



Kurzfassungen der Meteorologentagung DACH

DACH2022-158, 2022

<https://doi.org/10.5194/dach2022-158>

DACH2022

© Author(s) 2022. This work is distributed under the Creative Commons Attribution 4.0 License.



Ein non-target Ansatz zur Identifizierung von Komplexbildnern in atmosphärischen Aerosolen und Regenwasser

Jan Beck¹, Martin Brüggemann^{1,2}, Dominik van Pinxteren¹, and Hartmut Herrmann¹

¹Leibniz-Institute for Tropospheric Research, Atmospheric Chemistry Department, Germany (beck@tropos.de)

²Bayer AG Division CropScience, Alfred-Nobel-Str. 50, 40789, Monheim am Rhein, Germany

Atmosphärische Aerosolproben aus der Gas- und Flüssigphase bestehen aus zahlreichen organischen Substanzen. So beinhaltet sekundäres organisches Aerosol (SOA) bis zu 100 000 verschiedene organische Substanzen, welche durch Oxidation von biogenen und anthropogenen volatilen organischen Verbindungen (VOC) gebildet werden. Einige davon können zusammen mit Metallkationen von Eisen, Kupfer oder Mangan Komplexe in Aerosolpartikeln ausbilden. Solche Komplexe können photochemische Umwandlungsreaktionen auslösen und tragen zur verbesserten Löslichkeit von Metallionen in die atmosphärische Flüssigphase bei. Komplexbildner sind deswegen wichtige, aber nur schwer identifizierbare, organische Bestandteile von Aerosolpartikeln. In dieser Studie haben wir eine Flüssigkeitschromatographie mit hochauflösender Massenspektrometrie (LC/HR-MS) gekoppelt um ein Non-Target-Screening (NTS) durchzuführen, der den selektiven Nachweis von Komplexbildnern in Aerosolpartikelextrakten ermöglicht. Hierfür wurde ein T-Stück zwischen LC Auslass und der Ionenquelle eingebaut um eine Nachtrennsäulen-Komplexierung mit einer 155 μM FeCl_3 Lösung umzusetzen. Anschließend werden die erhaltenen Massenspektren auf die drei charakteristischen Eisenkomplexe $[\text{M-H}+\text{FeCl}_3]^-$, $[\text{M-2H}+\text{FeCl}_2]^-$ und $[\text{M-3H}+\text{FeCl}]^-$ untersucht, dabei betragen die Massenunterschiede ($\Delta m/z$) zwischen dem Signal des jeweiligen Komplexbildners und des Eisenkomplexes 160,8416, 124,8648 und 89,8959. In Aerosolpartikelproben aus Deutschland und China konnten bis zu 29 verschiedene Di- und Tricarbonsäuren als Komplexbildner nachgewiesen werden, selbst bei niedrigen Extrakt Konzentrationen von nur 50 nM. Ohne Nachtrennsäulen-Komplexierung mit Eisen werden noch 13 Komplexbildner identifiziert, welche durch Hintergrund Eisenspuren aus dem Analysesystem komplexiert werden. Zumindest für die am höchsten konzentrierten Komplexbildner ist der vorgeschlagene Screening-Ansatz somit auch ohne Geräteumbau anwendbar, besonders attraktiv ist dies für den Einsatz in der Routineanalytik. Neben Carbonsäuren wurden 4-Nitrophenol und 4-Nitrocatechol als weitere Komplexbildner in Regenwasserproben entdeckt, was die Anwendbarkeit der Methode auf andere Matrices und auf eine Reihe verschiedener Komplexbildner zeigt.