor-Array. *Proc. 10th Intern. Symp. Bioluminescence & Chemiluminescence*, John Wiley & Sons, edited by A. Roda et al., New York (1999) 67-70
- Szekacs, A., H. Le, D. Knopp and R. Niessner; A Modified ELISA for Polyaromatic Hydrocarbons. *Anal. Chim. Acta* 399 (1999) 127-134

- 
- Taglauer, A., R. Niessner; W. von der Linden, V. Dose, E. Taglauer; Trace Metal Detection in Natural Water. In: Maximum Entropy and Bayesian Methods, edited by W. von der Linden et al., pp. 341-344, Kluwer Academic, Dordrecht (1999)
- Theisen, M. and R. Niessner; Elemental Analysis of Airborne Dust Samples with TXRF: Comparison of Oxygen - Plasma Ashing and Acid Digestion for Sample Preparation. *Fres. J. Anal. Chem.* 365 (1999) 332-337
- Theisen, M. and R. Niessner; Sapphire Sample Carriers for Silicon Determination in Total Reflection X-ray Fluorescence Analysis. *Spectrochim. Acta B* 54 (1999) 1839-1848
- Weller, M., A. Schütz, M. Winklmaier and R. Niessner; Highly Parallel Affinity Sensor for the Detection of Environmental Contaminants in Water. *Anal. Chim. Acta* 393 (1999) 29-41
- Weller, M., A. Zeck, P. Pfortner, E. Simon and R. Niessner; Novel Concepts for the Immunological Detection of Bound Residues. *Intern. J. Environ. Anal. Chem.* 75 (1999) 201-215
- Wenzel, A., A. Gahr and R. Niessner; TOC-Removal and Degradation of Pollutants in Leachate Using a Thin-Film Photoreactor. *Water Research* 33 (1999) 937-946
- Winklmaier, M., A. Schütz, M. Weller and R. Niessner; Immunochemical Array for the Identification of Cross-reacting Analytes. *Fres. J. Anal. Chem.* 363 (1999) 731-737
- Winklmaier, M., A. Schütz, M. Weller and R. Niessner; New Regeneration Method for Competitive Immunosensors. *Proc. 10th Intern. Symp. Bioluminescence & Chemiluminescence*, John Wiley & Sons, edited by A. Roda et al., New York (1999) 134-137
- Winklmaier, M., A. Schütz, M. Weller and R. Niessner; Stabilization of Antibodies by Haptens. *Fres. J. Anal. Chem.* 363 (1999) 619-624
- Zeck, A., M. Weller and R. Niessner; Characterization of a Monoclonal TNT-antibody by Measurement of the Cross-reactivity of Nitroaromatic Compounds. *Fres. J. Anal. Chem.* 364 (1999) 113-120

## **2.2 Tagungsbeiträge**

### **2.2.1 Vorträge**

- Baumann, T.: Appraisal of Arsenic Fluxes From a Municipal Waste Disposal, EGS XXIV General Assembly, 19.-23.04.1999, The Hague.
- Baumann, T.: Groundwater Sampling Artefacts in the Vicinity of Contaminated Sites, 1st Workshop on Environmental Analytical Artefacts, 1.- 2.03.1999, Weissenkirchen, Österreich.
- Baumann, T.: Quantifying the Uncertainty in the Interpretation of Field Scale Tracer Tests, EGS XXIV General Assembly, 19.-23.04.1999, The Hague.
- Fink, H.: On-line Charakterisierung von Kunststoffrecyclaten aus Elektronikschrott mit laser-induzierter Plasmaspektroskopie (LIPS). IFAT, 03.-08.05.1999, München.
- Gahr, A.: Abwasserreinigung mit UV-Strahlung, Ozon und Wasserstoffperoxid kombiniert mit spektroskopischer Analytik. BayFORREST-Präsentation anlässlich der IFAT, 5.05.1999, München.
- Gahr, A.: Laser Induced Fluorescence Spectroscopy for On-Line and In Situ Monitoring of Heavy Metals in Active Barrier Systems. Workshop of the „Australian-German Collaborative Research on Active Barrier Systems“, 9.12.1999, Hamburg.

- 
- Gahr, A.: Sickerwasseraufbereitung: Einsatz, Möglichkeiten und Limitierungen der UV/Ozon/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-Behandlung. Fachtagung „Zeitgemäße Deponietechnik - Forschung und Praxis in Bayern“ des Bayerischen Staatsministeriums für Landesentwicklung und Umweltfragen, 26.10.1999, München.
- Gahr, A.: The Ambiguous Role of AOX for the Evaluation of Wastewater Treatment. 1st Workshop on Environmental Analytical Artefacts, 1.-2.03.1999, Weissenkirchen, Österreich.
- Haisch, C., Neuhauser, R.E., Niessner, R., Panne, U.: Laserinduzierte Plasmaspektroskopie in der Praxis. CANAS '99, 14.-19.03.1999, Konstanz.
- Huber, N., Baumann, T. u. Niessner, R.: Quantifizierung der Filtrationseffizienz natürlicher Sedimente für polydisperser Kolloide, 4. Nachwuchstage der Kolloid- und Grenzflächenforschung, 21.-22.04.99, Basel.
- Knopp, D. u. Niessner, R.: Negative and Positive Analytical Artifacts with Immunoassays - Two Sides of One Medal, 1st Workshop on Environmental Analytical Artefacts, 1.-2.03.1999, Weissenkirchen.
- Knopp, D., Seifert, M. u. Niessner, R.: Screening of Water and Soil Samples for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons with Immunologic and Chromatographic Methods, 1st North-African & Middle Eastern Symposium on Environmental and Sanitary Analytical Chemistry, 7.-11.3.1999, Hammamet.
- Knopp, D.: Einsatz der Immunoaffinitätschromatographie in der Analytik von Pflanzenschutzmitteln. DFG-Fachgespräch „Anwendung von Immunoassays in der Rückstandsanalytik von Pflanzenschutzmitteln“, 3.-4.11.1999, BASF Agrarzentrum Limburgerhof (Eingelad. Vortrag).
- Letzel, T., Niessner, R.: Benzo[a]pyrene-coated Soot Aerosol with Ozone: Separation and Identification of Degradation Compounds with HPLC/MS. EGS XXIV General Assembly, 19.-23.04.1999, The Hague.
- Letzel, T., Niessner, R.: The Reaction of B[a]P Coated Soot Aerosol with Ozone: Artefacts in Product Sampling and Working Up. 1st Workshop on Environmental Analytical Artefacts, 1.-2.03.1999, Weissenkirchen, Österreich.
- Neuhauser, R.E., Panne, U., Niessner, R.: On-line Monitoring of Heavy Metals in Aerosols: From Laboratory Studies to Industrial Applications, Neuere Entwicklungen bei der Messung und Beurteilung der Luftqualität. Kommission Reinhaltung der Luft im VDI und DIN, 27.-29.04.1999, Heidelberg.
- Niessner, R., Kotzick, R., Neuhauser, R.E., Panne, U.: Aerosol Monitoring (Soot & Heavy Metals) by Laser-Based Techniques, 63. Physikertagung der DPG-Symposium Umweltphysik und Spektroskopie, 16.03.1999, Heidelberg.
- Niessner, R.: Chemical Aerosol Characterization: Desire Versus Reality, 1st Workshop on Environmental Artefacts, 1.-2.03.1999, Weissenkirchen (Eingelad. Vortrag)
- Niessner, R.: Aerosol Chemistry: Where are Needs and Possibilities? European Aerosol Conference, 6.-10.09.1999, Prag (Eingelad. Vortrag).
- Niessner, R.: Analytical Chemistry 2000: Needs and Possibilities, Colloquium „Frontiers in Nanoscale Chemistry and Biochemistry“, 7.-8.10.1999, Karlsruhe (Eingelad. Vortrag).
- Niessner, R.: Changes in the Chemical and Physical Properties of Aerosols: Ozone Reaction with BaP-coated Carbon Aerosols, 2nd Gentner Symposium on Geoscience, 24.-29.10.1999, Nazareth (Eingelad. Vortrag).

- 
- Niessner, R.: Immunoassays within Analytical Chemistry: Irreconcilable Antagonism? 27. GDCh-Hauptversammlung, 17.08.1999, Berlin, (Eingelad. Vortrag).
- Niessner, R.: Photoacoustic Spectroscopy as a New Old Tool in Analytical Chemistry, 3rd Euroconference on Environmental Analytical Chemistry for the 21st Century, 9.-15.10.1999, Chalkidiki (Eingelad. Vortrag).
- Niessner, R.: Spektrometrische Echtzeitmessung im Wasser, IFAT 99, 6.05.1999, München (Eingelad. Vortrag).
- Panne, U.: Einsatz der laserinduzierten Plasmaspektroskopie (LIPS) in der Umwelt- und Prozeßanalytik. Chemiedozententagung, 14.-17.03.1999, Oldenburg.
- Panne, U.: Verfahren zur On-line Bestimmung der elementaren Zusammensetzung von Rohstoffen, Neue Entwicklungen in der keramischen Aufbereitung. Deutsche Keramische Gesellschaft (DKG), Kommission Reinhaltung der Luft im VDI und DIN, 8.-9.12.1999, Bayreuth.
- Pöschl, U., Letzel, T., Krämer, L., Nießner, R.: The Reaction of Benzo[a]pyrene-coated Soot Particles with Ozone: Products, Reaction Kinetics and Condensation Properties. European Aerosol Conference 6.-10.09.1999, Prag.
- Reichelt, E., Pichler, H., Krska, R., Grasserbauer, M., Knopp, D. u. Niessner, R.: Development of an Enzyme Immunoassay for the Determination of the Herbicide Metsulfuron-Methyl Based on Chicken Egg Yolk Antibodies, 3rd Euroconference on Environmental Analytical Chemistry, 9.-15.10.1999, Chalkidiki.
- Schedl, M., Maier, G., Achatz, S., Knopp, D., Kettrup, A. u. Niessner, R.: Selective Enrichment of PAH Metabolites from Human Urine with a Sol-Gel Glass Immunoabsorber. - 4th Workshop on Biosensors and Biological Techniques in Environmental Analysis, 1.-3.12.1999, Mao, Menorca.
- Schweigkofler, M., Nießner, R.: Bestimmung flüchtiger Arsenspezies in Biogasen. Arbeitskreis Bestimmung von Mikro- und Spurenstoffen der Elemente, 14.-16.11.1999, Geesthacht.
- Schweigkofler, M., Nießner, R.: Bestimmung von Spurenstoffen in Biogasen mittels GC-AED/MS. 9. Chromatographie-Seminar, 10.-12.01.1999, Hohenroda.
- Schweigkofler, M., Nießner, R.: Silizium im Deponiegas. Internationale Fachtagung zur Abfalltechnologie (IFAT), 5.05.1999, München.
- Speiser, C., Baumann, T., Nießner, R.: Bedeutung der CS(A,F)H- Phasen in alterierenden Schlacken. Min Wien 1999, Gemeinschaftstagung der Deutschen und Österreichischen Mineralogischen Gesellschaft, 30.08.-2.09.1999, Wien.
- Speiser, C., Baumann, T., Nießner, R.: Charakterisierung metallhaltiger Mineralphasen in MVA-Schlacken mit dem Rasterelektronen-Mikroskop. Arbeitskreis Bestimmung von Mikro- und Spurenstoffen der Elemente, 14.-16.11.1999, Geesthacht.
- Szekacs, A., Knopp, D. u. Niessner, R.: Effects of Assay Format, Including Plate and Dipstick Immunoassays on the Performance of an ELISA Against Pyrene, 1st Workshop on Environmental Analytical Artefacts, 1.-2.03.1999, Weissenkirchen.
- Weller, M.: Chromatographie/Immunoassay-Kombinationen für Biosensoren. Tutoriumsvortrag, Deutsches BioSensor Symposium, 14.04.1999, München.
- Weller, M.: Einsatz von Biosensoren in der Umweltanalytik. Hauskolloquium des Walter-Straub-Instituts für Pharmakologie und Toxikologie (Prof. G. Sabbioni), Ludwig-Maximilians-Universität, 16.06.1999, München



- 
- Weller, M.: Immunologische Methoden in der Umweltanalytik. Mitarbeiterseminar bei der Connex GmbH, 14.07.1999, Martinsried.
- Weller, M.: Parallel affinity sensor array (PASA) for multianalyte detection. 5th International Conference - Agri-Food Antibodies, 17.09.1999, Norwich, Großbritannien.
- Weller, M.: Parallele Biosensorarrays für die Umweltanalytik. Chemiedozententagung, 14.-17.03.1999, Oldenburg.
- Weller, M.: Parallele Immunsensorarrays für die Wasseranalytik. Forum Analyticum, ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.
- Weller, M.: Report on an Apparent Humic Acid Antibody for the Immunological Analysis of Humic Acids and the Detection of Bound Residues (plenary lecture). 1st Workshop on Environmental Analytical Artefacts, 1.-2.03.1999, Weissenkirchen, Österreich.
- Zeck, A.: Identifizierung strukturell verwandter Algentoxine mittels HPLC-Immunoassay-Kopplung. Deutsches BioSensor Symposium, 14.-16.04.1999, München

### 2.2.2 Poster

- Bou Carrasco, P., Gilabert, S., Schedl, M., Haupt, K., Bayona, J.M., Knopp, D. u. Niessner, R.: Comparison of Molecularly Imprinted Polymers and Immunoaffinity Supports for the Extraction of the Sulfonylurea Herbicide Metsulfuron-Methyl, 4th Workshop on Biosensors and Biological Techniques in Environmental Analysis, 1.-3.12.1999, Mao, Menorca.
- Düsing, R., Panne, U., Niessner, R.: Multidimensionale Fluoreszenzspektroskopie mit faseroptischen Sensoren zur On-Line und In-Situ Bestimmung polycyclischer aromatischer Kohlenwasserstoffe in ölbelasteten Wasser- und Bodenproben, ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.
- Düsing, R.: Time Resolved Excitation-Emission Spectroscopy (TEES) with Fibre Optical Sensors. ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.
- Exner, A., Theissen, M., Panne, U., Niessner, R.: Bestimmung der Größenverteilung huminstoffgebundener Schwermetalle mittels asymmetrischer Fluß-Feldflußfraktionierung (AF<sup>4</sup>) und Totalreflexions-Röntgenfluoreszenzanalyse (TRFA). ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.
- Exner, A., Theissen, M., Panne, U., Niessner, R.: Bestimmung der Größenverteilung huminstoffgebundener Schwermetalle mittels asymmetrischer Fluß-Feldflußfraktionierung (AF<sup>4</sup>) und Totalreflexions-Röntgenfluoreszenzanalyse (TRFA). Jahrestagung der Fachgruppe Wasserchemie in der GDCh, 10.-12.05.1999, Regensburg.
- Fink, H., Panne, U., Niessner, R.: Charakterisierung von Kunststoffrecyclaten der Elektronikindustrie mit laserinduzierter Plasmaspektroskopie (LIPS). ANAKON, 07.-10.04.1999, Konstanz.
- Fink, H.: On-line Charakterisierung von Kunststoffrecyclaten aus Elektronikschrott mit laserinduzierter Plasmaspektroskopie (LIPS). IFAT, 03.-08.Mai 1999, München.
- Gahr A. und Niessner R.: Detektion von OH-Radikalen mit spektroskopischen Methoden zur sensorischen Überwachung von oxidativen Wasseraufbereitungsprozessen. ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.
- Haisch, C., Neuhauser, R.E., Panne, U., Niessner, R.: Laser-Induced Plasma Spectroscopy with Echelle and Rowland Spectrometers: Old Tools for new Applications. European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry, 9.-15.01.1999, Pau, France.

- 
- Haisch, C., Panne, U., Niessner, R.: Einsatz eines Echelle-Spektrometers zur Analyse aquatischer Kolloide mit der laserinduzierten Plasmaspektroskopie (LIPS). ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.
- Huber, N., Baumann, T. u. Niessner, R.: Bestimmung verschiedener Schadstoffe in Anwesenheit organischer und anorganischer Kolloide, ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.
- Knopp, D., Eremin, S.A., Yakovleva, Y.S., Schedl, M. u. Niessner, R.: The Development of a Polarisation Fluoroimmunoassay for Metsulfuron-Methyl, Agri-Food Antibodies, 14.-17.09.1999, Norwich
- Krämer, L., Pöschl, U., Nießner, R.: Changes in the Microstructure of Aerosol Particles after Humidification. European Aerosol Conference, 6.-10.09.1999, Prag.
- Lesch, H., Düsing, R., Panne, U., Niessner, R.: Detektion von Ölrückständen in Boden mittels Hochleistungsdünnschichtchromatographie (HPTLC) und mehrdimensionaler laserinduzierter Fluoreszenzspektroskopie (LIFS). ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.
- Letzel, T., Rosenberg, E., Nießner, R.: Trennung und Identifizierung von Abbauprodukten der Reaktion Benzo[a]pyren mit Ozon mittels Flüssigchromatographie-Massen-Spektrometrie (LC-MS). ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.
- Letzel, T., Rosenberg, E., Pöschl, U., Niessner, R.: The Reaction of Benzo[a]pyrene-coated Soot Particles with Ozone: Separation and Identification of Degradation Products with LC-APCI-MS. European Aerosol Conference, 6.-10.09.1999, Prag.
- Müller, S., Baumann, T. u. Niessner, R.: Ultrafiltration, REM, und AAS zur Charakterisierung der kolloidalen Transportprozesse in einem Modellaquifer, ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.
- Mikhailov, E.F., Vlasenko, S.S., Krämer, L., Nießner, R.: Soot Particle Reconstructing Due to Interaction with Water Droplets. European Aerosol Conference, 6.-10.09.1999, Prag.
- Neuhauser, R.E., Panne, U., Niessner, R.: Charakterisierung von Schwermetallaerosolen auf Filtern mit laserinduzierter Plasmaspektroskopie (LIPS). ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.
- Nießner, R., Pöschl, U., Letzel, T., Krämer, L.: The Interaction of Benzo[a]Pyrene-Coated Soot Aerosol Particles With O<sub>3</sub> and NO<sub>2</sub>, BMBF AFS Statusseminar, 24.-25.06.1999, München.
- Prestel, H., Taglauer, A., Gahr, A., Nießner, R.: Detektion wassergelöster Schwermetalle mittels laserinduzierter Fluoreszenzspektroskopie. ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.
- Prestel, H., Taglauer, A., Gahr, A., Nießner, R.: Detektion wassergelöster Schwermetalle mittels laserinduzierter Fluoreszenzspektroskopie. Jahrestagung der Fachgruppe Wasserchemie in der GDCh, 10.-12.05.1999, Regensburg.
- Prestel, H., Zhang, J., Gahr, A., Nießner, R.: On-line-Detektion wassergelöster Schwermetalle mittels laserinduzierter Fluoreszenzspektroskopie. DECHEMA-Symposium: Natural Attenuation, 27.-28.10.1999, Frankfurt/Main.
- Scharnweber, T., Knopp, D. u. Niessner, R.: Sol-Gel-Glass Immunoabsorbers for the Selective Enrichment of Organic Pollutants from Precipitation, 1st North-African & Middle Eastern Symposium on Environmental and Sanitary Analytical Chemistry, 7.-11.03.1999, Hammamet.
- Scharnweber, T., Knopp, D., Niessner, R. u. J.M. Bayona: Untersuchung von Meerwasser auf PAKs und deren Metabolite mit Immunoaffinitätschromatographie und LC/MS. - Jahrestagung der "Fachgruppe Wasserchemie in der GDCh, 10.-12.05.1999, Regensburg.

- 
- Schweigkofler, M., Nießner, R.: Determination of Siloxanes in Landfill Gas and Sewage Gas. ANAKON, 7.-11.04.1999, Konstanz.
- Seiss M., Gahr A. und Niessner R.: Anwendung der UV-Oxidation zur Aufbereitung von Sickerwässern aus Mülldeponien. Jahrestagung der Fachgruppe Wasserchemie der GDCh, 10.-12.05.1999, Regensburg.
- Speiser, C., Baumann, T., Nießner, R.: Energiedispersive Röntgenspektrometrie an MVA-Schlacken mit dem Rasterelektronenmikroskop (REM). ANAKON, 7.-10.04. 1999, Konstanz.
- Wersching, C., Weller, Michael, G. Nießner, R.: Entwicklung von Teststreifen für die TNT-Bestimmung auf der Basis eines Apoenzym-Reaktivierungsimmunassays (ARIS). ANAKON, 7.-10.04.1999, Konstanz.

### 2.2.3 Gutachten

- Kontrollanalysen* Bad Windsheim, Bad Bentheim, Bad Endorf, Bad Füssing, Neustadt/Aisch, Nordenau (Taunus), Sibyllenbad, Siegsdorf, Bad Steben, Bad Wörishofen
- Anerkennungsgutachten, hydrogeologische Situation (Heilwasser, Mineralwasser)*. Bad Windsheim, Bad Bentheim, Bad Birnbach, Bad Füssing, Straubing, Kondrau, Löberschütz/Jena, Stadtwerke München
- Brunnenkontrollanalysen (Brunnenkopf, Flaschenanalysen, Süßgetränke)*. Bad Brückenau, Bad Kissingen, Bad Windsheim, Hölle, Kondrau, Neustadt/Aisch, Memmingen, Utting

## 2.3 Abgeschlossene Diplomarbeiten

- Dipl.-Chem. Harald Beck: Thermodesorption zur schnellen Probenahme von Pentachlorphenol und Lindan, LMU
- Dipl.-Chem. Barbara Fall: Untersuchungen zur Anwendung eines parallelen Affinitätsensorenarrays (PASA) in der Allergiediagnostik, TUM
- Dipl.-Chem. Harald Lesch: Analytik von PAK und Rohölen mittels HPTLC und zeitaufgelöster Laserfluoreszenzspektroskopie, TUM
- Dipl.-Chem. Thomas Schmid: Tiefenaufgelöste photoakustische Spektroskopie an Biofilmen, TUM
- Dipl.-Geol. René Wagner: Hydrogeologische und hydrochemische Charakterisierung des Versuchsfeldes Nabburg, TUM
- Dr.rer.nat. Gottfried Maier: Der Einsatz von Sol-Gel-Glas-Immunoabsorbentien im Bio-Monitoring am Beispiel der HPLC-Analytik von hydroxylierten polyzyklischen Aromaten im Urin. Aufbaustudium-Fernstudium, Studiengang Umwelttechnik und Recycling, Hochschule Zwickau

## 2.4 Abgeschlossene Dissertationen

- Dipl.-Phys. Angela Beenen: Entwicklung eines faseroptischen photoakustischen Sensorsystems zur Detektion von Benzol, Toluol und Xylol (BTX) in Luft, Wasser und Boden.
- Dipl.-Chem. Birgit Fröschl: Bildung und Nachweis von nitrierten polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen in realer und simulierter Atmosphäre.

- 
- Dipl.-Chem. Norbert Huber: Aquatische Kolloidsysteme: Charakterisierung des Migrationsverhaltens und Bedeutung für den Stofftransport.
- Dipl.-Phys. Christian Kopp: Entwicklung eines photoakustischen Sensorsystems zur tiefenaufgelösten Analyse von Biofilmen.
- Dipl.-Chem. Robert Loos: Untersuchungen zur Sorption und Analytik polarer hydrophiler Umweltschadstoffe mit Festphasenextraktion, Kapillarelektrophorese und Gaschromatographie.
- Dipl.-Phys. Richard Neuhauser: Anwendungen der laserinduzierten Plasmaspektroskopie (LIPS) in der industriellen Überwachung von Schwermetall-Aerosolemissionen.
- Dipl.-Chem. Andreas Schütz: Entwicklung und Automatisierung eines indirekten Immunsensorarrays zur parallelen Bestimmung von Umweltschadstoffen in Wasser.
- Dipl.-Chem. Andreas Taglauer: Fluorimetrischer Nachweis von wassergelösten Schwermetallionen zur Entwicklung eines Sensorsystems.
- Dipl.-Chem. Michael Theisen: Quellidentifizierung und Luftstaubanalytik unter Verwendung von Totalreflexions-Röntgenfluoreszenz-Spektroskopie.
- Dipl.-Chem. Michael Winklmaier: Entwicklung eines direkten, multianalytfähigen Immunsensorarrays zur parallelen Bestimmung kreuzreagierender Triazinherbizide.

---

## 3 Lehre und Fortbildung

### 3.1 Vorlesungen

|   |                      |
|---|----------------------|
| Chemie gelöster und ungelöster Wasserinhaltsstoffe, Teil 1: Wasserkreislauf und Gleichgewichte                              | Nießner              |
| Chemie gelöster und ungelöster Wasserinhaltsstoffe, Teil 2: Hydrokolloide, micellare Systeme und photochemische Umsetzungen | Nießner              |
| Umweltanalytik, Teil 1: Grundlagen der instrumentellen Analytik von Wasserinhaltsstoffen                                    | Nießner              |
| Umweltanalytik, Teil 2: Charakterisierung von Luftinhaltsstoffen (Gase und Aerosole)  | Nießner              |
| Umweltanalytik, Teil 3: Organische Spurenanalytik an Umweltmatrices   | Nießner              |
| Massenspektrometrie in der Umweltanalytik   | Weller, Nießner      |
| Biochemische und molekularbiologische Analysenverfahren in der Umweltanalytik   | Knopp, Nießner       |
| Umweltmesstechnik mit spektroskopischen Methoden  | Panne                |
| Spektroskopische Verfahren der organischen Spurenanalytik   | Panne                |
| Statistische Methoden in der Umweltanalytik   | Panne                |
| Die Mineral-, Thermal- und Heilwässer in Bayern und ihr hydrogeol. Rahmen   | M. Baumann, Nießner  |
| Einführung in das hydrogeologische Praktikum I, II, III   | M. Baumann, Nießner  |
| Brunnenbau und Bohrtechnik  | M. Baumann, Nießner  |
| Hydrogeologie I und II  | Frisch (Lehrauftrag) |
| Ausbreitung von Schadstoffen im Untergrund  | T. Baumann           |
| Ausgewählte Kapitel und Übungen zur Hydrogeologie   | T. Baumann           |
| Erkundung und Sanierung von Grundwasserschadensfällen   | T. Baumann           |
| Modellierung der Grundwasserströmung und des Stofftransports  | T. Baumann           |
| Hydrochemische Modellierung   | T. Baumann, Nießner  |
| Chemie und Technologie des Trink- und Betriebswassers I (Wasser und Umwelt)   | Knopp                |
| Chemische Charakterisierung von Umweltmatrices (Gase)   | Nießner              |

---

## 3.2 Übungen, Praktika und Seminare

|  |   |
|--|---|
| Vertiefungsfach Analytische Chemie, Teil 1 Organische Spurenanalytik | Nießner, Weller, Panne                        |
| Teil 2 Methoden der Strukturaufklärung und Instrumentellen Analytik  | Nießner und Mitarbeiter, Dozenten in Garching |
| Wasserchemisches Praktikum I: Wasseranalyse                          | Panne, Weller, Nießner                        |
| Wasserchemisches Praktikum II: Wassertechnologie                     | Panne, Nießner                                |
| Hydrogeologisches Praktikum I: Gesteinsphysikalische Methoden        | M.+T.Baumann, Nießner                         |
| Hydrogeologisches Praktikum II: Hydrochemische Methoden              | M. Baumann, Nießner                           |
| Hydrogeologisches Praktikum III: Geländeübungen mit Kurs             | M.+T.Baumann, Nießner                         |
| Hydrogeologische und hydrochemische Exkursionen                      | M.+T.Baumann, Nießner                         |
| Hydrogeologisches, hydrochemisches und umweltanalytisches Seminar    | M. Baumann, Nießner                           |
| Hydrogeologisches Literaturseminar                                   | T. Baumann                                    |

## 3.3 Institutskolloquium

- Dr. Michael Steinwand, Research Group Science and Technology, Bodenseewerk Perkin-Elmer GmbH, PE Applied Biosystems Division, Überlingen: Zwischen Einzelmolekülnachweis und High-Throughput-Screening: Die Zukunft in der Analytischen Chemie (25.01.1999).
- Dr. Peter Werle, Fraunhofer-Institut für Atmosphärische Umweltforschung, Garmisch-Partenkirchen: Spektroskopische Gasanalytik mit Halbleiterlasern (26.01.1999).
- Prof. Dr. Michael Karas, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Frankfurt: "Neue Entwicklungen in der Bio-Massenspektrometrie"(10.2.1999).
- Dr. Pascal Fichet, Commissariat à l'Energie Atomique (CEA), Saclay, Paris: Anwendungen von LIPS in der Nuklearindustrie (23.02.1999).
- Dr. Zoltan Bozoki, Department of Optics & Quantum Electronics, JATE University, Szeged/Hungary: New Possibilities for the Application of the Photoacoustic Technique (26.02.1999).
- Dr. Zoltan Bozoki, Department of Optics & Quantum Electronics, JATE University, Szeged/Hungary: Diode Laser Based Photoacoustic Gas Detection. Research and Development at the Department of Optics and Quantum Electronics, JATE University, Szeged (07.04.1999).
- Dr. Thorsten Schäfer, Institut für Nukleare Entsorgungstechnik im Forschungszentrum Karlsruhe: Abschätzung der Relevanz des Kolloidtransportes im Bereich anthropogen induzierter hydraulisch/hydrochemischer Schwankungen (03.05.1999).
- Prof. Dr. M. Jekel, Fachgebiet Wasserreinhaltung der TU Berlin: Vergleich der weitergehenden Oxidationsverfahren für Atrazin in der Trinkwasseraufbereitung (05.05.1999).
- Prof. Dr. Detlef Günther, Laboratorium für Anorganische Chemie, ETH Zentrum Zürich: Möglichkeiten der Laser-Ablation-ICP-MS (15.06.1999).

- 
- Prof. Dr. B. Neidhart, GKSS-Forschungszentrum Geesthacht: Konzepte der Analytischen Qualitätssicherung für den Universitätsbereich (07.07.1999).
- Dr. Ivo Wagner, Technologiezentrum Wasser, Karlsruhe: Physikalische Wasserbehandlungsverfahren: Aussichtsreich?!? (14.07.1999).
- Prof. Dr. Claire Welty, School of Environmental Science, Engineering and Policy, Drexel University, Philadelphia/USA: Modeling Virus and Colloid Transport in Heterogeneous Aquifers (15.07.1999).
- Prof. Dr. Dane Bicanic, Wageningen University and Research Centre, Wageningen/Niederlande: Photothermal and Photoacoustic Methods as Potential Problem Solvers in a Wide Scope of Agricultural and Environmental Sciences (05.08.1999).
- PD Dr. Ute Pyell, Fachbereich Chemie, Philipps-Universität Marburg: Kapillar-Elektrochromatographie und Mizellare Elektrokinetische Chromatographie - Von instrumentellen Entwicklungen bis zur computerunterstützten Optimierung (14.09. 1999).
- Prof. Dr. G. Hänel, Institut für Meteorologie und Geophysik, Universität Frankfurt: Aerosole im Wasserkreislauf (27.9.1999).
- Dr. Josep M. Bayona, Environmental Chemistry Department CID-CSIC, Barcelona/Spain: Development and Application of Solid-Phase Microextraction Techniques for the Determination of Volatile Amines and Fatty Acids in Wastewaters (13.10.1999).
- Dr. Claus Weitkamp, Institut für Physikalische und Chemische Analytik, GKSS-Forschungszentrum Geesthacht, GmbH: Ultraschallelevation kleiner Tropfen und Partikel - ein Werkzeug für die Aerosolforschung und die Mikroanalyse (19.10.1999).
- Prof. Dr. B. Spengler, Institut für Physikalische Chemie, Würzburg: Lasergestützte Massenspektrometrie für Umwelt- und Bioanalytik (02.11.1999).
- Prof. Dr. Luc Moens, Laboratory of Analytical Chemistry, University of Ghent/Belgien: Recent Trends in Trace Element Determination and Speciation Using ICP-MS (10.11.1999).
- Prof. Dr. K. Boos, Institut für Klinische Chemie, Universitätsklinikum Großhadern der LMU München: Molekular geprägte Adsorbentien in der Analytischen Chemie (15.12.1999).
- Prof. Dr. Hans A. Schuessler, Dept. of Physics, Texas A&M University: Development of an Ultra-Sensitive Surface Plasmon Resonance Based Biosensor (20.12.1999).

## **4 Ausstattung**

### **4.1 Hydrogeologie**

#### **4.1.1 Versuchsaquifere**

Mit den variablen Modellaquiferen stehen dem Institut Instrumente zur kontrollierten Durchführung von eindimensionalen Ausbreitungsversuchen im gesättigten Medium zur Verfügung. Die Doppelwannenkonstruktion erlaubt den risikolosen Einsatz von umweltgefährdenden Analyten. Damit kann das Transportverhalten von Schadstoffen unter realitätsnahen Bedingungen im Technikumsmaßstab untersucht werden. Die maximale Fließstrecke beträgt 10 m, die Fließbreiten sind 1 m und 1,5 m. Die Einstellung der hydraulischen Randbedingungen erfolgt wie die Steuerung der Probenahme vollelektronisch. Damit kann eine hohe zeitliche Auflösung der Versuche sichergestellt werden. Nach Ausbreitungsversuchen mit Pestiziden, Schwermetallen, hydrophoben und organischen Kontaminanten wird derzeit der Kolloidmoderierter Schadstofftransport einer detaillierten Betrachtung unterzogen. Die Ergebnisse der

---

Versuche aus dem Modellaquifer lassen sich unter Berücksichtigung der räumlichen Heterogenität gut auf die Ausbreitung im wassergesättigten Aquifer übertragen.

#### **4.1.2 Naturmeßfeld**

Mit den Naturmeßfeldern wird der Schritt vom Technikumsmaßstab in naturräumliche Bedingungen möglich. An drei Standorten (München-Nord, Nabburg, Sengenthal) bestehen hier Möglichkeiten zur Untersuchung der Stoffausbreitung mit hoher transversaler Auflösung. Damit kann insbesondere der dispersive Transport, der im Laborversuch häufig nur abgeschätzt wird, im Detail untersucht werden. Im Mittelpunkt der Untersuchungen steht, wie bei den Versuchsaquiferen, der kolloid-moderierte Stofftransport.

#### **4.1.3 Deponiemeßfeld Augsburg-Nord**

Die langfristige Sicherheit der Deponieabdichtungssysteme bildet einen Eckpfeiler der heutigen Entsorgungskonzepte. Aus der Motivation heraus, Aufschluß über das Langzeitverhalten mineralischer Dichtungssysteme unter Realbedingungen zu erhalten und gleichzeitig ein Feldlabor für neuentwickelte und zu entwickelnde Sensoren zur Überwachung von Dichtungssystemen zur Verfügung zu stellen, wurde das hydrogeologische Meßfeld auf der Deponie Augsburg-Nord eingerichtet. Mit Einrichtung der Oberflächenabdichtung wurde die Beobachtung 1999 wieder intensiviert, um deren Einfluß auf den Stofftransport in der Basisdichtung unter Realbedingungen zu untersuchen.

#### **4.1.4 Deponiemeßfeld Großmehring**

Zur Untersuchung der exothermen Prozesse in Deponien für Müllverbrennungsschlacken wurde im BA IV der Deponie Großmehring ein Meßprofil eingerichtet. Mit 8 Meßebenen (Temperatur, Wassergehalt) in einem vertikalen Abstand von max. 2 m, von denen die erste Meßstelle unmittelbar auf der Kunststoffdichtungsbahn liegt, kann die Temperaturentwicklung innerhalb der Deponie genau verfolgt werden. Über einen Zeitraum von 3 Jahren werden an diesem und weiteren geplanten Meßprofilen die Temperaturen aufgezeichnet und mit den Randbedingungen (Klima, Schlackenzusammensetzung, Einbaubedingungen) korreliert. Die Meßeinrichtungen der konventionellen Sensoren verbleiben auch nach Beendigung des Forschungsvorhabens auf der Deponie Großmehring, um das Meßprogramm langfristig fortzuführen zu können.

#### **4.1.5 Münchner Loch**

Das Münchner Loch wurde als Feldlabor in Großhadern zur Untersuchung der ungesättigten Zone eines quartären Kiesgrundwasserleiters eingerichtet. Ausgerüstet mit Probenahme- und Monitoringeinrichtungen in 7 Ebenen bis zu einer Tiefe von 10 m können der vertikale Wasser- und Stofftransport unter ungesättigten Bedingungen beobachtet werden.

### **4.2 Technikum**

Das Institut für Wasserchemie und Chemische Balneologie befaßt sich seit Jahren mit aktuellen Themen der Wasseraufbereitung. Das neu erstellte institutseigene Technikum stellt hierfür die räumlichen und technischen Erfordernisse bereit und ermöglicht das Aufstellen und die Installation von Pilotanlagen zur Anwendung moderner Wasseraufbereitungstechnologien. Darüber hinaus bieten die mit klassischer instrumenteller Analytik ausgestatteten Laboratorien die



---

apparative Voraussetzung zur Entwicklung neuartiger, problemorientierter Analysemethoden für umweltrelevante Schadstoffe in den Kompartimenten Wasser, Boden und Luft.

#### 4.2.1 Laser

4 He/Ne-Laser  
6 Nd-YAG-Laser  
1 CO<sub>2</sub>-Laser  
3 Farbstoff-Laser (durchstimmbare mit Frequenzverdoppelung)  
5 N<sub>2</sub>-Laser  
8 modulierbare Diodenlaser (600-1670 nm; > 100 mW CW)  
1 Laserdiodenarray mit 10 Dioden (0.8  $\mu$ m - 1.8  $\mu$ m), faseroptisch  
1 Laserdiode mit externem Resonator

#### 4.2.2 Optoelektronik/Spektrometer

1 Rowland-Spektrometer  
1 Echelle-Spektrometer  
1 Perkin Elmer FTIR-Spektrometer 1600  
1 Perkin Elmer Fluoreszenzspektrometer, Typ LS-50  
1 UV/VIS-Spektrometer Beckman DU 650  
1 Boxcar-Integrator  
4 Speicher-Oszilloskope (400 MHz, 500 MHz)  
3 Optische Vielkanalanalysatoren mit Monochromatoren, zeitauflösend  
3 Intensivierte CCD-Kameras  
1 Spektrofluorophotometer Shimadzu RF 540  
1 Wavemeter

#### 4.2.3 Chromatographie

7 Gaschromatographen mit FID, NPD, ECD, TEA und AED  
1 Gaschromatograph mit massenselektivem Detektor, Kaltaufgabesystem und Autosampler  
1 Hochauflösende GC/MS-Station (VG Autospec)  
1 LC-Orthogonal-ESI-TOF-MS (Micromass)  
1 Gefriertrockner  
1 Asymmetrisches Field-flow-fractionation-System  
1 SFE-System (SUPREX) mit Modifier  
2 Konzentratoren für dynamische Headspace-Analyse  
1 High-speed Counter-Current-Verteilungschromatographie-Station  
3 HPLC-Arbeitsstationen, UV/VIS-Array-Detektor, steuerbarer Fluoreszenzdetektor  
2 HPLC-Anlagen  
1 Kapillarelektrophoresesystem  
1 Ionenchromatograph Dionex 4500 i  
1 Ionenchromatograph Dionex 14  
1 AMD-System für Hochleistungs-DC mit Scanner (UV, VIS und Fluoreszenz) und Datenverarbeitung  
1 Niederdruck-Chromatographiesystem ECONO  
1 Präp.-HPLC

---

#### 4.2.4 Bioanalytik-Auswertesystem

- 2 Fluoreszenz-Reader-Systeme, zeitauflösend
- 3 Photometrie-Reader-Systeme
- 1 Mikrodosiersystem (Chip-Spot-Auftragesystem)

#### 4.3 Element-Analysensysteme

- 1 Totalreflektierend arbeitende Röntgenfluoreszenzanalytik-Station, Atomika (EXTRA II a)
- 1 Flammen-Photometer, Eppendorf (ELEX 6361)
- 2 AAS-Systeme mit Flammenatomisierung, elektrotherm. Atomisierung, Hydridsystem, Perkin Elmer (PE 3300, ELAN 4100)
- 1 ICP-MS Perkin-Elmer (ELAN 6100)

##### 4.3.1 Rasterelektronenmikroskopie/Mikroskopie

- 1 REM-Station mit Bildspeicher (Cambridge Instruments/Leica Stereoscan 360)
- 1 Videobild-Recorder-Einheit
- 1 Fensterloser EDX-(Röntgenfluoreszenz)Detektor (Link/Röntec)
- 2 Polarisationsmikroskope zur Phasenanalyse
- 1 Software zur automatischen Bildverarbeitung (Größe, Klassifizierung, Quantifizierung)
- 1 Schutzgas-Glovebox mit Sauerstoffentfernungssystem
- 1 Raman-Mikroskop mit 3 Laserwellenlängen, Renishaw (514 nm, 633 nm, 780 nm)

##### 4.3.2 Summenparameter-Meßsysteme

- 1 Coulostat (Coulomat 702) zur Kohlenstoffbestimmung
- 1 DOC-Analysator (UNOR 6 N)
- 1 TOC-Analysator (TOCOR 2)
- 1 AOX/TOX-10 Sigma

##### 4.3.3 Aerosolmeßgeräte

- 1 m<sup>3</sup>-Aerosolkammer
- 1 Aerosolströmungsreaktor
- 1 Ozon-UV-Absorptionsgasmeßsystem
- 1 Chemilumineszenz-NO/NOx-Analyzer
- 2 Aerodynamische Aerosolaufzeitspektrometer (0.5 µm - 25 µm)
- 1 Vielstufen-Kondensationskernzähler, rechnergesteuert
- 1 Berner-Impaktor, neunstufig (50 nm - 16 µm)
- 2 Differential mobility particle sizer-Systeme (5 nm - 1 µm)
- 2 Diffusionsbatterien mit Umschaltsteuerung (5 nm - 300 nm)
- 5 Kondensationskernzähler, kontinuierlich
- 1 Wafer-Scanner mit Laseranregung
- 5 Elektrostatische Klassifizierer zur Erzeugung monodisperser Aerosole (5 nm - 500 nm)
- 2 Ruß-Aerosolgeneratoren zur Erzeugung polydisperser, ultrafeiner Aerosole aus Kohlenstoff
- 1 Berglund-Liu-Aerosolgenerator zur Erzeugung monodisperser Aerosole (0.8 µm - 50 µm)
- 1 Schwebebett-Aerosolgenerator zur Redispergierung von Pulvern
- 1 Bürstendosierer, Erzeugung redispergierter Flugaschen-Aerosole etc.

##### 4.3.4 Dioxin-Laboratorium

- 3 Labors mit Schleuse, ausgestattet mit separaten Aktivkohle- und Hochleistungs-Schwebstoff-Filtern

## 5 Mitarbeiter 1999

Univ.-Prof. Dr. Reinhard Nießner

Dr. Manfred Baumann (AG-Leiter)  
Dr. Thomas Baumann (AG-Leiter)  
Dr. Zoltan Bozoki  
Dr. Achim Gahr (AG-Leiter)  
Dr. Dietmar Knopp (AG-Leiter)  
Dr. Ulrich Panne (AG-Leiter)  
Dr. Ulrich Pöschl (AG-Leiter)  
Dr. Michael Weller (AG-Leiter)

Birgit Apel  
Günter Dollinger  
Roswitha Glunz  
Gertrud Göppel (bis 2/99)  
Barbara Hanisch (bis 3/99)  
Petra Helbig (z.Zt. beurlaubt)  
Irmengard Kefer (z.Zt. beurlaubt)  
Karin Koller  
Gisela Lang  
Joachim Langer  
Susanne Mahler  
Robert Schneider  
Christine Sternkopf  
Christa Stopp  
Dragica Büttner (bis 8/99)  
Hatice Hazir (bis 9/99 beurlaubt)  
Mira Kolar

### Doktoranden

Dipl.-Chem. Harald Beck  
Dipl.-Phys. Angela Beenen (bis 3/99)  
Dipl.-Chem. Marcus Diemer  
Dipl.-Chem. Rüdiger Düsing  
Dipl.-Chem. Andreas Exner  
Dipl.-Chem. Barbara Fall  
Dipl.-Chem. Herbert Fink  
Dipl.-Chem. Birgit Fröschl  
Dipl.-Chem. Norbert Huber (bis 9/99)  
Dipl.-Ing. (Univ.) Larissa Kasarian  
Dipl.-Geol. Ralf Klein  
Dipl.-Phys. Christian Kopp (bis 10/99)  
Dipl.-Chem. Lutz Krämer  
Dipl.-Chem. Marion Lackhoff (ab 10/99)  
Dipl.-Chem. Thomas Letzel  
Dipl.-Chem. Robert Loos (bis 1/99)  
Dipl.-Geol. Stefan Müller (bis 7/99)  
Dipl.-Phys. Richard Neuhauser (bis 1/99)  
Dipl.-Chem. Harald Prestel

Dipl.-Chem. Tim Scharnweber  
Dipl.-Chem. Matthias Schedl  
Dipl.-Chem. Thomas Schmid  
Dipl.-Chem. Andreas Schütz (bis 1/99)  
Dipl.-Chem. Martin Schweigkofler  
Dipl.-Chem. Mario Seiss  
Dipl.-Min. Claudia Speiser  
Dipl.-Chem. Michael Theisen  
Dipl.-Chem. Carola Wersching  
Dipl.-Chem. Michael Winklmaier (bis 2/99)  
Dipl.-Chem. Anne Zeck

### Externe Doktoranden

Dipl.-Biol. Thomas Hofer (GSF)  
Dipl.-Biol. Thomas Meindl (GSF)

### Diplomanden

Cand.chem. Nuria Escobedo (ab 9/99)  
Cand.chem. Harald Lesch (bis 4/99)  
Cand.chem. Florian Kühbeck (ab 10/99)  
Cand.chem. Christian Schauer (ab 10/99)  
Cand.geol. René Wagner (bis 5/99)

### Gäste und Stipendiaten

Berrios Ruperto (Univ. Arruro IQUIQUE/Chile)  
Pilar Bou Carrasco (CSIC Barcelona)  
Christine Kirick (Bucknell Univ. Lewisburg/USA)  
Sandra R. Ponce (Univ. Ramón, Barcelona)  
S. Gilabert Sire (CSIC Barcelona)  
Jingdong Zhang (WUHAN University/China)  
Ivette Bacskay (Univ. Pecs/Ungarn)

### Wiss. HK

Dr. Gottfried Maier (8-10/99)

### Stud. HK

Nils Gerhardt (8/99 - 10/99)  
Bettina Jee (1/99 - 2/99)  
Sebastian Kraft (9/99 - 10/99)  
York Leiterer (3/99)  
Andrea Plieninger (11/99)  
Thomas Plieninger (2/99 - 9/99)  
Ulrich Schneider (bis 8/99)  
Jens Trafkowski (4/99 - 7/99)

---

## 5.1 Externe Aufgaben Institutsangehöriger

Prof. Dr. Reinhard Nießner

Titular-Mitglied IUPAC, Kommission V.4 "Spectrochemical and Other Optical Methods of Analysis"

Mitglied im BayFORKLIM, Bereichsordinator "Gase & Aerosole"

Mitglied im BayFORUV, Bereichsordinator C

Mitglied im BayFORREST

Mitglied im DFG-SFB 411 "Grundlagen der aeroben Abwasserreinigung"

Beiratsmitglied Arbeitsgemeinschaft Wasserforschung Bayern

Fachbeirat des Fachbereiches IV "Meßtechnik" der VDI/DIN-Kommission Reinhaltung der Luft

Mitglied im Forschungsbeirat des DVGW

Mitglied des Bayer. Fachausschusses für Kurorte, Erholungsorte und Heilbrunnen

Mitglied im Ausschuß für Medizin-Meteorologie des Deutschen Bäderverbandes

Jurymitglied "Heinrich-Emanuel-Merck-Preis"

Jurymitglied ISPAC-Award for Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Research

Mitglied im Fachbeirat des Instituts für Spektrochemie und Angewandte Spektroskopie, Dortmund

Mitglied im wiss. Beirat des Bayer. Instituts für Abfallforschung, Augsburg

Vorstandsmitglied Fachgruppe Wasserchemie der GDCh

Associated Editor „Analytical Chemistry“

Editorial Board Member "Fresenius' Journal of Analytical Chemistry"

Advisory Board Member "Fresenius' Environmental Bulletin"

Editorial Board Member "Mikrochimica Acta"

Mitherausgeber "Römpp Umweltlexikon"

Advisory Board Member "Field Analytical Chemistry and Technology"

Advisory Board Member „Analytical Sciences“

Advisory Board Member „Analyst“

Dr. Manfred Baumann

Stellvertr. Mitglied des Bayer. Fachausschusses für Kurorte, Erholungsorte und Heilbrunnen

Dr. Thomas Baumann

Mitglied im BayFORREST

VDI/VDE-Arbeitskreis Bio- und Umwelttechnologie, Bezirk München, Ober- und Niederbayern

PD Dr. Dietmar Knopp

Mitglied im BayFORREST

Mitglied im DFG-SFB 411 "Grundlagen der aeroben Abwasserreinigung"