

**Veröffentlichungen aus dem Technologiezentrum Wasser**  
**Band 64 – DOC-Analytik mittels 2D-Fluoreszenzspektroskopie**

# Inhaltsverzeichnis

<b>Abkürzungs- und Symbolverzeichnis</b>	<b>XI</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>XV</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>XVII</b>
<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Theoretische Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1. Optische Spektroskopie . . . . .	5
2.1.1. Absorptionsspektroskopie . . . . .	5
2.1.2. Fluoreszenzspektroskopie . . . . .	7
2.2. Größenausschlusschromatographie . . . . .	11
2.2.1. Charakterisierung und Quantifizierung . . . . .	11
2.2.2. Molmassenbestimmung . . . . .	13
2.3. Multivariate Datenanalyse . . . . .	14
2.3.1. Terminologie . . . . .	14
2.3.2. Matrixfaktorisierung . . . . .	17
2.3.3. Tensorfaktorisierung . . . . .	20
2.3.4. Ermittlung der Anzahl von Faktoren . . . . .	22
2.3.5. Kalibrierung und Validierung . . . . .	25
2.3.6. Umgang mit Streulicht . . . . .	28
<b>3. Standardisierung von Fluoreszenzmessungen</b>	<b>31</b>
3.1. Problemstellung . . . . .	31
3.2. Entwicklung einer Standardisierungsprozedur . . . . .	32
3.2.1. Aufbau eines Fluoreszenzspektrometers . . . . .	32
3.2.2. Vorschlag einer Standardisierungsprozedur . . . . .	33
3.3. Durchführung . . . . .	39
3.4. Ergebnisse und Diskussion . . . . .	40
3.4.1. Übereinstimmung der Bandenformen . . . . .	40
3.4.2. Übereinstimmung insgesamt . . . . .	43
<b>4. Huminstofffluoreszenz</b>	<b>49</b>
4.1. Stand des Wissens . . . . .	49
4.1.1. Genese und Struktur . . . . .	49
4.1.2. Optische Eigenschaften von Huminstoffen . . . . .	50
4.2. Charakterisierung und Quantifizierung . . . . .	53
4.2.1. Problemstellung . . . . .	53
4.2.2. Methodenentwicklung . . . . .	54
4.2.3. Ergebnisse und Diskussion . . . . .	70
4.3. Quenching . . . . .	77
4.3.1. Problemstellung . . . . .	77

4.3.2. Durchführung . . . . .	79
4.3.3. Ergebnisse und Diskussion . . . . .	79
<b>5. Biopolymerfluoreszenz</b>	<b>93</b>
5.1. Stand des Wissens . . . . .	93
5.1.1. Genese und Struktur . . . . .	93
5.1.2. Optische Eigenschaften von Aminosäuren . . . . .	96
5.2. Problemstellung . . . . .	98
5.3. Durchführung . . . . .	99
5.4. Ergebnisse und Diskussion . . . . .	101
5.4.1. Optische Eigenschaften . . . . .	101
5.4.2. Kalibrierung . . . . .	104
5.4.3. Quenching . . . . .	108
<b>6. Charakterisierung und Quantifizierung des natürlichen DOC</b>	<b>115</b>
6.1. Vorbemerkungen . . . . .	115
6.2. Durchführung . . . . .	117
6.2.1. Validierung . . . . .	117
6.2.2. Fallstudien . . . . .	118
6.3. Ergebnisse und Diskussion . . . . .	121
6.3.1. Validierung . . . . .	121
6.3.2. Fallstudien . . . . .	122
<b>7. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>139</b>
7.1. Zusammenfassung . . . . .	139
7.2. Ausblick . . . . .	142
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>143</b>
<b>A. Allgemein</b>	<b>153</b>
A.1. Verwendete Chemikalien . . . . .	153
A.2. Größenausschlusschromatographie . . . . .	156
A.3. Fluoreszenz- und Absorptionsmessungen . . . . .	156
A.4. Datenanalyse . . . . .	157
<b>B. Standardisierung von Fluoreszenzmessungen</b>	<b>159</b>
B.1. Durchführung . . . . .	159
B.1.1. Anregungskorrektur . . . . .	159
B.1.2. Emissionskorrektur . . . . .	160
B.1.3. Vergleichsmessungen . . . . .	160
B.2. Ergebnisse . . . . .	162
<b>C. Huminstofffluoreszenz</b>	<b>167</b>
C.1. Durchführung . . . . .	167
C.1.1. LC-DAD-FLD-OCD . . . . .	167
C.1.2. Quenchingversuche zur Huminstofffluoreszenz . . . . .	167
C.2. PARAFAC-Modelle der Huminstoffstandards . . . . .	168
C.2.1. Suwannee River Humic Acid . . . . .	169
C.2.2. Suwannee River Fulvic Acid . . . . .	169
C.2.3. Suwannee River NOM . . . . .	170

---

C.2.4. Pony Lake Fulvic Acid . . . . .	170
C.2.5. Nordic Aquatic Humic Acid . . . . .	171
C.2.6. Nordic Aquatic Fulvic Acid . . . . .	171
C.3. JNMF-Modelle der Huminstoffstandards . . . . .	172
C.4. Kalibriermodelle . . . . .	177
<b>D. Biopolymerfluoreszenz</b>	<b>179</b>
D.1. Vorversuche zur Eignung der LC-OCD als Referenzverfahren . . . . .	179
D.2. Vorversuche mit Algenkulturen . . . . .	180
D.3. PARAFAC-Modelle der Biopolymer-Standards . . . . .	182
D.3.1. Aminosäuren . . . . .	182
D.3.2. Peptide . . . . .	182
D.3.3. Proteine . . . . .	185
D.4. Kalibriermodelle . . . . .	185
D.4.1. Proteinmodell . . . . .	186
D.4.2. Peptidmodell . . . . .	186