

Institut für Wasserchemie und  
Chemische Balneologie

Lehrstuhl für Hydrogeologie,  
Hydrochemie und Umweltanalytik

Jahresbericht

2000



Das Institut für Wasserchemie zu Besuch im Kloster Andechs

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

Das Institut geht mit dem Jahreswechsel 2000/2001 in das 50. Jahr seines Bestehens. Es sei erinnert, daß es als Balneologisches Institut bei der Universität München „zur Bearbeitung der Fragen der Bäderkunde durch wissenschaftliche Forschung“ errichtet wurde und nach Teilung und Eingliederung in die TU München im Jahr 1967 „die bisherigen Aufgaben ... unberührt bleiben“ (Bayerisches Gesetz- und Verordnungsblatt Nr. 14/1967, Seite 404).

Diese Vorbemerkung in einem Jahresbericht mag formalistisch klingen, aber angesichts der allgemeinen Umwälzungen an den Münchner Universitäten ist es manchmal doch hilfreich, eine Positionierung vorzunehmen. Die Forschung und Lehre am Institut und Lehrstuhl kann zutreffend als „Wasserkreislaufforschung“ mit einem ganzheitlichen Ansatz (Wasser-Boden-Luft) beschrieben werden. Andererseits sind unsere Arbeiten auch der Prozeßmeßtechnik oder dem Life Science-Bereich zuzurechnen. Wie ein roter Faden findet sich dabei als dominierende Disziplin die Analytische Chemie mit allen ihren Varianten in den Laboratorien wieder.

Wobei die Stellung der Analytischen Chemie in Deutschland derzeit als schwierig zu bezeichnen ist. Mehrere Professuren dazu wurden an anderen Universitäten abgeschafft (z.B. Dortmund), an anderen Universitäten wiederum wurden neue eingerichtet (so in Augsburg). Selbst große Analytik Institute sind von der Schließung bedroht. Wobei dies allerdings nur mangelnde „Marktanpassung“ reflektiert, denn größer als heute war der Aufgabenbereich für Analytiker selten. Die derzeitige Unsicherheit im Lebensmittelbereich verdeutlicht diese Situation.

Das Jahr 2000 selbst war für das Institut überwiegend positiv. So gelang etwa die Etablierung der BMBF-Nachwuchsgruppe von Dr. Pöschl im Atmosphärenforschungsbereich, welche nunmehr die Aerosolkompetenz des Instituts nicht nur sichern hilft, sondern kräftig ausweiten wird. Ebenso erfreulich waren die Preisverleihungen, einmal der Fachgruppenpreis der Wasserchemischen Gesellschaft für Dr. Weller, sowie der Fresenius-Preis der Gesellschaft Deutscher Chemiker für Prof. Nießner. Bemerkenswert ist auch die Aufnahme der Mitherausgeberschaft der Fachzeitschrift „Analytical Chemistry“, die damit zum erstenmal außerhalb der U.S.A. entscheidend mitgestaltet wird.

Personell macht uns zunehmend der Mangel an Chemie- und Physikabsolventen zu schaffen. Die Konsequenz ist ein Anstieg an Post-Docs und die Aufnahme anderer Nationalitäten am Institut. Für die Zukunft gilt es daher, noch mehr nach hochqualifizierten Kräften für unsere Entwicklungsarbeiten Ausschau zu halten. In der Lehre begrüßen wir die zum 5.9.2000 ausgesprochene Ernennung von Herrn Dr. Frisch zum Honorarprofessor für Hydrogeologie. Er stellt zugleich das Bindeglied zum Bayerischen Landesamt für Wasserwirtschaft, einem unserer wichtigen Partner, dar.

Sächlich sind wir zunehmend mit der Ersatzbeschaffung unserer Gerätschaften konfrontiert. Trotzdem gelang es im Jahr 2000 wiederum, neueste Trenntechniken (für die Zuckeranalytik) zu etablieren. Dies ist nur wegen einer exzellenten Drittmittelsituation möglich gewesen. Allein im Jahr 2000 gelang die Einwerbung von etwa 4.8 Mio DM.

Es gilt also, auch in Zukunft flexibel und rasch zu reagieren. Dies erfordert Mitarbeiter, die selbst vordenken und mitgestalten. Derzeit verfügen wir noch über eine große Anzahl derselben. Dafür gebührt großer Dank!

Ebenso dankbar sind wir aber allen unseren nationalen und internationalen Förderern, besonders dem Freundeskreis des Instituts.

München, Februar 2001

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





# 1 Forschung

## 1.1 Hydrogeologie

### 1.1.1 Exothermer Stoffumsatz in MVA-Schlackedeponien

Förderung: BayFORREST

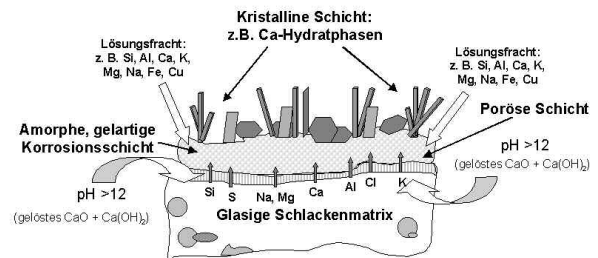
Im Rahmen des Forschungsprojekts F158 wurde die Temperaturentwicklung der Schlacke auf der Deponie der MVA Ingolstadt beobachtet. Neben deponierungsbedingten Parametern, wie Einbaugeschwindigkeit der Schlacken in die Deponie und Gesamtmächtigkeit der Schlackenschüttung, wurden materialspezifische Eigenschaften, wie u. a. chemische und mineralogische Zusammensetzung der Schlacken, untersucht. Unter Einbeziehung atmosphärischer Einflüsse (wie Wassereintrag, O<sub>2</sub>- und CO<sub>2</sub>-Zufuhr) wurden die kausalen Zusammenhänge mit der Temperaturentwicklung ermittelt. Die daraus abgeleitete Stoff- und Wärmebilanz wurde unter Einbeziehung klimatischer Begebenheiten (u.a. Atmosphärentemperatur, Wassereintrag, Kohlendioxid-, und Sauerstoffeintrag) diskutiert. Daneben wurden zahlreiche Versuche im Technikums- und Labormaßstab durchgeführt.

Zur geochemischen und mineralogischen Charakterisierung der Schlacken kamen zahlreiche Analytikmethoden zum Einsatz. Dabei standen neben der Untersuchung der Feststoffproben auch die Erfassung seines Auslaugungsverhaltens in Abhängigkeit der Lagerungsbedingungen und -dauer zur Diskussion. Neben der Polarisationsmikroskopie, der Röntgendiffraktometrie und der (Totalreflexions-)Röntgen-Fluoreszenz-Analyse wurde die Rasterelektronenmikroskopie mit energiedispersivem Detektor eingesetzt. Ergänzende Untersuchungen erfolgten mit Hilfe der Fischertitration (CaO, Ca(OH)<sub>2</sub>) und mit der IR-Spektroskopie (Schwefel, Kohlenstoff).

Zur Klärung der Alterationsvorgänge wurden im Rahmen eines Technikumsversuches (aufgeschütteter Schlackeberg auf der Deponie) und mittels einer Bohrung in einer 1 Jahr und 2 Jahre alten Deponieschüttung (Kernbohrung) die gealterten Schlacken chemisch und mineralogisch untersucht.

Die Untersuchungen zeigen, daß die Wärmeentwicklung nicht allein auf Umsetzungsprozesse in den Schlacken zurückgeführt werden kann. Viel mehr muß die Temperaturentwicklung im Kontext der Lagerungsbedingungen (z. B. Isolierung) gesehen werden. Erst die Einbeziehung der Deponierungsparameter, wie Zwischenlagerung, Einbaugeschwindigkeit der Schlacken in die Deponie, Gesamtmächtigkeit der Schlackenschüttung, aber auch die atmosphärischen Einflüsse in die beobachteten Alterationsprozesse ermöglicht die Entwicklung eines beherrschbaren Stoffsystems "Schlackedeponie".

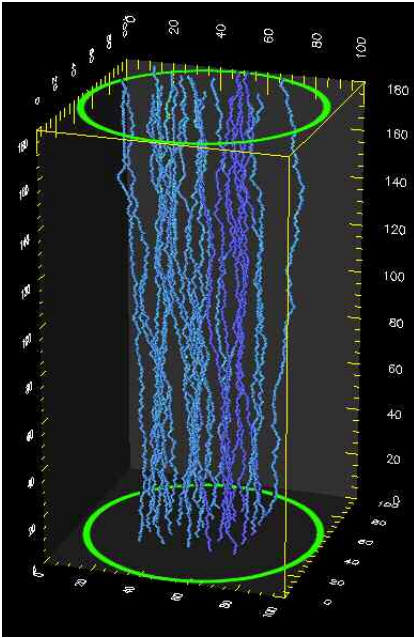
(R. Klein, C. Speiser)



### 1.1.2 Untersuchung des kolloidalen Stofftransports mittels Kernspintomographie

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft

Kolloide spielen beim Transport von Schadstoffen im Untergrund eine bedeutende Rolle. Dennoch liefert die Übertragung von kleinskaligen Laborversuchen ins Gelände bzw. die Extrapolation des Transports basierend z. B. auf der Filtrationstheorie und auf der Abschätzung der Oberflächenwechselwirkungen noch immer keine befriedigenden Ergebnisse. Eine mögliche Ursache liegt im Aufbau der Experimente.



Üblicherweise werden die Durchgangskurven von Schadstoffen und Kolloiden an diskreten Punkten in ungestörten Sedimentkörpern gemessen. Die Sedimenteigenschaften zwischen den Meßpunkten werden dann unter der Annahme von Homogenität und Stetigkeit interpoliert. Daraus ergibt sich eine Unsicherheit im Hinblick auf die tatsächliche Verteilung und Verknüpfung des Porenraums bzw. im Hinblick auf die Fließgeschwindigkeiten.

Die Kernspintomographie ist eine vielseitige Methode, um nichtinvasiv die dynamischen Prozesse in porösen oder geklüfteten Medien zu visualisieren und zu quantifizieren. Die Auflösung liegt dabei in der Größenordnung der mittleren bis größeren Poren, so daß die Elementarvolumina, also der Bereiche, denen ein homogener Eigenschaftsvektor zugeordnet wird, deutlich kleiner gestaltet werden können. Damit läßt sich die Heterogenität besser erfassen.

Mit Hilfe einer dreidimensionalen Abbildung des Porenraums können die Fließwegsamkeiten visualisiert werden. In der Abbildung sind die Trajektorien für einzelne Wasserteilchen dargestellt. Entlang dieser Trajektorien können die Fließgeschwindigkeiten direkt gemessen werden. Der resultierende Datensatz wurde in die Filtrationstheorie eingegeben und liefert deutlich geringere Abweichungen von den experimentellen Ergebnissen als der Datensatz, der mit konventionellen Mitteln gewonnen wurde.

(T. Baumann)

### 1.1.3 In-situ-Monitoring von altlast- und deponierelevanten Kontaminanten mit einem faseroptischen Infrarotsensor

*Förderung: Europäische Union*

*Kooperation: Fraunhofer-Institut für Physikalische Messtechnik, Freiburg; Technische Universität, Wien; Universität für Bodenkultur, Wien; Tel Aviv University; Université de Rennes; CSIC, Barcelona*

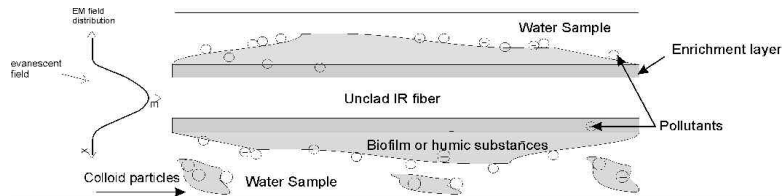
Entgegen zahlreicher europäischer Maßnahmen zur Vermeidung und Verminderung von Müll sind die Produktionsmengen weiterhin angestiegen. Annähernd 60 % des Hausmülls und 68 % des Sondermülls werden weiterhin auf Deponien eingebracht. Viele dieser Deponien entsprechen gegenwärtig nicht mehr dem neuesten Stand der Technik. Das heißt, sie sind weder mit einer Kunststoffdichtungsbahn, noch mit einer mineralischen Basisabdichtung oder einem Sickerwasserauffang- und Behandlungssystem ausgerüstet. Man kann davon ausgehen, dass das Grund- und Oberflächenwasser in der Umgebung von Deponien dem Risiko der Verunreinigung über lange Zeiträume ausgesetzt ist. Infolgedessen besteht ein flächendeckender und steigender Bedarf an kontinuierlichen Kontroll- und Überwachungssystemen für Deponiekontaminationen.

Im Rahmen des EU Projekts IMSIS (In Situ Monitoring of Landfill related Contaminants in soil and water by infrared sensing) wird ein faseroptisches Sensorsystem zur Messung organischer Schadstoffe im Sicker- bzw. Grundwasser entwickelt. Das IMSIS System soll auch zum Screening von Altlastflächen eingesetzt werden.

Dem Institut für Wasserchemie fallen in diesem Verbundprojekt die Aufgaben zu, Technikumseinrichtungen für den Test des Sensorsystems zur Verfügung zu stellen, geeignete Feldversuchsflächen auszuwählen und zu charakterisieren und die Repräsentanz der Sensormessung für die gesamte Grundwasserkontamination zu ermitteln. Hier spielen vor allem die

Zugänglichkeit des Sensorkopfes und dessen Ansprechverhalten auf kurzfristige und langfristige Konzentrationsänderungen eine Rolle. Auch die Langzeitstabilität des Sensorsystems – Ausbildung und Auswirkungen von organischen und anorganischen Überzügen – soll untersucht werden. Inwieweit mit dem Sensor auch der kolloidale Stofftransport erfasst werden kann ist ein weiterer Schwerpunkt der Untersuchungen.

Nach entsprechender Kalibration der Detektoreinheit sollte es möglich sein, nicht nur organische Kontaminantengruppen wie LHKW, BTX(E), PAK, Phenole u.a. nachzuweisen, sondern auch Einzelsubstanzen anzusprechen oder aus den gemessenen Spektren herauszufiltern. Die Nachweisgrenze des IMSIS-Systems befindet sich im Konzentrationsbereich von mg/L, mit Anreicherungszeiten des Analyten an das Coating von wenigen Minuten. Der Sensorkopf soll 10–20 m unter der Geländeoberkante platziert werden, sowohl in verschiedenen Tiefen als auch an benachbarten Lokalitäten innerhalb eines Untersuchungsstandortes.



Das IMSIS-System soll für eine kurz bzw. mittelfristige Überwachung in Grundwassermeßstellen eingesetzt - oder zur Langzeitüberwachung fest installiert werden. Ferner soll der Sensor sowohl beim Bau von Deponien eingebaut werden, als auch auf bestehenden Deponien nachgerüstet werden. Speziell bei der Planung von Sanierungsmaßnahmen und während der kritischen Phase der Sanierung ist ein flexibles Feldmeßsystem hilfreich und kann die erforderlichen Analysedaten beisteuern.

(M. Sarnes)

#### 1.1.4 Grundwassererschließung

Die seit 1998 im Bayer. Staatsbad Bad Steben laufenden Erschließungsarbeiten wurden im Jahr 2000 fortgeführt. Unmittelbar neben der äußerst wasserreichen Versuchsbohrung VB3 wurde die zweite Tiefbohrung auf 901 m abgeteuft.

Das Bohrprofil zeigt bis zu einer Tiefe von 430 m intensiv gestörte Verhältnisse. Diabase, vermutlich devonische Diabastuffite und schwarze bis grauschwarze Schiefer liegen engst vermengt und in stetem Wechsel vor. In den Tuffiten wurde neben hoher Wasserführung (13,5 L/s) auch hohe Gasführung (Stickstoff) festgestellt. Die Mineralisation nimmt bis 430 m leicht zu, auch die Konzentration an gelöstem CO<sub>2</sub> steigt leicht an. Temperatur und CO<sub>2</sub>-Konzentration sind aber nicht wertbestimmend. Ein Pumpversuch zeigte, daß das Wasser nitratfrei und bei einer Gesamtmineralisation von 624 mg/L auch natriumarm ist.

Nach der Absperrung des Bohrlochs bis 413,50 m wurden bis zur Endteufe von 901,50 m keine weiteren, nennenswerten Wasserzutritte mehr erbohrt. Die Bohrung erschließt hier dichte Diabase mit Kieselschiefern und ab 809 m schwarze Tonschiefer.

Daraufhin wurde bei 730 m eine Ablenkbohrung angesetzt und bis 901 m abgeteuft. Die abschließende Vermessung der Bohrung zeigte, das die Hauptbohrung bis 733 m entlang tektonischer Zerklüftung um über 80 m nach NW abgelenkt war. Die Ablenkbohrung wurde als Spülbohrung ausgeführt, wobei der Bohrmotor unten am stehenden Gestänge angebracht war (s. Abb.). Sie wurde in Richtung des Stebener Grabenbruchs (NE) ausgerichtet und überstreicht eine Horizontaldistanz von weiteren 65 m. Trotz vorhandener tektonischer Strukturen wurde jedoch kein weiterer nennenswertes Wasserzutritt angetroffen.

(M. Baumann)





## 1.2 Hydrochemie

### 1.2.1 On-line-Monitoring der Schwermetall-Mobilisierung aus kontaminierten Sedimenten mittels LIFS: Die Feldstudie Vollert-Süd

Förderung: BMBF

Kooperation: Arbeitsbereich Umweltschutztechnik, TU Hamburg-Harburg (Prof. Förstner)



Im Rahmen des australisch-deutschen Kooperationsprojekts „Entwicklung Aktiver Barriere-Systeme (ABS) zur Minimierung der Schadstoff-Freisetzung aus kontaminierten Sedimenten“ wurde ein in den vergangenen Jahren entwickelter On-line-Sensor für wassergelöste Schwermetalle erstmals unter Feldbedingungen eingesetzt. Das Detektionsprinzip basiert auf faseroptisch geführter, laserinduzierter Fluoreszenzspektroskopie geeigneter Metall-Ligand-Komplexe. Das System besteht aus einer Anregungs- und einer Detektionseinheit sowie aus einem Sensorarray mit fünf Fließzellen, 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 Komplexbildung 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.

Dieser Sensor wurde mit einem neuartigen, von der TU Hamburg-Harburg entwickelten Dialyseprobennehmer gekoppelt und wird seit August 2000 in einer Feldstudie im Schwelwasserdeponiesee Vollert-Süd bei Leipzig eingesetzt. Hierbei soll die Schadstoff-Freisetzung aus einem schwermetallkontaminiertem Sediment sowie deren Minimierung durch eine Barriere aus Quarzsand und des natürlichen Zeolithminerals Phillipsit beobachtet werden. Diese Studie ermöglicht eine Untersuchung der relevanten Prozesse unter Feldbedingungen und den Einsatz des Überwachungssystems unter realen Bedingungen.

Hierzu wurde ein zylindrisches Modul (s. Abb.) verwendet, das durch eine Trennwand in zwei gleiche Kammern geteilt ist. In beide Kammern wurde eine Schicht eines schwermetallkontaminierten Sediments eingefüllt. Anschließend wurde die Sedimentschicht in einer der beiden Kammern durch eine reaktive Barriere überdeckt. Das so mit Sediment und Barriere befüllte Modul wurde in einem abgeteilten Abschnitt des Sees, einem sogenannten „Enclosure“, an Ketten abgesenkt, bis die Unterkante eine Tiefe von 6 m erreicht hatte. Daraufhin wurde es an einer Tragekonstruktion fixiert. Seitdem werden vor Ort in drei- bis vierwöchigen Abständen Meßkampagnen mit dem Sensor durchgeführt. Begleitend werden im Labor TXRF- und ICP-MS-Analysen vorgenommen. Dabei wurden im Porenwasser des Sediments relativ bald hohe Konzentrationen an Zink(II) und Nickel(II) sowie sehr niedrige Konzentrationen an Kupfer(II) und Cadmium(II) gefunden. Eine Mobilisierung anderer im Sediment enthaltener Schwermetalle findet bisher nicht statt. Modellierungen zufolge ist ein Durchbruch in die Wasserphase nach etwa 6 Monaten zu erwarten, falls keine Rückhaltung durch die Barriere stattfindet. Nach Beendigung der Untersuchungen (Mai 2001) soll die Wirksamkeit der verwendeten Barriere beurteilt und eine Langzeit-Risikoabschätzung durchgeführt werden.

(H. Prestel)



## 1.2.2 Photokatalytische Wirkung von Aerosolpartikeln

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

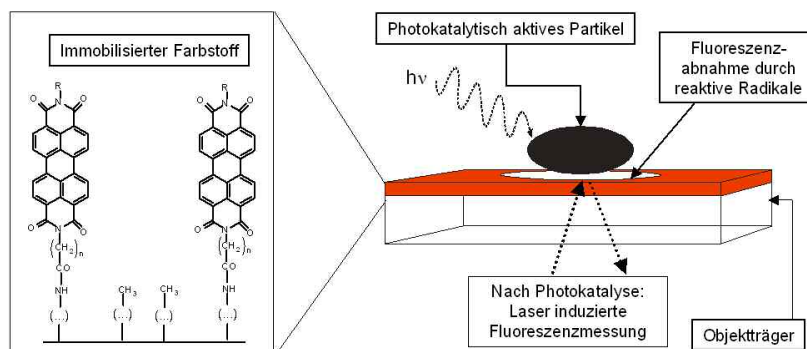
In dieser Studie soll die photokatalytische Wirkung von atmosphärischen Partikeln in Abhängigkeit der UV-Strahlung untersucht werden. Um direkte Messungen der photokatalytischen Aktivität von atmosphärischen Partikeln durchzuführen, wurde ein Detektionssystem für die bei der Photokatalyse intermediär gebildeten Radikale (z.B.  $\cdot\text{OH}$ - oder  $\cdot\text{HO}_2$ -Radikal) entwickelt. Das System basiert auf der Fluoreszenzabnahme von immobilisierten Farbstoffmolekülen.

Auf Grund ihrer hohen Photostabilität und Quantenausbeute wurden Perylenfarbstoffe gewählt. Eine UV-Bestrahlung führt in Anwesenheit von suspendierten, photokatalytisch aktiven  $\text{TiO}_2$ -Partikeln zu einer exponentiellen Abnahme der Fluoreszenzintensität des gelösten Farbstoffes. Zur Untersuchung von natürlich deponierten Aerosolpartikeln wurde der Perylenfarbstoff als Monolage auf Glasträger aufgebracht. Dazu wird der Perylenfarbstoff kovalent über eine Amidbindung angekoppelt.

Die farbstoffbeschichteten Glasträger wurden mit photokatalytisch aktiven Partikeln belegt und mit einem Excimer-Laser bei 308 nm bestrahlt (s. Abb.). Die Fluoreszenzmessungen wurden mit einem Laser-Raman-Mikroskop durchgeführt. Die räumliche Auflösung von 1–2  $\mu\text{m}$  erlaubt eine Fluoreszenzmessung an einzelnen Partikeln. Um Streulicht und Interferenzen mit den Partikeln zu vermeiden, werden die Messungen von unten durch den Glasträger hindurch ausgeführt. Vorläufige Ergebnisse zeigen einen exponentiellen Abfall der Fluoreszenzintensität des immobilisierten Perylenfarbstoffes an bestrahlten  $\text{TiO}_2$ -Partikeln.

Weitere Experimente mit anderen Partikeln ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{ZnO}$ , atmosphärischen Proben) als Funktion der relativen Feuchte und Bestrahlungsstärke sind in Bearbeitung.

(M. Lackhoff)

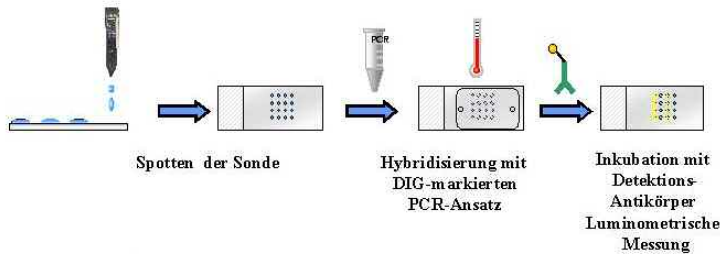


## 1.3 Bioanalytik 1

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

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft

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



Das Fernziel des Forschungsvorhabens ist die Etablierung weitgehend automatisierter und miniaturisierter Schnellhybridisierungsverfahren sowie umfassender Nukleinsäuresonden- bzw. Primersätze, die in Kombination prozeßbegleitend schnell und routinemäßig eine gegebene biologische Abwasserreinigungsanlage signifikant beschreibende Populations- und Aktivitätsanalysen ermöglichen. Im Berichtszeitraum wurden reverse Hybridisierungsverfahren im Mikrotiterplatten-

format etabliert, optimiert und evaluiert. Dabei lag ein Schwerpunkt bei umfangreichen Untersuchungen hinsichtlich geeigneter Materialien und experimenteller Vorgehensweisen, ein weiterer in der Entwicklung, Evaluierung und Etablierung brauchbarer Nukleinsäuresonden-sätze. Die grundsätzlichen Probleme der reversen Hybridisierung im Mikrotiterplattenformat konnten gelöst und die Anwendbarkeit des Verfahrens für umfassende (zunächst noch qualitative) Biodiversitätsanalysen an originärem Probenmaterial gezeigt werden. Für die Automatisierung sind Vereinfachungen (z.B. Reduzierung der Schritte) erforderlich. Hinsichtlich taxonspezifischer Quantifizierung von rRNA oder mRNA wurde erste Erfolge bei kompetitiver Versuchsführung erzielt. Um Verbesserungen zu erreichen, müssen in der Zukunft alternative Versuchsprotokolle geprüft werden. Erste erfolgreiche Versuche zur Miniaturisierung des Verfahrens in Richtung DNA-Chip bedürfen der Fortführung.

(M. Schedl)

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

Förderung: Europäische Union

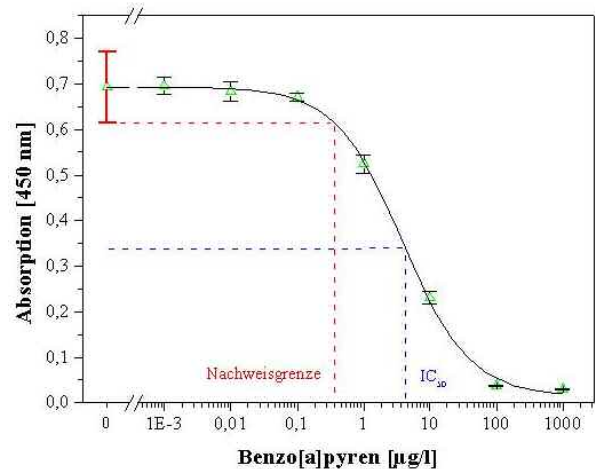
Kooperation: Institut Pasteur (Paris), Medizinische Universität Pecs, Akademie der Wissenschaften der Republik Tschechien (Prag)

Das Ziel des Vorhabens besteht letztendlich darin, sowohl die Aerosolprobenahme als auch den Nachweis von Pollen und chemischen Verbindungen zu kombinieren und zu automatisieren, um möglichst früh regulatorische Maßnahmen einleiten zu können. Dabei sollen immunologische Analysemethoden zum Einsatz kommen. Aerosolproben werden an den Standorten der Projektteilnehmer (Paris, München, Prag und Pecs) gesammelt. Organische Verbindungen sowie Aero-Allergene werden extrahiert und mittels chromatographischer und elektrophoretischer Methoden wird eine Charakterisierung und Reinigung der chemischen Inhaltsstoffe durchgeführt. Am Institut für Wasserchemie der TU München wurde schwerpunktmäßig die Entwicklung eines Immunoassays (ELISA) mit möglichst hoher Selektivität für Benzo(a)pyren in Angriff genommen. Nach der Synthese der Immunogene und Coating-Antigene wurden sowohl polyklonale (Pab) als auch monoklonale (Mab) Antikörper hergestellt.

Der bisher beste Mab wurde in Kooperation mit EXBIO (Prag) erhalten (Testmittelpunkt  $4 \mu\text{g/l}$ , Nachweisgrenze  $0,3 \mu\text{g/l}$ ). Neben Benzo(a)pyren (100 %) werden v.a. Indeno(1,2,3-c,d)pyren (63 %), Fluoranthen (60 %), Benzo(e)pyren (55 %), Pyren (47 %), Benzo(a)anthracen 44 %) und Chrysen (42 %) erkannt. Organische Lösungsmittel werden generell bis zu einer Absolutkonzentration von 10 % (entspricht einer Lösungsmittelkonzentration in der Probe von 30 %) im ELISA toleriert. Als stark interferierende Probeninhaltsstoffe wurden Salze identifiziert (bereits 0,5 % NaCl in der Probe). Gegenwärtig wird die Anwendung des ELISA auf Aerosolextrakte geprüft. Zur Methodvalidierung wird parallel die Analytik mittels HPLC durchgeführt.

Darüber hinaus wurde auch eine Fluoreszenzmarkierung des monoklonalen Antikörpers und erste Versuche zur direkten Detektion (Fluorescence Imaging mit Laser Scanning Raman Mikroskop) von Benzo(a)pyren auf Aerosol-Partikeln durchgeführt.

(T. Scharnweber)

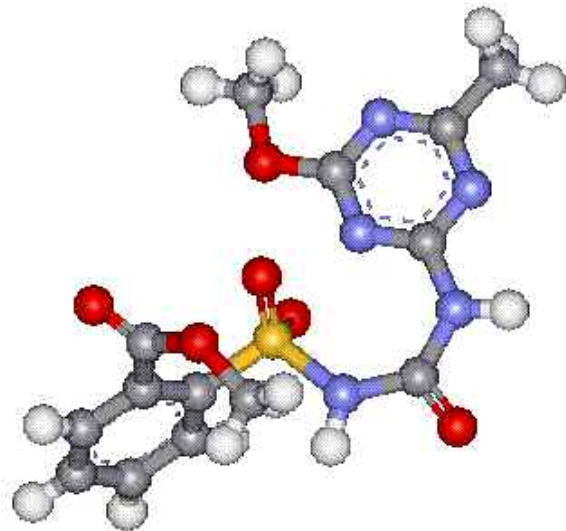


### 1.3.3 Herstellung und Charakterisierung von molekular geprägten Polymeren (MIPs) für Sulfonylharnstoff-Herbizide am Beispiel von Metsulfuron-methyl

*Förderung: Alexander von Humboldt-Stiftung*

Molekular geprägte Polymere (MIPs) erregen zunehmende Aufmerksamkeit. Die Technik ist eine interessante Alternative für die Herstellung und den Einsatz von Antikörpern gegen niedermolekulare chemische Verbindungen. MIPs wurden bisher vor allem für Pharmaka und Pestizide synthetisiert. In der Arbeitsgruppe werden seit einiger Zeit Anstrengungen unternommen „künstliche Antikörper“ für Sulfonylharnstoff-Herbizide herzustellen. Diesbezügliche Aktivitäten konnten im Berichtszeitraum mit Unterstützung der AvH-Stiftung intensiviert werden. Die zahlreichen Variablen des Herstellungsprozesses erfordern ein systematisches Herangehen, um die optimalen Synthesebedingungen (wie z.B. die Wahl des Porogens, des funktionellen Monomers, des Crosslinkers, des Initiators, der Polymerisation, der Extraktion des Templats u.a.) zu finden. Nach unseren bisherigen Erfahrungen werden die Anforderungen, v.a. was den Zeitfaktor betrifft, gegenwärtig vielfach unterschätzt.

(Dr. Q.-Z. Zhu)



## 1.4 Bioanalytik 2

### 1.4.1 Entwicklung von schnellen immunologischen und massenspektrometrischen Methoden zur Kontrolle von cyanobakteriellen Toxinen in Trink- und Oberflächenwasser

Förderung: BMBF

Kooperation: AWQC Adelaide, Australien (Prof. Bursill)

Cyanobakterien (bekannt auch als Blaualgen) sind weltweit verbreitete Mikroorganismen, die sowohl in Salz- als auch in Süßwasser vorkommen. Einige Arten produzieren Toxine, die eine Gefahr für die menschliche Gesundheit darstellen können, wenn sie in Trinkwasserspeichern oder Badeseen freigesetzt werden.

Microcystine zählen zu den akut hepatotoxischen cyanobakteriellen Toxinen. Dabei handelt es sich um cyclische Heptapeptide (MW 800–1100), die aus drei D-Aminosäuren, zwei variablen L-Aminosäuren und zwei ungewöhnlichen Aminosäuren (N-Methyldehydroalanin und 3-Amino-9-methoxy-10-phenyl-2,6,8-trimethyldeca-4,6-diensäure, Adda) bestehen. Ihre toxische Wirkung wird unter anderem auf die Inhibition von Proteinphosphatasen, wichtigen Enzymen der Zellregulation zurückgeführt. Außerdem gelten die Microcystine auch als Tumorpromotoren. Microcystin-LR, eines der weitverbreitetsten Microcystine, weist einen  $LD_{50}$  von  $50 \mu\text{g}/\text{kg}$  (Maus, i.p.) auf. Die Weltgesundheitsorganisation hat deshalb einen Richtwert von  $1 \mu\text{g}/\text{L}$  für Microcystin-LR in Trinkwasser vorgegeben.



Da bisher über 50 Microcystin-Varianten bekannt sind und nur sehr wenige davon kommerziell erhältlich sind, stellt die Analytik von Microcystinen eine besondere Herausforderung dar. Sie muß schnell und empfindlich sein und muß sicherstellen, daß auch bisher unbekannt Microcystine erfaßt werden. Deshalb werden im Rahmen dieses Projektes immunologische Tests, Anreicherungs- und Chromatographieverfahren mit massenspektrometrischer und/oder immunologischer Detektion entwickelt. Für die immunologischen Methoden wurde im vergangenen Jahr ein monoklonaler Microcystin-LR-Antikörper hergestellt und charakterisiert. Dazu wurde Microcystin-LR so an ein Trägerprotein (kationisiertes Ovalbumin) gekoppelt, daß alle geladenen funktionellen Gruppen am Microcystin erhalten bleiben und eine optimale Erkennung durch den Antikörper gewährleistet wird. Der neue monoklonale Antikörper ist hochaffin gegenüber Microcystin-LR (Testmittelpunkt:  $40 \text{ ng}/\text{L}$  bzw.  $40 \text{ pmol}/\text{L}$ ). Das Erkennungsmuster des Antikörpers zeigt eine hohe Selektivität bezüglich aller Microcystin-Varianten, die ein Arginin in Position 4 enthalten. Alle bisher untersuchten Varianten, die diese Aminosäure enthalten, werden mit gleicher Sensitivität erkannt, während die anderen (z.B. Microcystin-LA) stark diskriminiert werden (Kreuzreaktion  $< 0,01 \%$ ). An der Entwicklung weiterer Microcystin-Antikörper, insbesondere eines Breitband-Microcystin-Antikörpers, wird gearbeitet.

Im Sommer des Jahres 2000 wurden mit dem neu entwickelten Immunoassay Wasserproben aus bayerischen Seen auf Microcystine untersucht. In einigen der Seen, wie beispielsweise dem Klostersee bei Ebersberg, konnten eindeutig Microcystine nachgewiesen werden. Mittels LC-MS konnte zusätzlich geklärt werden, um welche Microcystine es sich handelt.

Weitere geplante Anwendungen des neuen Antikörpers sind die Entwicklung einer Immunitäts-Extraktion und die Routine-Anwendung als immunologischer Detektor für die HPLC.

(A. Zeck, I. Schaupt)

## 1.4.2 Entwicklung eines Glufosinat-Immunoassays

*Förderung: Aventis*

Durch den vermehrten Einsatz des Herbizides Glufosinat wird die Entwicklung nachweisstarker Immunoassays z.B. zur Überprüfung der Einhaltung der Trinkwasserverordnung immer dringlicher. Die dafür benötigten hochaffinen Antikörper konnten mit den bisher eingesetzten Verfahren jedoch noch nicht erhalten werden. Deshalb werden im Rahmen einer Industrie-Kooperation neue Wege der Antikörperentwicklung besprochen.

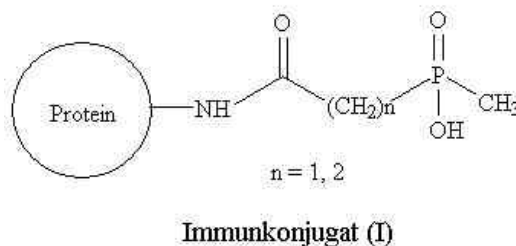
Zur Entwicklung von monoklonalen Antikörpern, die neben Glufosinat auch die Metaboliten erkennen, bietet sich die Immunisierung mit einem Immunkonjugat an, welches nur die gemeinsame Methylphosphingruppe enthält (I). Eine entsprechende Immunisierung wurde an sieben Mäusen durchgeführt. Die Seren enthielten jedoch nur unspezifische Antikörper, die neben Methylphosphingruppen auch die strukturell ähnlichen Carboxylgruppen erkennen.

Zur Verhinderung der Kreuzreaktion mit Carboxylgruppen wurde daraufhin ein Immunkonjugat synthetisiert, dessen Carrierproteinoberfläche modifiziert ist. Bei der Immunantwort werden so keine B-Lymphocyten zur Antikörperproduktion stimuliert, deren Rezeptoren die Oberfläche des Carrierproteins und damit Carboxylgruppen erkennen. Die Immunisierung mit diesem neuen Immunogen läuft.

Ein weiterer Ansatz zur Entwicklung eines Glufosinat-Immunoassays geht von der Annahme aus, daß die Antikörper/Glufosinat-Wechselwirkungen aufgrund der geringen bindungsfähigen Oberfläche des Analyt-Moleküls nur zu wenig affinen Antikörpern führen kann. Deshalb sollte eine Immunisierung gegen höhermolekulare und somit höheraffine Glufosinat-Derivate durchgeführt werden.

Durch diese Vorgehensweise konnten bereits N-Acetyl-Glufosinat-Antikörper im Mäuseserum mit einer Affinitätskonstanten von ca. 3.600 erzeugt werden.

Daher sollte eine Immunisierung mit einem sterisch anspruchsvolleren Hapten zu wesentlich höheren Affinitätskonstanten führen. Weiterhin kann die aus früheren Arbeiten bekannte gute Immunogenität von Nitroaromaten genutzt werden, indem mit Nitrophenyl-Derivaten des Glufosinats immunisiert wird. Die dazu notwendigen aufwendigen organischen Synthesen stehen kurz vor dem Abschluß. (M. Diemer, C. Wersching)



## 1.4.3 Von der Mikrotiterplatte auf den Chip: Anwendung des PASA-Systems in der Allergiediagnostik

*Förderung: Technische Universität München*

*Kooperation: Klinik für Dermatologie und Allergologie am Biederstein, München (Prof. Ring)*

Die Bestimmung des Gesamt- und des allergenspezifischen IgE-Gehaltes im Patientenserum sind Bestandteile der klinischen Allergiediagnostik und werden zum jetzigen Zeitpunkt noch konventionell in Mikrotiterplatten durchgeführt. Neben der Verkleinerung handelsüblicher Mikrotiterplatten in Kombination mit computergesteuerten Robotersystemen, die die Platten automatisch abarbeiten und vermessen, stellt die Übertragung des Mikrotiterplattensystems auf eine plane Oberfläche eine Alternative dar.

Die Reagenzien werden dabei mittels unterschiedlicher Spottingtechnologien (contact/non-contact-Systeme) als winzig kleine Tröpfchen auf eine modifizierte Oberfläche aufgebracht. Wir setzen hierfür ein „noncontact“-Piezopumpensystem ein. In Kombination mit einer geeigneten Durchflußkammer und optischen Ausleseverfahren (CCD-Kamera) erhält man das sogenannte PASA-System (Paralleler Affinitätssensor-Array), mit dem man mehrere allergenspe-

zifische Antikörper des Patientenserums in einer Messung bestimmen kann. Bei kommerziell erhältlichen Allergenlösungen handelt es sich um Proteinmischungen, die durch Extraktion in einem entsprechenden Puffer aus den jeweiligen getrockneten Pollenbestandteilen gewonnen werden. Die Extrakte enthalten neben den allergenauslösenden Proteinen auch nichtallergene Proteinbestandteile und Makromoleküle. Eine gelchromatographische Aufreinigung eines Birkenpollenextraktes über eine PD-10-Säule mit anschließender Proteinbestimmung in den aufgesammelten Fraktionen mit Bicinchonnic Acid zeigt neben dem Proteinpeak noch einen zweiten breiteren Peak, der kleineren Molekulargewichten zuzuordnen ist.

Diese Fraktionen liefern kein Signal im Sandwich-ELISA auf das Birkenpollenhauptallergen Bet v1. Die Immobilisierungsrate der Allergenextrakte auf mit 3-GOPS-modifizierten Glasträgern hängt somit vom Reinheitsgrad und der Proteinkonzentration im Extrakt, also vom Gesamtprotein/Allergenkomponentenverhältnis, ab. Da es sich bei Extrakten um verderbliches biologisches Material handelt, werden zu den Lösungen noch Stabilisatoren (Azid, Glycerin, Phenol) zugesetzt. Für eine Ankopplung an modifizierte Oberflächen ist es daher erforderlich, die Allergenextrakte gegen Wasser/PBS zu dialysieren und anschließend aufzukonzentrieren. Extrakte variieren abhängig von der Qualität der eingesetzten Pollen zudem in Menge und Zusammensetzung der Allergenbestandteile und können zudem noch durch andere äußere Allergenquellen verunreinigt sein. Reines rekombinantes Bet v1 kann sowohl adsorptiv als auch kovalent auf unterschiedlich modifizierte Glasträger und auch auf poröse Medien (Nitrozellulosemembranen) immobilisiert werden. Hingegen hat es sich gezeigt, daß die Immobilisierung von Birkenpollen- und anderen Extrakten vom Reinheitsgrad des Extraktes (Herstellungsverfahren/spätere Aufreinigung) und der Anzahl/Konzentration an Zusätzen abhängig ist. Die Abbildung zeigt eine CCD-Aufnahme von Allergenen durch on-chip Biotinylierung (v.l.n.r. BSA, Birke, Spitzwegerich, Lieschgras, Beifuß, Wiesenfuchsschwanz).

Für die Zukunft wäre es daher sinnvoll rekombinant hergestellte Allergene einzusetzen, da diese besser standardisierbar sind und eine kontrolliertere Anknüpfung an Oberflächen erlauben. Durch Fortschritte im Bereich der Herstellung rekombinanter Allergenbestandteile könnte in Zukunft eine gezieltere Diagnose und somit eine zielgerechtere Behandlung erfolgen.

(B. Fall)





## 1.5 Laserspektroskopie

### 1.5.1 Untersuchungen zum Biofouling bei Ultrafiltrationen mittels der AF<sup>4</sup>

Förderung: BMBF

Kooperation: Arbeitsbereich Röntgenphysik, Universität Göttingen (Dr. Thieme)

Biofouling bezeichnet das Auftreten von unerwünschten Biofilmen in technischen Prozessen. Biofilme entstehen an allen Grenzflächen von Wasser. Sie werden von Mikroorganismen gebildet und bestehen zum größten Teil aus Wasser. Ein weiterer wesentlicher Bestandteil sind die von Mikroorganismen gebildeten extrazellulären polymeren Substanzen.

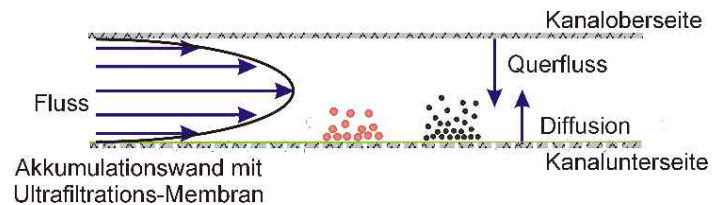
Biofilme können in der Membrantechnik auf der Trennschicht eine Sekundärmembran bilden. Ihr Reibungs- und Filterwiderstand erhöht die Energiekosten und verschlechtert die Permeatausbeute und -qualität.

Um den Einfluss von auf den Membranfiltern haftenden Biofilmen auf die Filtration zu untersuchen, werden in einer Durchflussapparatur Membranfilter mit Biofilm belegt. Nach Ausbau des Filters aus der Durchflussapparatur wird eine Filtration mit einem Kolloidgemisch in einer UF-Anlage durchgeführt. Anschließend erfolgt eine Charakterisierung/Quantifizierung des Filtrates mittels der AF<sup>4</sup>.

Die Asymmetrische Fluss-Feldflussfraktionierung (AF<sup>4</sup>) ist eine chromatographie-ähnliche Trenntechnik zur Fraktionierung und Größenbestimmung von Partikeln in wässrigen Medien. Der Trennbereich liegt im Größenbereich zwischen wenigen Nanometern (1 nm) und einigen Mikrometern (100  $\mu\text{m}$ ). Die Trennung erfolgt in einem Fließkanal mit 300 mm Länge, 250  $\mu\text{m}$  Höhe und 10 mm Breite. Aufgrund der geringen Fließkanalhöhe bildet sich eine laminare Strömung mit parabolischem Profil aus. Orthogonal zu dieser Strömung wird die eigentliche Trennkraft angelegt, bei der Fluss-Feldflussfraktionierung ist dies eine zusätzliche Strömung. Der Querfluss bewirkt eine Konzentrationsanreicherung der Probe in Richtung der Akkumulationswand. Als Gegenkraft wirkt eine Rückdiffusion, die im stationären Zustand zu einer exponentiellen Abnahme der Konzentration mit zunehmendem Abstand von der Akkumulationswand führt.

In Abhängigkeit von ihrem Diffusionskoeffizienten diffundieren kleine Teilchen weiter in den Kanal zurück als größere Teilchen. Kleinere Analyten liegen damit im Bereich von schnelleren Strömungslinien als größere und werden dadurch im normalen Trennmodus zuerst eluiert. Um den Einfluss von auf den Membranfiltern haftenden Biofilmen auf die Filtration zu bestimmen, werden für jeden mit Biofilm belegten Filter drei AF<sup>4</sup>-Fraktionierungen durchgeführt: Zuerst die Messung der unfiltrierten Probe, dann der normal filtrierten Kolloidmischung und anschließend der durch eine mit Biofilm belegte Membran filtrierten Mischung. Aus dem Verhältnis der Peakflächen der Fraktogramme ergibt sich die Wiederfindung nach der Filtration für jede Standardgröße.

(S. Hegendorf)



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

Förderung: BMBF

Kooperation: LaVision, Göttingen

Die Fluoreszenzspektroskopie ist eine empfindliche Methode zur Bestimmung anthropogener Schadstoffe, wie z. B. polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffe (PAK) oder Mineralölprodukte (MKW), in der Umwelt. Die PAK stehen aufgrund ihrer Kanzerogenität, die MKW durch die ständig steigende Zahl der Boden- und Wasserverunreinigung durch diese Substanzklasse, im Zentrum der aktuellen Diskussion. Mit der Novellierung des Bundesbodenschutzgesetzes (BBodSchG) im März 1999 werden wesentlich höhere Anforderungen an die chemische Analytik gestellt. Ein weiteres Einsatzgebiet des entwickelten Meßsystems ist die on-line Beprobung von Benzo[a]pyren tragender Aerosolströme, die besonders im Bereich der Rußanalytik wertvolle Informationen bereitstellt.

Aus diesem Grund 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 simul-



tan bis zu 30 verschiedene, kohärente Anregungswellenlängen zwischen 240 nm und 500 nm mit Pulsenergien zwischen 100  $\mu$ J und 4 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. Für die Beobachtungen in der Gasphase wurde eine Meßzelle konstruiert, die vom Aerosol durchströmt wird. Hier sind Anregungs- und Detektionsfaser senkrecht zueinander positioniert.

Die erzielten Nachweisgrenzen in wässriger Lösung liegen für verschiedene PAK im ng/l-Bereich, im Boden im Bereich von einigen mg/kg Bodentrockenmasse, in der Gasphase bei einigen ng/m<sup>3</sup>. Öle lassen sich mit dieser Methode durch computergestützte Mustererkennung nach ihrer Herkunft klassifizieren und mit hoher Empfindlichkeit im Boden detektieren. Zur Datenverarbeitung und -analyse wurden multidimensionale chemometrische Methoden, wie z. B. PARAFAC und Multi-way-PCA, an diese Fragestellung adaptiert. Diese Meßmethode erfüllt alle Anforderungen an Nachweisstärke, Empfindlichkeit und Reproduzierbarkeit die der Gesetzgeber mit der Trinkwasserverordnung (TVO) und dem BBodSchG an die Analytik stellt.

Desweiteren wurde das System zur Untersuchung von Mineralien eingesetzt. Dabei konnte gezeigt werden, daß die Fluoreszenzspektroskopie sinnvoll zur schnellen qualitativen und semiquantitativen Beurteilung von Scheelit-Kristallen geeignet ist. Weiter Experimente zeigten, daß es durch das faseroptische Konzept möglich ist, Tieftemperaturspektren bei 77 K von interessanten Analyten zu erhalten. Setzt man hier wässrige PAK-Lösungen ein, so sinkt die Nachweisgrenze weiter auf einige fg/l.

(R. Düsing)

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

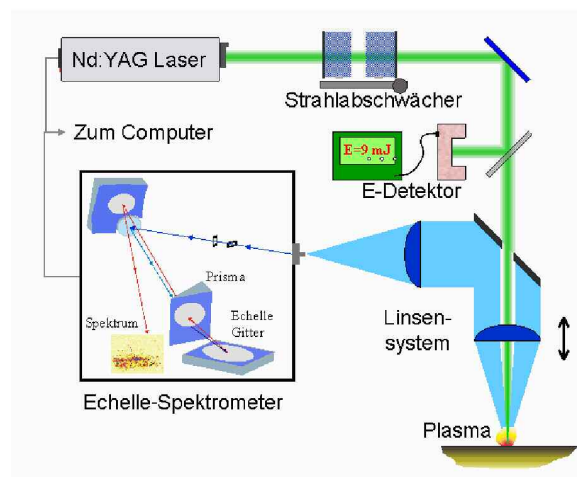
Förderung: BayFORREST

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-Charakterisierung von Kunststoffrecyclaten aus Elektronikschrott. Diese Prozesskontrolle ist notwendig für eine Qualitätssicherung der Recyclate und zur Überwachung ihres Schwermetallgehaltes, der gesetzlich limitiert ist. Für den Bereich industrieller Kunststoffabfälle existiert zur Zeit kein etabliertes On-line Verfahren. Der größte Teil der Recyclate wird daher nicht stofflich wiederverwertet, sondern deponiert oder energetisch verwertet.

Für LIPS-Untersuchungen (s. Abb.) wird ein intensiver, gepulster Laserstrahl auf die Probe fokussiert, so daß von der Oberfläche Materie verdampft und im entstandenen Plasma atomisiert und ionisiert wird. Nach ca. 1  $\mu$ s kann durch wellenlängenselektive und zeitaufgelöste Beobachtung der Emissionslinien eine Bestimmung der elementaren Zusammensetzung der Probe erfolgen. Die Methode vereint Aufschluß und Analyse, und erlaubt die Untersuchung beliebiger Proben mit wenig Probenvorbereitung. Eine Multielementanalytik wird durch den Einsatz eines hochauflösenden Echelle-Spektrometers erreicht (200–780 nm). Die Daten sind sofort in digitaler Form zur Prozesskontrolle verfügbar.

Die Arbeiten umfassen die Analyse von Zusätzen in typischen Thermoplasten (z.B. ABS, PS, PPO). Für deren metallische Komponenten (Pb, Cd, Cr, Ti, Sb, Zn, Al, Ba), sowie Halogene aus Flammschutzmitteln (z.B. Br) wurde eine referenzanalytische Methode etabliert und validiert. Sie beruht auf dem Lösen der Kunststoffe in geeigneten organischen Lösungsmitteln und Untersuchung der Elementzusammensetzung durch Totalreflektierende Röntgenfluoreszenzanalyse (TRFA). LIPS-Messungen an 100 zufällig ausgewählten Realproben (Kunststoffrecyclaten der Elektronikbranche) haben das Potential der Methode für die gesetzten Ziele bestätigt. Für alle Metalle wurden lineare Kalibriergeraden mit ausreichenden Nachweisgrenzen (ca. 100 ppm) erhalten. Interferenzen wurden durch Normierungsmethoden beseitigt. Die on-line Tauglichkeit des Systems wurde durch das Monitoring des Verarbeitungsprozesses von Kunststoffen während einer Messkampagne an einem Doppelschneckenextruder demonstriert. Dabei konnte die Veränderung der Additivgehalte der extrudierten Fraktionen sehr gut on-line mit dem LIPS-System erkannt werden. Mit bereits charakterisierten Proben wurde außerdem eine vor-Ort-Kalibrierung durchgeführt, um die Messwerte zu quantifizieren. Durch



Umsatz der Daten innerhalb einer ebenfalls on-line fähigen Software zur Prozeßsteuerung ist so eine direkte Ausschleusung von belastetem Material möglich.  
(H. Fink)

#### 1.5.4 On-line Analytik von Biofilmen mittels tiefenaufgelöster Photoakustischer Spektroskopie (PAS)

Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft

Unter einem Biofilm versteht man die Ansammlung von Mikroorganismenzellen an einer Oberfläche, die in eine Matrix aus extrazellulären polymeren Substanzen eingebettet (EPS) sind. Wechselwirkungen zwischen den EPS (Wasserstoffbrückenbindungen, van-der-Waals- und elektrostatische Wechselwirkungen) bestimmen die Stabilität des Biofilms. Biofilme sind in der Natur weit verbreitet (Boden, Gewässer) und werden im Rahmen der biologischen Abwasserreinigung zum Abbau organischer Verunreinigungen eingesetzt. Parameter, die zur Prozessoptimierung überwacht werden müssen, sind Schichtdicke, Wachstum und Stabilität bzw. Flockenabriss des Biofilms.

Photoakustische Spektroskopie basiert auf der Absorption elektromagnetischer Strahlung in einer Probe. Bei der Absorption kurzer Laserpulse durch einen Analyten führen strahlungslose Relaxationsprozesse zu einer Erwärmung der Probenmatrix, die sich infolgedessen ausdehnt. Die sich dadurch ausbildende Druckwelle kann mittels eines piezoelektrischen Schallwandlers detektiert und durch ein Oszilloskop zeitaufgelöst aufgezeichnet werden. Durch Auswertung der Signalamplituden lassen sich Absorptionskoeffizienten und daraus Konzentrationen bestimmen. Durch Inversion des Signalverlaufs sind Tiefenprofile der Absorption zugänglich.

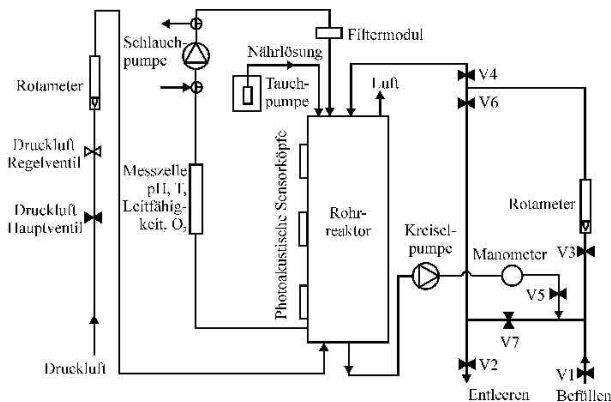
Im Rahmen des bearbeiteten Projektes wird ein Nd:YAG-Laser als Strahlungsquelle eingesetzt, wobei die Laserpulse faseroptisch zu den Sensorköpfen übertragen werden. Auf dem Gebiet der Biofilmanalytik lassen sich durch Absorptionsmessungen im sichtbaren Spektralbereich Zu- und Abnahme der Biomasse verfolgen, sowie deren Verteilung über die Tiefe abschätzen.

Ein Fließkanal und ein Rohrreaktor (Höhe 1 m, Volumen 18 L) wurden konstruiert, die sich als Biofilm-Reaktoren betreiben lassen. Die Abbildung gibt die Rohrreaktoranlage wieder. Der mit einer Kreiselpumpe betriebene Reaktorkreislauf dient der Durchmischung des Nährmediums im Reaktor. Der Volumenstrom im Reaktorkreislauf liegt bei 100 bis 200 L/h, der Druck in den Rohrleitungen beträgt etwa 2 bar. Für Experimente, bei denen geringere Volumenströme und Drücke benötigt werden, ist ein zweiter mit einer Schlauchpumpe betriebener Kreislauf in die Anlage integriert.

An der Schlauchpumpe lassen sich Volumenströme von 2,5 mL/min bis 2,5 L/min einstellen. In diesen Kreislauf lässt sich der Fließkanal einbauen und auf diese Weise mit Biofilm belegen. In einem Filtermodul lassen sich Biofilmproben auf Filtern abscheiden. Um aerobe Bedingungen im Reaktor zu erzielen, wird der Anlage Druckluft aus der Hausleitung zugeführt. In den Fließkanal und den Rohrreaktor lassen sich jeweils drei photoakustische Sensorköpfe integrieren.

Im Rahmen des Projektes wird der Einfluss von Prozessparametern (pH-Wert, Ionenstärke, Strömungsbedingungen, Zusammensetzung des Nährmediums und des Abwassers) auf Schichtdicke, Architektur (Tiefenprofile) und Stabilität (Flockenabriss) des Biofilms untersucht.

(T. Schmid)



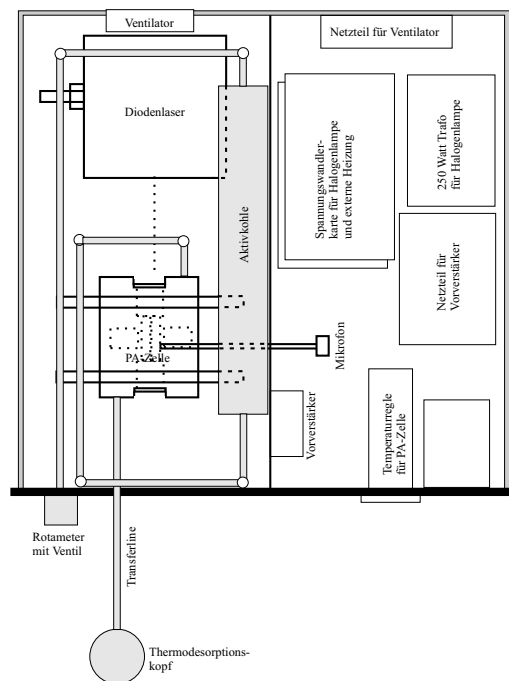
### 1.5.5 Thermodesorption und Photoakustische Spektroskopie zur Schnelldetektion von Pentachlorphenol auf Holzoberflächen

Förderung: Bayer. Staatsministerium für Landesentwicklung und Umweltfragen

Pentachlorphenol (PCP) fand zwischen den fünfziger und achtziger Jahren als Fungizid breite Anwendung im Holzschutz. Obwohl seine Verwendung in den meisten Industrieländern heutzutage verboten ist, finden sich immer noch hohe Konzentrationen in Bauholz, Möbeln und Abfallholz. PCP ist kanzerogen und in hohen Konzentrationen für den Menschen akut toxisch. Die Art der Wiederverwendung bzw. der Verwertung von Altholz hängt von dem Grad der PCP-Kontamination ab, der durch quantitative Analysen ermittelt werden muß. Da konventionelle Analysemethoden jedoch zeitaufwendig und kostenintensiv sind, ist die Entwicklung eines Schnellanalysegeräts von PCP notwendig.

In diesem Projekt soll ein Sensorsystem entwickelt werden, mit dessen Hilfe eine schnelle Detektion von Pentachlorphenol erfolgen kann. Im ersten Projektjahr wurde das Probenahmeverfahren und die Detektionsmethode von PCP anhand eines Laborprototypen untersucht. Zur Probenahme des PCP wurde ein Thermodesorptionskopf entwickelt, mit dessen Hilfe eine Probenoberfläche erwärmt werden kann, um den Analyten in die Gasphase zu überführen. Zur Detektion des Analyten in der Gasphase wurde eine beheizbare photoakustische Meßzelle (PA-Zelle) konstruiert und gebaut. Im zweiten Projektjahr wurde der bereits vorhandene Laboraufbau des photoakustischen PCP-Sensors durch verschiedene Neuerungen modifiziert und verbessert. So konnte das Desorptionsprofil von PCP durch Verwendung einer externen Heizung um Desorptionskopf und Verbindungsleitung zur PA-Zelle (Transferline), die zusammen die Probenahmeeinheit darstellen, verbessert werden. Eine schnellere Desorption der Analyten von der Oberfläche verbessert das Signal-Rausch-Verhältnis und ermöglicht eine niedrigere Nachweisgrenze. Für Holzoberflächen konnte eine Nachweisgrenze für PCP von  $10 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  erreicht werden. Die Nachweisgrenze für eine matrixfreie Oberfläche liegt derzeit bei einer Oberflächenkontamination von  $3.3 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  PCP. Ein Beheizen der Transferline ermöglicht zusätzlich eine Verlängerung des Abstandes von Thermodesorptionskopf zur PA-Zelle, was ein Messen großflächiger Stückhölzer ermöglicht. Ein Einfluß unterschiedlicher Wassergehalte der Holzproben konnte experimentell ausgeschlossen werden. Um einen Transport des Meßsystems zu ermöglichen, wurden Meßzelle und Thermodesorptionskopf in einen mobilen Aufbau integriert. Grundvoraussetzung hierfür waren nicht nur weitgehende Modifikationen des elektronischen Steuersystems, sondern auch die Erstellung einer entsprechenden Software mit benutzerfreundlicher, intuitiv verständlicher Benutzeroberfläche. Sie erlaubt die Ansteuerung aller Komponenten und eine Echtzeitdarstellung aller relevanten Steuer- und Meßparameter.

(H. Beck, Z. Bozoki)



---

### 1.5.6 Mikroanalyse mit der laserinduzierten Plasmaspektroskopie (LIPS) und einem VUV-optimierten Echelle-Spektrographen

*Förderung: Deutsche Forschungsgemeinschaft*

*Kooperation: ISAS Berlin*

Ziel des Antrags ist der Einsatz der laserinduzierten Plasmaspektroskopie (LIPS) zur quantitativen orts- und tiefenaufgelösten Mikroanalyse mit einem neu zu entwickelnden VUV-Echelle-Spektrographen. Dazu wird ein intensiver, gepulster Nd:YAG-Laser 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 und inversen Bremsstrahlung kann typischerweise nach einer Mikrosekunde durch eine wellenlängenselektive und zeitaufgelöste Beobachtung der charakteristischen Emissionslinien die Identifikation und Quantifizierung der elementaren Zusammensetzung erfolgen. Mit einer entsprechenden Strahlformung und Abbildung erlaubt LIPS eine schnelle elementanalytische Kartierung von Oberflächen ohne aufwendige Probenvorbereitung mit einer lateralen Auflösung von 3–10  $\mu\text{m}$ . Durch die Verwendung einer UV-Wellenlänge ( $\lambda = 266 \text{ nm}$ ) zur Ablation können Fraktionierungseffekte für Festkörper minimiert werden, so daß eine quantitative Analyse möglich wird. Durch eine Analyse der Spektren von einzelnen Pulsen kann eine Ortsauflösung mit einer entsprechenden Tiefenauflösung kombiniert werden. Die Verwendung eines Echelle-Spektrographen gestattet eine umfassende qualitative und quantitative multivariate Analyse von einzelnen Pulsen mit hoher spektraler Auflösung ( $\lambda/d\lambda > 10000$ ) über einen Spektralbereich von 150 nm. Für den zu konzipierenden Echelle-Spektrographen wird ein Arbeitsbereich von 150–300 nm angestrebt, so daß erstmals eine Multielement-VUV-Emissionsspektroskopie mit Laserplasmen für Nichtmetalle (S, P, N, O, C, As) oder metallische Elemente (Hg, Zn) möglich wird. Durch eine Verbesserung der Transmission des Spektrographen im Bereich 200–220 nm ist zusätzlich auch eine signifikante Steigerung der Nachweisgrenzen für Elemente wie z.B. Zn, Cd oder Ga mit intensiven Linien in diesem Bereich zu erwarten. Erste Anwendungen werden sich besonders auf geochemische und werkstoffwissenschaftliche Fragestellungen konzentrieren.

*(I. Radivojevic)*



## 1.6 Aerosolforschung

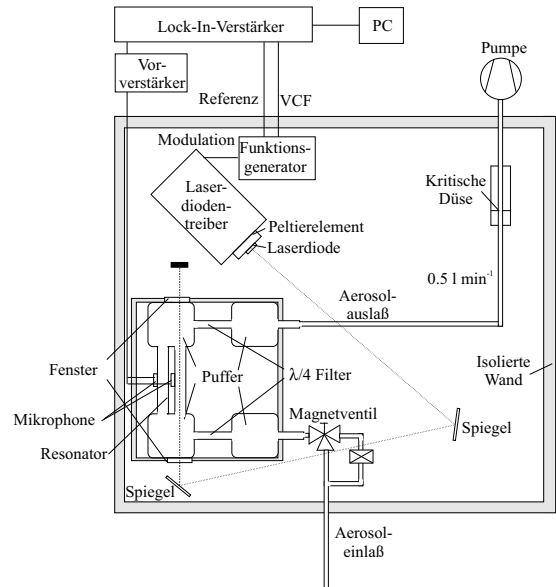
### 1.6.1 Entwicklung eines photoakustischen Sensorsystems zur Messung von Rußaerosolen in der Atmosphäre

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 deutlich weniger als  $1 \mu\text{g}/\text{m}^3$  schwarzen Kohlenstoffs, ein mobiler Aufbau mit sofortiger Meßwerterfassung und Auswertung (on-site) und eine hohe Zeitauflösung. 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 hohe Selektivität resultiert aus der Wahl einer 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 bildet die neu entwickelte (longitudinale) photoakustische Resonanzzelle, die sich durch ein kleines Volumen, eine hohe Empfindlichkeit und eine gute Zeitauflösung auszeichnet. Der modifizierte Sensor wurde mit künstlich erzeugtem Rußaerosol kalibriert und hinsichtlich Nachweisgrenze, Zeitauflösung, Querempfindlichkeit und Stabilität charakterisiert. Bei einer Zeitauflösung im Bereich von wenigen Minuten läßt sich eine Nachweisgrenze von ca.  $150 \text{ ng Ruß pro m}^3$  erreichen. Eine Zeitauflösung von wenigen Sekunden ist ebenfalls möglich, wobei sich die Nachweisgrenze dann dementsprechend verschlechtert ( $0,5 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ), was für dynamische Messungen (z.B. Abgasmessungen) aber mehr als ausreichend ist.

Querempfindlichkeiten zu anderen in der Atmosphäre vorkommenden Stoffen, wie etwa Kochsalz- oder Ammoniumsulfatpartikel,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{O}_3$ , Huminsäuren, Eisenoxid oder Sauerstoff, konnten bei atmosphärisch relevanten Konzentrationen nicht beobachtet werden. Lediglich Wasserdampf absorbiert bei einer Anregungswelle von 680 nm genügend Licht, 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. Bei der Bestimmung von Rußaerosolen mit Partikeldurchmessern von weniger 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 vergesellschaftet sind. Die Bestimmung des Rußgehaltes in Mischpartikeln ( $> 1 \mu\text{m}$ ) stellt kein Problem dar.

Darüber hinaus wurde der Sensor in mehreren Messkampagnen hinsichtlich seiner Tauglichkeit als Immissionsmessgerät überprüft. In Referenz zu der thermischen Kohlenstoffbestimmung gemäß VDI 2465, Blatt 1, wurde der massenspezifische Absorptionskoeffizient von schwarzem Kohlenstoff in der Atmosphäre zu  $6,3 \pm 1,0 \text{ m}^2/\text{g}$  bestimmt. Der Rußsensor erwies sich als geeignetes Instrument zur zeitaufgelösten Überwachung von atmosphärischen Rußmassenkonzentrationen.

(L. Krämer, Z. Bozoki)

### 1.6.2 Kohlenstoffhaltige Aerosolkomponenten: Chemische Zusammensetzung, Reaktivität und Hygroskopizität

*Förderung: BMBF*

Aerosole spielen eine zentrale Rolle im Bereich der Atmosphären- und Klimaforschung, und kohlenstoffhaltige Komponenten haben wesentlichen Anteil an der Zusammensetzung der Aerosolpartikel. Ihre chemische Zusammensetzung, ihr Reaktionsverhalten und ihre Hygroskopizität bzw. Wechselwirkung mit Wasserdampf sind bisher jedoch nur in geringem Ausmaß bekannt und sollen in diesem Projekt durch Feldmessungen und Laborexperimente untersucht werden. Dabei soll zur Klärung folgender Schlüsselfragen beigetragen werden:

- Was sind die molekularen Strukturen des großen Anteils chemisch unidentifizierter bzw. unzureichend charakterisierter kohlenstoffhaltiger Aerosolkomponenten? Insbesondere, wie groß sind die Anteile von semivolatilen aromatischen Verbindungen, Biopolymeren und ihren Abbauprodukten, huminstoffartigen und graphitähnlichen Substanzen?
- Welche charakteristischen Eigenschaften bzw. Tracer sind am besten dazu geeignet, kohlenstoffhaltige Aerosolkomponenten, speziell die zuvor genannten Substanzklassen, verschiedenen natürlichen und anthropogenen Quellen zuzuordnen?
- Wie wird die Zusammensetzung kohlenstoffhaltiger Aerosolkomponenten durch chemische Alterung verändert? Insbesondere, was sind die typischen Produkte und reaktionskinetischen Parameter für den Abbau der zuvor genannten Substanzklassen durch oxidierende Spurengase, und wie können diese Prozesse in atmosphärischen Modellen effizient beschrieben werden?
- Kann die chemische Alterung atmosphärischer Aerosolpartikel zu einer signifikanten in-situ Bildung oder zu einem Abbau lichtabsorbierender kohlenstoffhaltiger Komponenten führen (z.B. huminstoffartige Substanzen), wodurch die optischen Absorptionskoeffizienten verändert und der direkte Strahlungseffekt von Aerosolen auf das Klima beeinflusst werden könnten?
- Auf welche Weise und in welchem Ausmaß beeinflussen kohlenstoffhaltige Aerosolkomponenten die Hygroskopizität atmosphärischer Aerosolpartikel, ihre Aktivierung als Wolkenkondensationskerne und damit den indirekten Strahlungseffekt von Aerosolen auf das Klima? Wie werden diese Effekte durch chemische Alterung beeinflusst, und wie können sie in atmosphärischen Modellen effizient beschrieben werden?

Neue analytische Methoden werden speziell für semivolatile aromatische Verbindungen (polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe und partiell oxidierte Derivate), Makromoleküle (Biopolymere, huminstoffartige Substanzen) und schwarzen Kohlenstoff (graphitähnliche und organische Komponenten) entwickelt und gemeinsam mit etablierten analytischen

Techniken eingesetzt. Feldmesskampagnen an verschiedenen Standorten sind in Zusammenarbeit mit anderen Forschungsgruppen geplant.

In Reaktorexperimenten mit Modellaerosolen und Filterproben werden der Abbau von semivolatilen aromatischen Verbindungen und Biopolymeren durch oxidierende Spurengase, mögliche Wege zur Bildung huminstoffartiger Substanzen und die chemische Alterung von Verbrennungsaerosolen charakterisiert. Der Einfluss kohlenstoffhaltiger Aerosolkomponenten auf die Hygroskopizität bzw. das Feuchtwachstum atmosphärischer Partikel wird mit Modellaerosolen aus repräsentativen Gemischen organischer Verbindungen, graphitähnlicher Substanzen und anorganischer Salze oder Säuren untersucht.

Dieses Projekt wird seit Juli 2000 als Nachwuchsgruppe im Rahmen des BMBF-Schwerpunkts AFO 2000 gefördert (Förderzeitraum: 5 Jahre). In der Entwicklung von Methoden zur Bestimmung von Proteinen und Kohlenhydraten in atmosphärischen Aerosolproben, sowie in der Untersuchung der Reaktivität von Proteinen und semivolatilen aromatischen Verbindungen gegenüber oxidierenden Spurengasen wurden in den ersten Monaten bereits zahlreiche Ergebnisse erzielt. Da diese jedoch größtenteils noch vorläufigen Charakter haben und derzeit in weiterer Ausarbeitung sind, werden sie erst zu einem späteren Zeitpunkt im einzelnen präsentiert.

(U. Pöschl, T. Franze, S. Kamm, T. Letzel, A. Sadezky, C. Schauer, A. Zerrath)

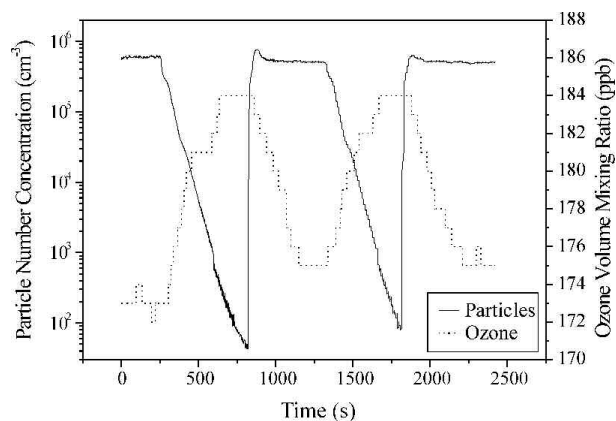
### 1.6.3 Prozessstudien zum Einfluss von Spurengasen auf die physikalischen und chemischen Eigenschaften ausgewählter Modellaerosole

Förderung: BMBF

Kooperation: Institut für Analytische Chemie, TU Wien

Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAH) 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 PAH und deren Abbauprodukte ein hohes kanzerogenes, mutagenes und allergenes Potential aufweisen, sind sie von großer lufthygienischer Bedeutung. Zudem können polyzyklische aromatische Verbindungen (PAC = PAH + 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 direkten und indirekten klimatischen Effekte beeinflussen. Die Reaktivität der meisten PAC 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.

Im Jahr 2000 wurde in diesem Projekt speziell der Abbau von Benzo[a]pyren (BaP; PAH aus fünf kondensierten C6-Ringen) auf Funkengeneratorrußaerosolpartikeln durch O<sub>3</sub> untersucht. Dabei wurden verschiedene bislang unbekannte Produkte mit unterschiedlichen funktionellen Gruppen identifiziert (Carboxyl, Carbonyl, Hydroxy etc.), und eine neue, universell einsetzbare Analysenmethode für partiell oxidierte aromatische Kohlenwasserstoffe entwickelt, die auf der Kopplung eines flüssigchromatographischen Trennverfahrens mit massenspektrometrischer Detektion beruht (LC-APCI-MS mit phenylmodifizierten Umkehrphasen).



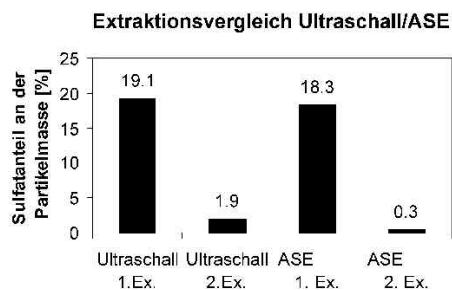
Im Rahmen reaktionskinetischer Untersuchungen wurde festgestellt, dass Ozon und Wasserdampf an der Oberfläche von Rußpartikeln reversibel und kompetitiv adsorbiert werden, wobei für Funkengeneratormußaerosole mit und ohne BaP-Beschichtung kein signifikanter Unterschied festzustellen war. Die Adsorptionsgleichgewichtskonstanten und mittleren Oberflächenverweilzeiten, welche für  $O_3$  und  $H_2O$  bestimmt wurden, sollten daher auch auf andere Graphen- bzw. PAH-ähnliche Oberflächen anwendbar sein. Die Reaktion von adsorbiertem Ozon mit BaP-Molekülen auf der Partikeloberfläche lässt sich durch ein einfaches Zeitgesetz zweiter Ordnung beschreiben, und durch Extrapolation auf umweltrelevante Ozon- und Wasserdampfkonzentrationen ergeben sich BaP-Halbwertszeiten von nur wenigen Minuten bis zu etwa einer Stunde. An der Oberfläche von gealterten atmosphärischen Rußpartikeln ist daher kein Benzo[a]pyren zu erwarten, was jedoch nicht für das Partikelinnere gilt, wo BaP vor direktem Zutritt von Ozon aus der Gasphase geschützt ist.  
(T. Letzel, C. Schauer)

#### 1.6.4 Physikalisch-chemische Untersuchungen zur Verminderung der Rußpartikelemission von Dieselmotoren

Förderung: MAN Nutzfahrzeuge AG, Nürnberg

Rußpartikel sind ein wesentlicher Bestandteil der ultrafeinen und feinen Partikelfraktion im Abgas von Dieselmotoren. Nach aktuellem Wissensstand sind sie toxikologisch bedenklich, weshalb die gesetzlichen Abgasnormen in den kommenden Jahren eine drastische Herabsetzung der Partikelemissionsobergrenzen vorsehen (EURO-4 und 5).

In diesem Projekt werden in Kooperation mit der Firma MAN (TVD-N) verschiedene technische Verfahren zur Abscheidung und oxidativen Entfernung von Rußpartikeln im Abgas von Dieselmotoren untersucht. Zur Klärung der physikalisch-chemischen Grundlagen (Aerosoldynamik, Reaktionskinetik) und der praktischen Anwendbarkeit dieser Verfahren sollen leistungsfähige physikalische und chemische Messmethoden eingesetzt werden. Im einzelnen wurde bisher mit der Planung und Durchführung folgender Arbeitspunkte begonnen:



- Test und Optimierung der Filterprobenahme von Dieselmotoren zur gravimetrischen und chemischen Analyse
- Analyse der chemischen Zusammensetzung von Dieselmotorenpartikeln: Sulfatgehalt (Extraktion und Analyse mittels IC); Elementarzusammensetzung des Asche-Anteils (Aufschluss und Analyse mittels TXRF, ICP-MS, ICP-OES)
- On-line Charakterisierung der Anzahlkonzentration und der Größenverteilung von Aerosolpartikeln im Motorenabgas vor und nach einem GD-Kat-System an Dieselmotoren (Messung mittels SMPS und CNC)

Geeignete Instrumentierung zur physikalischen Aerosolcharakterisierung wurde beschafft und in Betrieb genommen, und der Einsatz am Motorenprüfstand wird derzeit vorbereitet. Sulfatextraktionen erfolgten in früheren Untersuchungen meist im Ultraschallbad bzw. durch Soxhletextraktion mit reinem Wasser oder mit einem Isopropanol-Wassergemisch. Aus der Literatur sind jedoch kaum klare Angaben zur Extraktionseffizienz und zur Notwendigkeit des Einsatzes von iso-Propanol verfügbar. In jedem Fall erfordern die zuvor genannten Methoden einen hohen zeitlichen Aufwand. Mittels ASE (Accelerated Solvent Extraktion) kann die Extraktionsdauer auf etwa 30 min und darunter reduziert werden. Bei diesem Verfahren wird die Extraktion bei hohen Drücken (1–150 bar) und Temperaturen (bis 200°C) durchgeführt.

---

In dieser Arbeit werden die genannten Extraktionsmethoden parallel auf vergleichbare Filterproben von Dieselabgaspartikeln angewandt und miteinander verglichen. Dabei erfolgt die Bestimmung des gelösten Sulfatanteils jeweils mittels Ionenchromatographie, wodurch neben Sulfat auch weitere ionische Partikelkomponenten bestimmt werden können (z.B. Nitrat). Erste Versuche ergaben eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse, die durch Ultraschallextraktion und ASE mit reinem Wasser erhalten wurden. Wiederholte Extraktionen der Filterproben durch ASE zeigten bereits nach dem ersten Schritt ein Absinken des Sulfatanteils unter den Blindwert, was auf quantitative Extraktion schließen lässt. Weitere Experimente zur Optimierung und zum Vergleich verschiedener Methoden der Extraktion und Ionenchromatographie sind derzeit im Gange, und eine abschließende Bewertung ist geplant.  
(D. Rothe, S. Kamm)

---

## 2 Publikationen

### 2.1 Originalarbeiten

- T. Baumann, S. Haaszio, R. Niessner: Applications of a Laser-induced Fluorescence Spectroscopy Sensor in Aquatic Systems. *Water Res.* 34 (2000) 1318-1326.
- T. Baumann, R. Petsch, R. Niessner: Direct 3-D Measurement of the Flow-velocity in Porous Media Using Magnetic Resonance Tomography. *Environ. Sci. Technol.* 34 (2000) 4242-4248.
- T. Baumann, N. Huber, S. Müller, R. Nießner: Quantifizierung des kolloidalen Transportpfades in Labor- und Feldexperimenten. *Vom Wasser* 95 (2000) 151-166.
- H. Beck, Z. Bozoki, R. Niessner: Fast Screening Tool for Pentachlorophenol-contaminated Wood Based on Thermodesorption Sampling and Photoacoustic Detection. *Anal. Chem.* 72 (2000) 2171-2176.
- T. Behr, C. Koob, M. Schedl, A. Mehlen, H. Meider, D. Knopp, E. Frahm, U. Obst, K. Schleifer, R. Niessner, W. Ludwig: A Nested Array of rRNA Targeted Probes for the Detection and Identification of Enterococci by Reverse Hybridization. *J. System. Appl. Microbiol.* 23 (2000) 563-572.
- C. Brühl, U. Pöschl, P.J. Crutzen, B. Steil: Acetone and PAN in the Upper Troposphere: Impact on Ozone Production from Aircraft Emissions. *Atmospheric Environment* 34 (2000) 3931-3938.
- P.J. Crutzen, J. Williams, U. Pöschl, A. Hansel, R. Holzinger, C. Warneke, W. Lindinger, J. Lelieveld: High Spatial and Temporal Resolution Measurements of Primary Organics and Their Oxidation Products Over the Tropical Forests of Surinam. *Atmospheric Environment* 34 (2000) 1161-1165.
- A. Exner, M. Theisen, U. Panne, R. Niessner: Combination of Asymmetric Flow Field Flow Fractionation (AF4) and Total-reflection X-ray Fluorescence Analysis for Determination of Heavy Metals Associated with Colloidal Humic Substances. *Fres. J. Anal. Chem.* 366 (2000) 254-259.
- H. Fink, U. Panne, M. Theisen, R. Niessner, T. Probst, X. Lin: Determination of Metal Additives and Bromine in Recycled Thermoplasts from Electronic Waste by TXRF Analysis. *Fres. J. Anal. Chem.* 368 (2000) 235-239.
- N. Huber, T. Baumann, R. Niessner: Assessment of Colloid Filtration in Natural Porous Media by Filtration Theory. *Environ. Sci. Technol.* 34 (2000) 3774-3779.
- L. Kasarian, R. Niessner: A New Optical Fiber Multiplexer for Distortion-free Light Transfer in Multichannel Fiber Optic Sensor Systems. *Sensors & Actuators A* 84 (2000) 250-258.
- R. Klein, T. Baumann, R. Nießner: Wärmeentwicklung der MVA-Schlackedeponie Großmehring/Ingolstadt. *Entsorgungspraxis* 18 (2000) 26-30.
- D. Knopp: Antikörper – Biomoleküle zur selektiven Anreicherung organischer Analyten. *Nachrichten aus der Chemie* 48 (2000) 1056-1061.
- D. Knopp, M. Seifert, V. Väänänen, R. Niessner: Determination of PAHs in Contaminated Water and Soil Samples with Immunological and Chromatographic Methods. *Environ. Sci. Technol.* 34 (2000) 2035-2041.
- L. Krämer, U. Pöschl, R. Niessner: Microstructural Rearrangement of Sodium Chloride Condensation Aerosol Particles on Interaction with Water Vapor. *J. Aerosol Sci.* 31 (2000) 673-685.



- 
- R. Nießner: Chemische Sensoren in der Wassertechnologie. Nachrichten aus Chemie, Technik & Laboratorium 48 (2000) 1225-1230.
- R. Nießner, J. Broekart, J. Einax, H. Emons, W. Engewald, K. Heumann, D. Kirstein, D. Knopp, R. Krska, U. Panne, U. Pyell, R. Salzer, F. Scheller, N. Trautmann, M. Weller. Trendbericht Analytische Chemie. Nachrichten aus der Chemie 48 (2000) 348-354 und 468-472.
- R. Neuhauser, U. Panne, R. Niessner: Utilization of Fibre-optics for Remote Sensing by Laser-induced Plasma Spectroscopy (LIPS). Appl. Spectrosc. 54 (2000) 923-927.
- U. Panne, A. Knöller, R. Kotzick, R. Niessner: On-line and In-situ Detection of PAHs on Aerosols via Thermodesorption and Laser-induced Fluorescence Spectroscopy. Fres. J. Anal. Chem. 366 (2000) 408-414.
- U. Panne, C. Dicke, R. Niessner, G. Bidoglio: A Fibre-optical Sensor System for Time-resolved Excitation-Emission (TEE) Fluorescence Spectroscopy. Appl. Spectrosc. 54 (2000) 536-547.
- U. Pöschl, M.G. Lawrence, R. von Kuhlmann, P.J. Crutzen: Comment on „Methane Photooxidation in the Atmosphere: Contrast Between Two Methods of Analysis“. Journal of Geophysical Research – Atmospheres 105 (2000) 1431-1433.
- U. Pöschl, N. Poisson, R. von Kuhlmann, P.J. Crutzen: Development and Intercomparison of Condensed Isoprene Oxidation Mechanisms for Global Atmospheric Modeling. Journal of Atmospheric Chemistry 37 (2000) 29-52.
- H. Prestel, A. Gahr, R. Niessner: Detection of Heavy Metals in Water by Fluorescence Spectroscopy: On the Way to a Suitable Sensor System. Fres. J. Anal. Chem. 368 (2000) 182-191.
- T. Scharnweber, D. Knopp, R. Niessner: Application of Sol-Gel Glass Immunoabsorbers for the Enrichment of PAHs from Wet Precipitation. Field Analytical Chemistry and Technology 4 (2000) 43-52.
- M. Schedl, T. Behr, W. Ludwig, K. Schleifer, R. Niessner, D. Knopp: Optimization of Reverse Hybridization in Microplates Coated with rRNA Targeted Specific Probes. J. System. Appl. Microbiol. 23 (2000) 573-581.
- C. Speiser, T. Baumann, R. Niessner: Morphological Characterization of Non-metallic Hydrate Phases Formed in Alteration Processes of Deposited Municipal Solid Waste Incinerator Bottom Ash. Environ. Sci. Technol. 34 (2000) 5030-5037.
- B. Spitzer, M. Cichna, P. Markl, G. Sontag, D. Knopp, R. Niessner: Determination of 1-Nitropyrene in Spices after Selective Enrichment by a Sol-Gel Generated Immunoaffinity Column. Journal of Chromatography A 880 (2000) 113-120.
- M. G. Weller: Immunochromatographic Techniques – A Critical Review. Fres. J. Anal. Chem. 366 (2000) 635-735.
- J. Zhang, H. Prestel, A. Gahr, R. Nießner: Development of a FIA System for the Measurement of Heavy Metals Using a Fibre Optic Chemical Sensor Based on Laser-induced Fluorescence. SPIE Proceedings 4077 (2000) 32-39.

## **2.2 Tagungsbeiträge**

### **2.2.1 Vorträge auf Einladung**

- R. Nießner: Analytische Chemie im Jahr 2000+. Schering AG, 12.1.2000, Berlin

- 
- R. Nießner: Neuere Methoden zur Charakterisierung von Schadstoffen im Bereich der Hydrosphäre. Bodenkundliches Seminar der TU München-Weihenstephan, 14.1.2000
- R. Nießner: Nichtchromatographische Screeningverfahren. 17. Forum Analytik, 19.1.2000, Wien
- R. Nießner: Neue Aufgaben und Möglichkeiten der optischen Chemosensorik in der Umwelt- und Prozesstechnik. Deutsche Agenda "Optische Technologien für das 21. Jahrhundert", 14./15.2.2000, Stuttgart
- R. Nießner: Neuere analytisch-chemische Verfahren (Probenahme und Nachweis) zur Charakterisierung von Verbrennungsaerosolen. Institut für biologische Forschung GmbH, 16.2.2000, Köln
- R. Nießner: Biofilme und Hydrokolloide: Diffizile Grenzflächen in analytisch-chemischer Hinsicht. Graduiertenkolleg 366 an der Universität Karlsruhe, 5.4.2000, Karlsruhe
- R. Nießner: Non-chromatographic Screening Techniques. Analytica 2000, 12.4.2000, München
- R. Nießner: Neuere analytisch-chemische Verfahren (Probenahme und Nachweis) zur Charakterisierung von Verbrennungsaerosolen. Kolloquium in Organischer Chemie der Universität Basel, 28.4.2000, Basel
- R. Nießner: Development of a FIA System for the Measurement of Heavy Metals Using a Fibre Optic Chemical Sensor Based on Laser-induced Fluorescence. Intern. Conf. on Sensors and Control Techniques (ICSC 2000), 19.6.2000, Wuhan
- R. Nießner: New Chemo-analytical Techniques (Sampling and Determination) for Characterization of Combustion Aerosols. Wuhan University of Hydraulic and Electrical Engineering, 20.6.2000, Wuhan
- R. Nießner: Immunoserologische Nachweisverfahren. Institut für Physikalische und Chemische Analytik, GKSS Geesthacht, 10.8.2000, Geesthacht
- R. Nießner: Development of a Multianalyte Bio-Chip for Water Monitoring. 8. Deutsch-Japanischer Workshop auf dem Gebiet der Wassertechnologie, 11.9.2000, Dresden
- R. Nießner: New Analytical Techniques within Water Treatment Procedures. 3rd Intern. Colloquium on Process Related Environmental Analytical Chemistry, 6.10.2000, Leipzig
- R. Nießner: Aerosol Chemistry: Where are Needs and Possibilities? TU Wien, 9.10.2000, Wien
- R. Nießner: Lasergestützte Analytik an diffizilen Matrices (Kolloide, Biofilm, Schmelze, Abfall und Sickerwasser. Institut für Physikalische Chemie der LMU, 15.11.00, München
- R. Nießner: Intelligente Screeningtechniken - Neue Möglichkeiten in der Prozessanalytik. Kongreß „Bayern Innovativ“, 7.12.00, Augsburg
- T. Baumann: Application of Magnetic Resonance Imaging to Parametrize Colloidal Transport in Porous Media. Institute for Hydromechanics, ETH Zürich, 11.5.2000, Zürich.
- T. Baumann: Anwendung der Kernspintomographie zur Darstellung dynamischer Prozesse in der Hydrogeologie. VDI/VDE Arbeitskreis Bio- und Umwelttechnik, 26.6.2000, München.
- T. Baumann: Direkte Messung der Fließgeschwindigkeit in porösen Medien mittels Magnetresonanztomographie. Institut für Angewandte Physikalische Chemie ICG-7, Forschungszentrum Jülich, 31.8.2000, Jülich.

- 
- T. Baumann: Parameterization of Colloidal Transport Phenomena in Subsurface Environments. Drexel University, School of Environmental Science, Engineering, and Policy, 8.12.2000, Philadelphia, U.S.A.
- T. Baumann: Insights Into Colloidal Transport Phenomena Using Magnetic Resonance Imaging. Department of Engineering and Environmental Science, University of Illinois, 12.12.2000, Urbana/Champaign, U.S.A.
- D. Knopp: Preparation and Characterization of Sol-Gel Immunoabsorbents Based on Antipolycyclic Aromatic Hydrocarbon Antibodies Using Pulsed Field Gradient NMR Diffusometry and Ultra-Small Angle X-ray Scattering. 2000 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2000), 14.12.-19.12.2000, Honolulu, Hawaii, U.S.A.
- R. Klein: Schlackedeponie – Ein Inertstoffsystem? Institut für Petrographie der LMU, 14.7.2000, München.
- U. Panne: More Lasers, More Fun - Laser Spektroskopie in der Analytik, Universität Mainz, 4.12.2000, Mainz.
- U. Panne: Chemische und Physikalische Charakterisierung von Hydrokolloiden, Univ. Göttingen, Institut für Roentgenphysik, 17.11.2000, Göttingen.
- M. G. Weller, Immunologische Methoden in der organischen Spurenanalytik. Technisch-Naturwissenschaftliche Fakultät der TU Graz, 10.2.2000, Graz, Österreich.
- M. G. Weller, Multianalytdetektion von spezifischem IgE in Humanserum. R-Biopharm GmbH, 3.3.2000, Darmstadt.

### 2.2.2 Vorträge

- T. Baumann, R. Petsch, R. Niessner: Flow Measurements in Porous Media Using Magnetic Resonance Tomography (MRT). EGS XXV General Assembly, 25.–29.4.2000, Nice, France.
- T. Baumann, R. Niessner: Direkte Messung der Fließgeschwindigkeit in porösen Medien mittels Magnetresonanztomographie. Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft, 29.–31.5.2000, Weimar.
- H. Fink, U. Panne, R. Niessner: On-Line Characterization of Recycled Thermoplasts from Consumer Electronics by Laser-Induced Plasma Spectroscopy (LIPS). EUROANALYSIS 2000, 3.–9.9.2000, Lisbon, Portugal.
- C. Haisch, U. Panne, S. Florek: Laser-Induced Plasma Spectroscopy (LIPS) for Environmental and Process Analysis. ASCOS 2000, 24.–28.9.2000, Rogaska Slatina, Slovenien.
- D. Knopp: Application of Biomolecules as Selective Detectors in Environmental Analytical Chemistry - The Antibody Option. CEMSA 2000 (Conference and Exhibition on Integrated Environmental Management in South Africa), 27.–29.3.2000, East London, Südafrika
- D. Knopp, M. Schedl, T. Behr, R. Niessner, K.H. Schleifer, W. Ludwig: Nukleinsäure-Mikrohybridisierung als Instrument zur bakteriologischen Wassergüteüberwachung. Jahrestagung 2000 „Umweltchemie und Ökotoxikologie - Wissenschaftliche Instrumente zur nachhaltigen Entwicklung“, 7.–10.10.2000, Bayreuth
- T. Letzel, U. Pöschl, R. Niessner: Analysis of Particle-Bound Semivolatile Aromatic Compounds. EGS XXV General Assembly, 25.–29.4.2000, Nice.

- 
- T. Letzel, U. Pöschl, R. Niessner: Analysis of Oxidized Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Adsorbed in Laboratory and Atmospheric Aerosol Samples. AAAR Conference 2000, 6.–10.11.2000, St. Louis.
- U. Panne: Multidimensionale Fluoreszenzspektroskopie mit zeitaufgelösten Anregungs-Emissionsspektren in der Umwelt- und Prozessanalytik. Chemiedozenten-Tagung 2000, 20.–22.3.2000, Regensburg.
- U. Panne: Laser Induced Breakdown Spectrometry. Short Course: From Elemental Materials Analysis to Solid-State Speciation. 27.–30.3.2000, Antwerp, Belgium.
- U. Panne, C. Haisch, H. Fink: Laser-Induced Plasma Spectroscopy – Metals in Colloids and Particles. Analytica 2000, 11.–14.4.2000, München.
- U. Panne, C. Haisch, H. Fink: Laser-Induced Plasma Spectroscopy – An emerging Tool for Environmental and Process Analysis. Analytica 2000, 11.–14.4.2000, München.
- U. Panne, H. Fink, R. Niessner: On-line-Analyse der elementaren Zusammensetzung von Rohstoffen und Arbeitsmassen. Eurosymposium Keramik, 12.–13.9.2000, Meißen.
- U. Panne, H. Fink, R. Niessner: On-Line Analysis of Thermoplasts by Laser-Induced Plasma Spectroscopy (LIPS). FACCS 2000, 24.–28.9.2000, Nashville, TN, USA.
- U. Panne, R. Düsing, R. Niessner: Time-resolved Excitation Emission (TEE) Spectra : A New Tool for Multidimensional Fluorescence Spectroscopy. FACCS 2000, 24.–28.9.2000, Nashville, TN, USA.
- U. Panne, R. E. Neuhauser, R. Niessner: On-line Monitoring of Heavy Metals in Aerosols: From Laboratory Studies to Industrial Applications. LIBS 2000, 08.–12.10.2000, Pisa, Italy.
- H. Pichler, S. Baumgartner, L. Schneider, E. Welzig, R. Krska, A. Székács, D. Knopp, R. Niessner: Chicken Egg Yolk – A Remarkable Antibody Source for the Development of Enzyme-Immunoassays. EUROANALYSIS XI, 3.–9.9.2000, Lissabon, Portugal
- U. Pöschl, T. Letzel, C. Schauer, R. Niessner: Reactivity of Polycyclic Aromatic Aerosol Components. EGS XXV General Assembly, 25.–29.4.2000, Nice.
- U. Pöschl, T. Letzel, C. Schauer, R. Niessner: Reactivity of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Adsorbed on Soot Aerosol Particles, European Aerosol Conference, 3.–8.9.2000, Dublin.
- U. Pöschl, T. Letzel, C. Schauer, R. Niessner: Polycyclic Aromatic Aerosol Components: Chemical Analysis and Heterogeneous Reactions. 7th Intern. Conference on Carbonaceous Particles in the Atmosphere, 26.–29.11.2000, San Juan.
- H. Prestel, A. Gahr, R. Niessner: Laser Induced Fluorescence Spectroscopy (LIFS) for On-line Monitoring of Heavy Metals in Water. Workshop of the Australia-Germany Alliance on Contaminated Sediments (CONSED) 26.–30.6.2000, Hamburg.
- H. Prestel, A. Gahr, R. Niessner: Development of a FIA-LIFS Sensor System for the On-line-Monitoring of Heavy Metal Ions in Surface Water. EUROANALYSIS XI, 03. bis 09.09.00, Lissabon, Portugal.
- C. Schauer, T. Letzel, U. Pöschl, R. Niessner: Reaction of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Adsorbed on Soot Aerosol Particles With Ozone. AAAR Conference 2000, 6.–10.11.2000, St. Louis.
- M. Schedl, G. Maier, S. Achatz, D. Knopp, A. Kettrup, R. Niessner: Einsatz von Sol-Gel-Glas Immunadsorbentien zur selektiven Anreicherung von PAK-Metaboliten aus Human-

---

urinproben. 10. Chromatographie-Seminar des GDCh-Arbeitskreises Chromatographie, 9.–11.1.2000, Hohenroda

- M. Schedl, T. Behr, W. Ludwig, D. Knopp, R. Niessner, K.H. Schleifer: Entwicklung und Anwendung von Mikrohybridisierungsverfahren für die Untersuchung mikrobieller Lebensgemeinschaften bei der biologischen Abwasserbehandlung. Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft, 29.–31.5.2000, Weimar
- M. Schedl, G. Maier, S. Achatz, D. Knopp, A. Kettrup, R. Niessner: Application of Immunoaffinity Chromatography Using Sol-Gel Glass Immunoabsorbents: Selective Isolation and Enrichment of Hydroxylated PAH Metabolites from Human Urine. EUROANALYSIS XI, 3.-9.9.2000, Lissabon, Portugal
- M. Schedl, G. Maier, S. Achatz, D. Knopp, A. Kettrup, R. Niessner: Application of Immunoaffinity Chromatography Using Sol-Gel Glass Immunoabsorbents: Selective Isolation and Enrichment of Hydroxylated PAH Metabolites from Human Urine. 4th Euroconference on Environmental Analytical Chemistry. 14.–19.9.2000, Visegrád, Ungarn
- M. G. Weller, P. Pfortner, E. Simon, A. Zeck, R. Niessner: Analyse gebundener Rückstände im Boden mittels immunologischer Methoden. Chemiedozententagung 2000, 20.–22.3.2000, Regensburg.
- M. G. Weller, A. J. Schütz, M. Winklmaier, R. Niessner: Die Anwendung von Biochips in der Wasseranalytik. Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft, Weimar.
- M. G. Weller, Detection of Pesticides and Allergens. Tutorial Lecture, ASCOS 2000 Optical Chemical Sensors & Biosensors, 24.-28.9.2000, Rogaska Slatina, Slovenien.
- A. Zeck, M. G. Weller, R. Niessner: Development of Immunological Methods for the Control of Algal Toxin Contamination in Drinking Water. 4th Euroconference on Environmental Analytical Chemistry, 14.–19.9.2000, Visegrád, Ungarn.
- A. Zeck, M. G. Weller, R. Niessner: Entwicklung von immunologischen und massenspektrometrischen Methoden zur Kontrolle von Algentoxin-Kontaminationen in Trink- und Oberflächenwasser, Jahrestagung 2000 der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie, 7.–10.10.2000, Bayreuth.
- A. Zeck, M. G. Weller, R. Niessner: Untersuchung strukturell verwandter Algentoxine mittels HPLC-Immunoassay und ESI/TOF, 11. Chromatographie-Seminar, 7.–9.1.2000, Hohenroda.

### 2.2.3 Poster

- T. Baumann, R. Petsch, R. Niessner: Non-Invasive Flow Measurements in Porous Media Using Magnetic Resonance Tomography. 2nd European Symposium NMR in Soil Science, 27.2.–1.3.2000, Weihenstephan.
- T. Baumann, N. Huber, S. Müller, R. Niessner: Quantifizierung des kolloidalen Transportpfades. Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft, 29.–31.5.2000, Weimar.
- T. Baumann, R. Niessner: Assessment of Colloidal Transport Phenomena Using Magnetic Resonance Imaging (MRI). AGU Fall Meeting, 15.–19.12.2000, San Francisco, U.S.A.
- H. Beck, Z. Bozoki, R. Nießner: Fast Screening of Pentachlorophenol in Wood by Thermodesorption Sampling and Photoacoustic Detection. XI. International Conference on Photoacoustic and Photothermal Phenomena, 25.–29.6.2000, Kyoto, Japan.

- 
- H. Beck, Z. Bozoki, R. Nießner: Fast Screening of Pentachlorophenol in Wood by Thermo-desorption Sampling and Photoacoustic Detection. EUROANALYSIS XI, 3.–9.9.2000, Lissabon, Portugal.
- H. Beck, Z. Bozoki, R. Nießner: Fast Screening of Chemical Compounds and Aerosols by gas phase Photoacoustic Spectroscopy. Bayern Innovativ, 7.12.2000, Augsburg
- T. Behr, A. Mehlen, W. Ludwig, M. Schedl, D. Knopp, R. Niessner, K.H. Schleifer: Detection and Identification of Enterococci by Reverse Hybridization of PCR-Amplified rDNA to an Array of Specific Probes in Microplate Formats. 1. Gemeinsamer Kongress der DGHM, ÖGHMP und VAAM, 12.3.–16.3.2000, München
- N. Escobedo Ruiz, D. Knopp, R. Niessner, D. Barbosa: Comparison Between Affinity (Immuno)Extraction and Classical Solid-Phase Extraction for Trace Level Determination of Sulfonylurea Herbicides Using Capillary Electrophoresis with UV Detection. EUROANALYSIS XI, 3.–9.9.2000, Lissabon, Portugal
- A. Exner, U. Panne, R. Niessner: Thermische-Linsen-Spektroskopie zur Detektion von Hydrokolloiden für die asymmetrischer Fluß-Feldflußfraktionierung AF<sup>4</sup>). Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft, 29.–31.5.2000, Weimar (POSTERPREIS).
- N. Huber, T. Baumann, R. Niessner: Sorption and Desorption Rates for Heavy Metals, PCP and Pyrene on Natural Sediments. EGS XXV General Assembly, 24.–29.4.2000, Nice, France.
- R. Klein, T. Baumann, R. Nießner: Exotherme Reaktionen auf der MVA-Schlackedeponie Großmehring. 9. Braunschweiger Deponieseminar, 16.–17.3.2000, Braunschweig.
- M. Lackhoff, R. Nießner: Determination of Radicals Formed by Photocatalysis on Single Particles. EC/EUROTRAC-2 Joint Workshop, 10.–13.09.2000, Lausanne.
- T. Letzel, U. Pöschl, E. Rosenberg, R. Niessner: Analysis of Semivolatile Aromatic Compounds with LC-APCI-MS. Analytica Conference 2000, 11.–14.4.2000, München.
- T. Letzel, U. Pöschl, R. Niessner: Analysis of Particle-Bound Semivolatile Aromatic Compounds in Synthetic and Real Samples, European Aerosol Conference, 3.–8.9.2000, Dublin.
- T. Letzel, U. Pöschl, E. Rosenberg, R. Niessner: Analysis of Partially Oxidized Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, EUROANALYSIS XI, Lisbon, 3.–9.9.2000, Lisbon.
- U. Panne, H. Fink, R. Niessner: On-Line Characterization of Recycled Thermoplasts from Consumer Electronics by Laser-Induced Plasma Spectroscopy (LIPS). LIBS 2000, 8.–12.10.2000, Pisa, Italy.
- U. Pöschl, T. Letzel, C. Schauer, R. Niessner: Polycyclic Aromatic Aerosol Components: Chemical Analysis and Reactivity, EUROTRAC Symposium 2000, 27.2.–1.3.2000, Garmisch-Partenkirchen.
- U. Pöschl, T. Letzel, C. Schauer, R. Niessner: The Interaction of Benzo[a]pyrene-Coated Carbon Aerosol Particles With Ozone and Water Vapor: O<sub>3</sub> and H<sub>2</sub>O Adsorption, Benzo[a]pyrene Degradation and Atmospheric Implications, EC/EUROTRAC-2 Joint Workshop, 11.–13.9.2000, Lausanne.
- H. Prestel, A. Gahr, R. Niessner: Entwicklung eines faseroptisch geführten FIA-LIFS-Sensors zur Überwachung der Schwermetallfreisetzung aus kontaminierten Sedimenten. Jahrestagung 2000 der Fachgruppe Wasserchemie, 29.–31.5.2000, Weimar.

- 
- M. Schweigkofler, R. Niessner: Evaluation of Biogas Pretreatment Installations for Their Siloxane Removing Potential. 1st Int. Symp. On Advances in Chromatographic and Electrophoretic Separations, 17.–19.4.2000, Bayreuth.
- E. Welzig, L. Schneider, S. Baumgartner, H. Pichler, R. Krska, A. Székács, D. Knopp, R. Niessner: Recent Developments on the Basis of Egg Yolk Antibodies. 4th Euroconference on Environmental Analytical Chemistry, 14.9.–19.9.2000, Visegrád, Ungarn.
- J. Zhang, H. Prestel, A. Gahr, R. Niessner: Development of a FIA System for the Measurement of Heavy Metals Using a Fibre Optic Chemical Sensor Based on Laser-induced Fluorescence. Intern. Conf. on Sensors and Control Techniques (ICSC 2000), 19.6.2000, Wuhan

#### 2.2.4 Gutachten

*Kontrollanalysen* Altdorf (Schwefel-Thermalwasser, Forschungsbohrung), Bad Brückenau, Bad Endorf, Bad Füssing, Bad Gögging, Bad Griesbach, Bad Steben, Bad Wiessee, Bad Wimpfen, Bad Windsheim, Bayreuth, Frankenbrunnen (Bad Kissingen, Bad Windsheim, Neustadt/Aisch), Gundremmingen, Garching FRM II, Hölle, Kondrau, Niederrieden, Neustätten, Sibyllenbad, Siegsdorf, Utting.

*Anerkennungsgutachten, hydrogeologische Situation (Heilwasser, Mineralwasser)*. Stadtwerke München (Loisachtal Brunnen II und IV), Frankenbrunnen Mineralbrunnen (Bad Windsheim BW 8), Bad Reichenhall, Bad Rodach, Bad Tölz (Sauersberger Jodquelle), Bad Windsheim (Thermal-Säuerling Stadt), Bad Wörishofen (Thermalwasser).

*Forschungsprojekte* Deponiesickerwasser Großmehring, Deponiesickerwasser Eberstetten, Badewasser Füssing Therme I und II.

### 2.3 Abgeschlossene Diplomarbeiten

- Dipl.-Chem. Florian Kühbeck (TUM): Pyrolyse-gekoppelte Massen- und Ionenmobilitätspektrometrie zur Schnelldetektion bakterieller Endosporen (Abgabe: 30.4.2000)
- Dipl.-Chem. Christian Schauer (LMU): Reaktionskinetische Untersuchung des Abbaus von Benzo[a]pyren auf Rußaerosolpartikeln durch Ozon (Abgabe: 30.4.2000)
- Dipl.-Ing. Dóra Kneffel (Universität Veszprém, Lehrstuhl für Umweltschutztechnik): Photoakustische Bestimmung der Massenkonzentration von partikulärem Kohlenstoff und Heterogene Kondensation von  $H_2SO_4$  und Wasserdampf auf Rußpartikeln (Abgabe: Mai 2000)
- Dipl.-Chem. Nuria Escobedo Ruiz (ERASMUS-Programm; Universität Barcelona): Comparison Between Affinity (Immuno)Extraction and Classical Solid-Phase Extraction for Trace Level Determination of Sulfonylurea Herbicides using Capillary Electrophoresis with UV Detection (Abgabe: 5.7.2000)
- Dipl.-Chem. Thomas Franze (TUM): Untersuchungen zur Nitrierung von Proteinen durch atmosphärische Spurenstoffe (Abgabe: 1.10.2000)
- Dipl.-Chem. Anja Eikenberg (Uni Stuttgart): Charakterisierung von monoklonalen Antikörpern zur Detektion von Microcystinen (Abgabe: 18.10.2000)
- Dipl.-Chem. Alexa Sadezky (LMU): Raman-Spektroskopie an graphitähnlichen Materialien (Abgabe: 9.10.2000)
- Dipl.-Chem. Axel Zerrath (TUM): Bestimmung von Cellulose und Glucose in atmosphärischen Aerosolproben (Abgabe: 18.12.2000)

---

## 2.4 Abgeschlossene Dissertationen

Dipl.-Biol. Thomas Hofer: Wirkung von partikulären Umweltnoxen auf die Immunabwehr monozytärer Zellen

Dipl.-Chem. Martin Schweigkofler: Bestimmung flüchtiger Siliziumverbindungen in Biogasen mittels Kanisterprobenahme und GC-MSD/AED-Analytik

Dipl.-Geol. Stefan Müller: Technikums- und Freilandversuche zur Charakterisierung der gelösten und kolloidgebundenen Migrationsprozesse von Kontaminanten in natürlichen Grundwassersystemen

Dipl.-Chem. Thomas Letzel: Analytik partiell oxidierter polyzyklischer aromatischer Kohlenwasserstoffe und Abbau von Benzo[a]pyren auf Rußaerosolpartikeln durch Ozon

## 2.5 Ehrungen und Preise

R. Nießner: Fresenius-Preis der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh)

M. Weller: Fachgruppenpreis der Wasserchemischen Gesellschaft in der GDCh

A. Exner: Posterpreis der Wasserchemischen Gesellschaft in der GDCh

## 2.6 Veranstaltungen/Mitorganisation

R. Nießner: 7th Intern. Conference on Carbonaceous Particles in the Atmosphere, 26.–29.11.2000, San Juan (Program Committee)

R. Nießner: Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft, 29.–31.5.2000, Weimar (Programmausschuß)

R. Nießner: Analytica 2000, 11.–14.4.2000, München (Koordinierungsgruppe)

U. Panne: LIBS 2000, 8.–12.10.2000, Pisa (Scientific Committee)



---

## 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
Chemische Charakterisierung von Umweltmatrices (Wasser)	Knopp
Chemische Charakterisierung von Umweltmatrices (Gase)	Nießner
Atmosphärenchemie und Klimaforschung	Pöschl
Methoden der Strukturaufklärung und Instrumentelle Analytik	Panne
Statistische Methoden in der Umweltanalytik	Panne
Umweltmeßtechnik mit spektroskopischen Methoden	Panne
Hydrogeologie I und II	Frisch
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
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

---

## 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, Knopp, 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

- Prof. Dr. H. Herrmann, Institut für Troposphärenforschung, Leipzig: Troposphärische Multiphasenchemie im Feld, Labor und Modellierung (19.1.2000)
- Prof. Dr. Hans Puxbaum, Institut für Analytische Chemie, TU Wien: Aerosolanalytik für die Klimaforschung, (1.2.2000)
- Prof. Dr. W. Kiefer, Institut für Physikalische Chemie, Universität Würzburg: Lineare und nichtlineare Ramanspektroskopie an einzelnen Laser-gefangenen Mikroteilchen (7.2.2000)
- Prof. Dr. Jacques Buffle, Department of Inorganic, Analytical and Applied Chemistry, University of Geneva, Switzerland: Structural Characterisation and Properties of Natural Biopolymers in the Context of Flocculation (11.2.2000)
- Dr. Klaus-Dieter Franz, Leitung Zentrale Analytik, Merck KGaA, Darmstadt: Analytik als Teil des industriellen Entwicklungs- und Wertschöpfungsprozesses (28.2.2000)
- Dr. Anne Glover and Dr. Andrew Porter, Dept. of Molecular and Cell Biology, Institute of Medical Sciences, University of Aberdeen: Recombinant Antibodies and Whole Cells as Biosensors (10.3.2000)
- Prof. Dr. Wolfgang Buchberger, Analytische Chemie, Universität Linz: Strategien zur Methodenentwicklung für die Kapillarelektrophorese und die Kopplung mit der Massenspektrometrie (2.5.2000)
- Prof. Dr. Günter Allmaier, Institut für Analytische Chemie der Universität Wien: Photonen und Sprays, die Basis der massenspektrometrischen Analyse von Biomolekülen - von Glykopeptiden bis zu intakten Viren (16.5.2000)
- Prof. Dr. Bernd Luckas, Institut für Ernährungswissenschaften, Lehrbereich Lebensmittelchemie, Friedrich-Schiller-Universität Jena: Algentoxine – Neue Strategien zur Lösung eines alten Problems (26.5.2000)
- Prof. Dr. Dipl.-Ing. Boris Mizaikoff, Institut für Analytische Chemie, Technische Universität Wien: MIR-Sensing and Molecular Recognition Schemes (9.6.2000)

- 
- Dr. Klaus Pecher, Lawrence Berkeley National Laboratory-Advanced Light Source, Berkeley/California: Scanning Transmission X-ray Microscopy (STXM) of Transition Element Precipitates – A New Technique and What We Can Learn From It (14.6.2000)
- Prof. Dr. Arne Skerra, Lehrstuhl für Biologische Chemie, TU München: Molekulare Erkennung durch Protein Design mit Antikörpern und 'Anticalinen', einer neuen Klasse von Liganden-Bindungsproteinen (5.7.2000)
- Dr. Börje Sellergren, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Johannes Gutenberg Universität Mainz: Neue Strategien und analytische Anwendungen in der Prägung von kleinen Molekülen (10.7.2000)
- Dr. Werner Lindinger, Institut für Ionenphysik der Universität Innsbruck: Volatile organische Komponenten im Bereich der Medizin, Lebensmittel- und Umweltforschung: Untersuchungen mittels Protonen-Transfer-Reaktions-Massenspektrometrie (18.7.2000)
- Prof. Dr. D.B. Dingwell, Institut für Mineralogie, Petrologie und Geochemie, LMU München: Noble Metal Solubilities in Silicate Melts: An Analytical Challenge (2.8.2000)
- Dr. Wolfgang Wilcke, Institut für Bodenkunde und Geographie, Universität Bayreuth: Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe in Böden – Gehalte, Verteilung, Reaktivität (19.9.2000)
- Dr. Nikolaus Nestle, Universität Leipzig: NMR-Methoden zur Charakterisierung von porösen Systemen (28.9.2000)
- PD Dr. C. Zander, Fachbereich Chemie-Biologie, Universität - GH Siegen: Einzelmolekül-Detektion in Lösung: Ein neues Werkzeug für die Analytische Chemie!? (17.10.2000)
- Dr. Ursula Bilitewski, Gesellschaft für Biotechnologische Forschung in Braunschweig: Optische Biosensoren zur Protein- und Genexpressionsanalytik (21.11.2000)
- Prof. Colin Self, Department of Clinical Biochemistry & Metabolic Medicine, University of Newcastle, UK: Increasing the Power of Antibodies in Immunodiagnosics (24.11.2000)
- Prof. Dr. E. James Davis, Department of Chemical Engineering, University of Washington: Studies of Aerosol Chemistry and Chemical Reactions (5.12.2000)
- Prof. Dr. Andreas Hensel, Institut für Tierhygiene und Öffentliches Veterinärwesen, Universität Leipzig: Bioaerosole - Hygienische Aspekte und aktuelle Probleme der Charakterisierung (18.12.2000)

## **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.

#### **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 (durchstimmbar mit Frequenzverdoppelung)
- 5 N<sub>2</sub>-Laser
- 8 modulierbare Diodenlaser (600-1670 nm; > 100 mW CW)
- 1 Laserdiodenarray mit 10 Dioden (0.8 μm - 1.8 μm), 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
- 1 Ionenchromatograph Dionex Bio-LC

---

#### 4.2.4 Bioanalytik-Auswertesystem

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

#### 4.2.5 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)

#### 4.2.6 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)

#### 4.2.7 Summenparameter-Meßsysteme

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

#### 4.2.8 Aerosolmeßgeräte

- 1 m<sup>3</sup>-Aerosolkammer
- 1 Aerosolströmungsreaktor
- 1 Ozon-UV-Absorptionsgasmeßsystem
- 1 Chemilumineszenz-NO/NO<sub>x</sub>-Analyser
- 2 Aerodynamische Aerosollaufzeitspektrometer (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 Schwebbett-Aerosolgenerator zur Redispersierung von Pulvern
- 1 Bürstendosierer, Erzeugung redispergierter Flugaschen-Aerosole etc.

#### 4.2.9 Dioxin-Laboratorium

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

---

### 4.3 Struktur

Leitung: o.Univ.-Prof. Dr. R. Nießner

Kompetenzbereiche	Aufgabenspektrum	AG-Leiter
Hydrogeologie	Wasserschließung, Transportvorgänge im Aquifer	Akad.-Dir. Dr. M. Baumann Wiss.Ass. Dr. T. Baumann
Hydrochemie	Charakterisierung und Technologie des Wassers	Prof. Dr. R. Nießner
Biochemische Analytik	Produktion und Nutzung hochselektiver Antikörper	AOR PD Dr.habil. D. Knopp AR Dr. M. Weller
Angewandte Spektroskopie	Laserbasierte Prozessmesstechnik	Wiss.Ang. Dr. U. Panne Wiss.Ang. Dr. C. Haisch
Chromatographie	Hochleistungstrennverfahren und Stoffnachweis	Prof. Dr. R. Nießner
Aerosolforschung	Physikalische und chemische Charakterisierung von Aerosolen (Luftstaub)	Wiss. Ang. Dr. U. Pöschl (BMBF-Nachwuchsgruppe)

Stand: Februar 2001

---

## 4.4 Mitarbeiter 2000

Univ.-Prof. Dr. Reinhard Nießner

Dr. Manfred Baumann  
Dr. Thomas Baumann  
Dr. Zoltan Bozoki (bis 5/00)  
Dr. Achim Gahr (bis 7/00)  
Dr. Monika Hamers-Schneider (ATTO-TEC)  
Dr. Stefan Kamm (ab 10/00)  
Dr. Dietmar Knopp  
Dr. Ulrich Panne  
Dr. Ulrich Pöschl  
Dr. Michael Weller

Birgit Apel  
Günter Dollinger  
Roswitha Glunz  
Irmengard Kefer  
Karin Koller  
Gisela Lang  
Joachim Langer  
Susanne Mahler  
Robert Schneider (bis 9/00)  
Christine Sternkopf  
Christa Stopp  
Sebastian Wiesemann (ab 12/00)

Hatice Hazir  
Mira Kolar

### Doktoranden

Dipl.-Chem. Harald Beck  
Dipl.-Chem. Marcus Diemer  
Dipl.-Chem. Rüdiger Düsing  
Dipl.-Chem. Andreas Exner (bis 6/00)  
Dipl.-Chem. Barbara Fall  
Dipl.-Chem. Herbert Fink  
Dipl.-Chem. Thomas Franze (ab 2/00)  
Sabine Hegendorf (ab 7/00)  
Dipl.-Ing. (Univ.) Larissa Kasarian (bis 8/00)  
Dipl.-Geol. Ralf Klein  
Dipl.-Chem. Lutz Krämer  
Dipl.-Chem. Marion Lackhoff  
Dipl.-Chem. Thomas Letzel  
Dipl.-Chem. Harald Prestel  
Dipl.-Phys. Igor Radivojevic (ab 8/00)  
Dipl.-Geol. Maik Sarnes (ab 5/00)  
Dipl.-Chem. Tim Scharnweber  
Dipl.-Chem. Christian Schauer (ab 6/00)  
Dipl.-Leb.Chem. Isabel Schaupt (ab 4/00)  
Dipl.-Chem. Matthias Schedl  
Dipl.-Chem. Thomas Schmid  
Dipl.-Chem. Martin Schweigkofler (bis 10/00)  
Dipl.-Chem. Mario Seiss  
Dipl.-Min. Claudia Speiser (bis 8/00)  
Dipl.-Chem. Carola Wersching  
Dipl.-Chem. Anne Zeck

### Externe Doktoranden

Dipl.-Biol. Thomas Hofer (GSF)  
Dipl.-Biol. Thomas Meindl (GSF)  
Dipl.-Chem. Norbert Uwe Kemnitzer (ATTO-TEC)  
Dipl.-Chem. Dieter Rothe (MAN)

### Diplomanden

Cand.geol. Marcus Bock (bis 11/00)  
Marcus Donié (ab 10/00)  
Cand.chem. Anja Eikenberg (ab 4/00)  
Cand.chem. Nuria Escobedo (bis 6/00)  
Cand.chem. Dóra Kneffel (bis 3/00)  
Cand.chem. Florian Kühbeck (bis 5/00)  
Cand.chem. Alexa Sadezky (bis 6/00)  
Cand.chem. Axel Zerrath (ab 6/00)

### Gäste und Stipendiaten

Jingdong Zhang (Wuhan University/China)  
Oriol Gibert Agullo (Uni Barcelona/Spanien)  
Dr. Qing-Zhi Zhu (Xiamen University/China)  
Michal Fisher (Technion, Haifa/Israel)  
Elvira Welzig (IFA Tulln/Austria)  
Arpad Mohacsi (JATE University Szeged/Ungarn)

### Wiss. HK

Dipl.-Biol. Iris Vomberg (bis 1/00)

### Stud. HK

York Leiterer (3/00)  
Andrea Plieninger (1-3/00)  
Simone Toelstede (2-3/00)  
Thomas Schwarz (4-6/00)  
Alexander Ruhl (5-6/00)

### Werkstudenten

Clemens Helmbrecht (8-10/00)



---

## 4.5 Externe Aufgaben Institutsangehöriger

Prof. Dr. Reinhard Nießner

Titular-Mitglied IUPAC, Kommissionen 500 und 540  
Mitglied im BayFORUV, Bereichskoordinator C  
Mitglied im BayFORREST  
Mitglied im DFG-SFB 411 „Grundlagen der aeroben biologischen Abwasserreinigung“  
Fachbeirat des Fachbereiches IV „Meßtechnik“ der VDI/DIN-Kommission Reinhaltung der Luft  
Mitglied im EERO-Sub-Committee der European Science Foundation, ESF  
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 der Wasserchemischen Gesellschaft in der GDCh  
Vorstandsmitglied Gesellschaft für Aerosolforschung GAeF  
Associated Editor „Analytical Chemistry“  
Editorial Board Member „Fresenius' Journal of Analytical Chemistry“  
Editorial Board Member „Mikrochimica Acta“  
Advisory Board Member „Fresenius' Environmental Bulletin“  
Advisory Board Member „Field Analytical Chemistry and Technology“  
Advisory Board Member „Analytical Sciences“  
Advisory Board Member „Analyst“  
Mitherausgeber „Römpf Umweltlexikon“

Dr. Manfred Baumann

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

Dr. Thomas Baumann

Mitglied im VDI/VDE Arbeitskreis „Bio- und Umwelttechnik“  
Mitglied im Arbeitskreis „Kolloide“ der Wasserchemischen Gesellschaft

PD Dr. Dietmar Knopp

Mitglied im BayFORREST  
Mitglied im DFG-SFB 411 „Grundlagen der aeroben biologischen Abwasserreinigung“  
Mitglied in der KRdL-3/7/04, „Luftgetragene Mikroorganismen und Viren“, im VDI/DIN  
Editorial Board Member „Vom Wasser“

Dr. Ulrich Pöschl

Lehrauftrag am Institut für Physikalische Chemie und Theoretische Chemie der Technischen Universität Wien

Dr. Michael Weller

Mitglied im DIN Microcystine (AK 2.12 im UAZ des DIN NAW 1.3)