

Bachelorarbeit

Detektionsmethoden für gasförmige organische Verbindungen:

Ein systematischer Vergleich von FID und PID

Timo Blockhaus

Matrikelnummer: [REDACTED]

Abgabe: 26. September 2025

1. Gutachter: Prof. Dr. Carsten Frank
2. Gutachter: Henning Tammen, B. Sc.

**HOCHSCHULE FÜR ANGEWANDTE
WISSENSCHAFTEN HAMBURG**

Department Umwelttechnik
Ulmenliet 20
21033 Hamburg

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	IV
Tabellenverzeichnis	VI
Glossar	VIII
1 Einleitung	1
2 Theoretischer Hintergrund	2
2.1 Flüchtige organische Verbindungen (VOC)	2
2.1.1 Definition und Klassifikation	2
2.1.2 Quellen	2
2.1.3 Gesundheitliche und ökologische Relevanz	2
2.2 Grundlagen Flammenionisationsdetektor (FID)	3
2.2.1 Funktionsprinzip	3
2.2.2 Empfindlichkeit und Nachweisgrenzen	3
2.2.3 Selektivität und Grenzen	4
2.2.4 Anwendungsbereich	4
2.3 Grundlagen Photoionisationsdetektor (PID)	5
2.3.1 Funktionsprinzip	5
2.3.2 Empfindlichkeit und Nachweisgrenzen	6
2.3.3 Selektivität und Grenzen	6
2.3.4 Anwendungsbereich	6
2.3.5 Responsefaktoren	6
2.3.5.1 Berechnung der Response-Faktoren (RF)	8
2.4 Vergleich des FID und des PID	10
2.4.1 Technische Gegenüberstellung	10
2.4.2 Vor- und Nachteile	11
2.4.3 Einsatzfelder in der Praxis	11
2.5 Einflussgrößen und Störfaktoren	12
2.5.1 Luftfeuchtigkeit	12
2.5.2 Temperatur	12

2.5.3	Matrixeffekte (Hintergrundgase)	12
2.5.4	Kalibrierung und Drift	12
2.5.5	Standardreferenzmaterialien (SRM) und Gründe für die Nichtverwendung	13
2.6	Verwendete Substanzen	13
2.6.1	Ylang-Ylang-Öl.....	14
2.6.2	Teebaumöl	14
2.6.3	Isopropanol (70 %).....	15
2.6.4	Annahme der Ölzusammensetzungen	15
2.6.5	Surrogat-Methode	16
2.7	Alternative Messverfahren zur VOC-Analyse	19
2.7.1	Fourier-Transformations-Infrarot-Spektroskopie (FTIR / NDIR)	19
2.7.2	Gaschromatographie mit verschiedenen Detektoren (GC-FID, GC-MS, GC-IMS)	19
3	Eingesetzte Messgeräte	20
3.1	MiniRAE Lite+ (PID).....	20
3.1.1	Technische Eigenschaften.....	20
3.1.2	Anwendungsbereiche.....	20
3.1.3	Grenzen	20
3.2	iFiD Mobile (FID).....	21
3.2.1	Technische Eigenschaften.....	21
3.2.2	Anwendungsbereiche.....	21
3.2.3	Grenzen	22
4	Methodik, Versuchsaufbau und -durchführung	23
5	Messergebnisse	27
5.1.1	Ylang-Ylang-Öl Trockenbedingungen.....	27
5.1.2	Ylang-Ylang-Öl Trockenbedingungen mit R_{emp}	28
5.1.3	Ylang-Ylang-Öl Trockenbedingungen mit tabellarischem Mischungs-Responsefaktor	29
5.1.4	Ylang-Ylang-Öl Feuchtbedingungen.....	30
5.1.5	Ylang-Ylang-Öl Feuchtbedingungen mit empirischem R_{emp}	31

5.1.6	Ylang-Ylang-Öl Feuchtbedingungen mit Mix-Responsefaktor.....	32
5.2.1	Teebaumöl Trockenbedingungen	33
5.2.2	Teebaumöl Trockenbedingungen mit R_{emp}	34
5.2.3	Teebaumöl Trockenbedingungen mit Mix-Responsefaktor	35
5.2.4	Teebaumöl – Feuchtbedingungen	37
5.2.5	Teebaumöl – Feuchtbedingungen mit R_{emp}	38
5.2.6	Teebaumöl – Feuchtbedingungen mit tabellarischem Mischungs-Responsefaktor 39	
5.3.1	Isopropanol Trockenbedingungen	41
5.3.2	Isopropanol – Trockenbedingungen mit R_{emp}	42
5.3.3	Isopropanol – Trockenbedingungen mit RF_{mix}	43
5.3.4	Isopropanol – Feuchtbedingungen	44
5.3.5	Isopropanol – Feuchtbedingungen mit R_{emp}	45
5.3.6	Isopropanol – Feuchtbedingungen mit tabellarischem Responsefaktor	47
5.4.1	Ylang-Ylang-Öl – Vergleich Trocken- und Feuchtbedingungen.....	48
5.4.2	Teebaumöl – Vergleich Trocken- und Feuchtbedingungen	49
5.4.3	Isopropanol – Vergleich Trocken- und Feuchtbedingungen	51
6	Diskussion.....	53
7	Fazit	54
	Eidesstaatliche Erklärung	XII
	Literaturverzeichnis	XIII

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Schematischer Aufbau eines Flammenionisationsdetektors (FID) (Eigene Darstellung).....	3
Abbildung 2: Schematischer Aufbau eines Photoionisationsdetektor (PID) (Eigene Darstellung)	5
Abbildung 3: Versuchsaufbau der Messung.....	24
Abbildung 4: Darstellung der Messkammer	24
Abbildung 5: Darstellung der Messgeräte MiniRAE Lite+ und iFiD Mobile	25
Abbildung 6: Dokumentation der Temperatur, der Luftfeuchtigkeit und des Umgebungsdruck mit dem Testo 440	26
Abbildung 7: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit – Ylang Ylang-Öl Trocken.....	27
Abbildung 8: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Ylang Ylang-Öl Trocken mit dem R_{emp}	28
Abbildung 9: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Ylang Ylang-Öl Trocken mit R_{mix}	29
Abbildung 10: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Ylang Ylang-Öl Feucht	30
Abbildung 11: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Ylang Ylang-Öl Feucht mit dem R_{emp}	31
Abbildung 12: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Ylang Ylang-Öl Feucht mit R_{mix}	32
Abbildung 13: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit – Teebaum-Öl Trocken	33
Abbildung 14: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit – Teebaum-Öl Trocken mit dem R_{emp}	34
Abbildung 15: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Teebaum-Öl Trocken mit R_{mix}	35
Abbildung 16: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Teebaum-Öl Feucht.....	37
Abbildung 17: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Teebaum-Öl Feucht mit dem R_{emp}	38
Abbildung 18: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Teebaum-Öl Feucht mit dem R_{mix}	39
Abbildung 19: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Isopropanol Trocken.....	41
Abbildung 20: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Isopropanol Trocken dem R_{emp}	42
Abbildung 21: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Isopropanol Trocken dem R_{mix}	43

Abbildung 22: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Isopropanol mit Feuchtbedingungen.....	44
Abbildung 23: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Isopropanol mit Feuchtbedingungen mit R_{emp}	45
Abbildung 24: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Isopropanol mit Feuchtbedingungen mit R_{mix}	47
Abbildung 25: Vergleich der Trocken- und Feuchtbedingungen des Ylang Ylang-Öls	48
Abbildung 26: Vergleich der Trocken- und Feuchtbedingungen des Teebaum-Öls	49
Abbildung 27: Vergleich der Trocken- und Feuchtbedingungen von Isopropanol	51

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Gegenüberstellung der Vor- und Nachteile von FID und PID	11
Tabelle 2: Darstellung der Zusammensetzung der verwendeten Substanzen	17
Tabelle 3: Darstellung der Messergebnisse von Ylang Ylang-Öl während der Trockenbedingung.....	27
Tabelle 4: Darstellung der Messergebnisse von Ylang Ylang-Öl während der Trockenbedingung mit dem R_{emp}	28
Tabelle 5: Darstellung der Messergebnisse von Ylang Ylang-Öl während Trockenbedingung mit dem R_{mix}	29
Tabelle 6: Darstellung der Messergebnisse von Ylang Ylang-Öl während der Feuchtbedingungen.....	30
Tabelle 7: Darstellung der Messergebnisse von Ylang Ylang-Öl während der Feuchtbedingung mit dem R_{emp}	31
Tabelle 8: Darstellung der Messergebnisse von Ylang Ylang-Öl während der Feuchtbedingungen mit dem R_{mix}	32
Tabelle 9: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Trockenbedingungen.....	34
Tabelle 10: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Trockenbedingungen mit dem R_{emp}	35
Tabelle 11: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Trockenbedingungen mit dem R_{mix}	36
Tabelle 12: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Feuchtbedingungen.....	37
Tabelle 13: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Feuchtbedingung mit dem R_{emp}	38
Tabelle 14: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Feuchtbedingung mit dem R_{mix}	40
Tabelle 15: Darstellung der Messergebnisse des Isopropanols während der Trockenbedingung	41
Tabelle 16: Darstellung der Messergebnisse des Isopropanols während der Trockenbedingung mit dem R_{emp}	42
Tabelle 17: Darstellung der Messergebnisse des Isopropanols während der Trockenbedingung mit dem R_{mix}	43
Tabelle 18: Darstellung der Messergebnisse des Isopropanols während der Feuchtbedingungen.....	45

Tabelle 19: Darstellung der Messergebnisse des Isopropanols während der Feuchtbedingungen mit R_{emp}	46
Tabelle 20: Darstellung der Messergebnisse des Isopropanols während der Feuchtbedingungen mit R_{mix}	47
Tabelle 21: Darstellung der Messergebnisse des Ylang Ylang-Öls während der Feuchtigkeitsmessung	48
Tabelle 22: Darstellung der Messergebnisse des Ylang Ylang-Öls während der Trockenmessung	48
Tabelle 23: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Feuchtigkeitsmessung	50
Tabelle 24: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Trockenmessung	50
Tabelle 25: Darstellung der Messergebnisse von Isopropanol während der Feuchtigkeitsmessung	51
Tabelle 26: Darstellung der Messergebnisse von Isopropanol während der Trockenmessung	51

Glossar

AGW (Arbeitsplatzgrenzwert)

Ist von der TRGS 900 (Technische Regeln für Gefahrstoffe) ein definierter Grenzwert, der die maximal zulässige Konzentration eines Stoffes in der Luft am Arbeitsplatz beschreibt.

Ätherische Öle

Komplexe Gemische biogener VOCs, die durch Destillation oder Extraktion aus Pflanzen gewonnen werden.

Baseline-Korrektur

Verfahren zur Bereinigung von Messdaten. Vor Beginn der Exposition wird das Nullsignal (Baseline) ermittelt, das anschließend von den Messwerten abgezogen wird. Dadurch werden Messungen vergleichbarer und systematischer Fehler reduziert.

CF (Correction Factor / Korrekturfaktor)

Von Geräteherstellern (z. B. Honeywell/RAE Systems) angegebener Faktor, mit dem PID-Messwerte (Isobutylen-Äquivalente) für verschiedene Substanzen korrigiert werden.

DIN EN 12619

Europäische Norm für die kontinuierliche Messung von Gesamtkohlenwasserstoffen mit dem FID. Legt technische Anforderungen, Kalibrierverfahren und Genauigkeitskriterien fest.

Empirischer Responsefaktor (RF_{emp})

Aus Vergleichsmessungen zwischen FID und PID berechneter Korrekturfaktor. Er beschreibt, wie stark PID-Signale angepasst werden müssen, um mit FID-Ergebnissen vergleichbar zu sein.

Feuchtbedingungen

Messungen, bei denen die relative Luftfeuchtigkeit in der Messkammer gezielt erhöht wurde. Dienten zur Untersuchung des Einflusses von Wasserdampf auf FID- und PID-Signale.

FID (Flammenionisationsdetektor)

Referenzmethode in der VOC-Analytik. Arbeitet mit einer Wasserstoff-Flamme, in der Kohlenwasserstoffe ionisiert werden. Der entstehende Ionenstrom ist proportional zur Menge an Kohlenstoff.

GC-MS (Gaschromatographie-Massenspektrometrie)

Analytisches Verfahren zur Identifizierung und Quantifizierung einzelner Substanzen in komplexen Mischungen. In der Literatur werden damit typische Zusammensetzungen von ätherischen Ölen, wie Ylang-Ylang oder Teebaumöl, bestimmt.

Honeywell Response Factor Chart (RAE Systems)

Herstellerdokumentation mit tabellarischen CF-Werten für hunderte organische Substanzen. Grundlage für die Berechnung tabellarischer Mischungs-RF in dieser Arbeit.

Isobutylene

Referenzgas für PID-Kalibrierungen. Alle PID-Signale werden in „Isobutylene-Äquivalenten“ angezeigt und müssen für andere Substanzen mit CF oder RF korrigiert werden.

Isopropanol (2-Propanol)

Sekundärer Alkohol, häufig als Lösungsmittel und Desinfektionsmittel eingesetzt. In dieser Arbeit als anthropogene VOC-Referenz verwendet.

Kalibrierung

Einstellung und Überprüfung der Messgeräte mit bekannten Referenzgasen. Für den FID erfolgt die Kalibrierung nach DIN EN 12619, für den PID üblicherweise mit Isobutylene.

Linearer Messbereich

Konzentrationsbereich, in dem die Messsignale eines Detektors proportional zur tatsächlichen Konzentration sind. FID hat einen großen linearen Bereich, PID einen eingeschränkteren.

Matrixeffekt

Einfluss von Begleitstoffen oder Umweltbedingungen (z. B. Luftfeuchtigkeit, Ölgemische) auf die Signalantwort. Besonders relevant für den PID.

Maximalwert (Max)

Höchster gemessener Konzentrationswert einer Messreihe. Wichtige Kennzahl zur Charakterisierung der Signalspitzen.

Mittelwert (μ)

Durchschnittswert einer Messreihe, der als repräsentativer Konzentrationswert verwendet wird.

Normative Quellen

Offizielle Vorschriften oder Standards (z. B. TA-Luft, TRGS 900, DIN EN 12619), die gesetzliche oder technische Rahmenbedingungen für VOC-Messungen festlegen.

PID (Photoionisationsdetektor)

Mobiles Messgerät für VOCs. Arbeitet mit UV-Lampen (typisch 10,6 eV), die Moleküle ionisieren. Besonders geeignet für Screening-Messungen, aber empfindlich gegenüber Feuchtigkeit und nicht universell für alle Kohlenwasserstoffe anwendbar.

Responsefaktor (RF)

Korrekturfaktor für die Anpassung von PID-Messungen an FID-Referenzwerte. Er kann empirisch aus Messungen bestimmt oder tabellarisch (Honeywell/RAE Systems) abgeleitet werden.

Standardabweichung (σ)

Statistische Kenngröße für die Streuung von Messwerten um den Mittelwert. Geringe Standardabweichungen deuten auf stabile, reproduzierbare Messungen hin.

Summenkohlenstoff

Gesamtkonzentration organischer Kohlenstoffverbindungen, wie sie mit FID gemessen wird. Anders als die PID-Messung, die nur Substanzen mit Ionisationspotenzial < Photon Energie erfasst.

TA-Luft (Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft)

Zentrale deutsche Vorschrift für Emissionsgrenzwerte industrieller Anlagen. Der FID ist darin als Referenzmessgerät vorgeschrieben.

Trockenbedingungen

Messungen unter Standardbedingungen ohne zusätzliche Luftfeuchtigkeit.

TRGS 900

Technische Regeln für Gefahrstoffe. Enthält Arbeitsplatzgrenzwerte (AGW) für viele VOCs.

VOC (Volatile Organic Compounds / Flüchtige organische Verbindungen)

Oberbegriff für eine Vielzahl organischer Substanzen, die durch hohe Flüchtigkeit gekennzeichnet sind.

WHO-Leitwerte

Von der Weltgesundheitsorganisation veröffentlichte Grenzwerte zur Beurteilung der Luftqualität in Innenräumen.

1 Einleitung

Die Belastung der Atmosphäre durch flüchtige organische Verbindungen (VOCs) stellt ein zentrales Thema im Bereich des Umweltschutzes dar. VOCs entstehen unter anderem durch natürliche Prozesse wie zum Beispiel von den Emissionen von Terpenen aus Pflanzen. Auf der anderen Seite entstehen VOCs auch durch anthropogene Quellen, insbesondere durch industrielle Prozesse, Verbrennungsvorgänge und den Einsatz von Lösungsmitteln (Wolff 2021, Bundesministerium für Umwelt 2021). Aufgrund ihrer Reaktivität tragen VOCs wesentlich zur Bildung von bodennahem Ozon und sekundären organischen Aerosolen bei. Für die menschliche Gesundheit bedeutet dies eine erhebliche Belastung: kurzfristige Expositionen können Reizungen der Augen, Schleimhäute und Atemwege verursachen, während langfristige Belastungen mit Atemwegserkrankungen, Allergien sowie einem erhöhten Risiko für kardiovaskuläre Erkrankungen verbunden sind. Einzelne Substanzen wie Benzol oder Formaldehyd gelten zudem als krebserregend (Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014, WHO 2000). Auch für die Umwelt sind VOCs von hoher Relevanz. Ihre Rolle bei der photochemischen Ozonbildung führt zu Vegetationsschäden und einer Beeinträchtigung der Photosyntheseleistung von Pflanzen. Darüber hinaus wirken sekundäre organische Aerosole klimarelevant, indem sie die Strahlungsbilanz beeinflussen und Rückkopplungseffekte in der Atmosphäre verstärken (Wolff 2021). Zur Überwachung von VOCs stehen verschiedene Messverfahren zur Verfügung. In der Praxis der Emissions- und Immissionsmessung kommt der Flammenionisationsdetektor (FID) zum Einsatz, der seit Jahrzehnten als Referenzverfahren gilt (Zimmermann *et al* 2002, Poole 2015). Daneben existieren alternative Technologien wie der Photoionisationsdetektor (PID), der durch seine Mobilität, geringe Aufwärmzeit und einfache Handhabung Vorteile im Probenahmefeld bietet (DHS 2014, Hori *et al* 2015). Die Motivation der Bachelorarbeit ergibt sich aus der praktischen Tätigkeit bei der DEKRA-Messstelle für Luftreinhaltung. Dort wird der FID routinemäßig eingesetzt, während der PID bisher nicht etabliert ist. Im praktischen Einsatz stellt sich jedoch die Frage, ob der PID als Screening-Instrument genutzt werden kann, um vor Ort eine schnelle orientierende Einschätzung zu geben und so zu entscheiden, ob eine detaillierte Referenzmessung mit dem FID erforderlich ist. Dabei ist insbesondere von Interesse, inwieweit sich PID-Messungen von etablierten FID-Ergebnissen unterscheiden. Im Rahmen der Bachelorarbeit werden exemplarisch drei Substanzen, darunter zwei ätherische Öle und ein Reinigungsalkohol ausgewählt, um unterschiedliche Charakteristika bei der Messung zu verdeutlichen. Dabei wird auch die Einflussgröße Luftfeuchtigkeit berücksichtigt, da bekannt ist, dass diese insbesondere die PID-Messung signifikant beeinflussen kann (DHS 2014).

2 Theoretischer Hintergrund

2.1 Flüchtige organische Verbindungen (VOC)

2.1.1 Definition und Klassifikation

Flüchtige organische Verbindungen (VOCs) sind eine heterogene Gruppe von organischen Substanzen, die sich durch einen niedrigen Siedepunkt und eine hohe Dampfdrucktendenz auszeichnen. Gemäß EU-Richtlinie 1999/13/EG (Rat der Europäischen Union 1999) werden flüchtige organische Verbindungen als Stoffe definiert, deren Siedepunkt bei Normaldruck (101,3 kPa) unterhalb von 250 °C liegt. Diese EU-Richtlinie dient als rechtliche Grundlage für die Abgrenzung der VOC-Klasse (Bundesministerium für Umwelt 2021). In der Praxis wird häufig zwischen leichtflüchtigen (VVO), flüchtigen (VOC) und halbstationären organischen Verbindungen (SVOC) unterschieden (Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014).

2.1.2 Quellen

Die Emissionen von VOCs können natürlichen oder anthropogenen Ursprungs sein. Natürliche Quellen sind beispielsweise Terpene aus Pflanzen, während anthropogene Quellen vor allem aus der Nutzung von Lösungsmitteln, der Energieerzeugung, der chemischen Industrie sowie aus Verkehrsemissionen stammen (Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014). In Innenräumen können Baustoffe, Möbel, Farben und Reinigungsmittel wesentliche Emittenten darstellen (Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014).

2.1.3 Gesundheitliche und ökologische Relevanz

VOCs haben sowohl gesundheitliche als auch ökologische Auswirkungen. Viele VOCs wirken reizend auf Augen, Schleimhäute und Atemwege, wenn sie in höheren Konzentrationen vorkommen. Einige Vertreter, beispielsweise Benzol oder Formaldehyd, stehen darüber hinaus im Verdacht, krebserzeugend zu sein oder das Erbgut zu schädigen (Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014). Auf ökologischer Ebene tragen VOCs maßgeblich zur Ozonbildung in der Troposphäre und zur Entstehung sekundärer organischer Aerosole (SOA) bei, die die Luftqualität verschlechtern und klimarelevante Effekte hervorrufen (Wolff 2021). In Deutschland und der EU ist der Umgang mit VOCs reguliert. Zentrale Instrumente sind die Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft (TA-Luft), die Emissionsgrenzwerte für industrielle Anlagen vorgibt (Bundesministerium für Umwelt 2021), sowie die Technischen Regeln für Gefahrstoffe (TRGS 900), die Arbeitsplatzgrenzwerte (AGW) festlegen (BAuA 2024). Darüber hinaus veröffentlicht die WHO-Leitwerte für die Innenraumluftqualität, die als Grundlage zur Bewertung gesundheitlicher Risiken dienen (WHO 2000).

2.2 Grundlagen Flammenionisationsdetektor (FID)

2.2.1 Funktionsprinzip

Der Flammenionisationsdetektor (FID) zählt zu den Standarddetektoren der Gasanalytik und wird seit den 1960er Jahren breit eingesetzt (Driscoll et al 1967, Poole 2015). Beim Flammenionisationsdetektor werden organische Moleküle in einer Wasserstoff-Luft-Flamme verbrannt, wodurch Ionen entstehen. Diese erzeugen einen messbaren elektrischen Strom, der direkt mit dem Kohlenstoffgehalt der Probe zusammenhängt (Deutsches Institut für Normung (DIN) 2013, Zimmermann *et al* 2002). Wie in Abbildung 1 dargestellt, werden die in der Flamme gebildeten Ionen zwischen der Flammenspitze (Anode) und dem darüberliegenden Kollektor (Kathode) durch eine angelegte Spannung erfasst. Dieser Strom ist direkt proportional zur Anzahl der im Molekül enthaltenen Kohlenstoffatome (Zimmermann et al 2002).

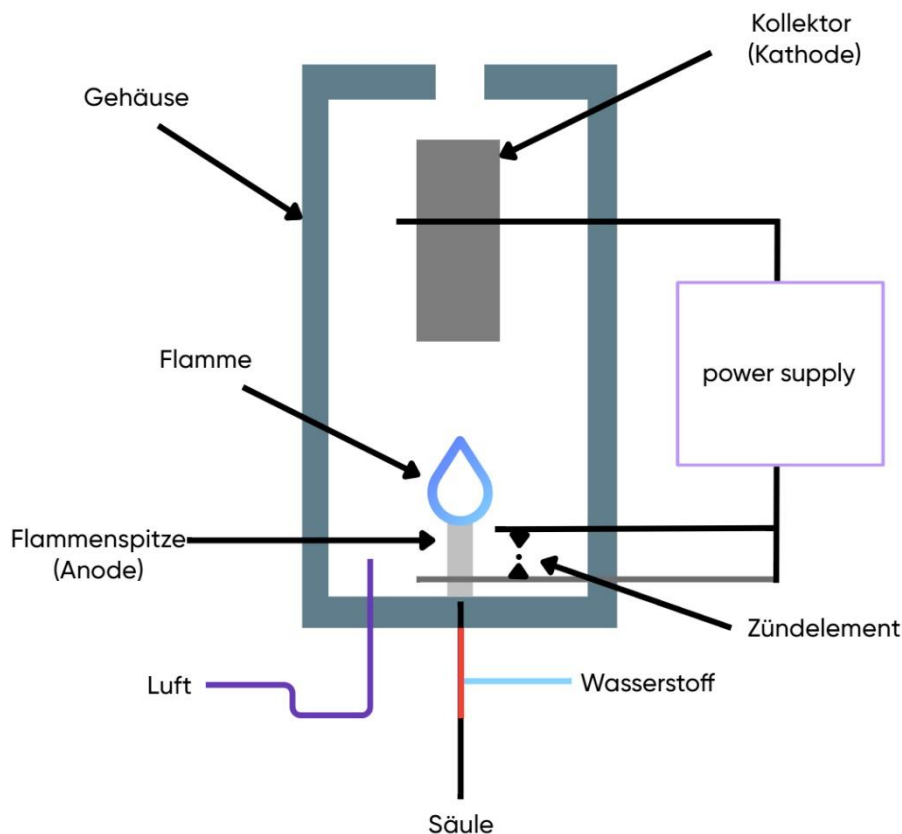


Abbildung 1: Schematischer Aufbau eines Flammenionisationsdetektors (FID) (Eigene Darstellung)

2.2.2 Empfindlichkeit und Nachweisgrenzen

Der FID zeichnet sich durch eine sehr hohe Empfindlichkeit gegenüber organischen Verbindungen aus. Typische Nachweisgrenzen liegen im Bereich von wenigen ppb (parts per

billion), womit auch geringe Konzentrationen zuverlässig quantifiziert werden können (Zimmermann *et al* 2000, Winskowski 1983). Zudem bietet der FID einen großen linearen Arbeitsbereich, der mehrere Größenordnungen umfasst, was ihn für quantitative Bestimmungen in sehr unterschiedlichen Konzentrationsbereichen geeignet macht (Poole 2015).

2.2.3 Selektivität und Grenzen

Die Selektivität des FID ist im Wesentlichen auf kohlenstoffhaltige Verbindungen beschränkt. Anorganische Gase wie Stickstoff, Sauerstoff oder Kohlendioxid erzeugen kein Signal. Dadurch eignet sich der FID besonders für die Summenbestimmung organischer Verbindungen, ohne eine Stoffdifferenzierung vorzunehmen (Wolff 2021). Einschränkungen ergeben sich aus dem Betrieb mit Hilfsgasen (hochreiner Wasserstoff und Luft) sowie aus der Notwendigkeit einer Aufwärmphase, bis stabile Messbedingungen erreicht sind (Rezende *et al* 2020).

2.2.4 Anwendungsbereich

Der FID gilt als Referenzmethode in der Luftschadstoffanalytik und ist in zahlreichen gesetzlichen Regelwerken verankert. Typische Einsatzgebiete sind die Emissionsüberwachung industrieller Anlagen, die Bestimmung von Kohlenwasserstoffen in der Umgebungsluft sowie die VOC-Messung in der Abgasanalyse. Darüber hinaus wird der FID in Kombination mit der Gaschromatographie genutzt, um einzelne Substanzen analytisch aufzulösen und zu quantifizieren (Poole 2015). Seine Rolle als „Referenzverfahren“ ist durch verschiedene Normen und Vorschriften definiert:

- DIN EN 12619:2013-07: „Stationäre Quellen – Bestimmung der Emission von Gesamtkohlenstoff – Flammenionisationsdetektor-Verfahren (FID)“. Diese Norm beschreibt detailliert die Anwendung des FIDs bei Abgasuntersuchungen von stationären Quellen und legt die methodischen Anforderungen an Messung, Kalibrierung und Qualitätssicherung fest.
- ISO 25140-1:2010: „Stationary source emissions – Determination of low range mass concentration of hydrocarbons – Part 1: FID method“. Diese internationale Norm ergänzt die europäische Norm und ist vor allem für niedrige Konzentrationsbereiche relevant.
- TA-Luft 2021 (Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft): Hier wird im Abschnitt 5.2.6.1 ausdrücklich die Bestimmung des Gesamtkohlenstoffs mittels FID nach DIN EN 12619 als verbindliches Verfahren vorgeschrieben. Die TA-Luft verweist damit unmittelbar auf den Einsatz des FIDs als Standardverfahren zur Überwachung organischer Emissionen aus genehmigungspflichtigen Anlagen.

Damit ist der FID nicht nur wissenschaftlich etabliert, sondern auch rechtlich bindend in Deutschland und Europa als Standardverfahren zur VOC-Überwachung vorgeschrieben (Deutsches Institut für Normung (DIN) 2013, International Organization for Standardization (ISO) 2010, Bundesministerium für Umwelt 2021).

2.3 Grundlagen Photoionisationsdetektor (PID)

2.3.1 Funktionsprinzip

Der Photoionisationsdetektor (PID) ist ein gasanalytisches Verfahren, das auf der Ionisation von Molekülen durch ultraviolette Strahlung (UV-Licht) basiert. Das Messgas strömt über die Gaszufuhr in die Ionisationskammer, wo es mit dem von der UV-Lampe ausgesendeten Licht (typischerweise 9,8 eV, 10,6 eV oder 11,7 eV) bestrahlt wird (Poole 2015, Rezende *et al* 2020). Treffen diese Photonen auf Moleküle mit einer geringeren Ionisationsenergie, werden Elektronen herausgelöst und es entstehen positive Ionen (M^+) und freie Elektronen (e^-). Die geladenen Teilchen werden in der Ionisationskammer durch ein elektrisches Feld zwischen der negativen Elektrode (–) und der positiven Elektrode (+) getrennt (Zimmermann *et al* 2000, Poole 2015). Dadurch fließt ein messbarer Strom, der über ein Amperemeter erfasst wird und direkt proportional zur Konzentration des ionisierbaren Messgases ist (Zimmermann *et al* 2000). Das Gas verlässt anschließend die Kammer über die Gasabfuhr.

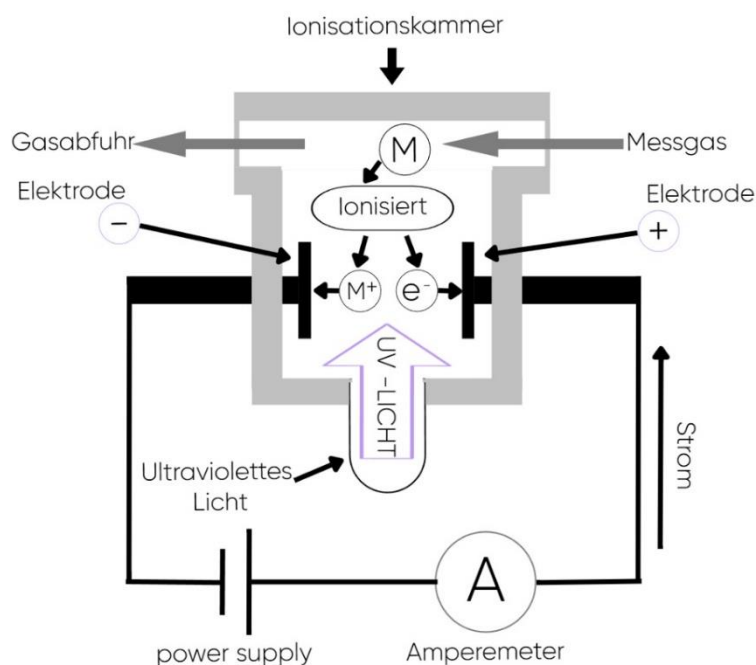


Abbildung 2: Schematischer Aufbau eines Photoionisationsdetektor (PID) (Eigene Darstellung)

2.3.2 Empfindlichkeit und Nachweisgrenzen

PIDs weisen eine sehr hohe Empfindlichkeit auf und können VOCs bereits im ppm-Bereich (parts per million) detektieren (Antoniadou *et al* 2019). Die Ansprechzeit liegt typischerweise bei wenigen Sekunden, was eine schnelle Screening-Messung ermöglicht (Hori *et al* 2015). Im Gegensatz zum FID ist für den Betrieb kein Brenngas erforderlich, wodurch sich der PID besonders für den mobilen Einsatz eignet (DHS 2014).

2.3.3 Selektivität und Grenzen

Die Selektivität des PIDs wird durch die Photonenenergie der eingesetzten UV-Lampe bestimmt. Stoffe, wie Methan oder Kohlendioxid, besitzen eine Ionisationsenergie, die oberhalb der Photonenenergie liegt und können daher nicht nachgewiesen werden (DHS 2014, Wolff 2021). Somit ist der PID zwar für viele VOCs geeignet, jedoch nicht universell einsetzbar. Ein weiterer Nachteil ist die Störanfälligkeit durch die vorhandene Luftfeuchtigkeit, da Wassermoleküle die Ionisationsprozesse beeinflussen und dadurch zu Signalunterdrückungen führen können (Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014).

2.3.4 Anwendungsbereich

PIDs werden in der Praxis vor allem für Screening-Messungen, die Überwachung von Arbeitsplatzkonzentrationen und für die Leckage-Suche in Anlagen eingesetzt (LUBW Landesanstalt für Umwelt 2011). Aufgrund der Handlichkeit und schnellen Einsatzbereitschaft sind sie besonders nützlich für die Probeentnahme vor Ort, bei denen zunächst eine erste Einschätzung der VOC-Belastung erforderlich ist, bevor aufwendigere Referenzverfahren, wie der FID, eingesetzt werden (DHS 2014, Hori *et al* 2015).

2.3.5 Responsefaktoren

Photoionisationsdetektoren sind standardmäßig auf Isobutylen kalibriert. Die vom Gerät angezeigten Werte stellen daher zunächst Isobutylen-Äquivalente dar und spiegeln nicht die tatsächlichen Konzentrationen der in der Umgebungsluft vorhandenen Substanzen wider (Honeywell Analytics and Honeywell RAE Systems 2018). Um reale VOC-Konzentrationen korrekt zu erfassen, ist die Anwendung sogenannter Responsefaktoren (RF) erforderlich. Diese Faktoren geben an, mit welchem Korrekturwert die Rohmesswerte multipliziert werden müssen, um sie auf die tatsächliche Konzentration der untersuchten Substanz umrechnen zu können (Poole 2015). Die Größe des Responsefaktors hängt maßgeblich von der Ionisationsenergie der Substanz im Verhältnis zur eingesetzten Photonenenergie (zumeist 10,6 eV) ab. Substanzen mit niedriger Ionisationsenergie (z. B. aromatische Kohlenwasserstoffe) erzeugen hohe Signale, sodass der RF nahe 1 liegt. Andere Verbindungen wie Alkohole oder Terpene besitzen deutlich höhere RFs, da sie vom PID

schwächer angesprochen werden (Hori et al 2015, Rezende et al 2020). Beispielsweise liegt der RF für Isopropanol bei etwa 1,0. Bei typischen Terpene, wie α -Pinen oder Limonen, die in ätherischen Ölen vorkommen, werden Werte zwischen 0,2 und 0,4 angegeben (Honeywell Analytics and Honeywell RAE Systems 2018, Wolff 2021). Das bedeutet, dass die gemessenen PID-Konzentrationen ohne Korrektur eine erhebliche Unterschätzung der tatsächlichen Konzentration darstellen können. Ein Nachteil ist, dass für komplexe Gemische, wie sie bei ätherischen Ölen vorliegen, nur eine näherungsweise Anwendung der RF möglich ist. Dabei besteht die Zusammensetzung aus zahlreichen Einzelkomponenten. In diesen Fällen kann der PID lediglich eine orientierende Screening-Messung liefern, während für präzise Konzentrationsbestimmungen weiterhin auf den FID zurückgegriffen werden muss (Zimmermann *et al* 2000, Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014).

2.3.5.1 Berechnung der Response-Faktoren (RF)

In dieser Arbeit werden zwei Arten von Response-Faktoren (RF) herangezogen:

1. ein experimentell bestimmter RF (RF_{emp}) aus den gemessenen Mittelwerten der beiden Geräte,
2. ein tabellarisch dokumentierter RF (RF_{tab}) für Isopropanol, der aus der Honeywell/RAE-Response-Factor-Chart abgeleitet wurde.

1) Experimentell bestimmter RF (RF_{emp})

Der Photoionisationsdetektor (PID) wurde mit einer 10,6 eV-Lampe betrieben und war auf Isobutylen kalibriert, d. h. die Anzeigen erfolgten in Isobutylen-Äquivalenten. Als Referenzgröße diente der Flammenionisationsdetektor (FID), dessen Messergebnisse als etablierte Referenzmethode zur VOC-Bestimmung gelten (Zimmermann et al. 2002; Poole 2015). In dieser Arbeit wurde der empirische Responsefaktor (RF_{emp}) auf Grundlage der selbst durchgeführten Parallelmessungen mit PID und FID bestimmt. Damit ergibt sich der Korrekturwert für das PID-Signal direkt aus den erhobenen Messdaten. Die Anwendung dieses Faktors erlaubt eine Anpassung der PID-Daten an die Referenzwerte des FID. Hinweise zu Stabilisierungseffekten, z. B. verlängerte Ansaugzeiten bei schwer flüchtigen Verbindungen, finden sich in den technischen Notes von Honeywell (RAE Systems by Honeywell 2014). Für jede Messung wurde nach Erreichen des Nullpunktes ein stabiler Abschnitt der Exposition ausgewählt. In diesem Zeitfenster wurden die Mittelwerte von FID- und PID-Signale gebildet.

2) Tabellarischer RF für Isopropanol (RF_{tab})

Für die Substanz Isopropanol wurde zusätzlich ein tabellarischer Response-Faktor aus der Herstellerdokumentation (Honeywell/RAE Systems, 10,6 eV Lampe, Isobutylen-Kalibrierung) übernommen. In der Honeywell-Tabelle ist für Isopropanol ein Korrekturfaktor von 4,6 angegeben (RAE Systems by Honeywell 2014). Damit ergibt sich der RF als:

$$RF_{\text{tab}} = 4,6$$

Die Anwendung erfolgt durch Multiplikation der PID-Anzeige mit diesem Faktor.

Dadurch wird deutlich, dass der RF sowohl substanzspezifisch als auch abhängig von der eingesetzten UV-Lampe ist.

Grundsätzlich lassen sich drei Ansätze unterscheiden:

1) Berechnung experimentell bestimmter Response-Faktor (RF_{emp}):

Der empirische RF ergibt sich aus dem Verhältnis der gemittelten Konzentrationen beider Geräte:

$$RF_{emp} = \frac{\bar{c}_{FID}}{\bar{c}_{PID}}$$

Damit können PID-Signale direkt auf die Referenzwerte des FIDs angepasst werden. Praktische Hinweise, etwa zu Stabilisierungseffekten bei schwerflüchtigen Verbindungen, finden sich in den Honeywell Technical Notes (RAE Systems by Honeywell 2014).

2) Berechnung tabellarisch dokumentierter Response-Faktor (RF_{tab}):

Hersteller wie Honeywell/RAE Systems stellen umfangreiche Tabellen mit Korrekturfaktoren für eine Vielzahl von Substanzen bereit. Diese Werte basieren auf standardisierten Messungen mit Isobutylen-Kalibrierung und 10,6 eV-Lampen. Die Korrektur erfolgt durch Multiplikation der PID-Anzeige mit diesem Faktor:

$$c_{Substanz} = c_{PID} * RF_{tab}$$

3) Berechnung von Response-Faktoren für Mischungen (RF_{mix}):

Bei komplexen VOC-Gemischen, wie sie in ätherischen Ölen vorkommen, reicht die Anwendung eines einzelnen tabellarischen RF nicht aus. Da die PID-Ansprechbarkeit stark von der Ionisationsenergie der einzelnen Komponenten abhängt, wird ein Mischungs-Response-Faktor berechnet. Grundlage sind die relativen Anteile der Komponenten (z. B. aus GC/MS-Profilen oder normativen Spezifikationen wie ISO 4730 für Teebaumöl) sowie die jeweiligen Correction Factors. Diese sind definiert als Kehrwerte der Einzel-RF. Der Mischungs-CF ergibt sich nach (RAE Systems by Honeywell 2024) aus:

$$CF_{mix} = \sum_i X_i * CF_i$$

Der zugehörige Mischungs-RF berechnet sich als Kehrwert (Poole 2015; Rezende et al. 2020):

$$RF_{mix} = \frac{1}{CF_{mix}}$$

Dabei entstehen einige Einschränkungen. Die Genauigkeit des Verfahrens hängt stark von der Richtigkeit der Anteile ab, da die Zusammensetzung pflanzlicher Öle je nach Herkunft, Destillationsmethode und Erntezeitpunkt variieren kann (Wolff 2021). Zudem sind nicht für alle Substanzen tabellarische CF-Werte verfügbar. In solchen Fällen können Surrogat Werte aus

chemisch ähnlichen Stoffklassen (z. B. Ester oder Alkohole mit ähnlicher Ionisationsenergie) herangezogen werden (Poole 2015). Insgesamt bleibt ein Mischungs-RF eine Näherung und ersetzt nicht die direkte empirische Bestimmung an der realen Matrix (Rezende *et al* 2020, RAE Systems by Honeywell 2024).

2.4 Vergleich des FID und des PID

2.4.1 Technische Gegenüberstellung

Der Flammenionisationsdetektor und der Photoionisationsdetektor gehören beide zur Gruppe der ionisationsbasierten Detektoren. Während der FID die Ionisation in einer Wasserstoff-Luft-Flamme nutzt, arbeitet der PID mit UV-Photonen, die Moleküle mit ausreichend geringer Ionisationsenergie ionisiert (Poole 2015, Rezende *et al* 2020). Der FID ist ein nahezu universeller Detektor für organische Kohlenstoffverbindungen und zeichnet sich durch hohe Präzision, Robustheit und einem großen linearen Messbereich aus (Zimmermann *et al* 2002). Der PID hingegen ist aufgrund seiner Mobilität, geringen Kosten und sofortigen Einsatzbereitschaft ein bevorzugtes Werkzeug für Screening-Messungen (Hori *et al* 2015).

2.4.2 Vor- und Nachteile

Die wesentlichen Unterschiede der beiden Detektoren lassen sich wie folgt tabellarisch zusammenfassen.

Tabelle 1: Gegenüberstellung der Vor- und Nachteile von FID und PID

	Vorteile	Nachteile
FID	Hohe Präzision Großer linearer Bereich Referenzstatus in der Emissionsmessung Weitgehend unempfindlich gegenüber Luftfeuchtigkeit (Winskowski 1983, Zimmermann <i>et al</i> 2002)	Längere Aufwärmzeit Schwerer und weniger mobil Benötigt eine Wasserstoff- und Nullgasversorgung (Poole 2015)
PID	Keine Gasversorgung nötig Sofort betriebsbereit Mobil Einfache Handhabung (DHS 2014)	Empfindlich gegenüber Luftfeuchtigkeit Begrenzter linearer Bereich Keine Detektion von Methan und CO₂ Eine regelmäßige Lampenwartung ist erforderlich (DHS 2014)

2.4.3 Einsatzfelder in der Praxis

Der FID wird bevorzugt in der gesetzlich geregelten Emissionsmessung eingesetzt, unter anderem bei der Umsetzung der Vorgaben der TA Luft in Deutschland (Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014). Aufgrund seiner Robustheit und der Genauigkeit der Messergebnisse dient er hier als Referenzverfahren. Der PID kommt insbesondere bei Vor-Ort-Screenings, Arbeitsschutzmessungen und der Leckage-Suche zum Einsatz, da er tragbar und flexibel ist (LUBW Landesanstalt für Umwelt 2011). In diesen Bereichen kann der PID eine schnelle erste Einschätzung ermöglichen, die im Anschluss durch FID-Messungen validiert werden muss.

2.5 Einflussgrößen und Störfaktoren

2.5.1 Luftfeuchtigkeit

Die Luftfeuchtigkeit zählt zu den bedeutendsten Einflussgrößen bei der Messung flüchtiger organischer Verbindungen. Während der FID weitgehend unempfindlich gegenüber Wasserdampf ist, zeigt der PID eine deutliche Signalabschwächung bei hoher relativer Feuchte (Hori *et al* 2015, Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014). Ursache ist die Absorption von UV-Strahlung durch Wassermoleküle sowie die Bildung von hydratisierten Ionen, die die Ionisationseffizienz verringern (Rezende *et al* 2020). In der Praxis kann dies zu einer Unterschätzung der VOC-Konzentrationen führen. Daher wird empfohlen, die Luftfeuchtigkeit während der PID-Messung kontinuierlich zu überwachen und anzupassen beziehungsweise zu korrigieren.

2.5.2 Temperatur

Auch die Temperatur beeinflusst die Messergebnisse. Höhere Temperaturen erhöhen den Dampfdruck der VOCs und führen dadurch zu höheren Konzentrationen im gasförmigen Zustand (Wolff 2021). Während der FID diese Änderungen linear erfasst, kann es beim PID durch die Kombination von Temperatur und Feuchtigkeit zu verstärkten Abweichungen kommen (Hori *et al* 2015). Für standardisierte Messungen sind daher definierte Temperaturbedingungen von Vorteil.

2.5.3 Matrixeffekte (Hintergrundgase)

Die Zusammensetzung der Matrixgase spielt insbesondere beim PID eine Rolle. Gase mit hohem Ionisationspotenzial (z. B. Stickstoff, Sauerstoff, Kohlendioxid) bleiben zwar ohne Signal, können aber als Kollisionspartner die Ionisationseffizienz anderer Substanzen reduzieren (Antoniadou *et al* 2019). Beim FID hingegen haben Hintergrundgase kaum einen Einfluss, solange die Flammenstabilität gewährleistet ist (Zimmermann *et al* 2000).

2.5.4 Kalibrierung und Drift

Beide Messgeräte sind auf eine regelmäßige Kalibrierung angewiesen, um zuverlässige Ergebnisse zu liefern. Beim FID erfolgt die Kalibrierung in der Regel mit Propangas oder Methan, da diese eine stabile und reproduzierbare Signalantwort liefern (Zimmermann *et al* 2002). Beim PID ist eine Kalibrierung mit Isobuten üblich, wobei anschließend Korrekturfaktoren für andere Substanzen angewendet werden müssen (Honeywell Analytics and Honeywell RAE Systems 2018). Zusätzlich kann beim PID ein Drift des Signals auftreten, der durch Alterung der UV-Lampe oder Ablagerungen auf der Lampe verursacht werden kann (DHS 2014).

2.5.5 Standardreferenzmaterialien (SRM) und Gründe für die Nichtverwendung

Ein weiterer Ansatz zur Gewährleistung der Vergleichbarkeit zwischen FID- und PID-Messungen ist der Einsatz von Standardreferenzmaterialien (SRM) in Form von BTEX-Mischungen (Benzol, Toluol, Ethylbenzol, Xylole). Diese Aromaten weisen Ionisationsenergien unterhalb der typischen Photonenenergie von 10,6 eV auf und erzeugen daher ein starkes Signal im PID (Liaud and et al. 2014). Gleichzeitig liefern sie im FID eine nahezu lineare, molare Antwort, da die Signalintensität proportional zur Zahl der Kohlenstoffatome ist (Poole 2015). Aufgrund dieser Eigenschaften gelten BTEX-Gemische in der Literatur als geeignetes Standardreferenzmaterial, um Messergebnisse beider Detektortypen vergleichbar zu machen (Frausto-Vicencio and et al. 2021).

In der vorliegenden Arbeit wurde ein solches Referenzverfahren bewusst nicht eingesetzt. Zum einen verfügt das Unternehmen, in dem die Arbeit durchgeführt wurde, nicht über zertifizierte BTEX-Referenzmaterialien. Zum anderen wäre die Anwendung mit erheblichem organisatorischen und sicherheitstechnischen Aufwand verbunden gewesen, da insbesondere Benzol nach TRGS 905 als krebserzeugend der Kategorie 1A eingestuft ist und eine Handhabung nur unter strengen Arbeitsschutzauflagen zulässig wäre (Wolff 2021). Im Vergleich dazu konnten ätherische Öle und ein Reinigungsalkohol unter den gegebenen Laborbedingungen einfacher und ohne zusätzliche Genehmigungen eingesetzt werden, obwohl auch diese Substanzen gesundheitsschädigende Eigenschaften besitzen (Wolff 2021). Darüber hinaus wurden beide Messgeräte vor Beginn der Versuche fachgerecht mit den vom Hersteller vorgesehenen Kalibriergasen eingestellt – der FID mit Propan und der PID mit Isobuten –, wie es auch in der praktischen Anwendung üblich ist (Zimmermann *et al* 2000, RAE Systems by Honeywell 2024). Die Auswahl praxisnaher VOC-Quellen entsprach zudem der Zielsetzung der Arbeit, die vor allem auf die vergleichende Charakterisierung der Detektoren und nicht auf eine normgerechte Rückführbarkeit abzielte. Vor diesem Hintergrund wurde auf den Einsatz von BTEX-Mischungen verzichtet, wenngleich diese in wissenschaftlichen Vergleichsstudien häufig als Standardreferenzmaterial genutzt werden (Frausto-Vicencio and et al. 2021, Liaud and et al. 2014).

2.6 Verwendete Substanzen

Für die Untersuchungen wurden drei Substanzen ausgewählt, die unterschiedliche Charakteristika flüchtiger organischer Verbindungen (VOC) repräsentieren. Dabei handelt es sich um zwei ätherische Öle. Zum einen Ylang-Ylang-Öl und ein Teebaumöl. Beide dienen als biogene Quelle. Als Reinigungsalkohol wurde Isopropanol als anthropogene Referenzsubstanz verwendet. Diese Auswahl ermöglicht es, Unterschiede in der

Detektionscharakteristik von FID und PID sowohl bei komplex zusammengesetzten Naturstoffen als auch bei einer technisch reinen Einzelsubstanz zu bewerten.

2.6.1 Ylang-Ylang-Öl

Dieses ätherische Öl wird aus den Blüten des Cananga-Baums (*Cananga odorata*) gewonnen. Es stellt ein komplexes VOC-Gemisch dar, das vor allem Monoterpenalkohole, Ester, Sesquiterpene, Ether und aromatische Verbindungen enthält (Tan et al. 2015). Typische Hauptkomponenten sind Linalool (26 %), Benzylacetat (20 %), p-Kresyl-methyl-ether (12 %) sowie Benzylbenzoat (12 %). Weitere Bestandteile sind Germacren-D und β -Caryophyllen (jeweils 6 %), Geranylacetat (6 %), Methylbenzoat (4 %) sowie in geringeren Anteilen 1,8-Cineol, Farnesol, α -Farnesen und Benzylsalicylat (1 – 3 %) (Tan et al 2015, Chakira et al 2022). Die unterschiedlichen Stoffklassen sprechen verschieden auf die UV-Ionisation im PID an: Monoterpenalkohole wie Linalool reagieren mit vergleichsweise hoher Signalintensität ($RF \sim 5,1$), während Sesquiterpene wie Germacren-D oder β -Caryophyllen deutlich niedrigere Werte ($< 0,4$) zeigen (RAE Systems by Honeywell 2024). Ester wie Benzylacetat oder Benzylbenzoat liegen im mittleren Bereich ($RF \sim 1,3 - 2,3$), aromatische Komponenten wie p-Kresyl-methyl-ether zeigen noch geringere Ansprechraten ($RF < 1,0$). Damit verdeutlicht die Zusammensetzung von Ylang-Ylang-Öl die hohe Heterogenität der PID-Signale. Während einzelne Verbindungen wie Linalool klar erfasst werden, liefern große Teile der Matrix nur geringe Signalantworten. Dies führt dazu, dass die Gesamtkonzentration des Öls im PID systematisch unterschätzt wird. Damit zeigt Ylang-Ylang-Öl exemplarisch die Grenzen des PID-Verfahrens bei der Analyse komplexer Naturstoffe, deren Summensignal von der jeweiligen Matrixzusammensetzung geprägt ist (Rezende et al. 2020; Wolff 2021).

2.6.2 Teebaumöl

Teebaumöl stammt aus den Blättern von *Melaleuca alternifolia* und stellt ein komplexes VOC-Gemisch dar, das sich überwiegend aus Monoterpenen, Monoterpenalkoholen sowie in geringeren Anteilen aus Sesquiterpenen und aromatischen Verbindungen zusammensetzt (Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014). Typische Hauptkomponenten sind Terpinen-4-ol (41 %), γ -Terpinen (21 %), α -Terpinen (9 %), p-Cymen (4,5 %) und 1,8-Cineol (5 %). Weitere wichtige Bestandteile sind Terpinolen (5 %), α -Terpineol (3,5 %), α -Pinen und Sabinen (je 3 %) sowie Limonen (1,5 %). In deutlich geringeren Anteilen treten Aromadendren, Ledene, δ -Kadinen, Globulol und Viridiflorol auf (jeweils < 1 %) (Scientific Committee on Consumer Safety (SCCS) 2025, International Organization for Standardization 2017). Die unterschiedlichen Stoffklassen weisen sehr verschiedene Ionisationspotenziale auf und reagieren daher unterschiedlich stark im PID. Monoterpenalkohole wie Terpinen-4-ol oder α -Terpineol zeigen mit Responsefaktoren von etwa 5,1 eine hohe Signalantwort, während

Monoterpene wie γ -Terpinen, α -Terpinen oder Sabinen mit RF-Werten um 0,3 – 0,4 deutlich schwächere Signale liefern (RAE Systems by Honeywell 2014). Aromatische Verbindungen wie p-Cymen (RF $\sim$ 0,45) und Ether wie 1,8-Cineol (RF $\sim$ 2,3) liegen im mittleren Bereich. Sesquiterpene wie Aromadendren oder Ledene zeigen hingegen nur geringe Ionisierbarkeit (RF < 0,4), während Verbindungen wie Globulol oder Viridiflorol mit RF-Werten von 5,1 vergleichsweise stark detektiert werden. Diese heterogene Zusammensetzung verdeutlicht die methodische Herausforderung für den PID: Während bestimmte Hauptkomponenten wie Terpinen-4-ol sehr klar erfasst werden, tragen andere nur schwach oder gar nicht zum Gesamtsignal bei. Damit ist die Summenkonzentration des Öls im PID stark von der relativen Zusammensetzung der Matrix abhängig, was zu systematischen Unter- oder Überschätzungen führen kann (Poole 2015, Rezende *et al* 2020). Insgesamt zeigt Teebaumöl somit exemplarisch die Grenzen des PID-Verfahrens bei komplexen Naturstoffen, gleichzeitig aber auch seine Stärke bei ionisierbaren Einzelsubstanzen.

2.6.3 Isopropanol (70 %)

Isopropanol ist ein weit verbreitetes Lösungs- und Desinfektionsmittel und stellt eine klassische anthropogene VOC-Quelle dar (Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014). Es ist hoch flüchtig und wird vom PID nahezu Isobutylen-äquivalent erfasst (RAE Systems by Honeywell 2014). Allerdings weist es mit einem Responsefaktor von 4,6 eine deutliche Abweichung auf, sodass Rohwerte des PID entsprechend korrigiert werden müssen (RAE Systems by Honeywell 2014). Aufgrund dieser klar definierten Korrektur und seiner hohen Flüchtigkeit eignet sich Isopropanol ideal als Referenzsubstanz zur Überprüfung der Linearität und Genauigkeit von FID und PID (Hori *et al* 2015).

2.6.4 Annahme der Ölzusammensetzungen

Die in Tabelle 2 dargestellten Zusammensetzungen von Ylang-Ylang- und Teebaumöl basieren auf publizierten Literatur- und Normquellen. Für Teebaumöl wurden die Angaben der ISO 4730:2017 sowie die Bewertung des Scientific Committee on Consumer Safety (Scientific Committee on Consumer Safety (SCCS) 2025, International Organization for Standardization 2017) herangezogen, die typische Konzentrationsbereiche der Hauptkomponenten wie Terpinen-4-ol, γ -Terpinen und α -Terpineol festlegen. Für Ylang-Ylang-Öl wurde die Zusammensetzung aus der Übersichtsarbeit sowie ergänzender Literatur zu charakteristischen Monoterpenen, Sesquiterpenen und Estern übernommen (Tan *et al* 2015, Chakira *et al* 2022). Da ätherische Öle eine natürliche Variabilität in Abhängigkeit von Herkunft, Erntezeitpunkt und Destillation aufweisen, wurden diese Literaturangaben in dieser Arbeit als repräsentative Zusammensetzung für die eingesetzten Proben angenommen. Die so gewonnenen Daten dienen als Grundlage für die Berechnung der Mischungs-

Responsefaktoren (RF_{mix}), die ausschließlich als orientierende Korrekturwerte zu verstehen sind. Für die Bewertung der Messergebnisse bleibt der empirisch bestimmte RF_{emp} maßgeblich.

2.6.5 Surrogat-Methode

Für viele Komponenten ätherischer Öle liegen in der Literatur keine spezifischen Responsefaktoren (RF) für den PID vor (RAE Systems by Honeywell 2014). In solchen Fällen wird ein Surrogat Verfahren angewendet: Einer Verbindung ohne tabellierten RF wird ein chemisch ähnlicher Stoff mit vergleichbarer Ionisationsenergie und funktionellen Gruppen zugeordnet, für den ein RF bekannt ist (Liaud and et al. 2014). Auf diese Weise lassen sich auch für komplexe Gemische orientierende Mischungs-Responsefaktoren (RF_{mix}) berechnen (Poole 2015). Dieses Vorgehen ist in der Literatur etabliert und wird insbesondere in praxisorientierten Studien zur VOC-Analytik angewendet (Frausto-Vicencio and et al. 2021).

Tabelle 2: Darstellung der Zusammensetzung der verwendeten Substanzen

Substanz/Bestandteil	Stoffklasse	Anteil (typisch) [%]	RF (PID, 10,6 eV)	Surrogat
Ylang-Ylang Öl				
Linalool	Monoterpen- Alkohol	26	5,1	n-Propanol
Benzylacetat	Ester	20	1,3	Methyl-benz
p-Kresyl-methyl-ether	Aromat	12	0,89	Anisol
Benzylbenzoat	Ester	12	1,3	Methyl-benzoat
Germacren D	Sesquiterpen	6	0,37	Terpentin
β-Caryophyllen	Sesquiterpen	6	0,37	Terpentin
Geranylacetat	Ester	6	2,27	n-Propylacetat
Methylbenzoat	Ester	4	1,3	-
1,8-Cineol (Eucalyptol)	Ether	1	2,3	1,3-Dioxolan
Farnesol	Sesquiterpen	2	5,1	n-Propanol
α-Farnesen	Sesquiterpen	2	0,37	Terpentin
Benzylsalicylat	Ester	3	1,3	Methyl-benzoat

Substanz/Bestandteil	Stoffklasse	Anteil (typisch) [%]	RF (PID, 10,6 eV)	Surrogat
Teebaumöl				
Terpinen-4-ol	Monoterpen- Alkohol	41	5,1	n-Propanol
γ-Terpinen	Monoterpen	21	0,31	α-Pinen
α-Terpinen	Monoterpen	9	0,31	α-Pinen
p-Cymen	Aromat	4,5	0,45	Toluol
1,8-Cineol	Ether	5	2,3	1,3-Dioxolan
Terpinolen	Monoterpen	5	0,31	α-Pinen
α-terpineol	Monoterpen	3,5	5,1	n-Propanol
α-Pinen	Monoterpen	3	0,31	-
Sabinen	Monoterpen	3	0,31	α-Pinen
Limonen	Monoterpen	1,5	0,33	D-Limonen
Aromadendren	Sesquiterpen	1	0,37	Terpentin
Ledene	Sesquiterpen	0,5	0,37	Terpentin
δ-Kadinen	Sesquiterpen	0,5	0,37	Terpentin
Globulol	Sesquiterpen	0,5	5,1	n-Propanol
Viridiflorol	Sesquiterpen	0,5	5,1	n-Propanol

Substanz/Bestandteil	Stoffklasse	Anteil (typisch) [%]	RF (PID, 10,6 eV)	Surrogat
Reinigungsalkohol				
Isopropanol	Alkohol	70	4,6	-
Wasser	Anorganisch	30	Nicht VOC aktiv	-

2.7 Alternative Messverfahren zur VOC-Analyse

2.7.1 Fourier-Transformations-Infrarot-Spektroskopie (FTIR / NDIR)

Analytische FTIR-Verfahren ermöglichen die selektive Bestimmung von VOCs anhand ihrer charakteristischen Absorptionsspektren. Durch den Einsatz von Multipass-Gaszellen können Nachweisgrenzen im ppb-Bereich realisiert werden. Diese Technik bietet eine leistungsfähige, nicht-destruktive Alternative zur Echtzeitanalyse von Luftproben (D'Arco *et al* 2022).

2.7.2 Gaschromatographie mit verschiedenen Detektoren (GC-FID, GC-MS, GC-IMS)

Gaschromatographie (GC) gilt als Standardelement zur Analyse komplexer VOC-Gemische. In Verbindung mit FID oder MS lassen sich VOC-Komponenten präzise trennen und quantifizieren, wobei GC-MS die höchste Genauigkeit bietet (Dewulf and Van Langenhove 2002). Die Kombination aus GC und Ion-Mobility-Spektrometrie (GC-IMS) ermöglicht zudem schnelle Detektion und Klassifizierung in dynamischen Luftproben (Moura *et al* 2022).

2.7.3 Ion-Mobility-Spektrometrie (IMS, einschließlich GC-IMS)

IMS differenziert geladene Moleküle im Gaszustand aufgrund ihrer Mobilität unter einem elektrischen Feld. Studien zeigen, dass IMS VOCs im ppb- bis ppt-Bereich detektieren kann. Speziell GC-IMS erlaubt eine schnelle Analyse komplexer VOC-Matrizes – etwa in Innenraum- oder Umweltproben (Moura *et al* 2023).

2.7.4 Protonen-Transfer-Reaktions-Massenspektrometrie (PTR-MS)

PTR-MS analysiert VOCs in Echtzeit, ohne eine Probenzusammenstellung, dabei bietet es eine hohe Sensitivität, Spezifität und wird häufig in atmosphärischen und biogenen Emissionsstudien eingesetzt (Jensen *et al* 2023).

3 Eingesetzte Messgeräte

3.1 MiniRAE Lite+ (PID)

Der MiniRAE Lite+ ist ein tragbarer Photoionisationsdetektor (PID) der Firma RAE Systems/Honeywell (San Jose, USA). Er gehört zu den weltweit am häufigsten eingesetzten Geräten für die VOC-Screening-Analytik. Sein Messprinzip beruht auf der Ionisation organischer Moleküle durch UV-Strahlung, typischerweise mit einer 10,6 eV Lampe (Honeywell Analytics and Honeywell RAE Systems 2018).

3.1.1 Technische Eigenschaften

Das Gerät zeichnet sich durch eine hohe Empfindlichkeit aus und erlaubt Messungen im Bereich von 0,1 bis 5.000 ppm VOC. Die Auflösung beträgt 0,1 ppm, was eine präzise Erfassung selbst geringer Konzentrationen ermöglicht. Die Ansprechzeit liegt bei unter 3 Sekunden, wodurch schnelle Konzentrationsänderungen in Echtzeit verfolgt werden können (Honeywell Analytics and Honeywell RAE Systems 2018).

Ein wesentlicher Vorteil ist die Mobilität. Das Gerät wiegt weniger als 800 g und ist durch seinen Akku mehrere Stunden autark einsetzbar. Zudem ist keine externe Gasversorgung notwendig, was den PID für Vor-Ort-Begehungen und Screening-Messungen besonders attraktiv macht (DHS 2014).

3.1.2 Anwendungsbereiche

Der MiniRAE Lite+ wird primär eingesetzt zur:

- Überwachung von Arbeitsplatzgrenzwerten (AGW),
- Leckage-Suche an Tanks, Rohrleitungen und Prozessanlagen,
- Screening-Messungen bei industriellen Emissionen und
- Gefahrenstoffüberwachung im Arbeitsschutz.

Besonders geeignet ist er in Situationen, in denen eine schnelle Entscheidung über eine VOC-Belastung getroffen werden muss, ohne dass sofort eine umfassende analytische Laboruntersuchung nötig ist (LUBW Landesanstalt für Umwelt 2011).

3.1.3 Grenzen

Die Störanfälligkeit gegenüber Luftfeuchtigkeit stellt eine der zentralen Einschränkungen dar. Ab einer relativen Feuchte von über 90 % kann es zu deutlichen Signalunterdrückungen kommen (Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014). Zudem können nicht alle Stoffe erfasst werden. Die Moleküle mit einer Ionisationsenergie oberhalb von 10,6 eV, wie Methan

oder Kohlendioxid, können von dem Messgerät nicht erfasst werden (DHS 2014). Ein weiterer limitierender Faktor ist die regelmäßige Wartung der UV-Lampe, deren Intensität mit der Zeit nachlässt (Rezende *et al* 2020).

3.2 iFiD Mobile (FID)

Der iFiD Mobile ist ein tragbarer Flammenionisationsdetektor (FID), der speziell für die Vor-Ort-Analytik von flüchtigen organischen Verbindungen entwickelt wurde. Er kombiniert die hohe Genauigkeit klassischer FID-Systeme mit einer für Feldmessungen optimierten und kompakten Bauweise (Dr. Ulrich 2019).

3.2.1 Technische Eigenschaften

Das Gerät arbeitet nach dem klassischen Flammenionisationsprinzip, bei dem organische Moleküle in einer Wasserstoff-Luft-Flamme ionisiert werden und der dabei entstehende Ionenstrom proportional zur Kohlenstoffkonzentration gemessen wird (Zimmermann *et al* 2002). Der Messbereich des iFiD Mobile liegt zwischen 0,01 und 10.000 ppm C, womit sowohl Spurenanalysen als auch hohe Konzentrationen zuverlässig erfasst werden können. Der iFiD Mobile verfügt über eine automatische Nullpunkt- und Spanneinstellung, die eine schnelle Kalibrierung vor Ort ermöglicht. Als Kalibriergas wird üblicherweise Methan oder Propan eingesetzt, wodurch die Ergebnisse auf Kohlenstoffäquivalente normiert werden (Winskowski 1983). Im Gegensatz zu PIDs benötigt der FID eine kontinuierliche Versorgung mit Wasserstoff und in einigen Fällen mit Null Gas (Stickstoff oder synthetische Luft). Trotz dieses Nachteils bietet er eine größere Robustheit und Linearität im Vergleich zu photonischen Verfahren (Poole 2015).

3.2.2 Anwendungsbereiche

Der iFiD Mobile wird vorrangig in der gesetzlich geregelten Emissionsüberwachung eingesetzt, da er als Referenzmethode in der TA Luft und in der DIN EN 12619 verankert ist (Deutsches Institut für Normung (DIN) 2013, Bundesministerium für Umwelt 2021).

Typische Einsatzgebiete sind:

- Überwachung industrieller Emissionen (z. B. Abgasreinigung, Anlagenüberwachung),
- VOC-Bestimmung in der Umgebungsluft,
- Überprüfung gesetzlicher Grenzwerte nach TA-Luft und
- Qualitätssicherung in Labor- und Feldmessungen.

Aufgrund seiner Genauigkeit ist der iFiD Mobile besonders geeignet, wenn rechtlich belastbare Messungen erforderlich sind.

3.2.3 Grenzen

Die größten Einschränkungen ergeben sich aus dem Betrieb mit Wasserstoffgas, was zusätzliche Sicherheitsvorkehrungen erfordert. Zudem ist das Gerät schwerer und weniger handlich als ein PID-System, was die Mobilität einschränkt. Weiterhin ist eine Aufwärmphase von mehreren Minuten notwendig, bis die Flamme stabil ist (Zimmermann et al 2000). Im Gegenzug liefert der iFiD Mobile aber deutlich robustere und rechtssichere Messdaten, was ihn für regulative Anwendungen unverzichtbar macht.

4 Methodik, Versuchsaufbau und -durchführung

In der Literatur werden zum Einsatz von Photoionisationsdetektoren (PID) unterschiedliche Versuchsaufbauten beschrieben, die sich in Laboraufbauten mit kontrollierten Bedingungen und Feldaufbauten unter Praxisbedingungen unterscheiden (Liaud and et al. 2014, Frausto-Vicencio and et al. 2021, DHS 2014, Hori *et al* 2015).

Laboraufbauten zeichnen sich in der Regel dadurch aus, dass definierte Gasgemische in geschlossenen Probenahmekammern oder Teflon-Bags eingebracht werden (Liaud et al. 2014). Über Massenflussregler (MFC) können die Konzentrationen in den Bereichen von ppb bis ppm eingestellt werden, um so sowohl die Linearität als auch die Nachweisgrenzen des PID zu überprüfen (Frausto-Vicencio and et al. 2021). Darüber hinaus wird die Luftfeuchtigkeit gezielt reguliert, etwa durch den Einsatz von Gaswaschflaschen oder Trockengasen, um den Einfluss von Feuchtigkeit systematisch zu untersuchen (Liaud and et al. 2014). Der PID wird dabei parallel zu einem Referenzverfahren, meist einem Gaschromatographen mit Flammenionisationsdetektor (GC-FID), betrieben, sodass Abweichungen in Empfindlichkeit und Signalantwort quantifiziert werden können (Frausto-Vicencio and et al. 2021).

Feldstudien fokussieren dagegen auf den praktischen Einsatz von PIDs direkt an Emissionsquellen oder in Innenräumen (DHS 2014). Hierbei stehen weniger exakt dosierte Konzentrationen im Vordergrund, sondern vielmehr die Bewertung der Praxistauglichkeit (Hori et al. 2015). Der PID wird dabei in realen Umgebungen parallel zu einem Referenz-FID eingesetzt, wobei Umgebungsbedingungen wie Temperatur und Luftfeuchtigkeit zwar dokumentiert, jedoch nicht aktiv kontrolliert werden (DHS 2014, Hori *et al* 2015). Diese Vorgehensweise erlaubt es, die Leistungsfähigkeit des PID unter Bedingungen zu beurteilen, wie sie auch im Arbeits- und Umweltschutz typischerweise vorliegen (Hori *et al* 2015).

Zusammenfassend zeigen die Literaturbeispiele, dass Laboraufbauten insbesondere zur Charakterisierung der messtechnischen Leistungsfähigkeit des PID (Sensitivität, Nachweisgrenze, Kreuzempfindlichkeit) dienen (Liaud and et al. 2014, Frausto-Vicencio and et al. 2021), während Feldaufbauten den praktischen Nutzen für Screening-Messungen und Vor-Ort-Bewertungen betonen (DHS 2014, Hori *et al* 2015).

Der in dieser Arbeit verwendete Versuchsaufbau nimmt eine Zwischenstellung zwischen diesen Ansätzen ein. Einerseits wurde, ähnlich wie in den Laborstudien, eine gezielte Auswahl von Substanzen getroffen, die unter reproduzierbaren Bedingungen untersucht wurden. Andererseits erfolgte keine Dosierung über Massenflussregler und auch keine gezielte Steuerung der Luftfeuchtigkeit. Stattdessen wurden die Messungen unter praxisnahen Bedingungen durchgeführt, wie sie typischerweise bei orientierenden Vor-Ort-Messungen auftreten.

Der Versuchsaufbau bestand aus einer luftdicht verschließbaren Kunststoffbox mit einem Volumen von etwa 55 Litern (Abbildung 3). Diese diente als Messkammer, in der die Substanzen freigesetzt und homogen verteilt wurden. Zur Sicherstellung einer gleichmäßigen Durchmischung der Luft im Innenraum wurde ein Ventilator in die Box integriert (Abbildung 4). Über seitliche Schlauchdurchführungen konnten die Messgeräte mit dem Innenraum verbunden werden, ohne dass Leckagen auftraten.

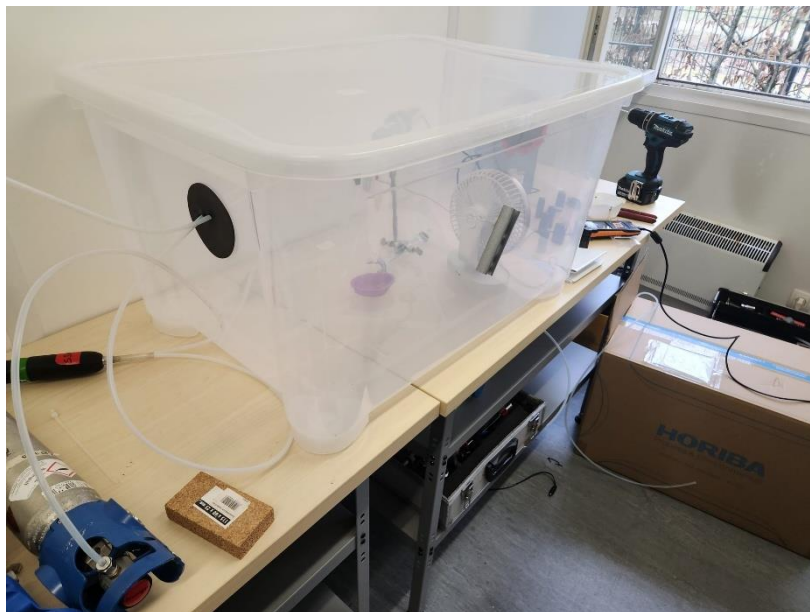


Abbildung 3: Versuchsaufbau der Messung



Abbildung 4: Darstellung der Messkammer

Die Flüssigproben bestehend aus zwei ätherischen Ölen und einem alkoholischen Lösungsmittel wurden in separaten Gefäßen (siehe lila Gefäß in Abbildung 4) bereitgestellt. Diese Gefäße wurden vor jeder Messung gereinigt, um Kreuzkontaminationen zu vermeiden. Der Eintrag der Proben erfolgte nach einem festgelegten Schema: Ätherische Öle wurden jeweils mit exakt 10 Tropfen dosiert, während beim Reinigungsalkohol (70 % Isopropanol) eine definierte Menge von 3 ml verwendet wurde. Durch diese Standardisierung konnte die Vergleichbarkeit der einzelnen Messungen gewährleistet werden.



Abbildung 5: Darstellung der Messgeräte MiniRAE Lite+ und iFiD Mobile

Als Messgeräte kamen ein MiniRAE Lite+ (PID, RAE-Systems/Honeywell) sowie ein iFiD Mobile (FID, Testa GmbH) zum Einsatz (Abbildung 5). Beide Messgeräte entnahmen die zu messende Luft über eine 60 cm lange PTFE-Leitung. Die Ansaugöffnung befand sich dabei nahe der Probenquelle. Beide Geräte zeichneten die Konzentrationen kontinuierlich mit einem Intervall von 5 sec auf. Ergänzend wurde die Temperatur, die Luftfeuchtigkeit und der Umgebungsdruck mit einem Testo 440 dokumentiert (Abbildung 6).

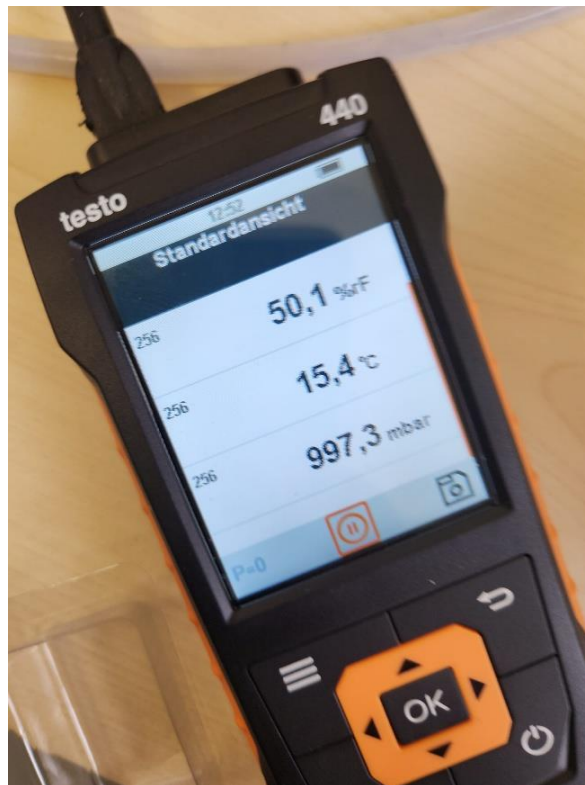


Abbildung 6: Dokumentation der Temperatur, der Luftfeuchtigkeit und des Umgebungsdruck mit dem Testo 440

Vor Beginn jeder Messung wurde die Box mit Frischluft durchlüftet bis beide Geräte einen stabilen Nullpunkt anzeigten. Erst danach erfolgte die definierte Probenzugabe. Dieses Vorgehen verhindert Störeinflüsse durch Restkonzentrationen vorheriger Substanzen und stellte reproduzierbare Ausgangsbedingungen sicher. Untersucht wurden drei verschiedene Substanzen mit repräsentativem VOC-Charakter: ätherisches Ylang-Ylang-Öl, ätherisches Teebaumöl, sowie Reinigungsalkohol (Isopropanol, 70 %). Neben den Standardbedingungen wurden zusätzlich Messungen unter erhöhter Luftfeuchtigkeit durchgeführt. Hierzu wurde der Innenraum der Box mithilfe einer Sprühflasche befeuchtet, sodass sich die relative Luftfeuchtigkeit deutlich erhöhte. Dieser Schritt diente der Untersuchung des Einflusses von Wasserdampf auf die Messgenauigkeit, da insbesondere PID-Systeme für Feuchtigkeitseinflüsse bekannt sind. Es wurden somit zwei vollständige Messreihen durchgeführt. Die erste unter trockenen Bedingungen (Trockenmessungen) und eine zweite unter feuchten Bedingungen (Feuchtmessungen). Durch diese systematische Versuchsanordnung war es möglich, die Messergebnisse beider Detektoren unter vergleichbaren Bedingungen zu erfassen und sowohl die Einflüsse der Substanzwahl als auch der Luftfeuchtigkeit auf die Messergebnisse zu bewerten.

5 Messergebnisse

5.1 Ylang-Ylang-Öl

5.1.1 Ylang-Ylang-Öl Trockenbedingungen

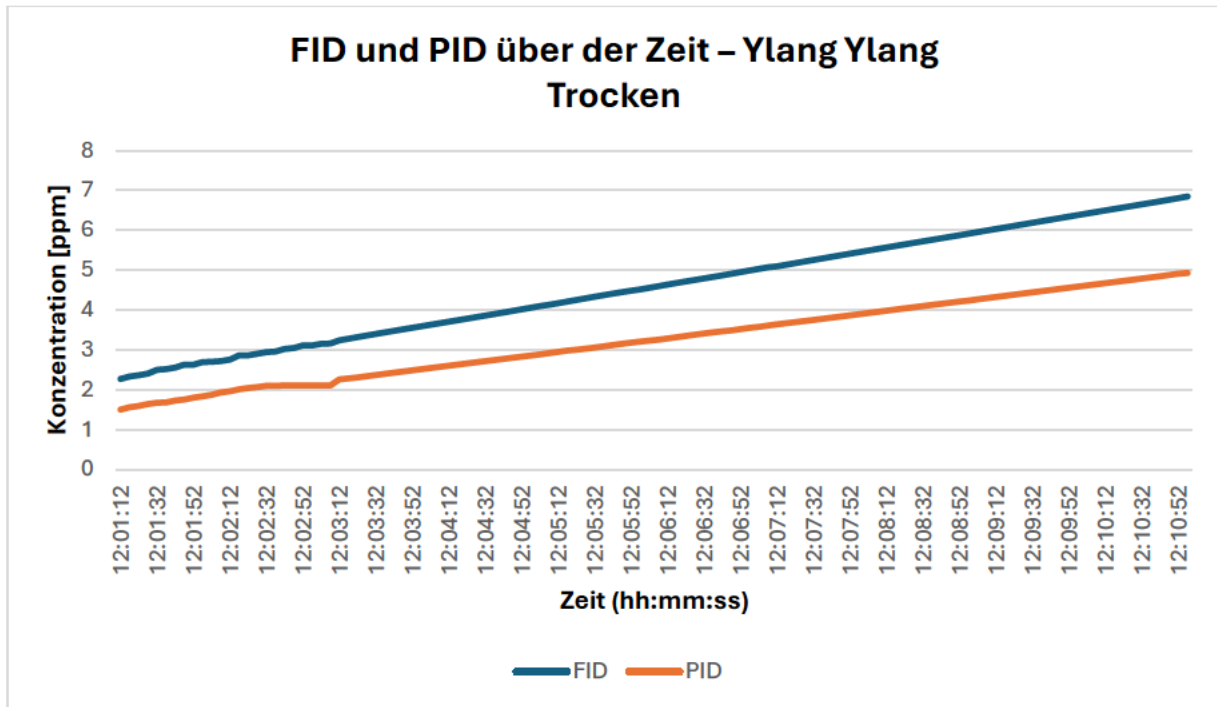


Abbildung 7: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit – Ylang Ylang-Öl Trocken

Tabelle 3: Darstellung der Messergebnisse von Ylang Ylang-Öl während der Trockenbedingung

	FID	PID
Standartabweichung	1,327	0,982
Max	6,850	4,930
Mittelwert	4,580	3,249

Die Messungen unter Trockenbedingungen zeigen einen kontinuierlichen Anstieg der Konzentrationen sowohl im FID- als auch im PID-Signal (Abbildung 77). Der FID erreichte dabei einen Maximalwert von 6,850 ppm, während der PID bei 4,930 ppm lag. Die berechneten Mittelwerte betrugen für den FID 4,580 ppm und für den PID 3,249 ppm. Die Standardabweichungen lagen bei 1,327 ppm (FID) und 0,982 ppm (PID), was auf eine stabile Signalentwicklung mit geringen Schwankungen hinweist.

5.1.2 Ylang-Ylang-Öl Trockenbedingungen mit R_{emp}

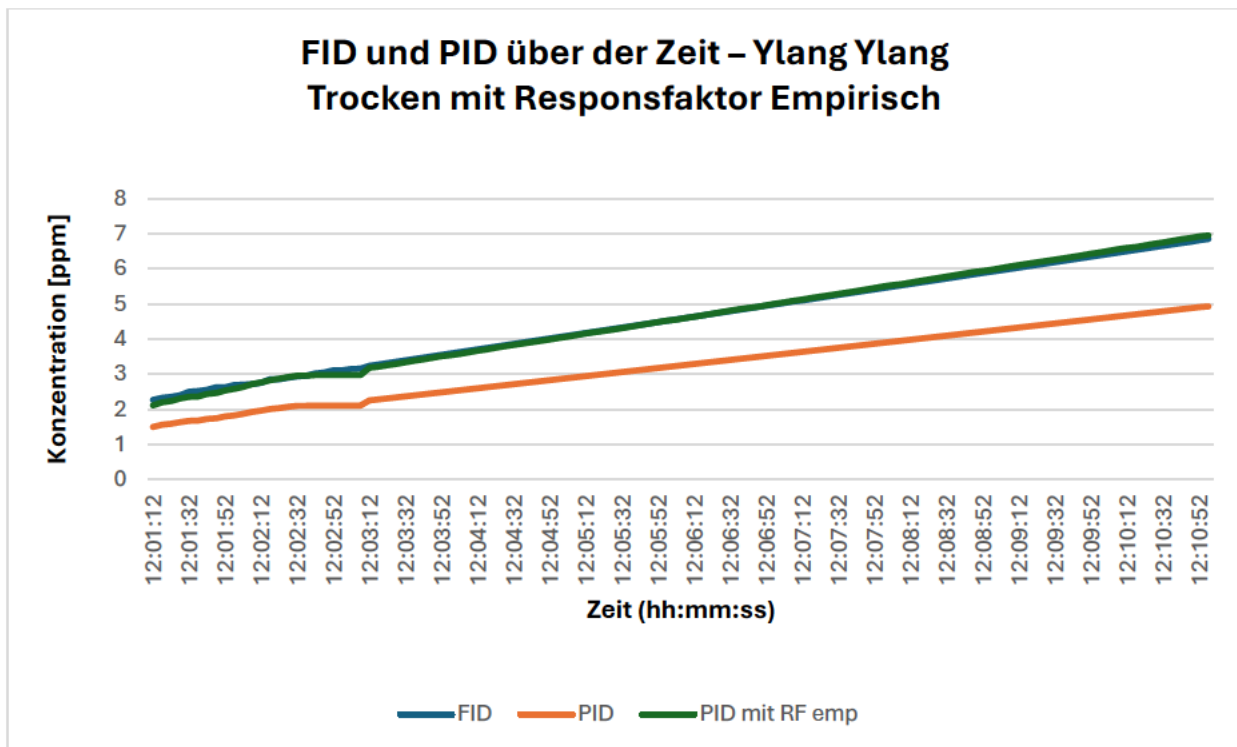


Abbildung 8: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Ylang Ylang-Öl Trocken mit dem R_{emp}

Tabelle 4: Darstellung der Messergebnisse von Ylang Ylang-Öl während der Trockenbedingung mit dem R_{emp}

Responsefaktor = 1,410	FID	PID
Standartabweichung	1,327	1,384
Max	6,850	6,950
Mittelwert	4,581	4,581

Bei Anwendung des empirisch bestimmten Responsefaktors auf die PID-Messwerte zeigte sich eine deutliche Annäherung der Ergebnisse an die FID-Signale (Abbildung 88). Der berechnete RF_{emp} lag bei 1,410. Die Maximalwerte betrugen 6,8510 ppm (FID) und 6,950 ppm (PID nach Korrektur). Die Mittelwerte lagen mit jeweils 4,581 ppm für beide Systeme identisch. Die Standardabweichung betrug 1,327 ppm beim FID und 1,384 ppm beim PID, was auf eine vergleichbare Stabilität der Signale hinweist.

5.1.3 Ylang-Ylang-Öl Trockenbedingungen mit tabellarischem Mischungs-Responsefaktor

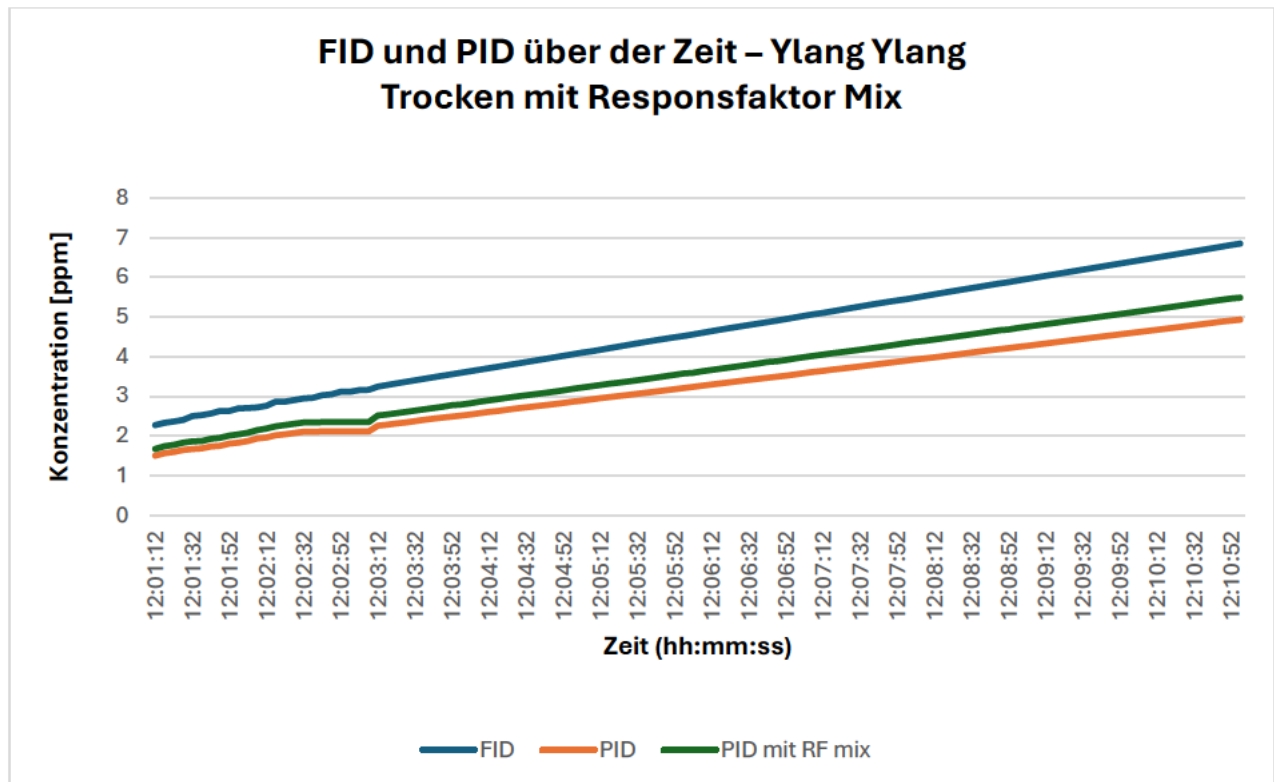


Abbildung 9: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Ylang Ylang-Öl Trocken mit R_{mix}

Tabelle 5: Darstellung der Messergebnisse von Ylang Ylang-Öl während Trockenbedingung mit dem R_{mix}

Responsefaktor = 1,112	FID	PID
Standartabweichung	1,327	1,092
Max	6,850	5,485
Mittelwert	4,581	3,615

Neben dem empirisch bestimmten RF wurde auch der tabellarisch abgeleitete Mischungs-Responsefaktor angewandt. Dieser basiert auf den in der Literatur beschriebenen typischen Zusammensetzungen von Ylang-Ylang-Öl sowie den in der Honeywell/RAE-Tabelle veröffentlichten Korrekturfaktoren (RAE Systems by Honeywell 2014). Für die Berechnung wurde der gewichtete Mittelwert der Komponenten berücksichtigt, woraus sich ein RF_{mix} von 1,112 ergab. Nach Anwendung dieses Faktors zeigte sich, dass die PID-Signale zwar näher an den FID-Werten lagen, die Korrektur jedoch nicht so präzise wie beim empirisch bestimmten RF war (Abbildung 99). Die Mittelwerte lagen bei 4,581 ppm (FID) und 3,615 ppm

(PID korrigiert mit RF_{mix}). Der maximale Wert betrug 6,850 ppm für den FID und 5,485 ppm für den PID nach Korrektur. Die Standardabweichung fiel mit 1,327 ppm (FID) und 1,092 ppm (PID) geringer aus als bei der empirischen Anpassung. Dies verdeutlicht, dass der tabellarische RF eine grundsätzliche Annäherung ermöglicht, die Genauigkeit aber hinter der empirischen Korrektur zurückbleibt.

5.1.4 Ylang-Ylang-Öl Feuchtbedingungen

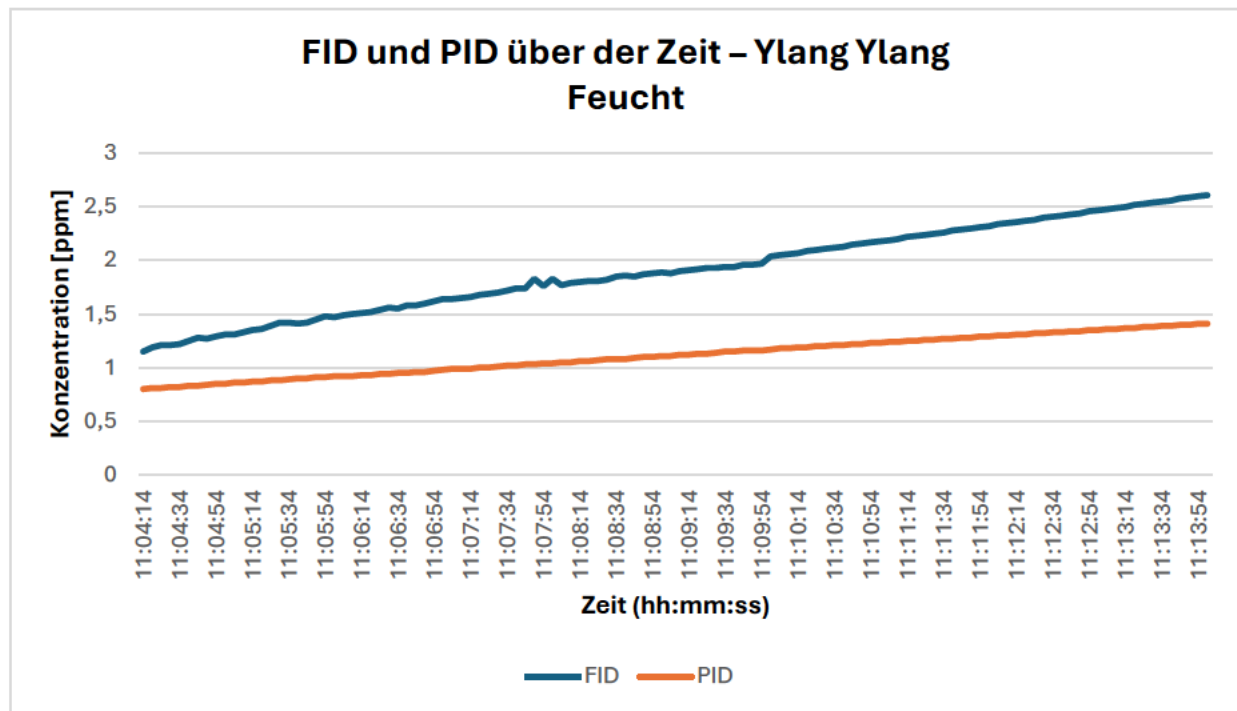


Abbildung 10: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Ylang Ylang-Öl Feucht

Tabelle 6: Darstellung der Messergebnisse von Ylang Ylang-Öl während der Feuchtbedingungen

	FID	PID
Standartabweichung	0,409	0,178
Max	2,610	1,410
Mittelwert	1,912	1,111

Unter Feuchtbedingungen zeigten die Messungen mit Ylang-Ylang-Öl insgesamt niedrigere Konzentrationen als unter Trockenbedingungen (Abbildung 1010). Der FID registrierte dabei einen kontinuierlichen Anstieg bis zu einem Maximalwert von 2,610 ppm, während der PID lediglich 1,410 ppm erreichte. Die Mittelwerte der beiden Geräte lagen bei 1,912 ppm (FID) und 1,111 ppm (PID). Die Standardabweichung war mit 0,409 ppm (FID) und 0,178 ppm (PID) im Vergleich zur Trockenmessung geringer, was auf eine stabilere Signalentwicklung hinweist.

Besonders auffällig ist, dass die Signalintensität des PID unter erhöhter Luftfeuchtigkeit stärker abgeschwächt wurde als die des FID. Dies entspricht auch den in der Literatur beschriebenen Einschränkungen des PID bei hoher Luftfeuchtigkeit (DHS 2014). Damit bestätigt die Messreihe, dass der PID unter feuchten Bedingungen deutlich niedrigere Messwerte liefert, während der FID in seiner Signalentwicklung robust bleibt.

5.1.5 Ylang-Ylang-Öl Feuchtbedingungen mit empirischem R_{emp}

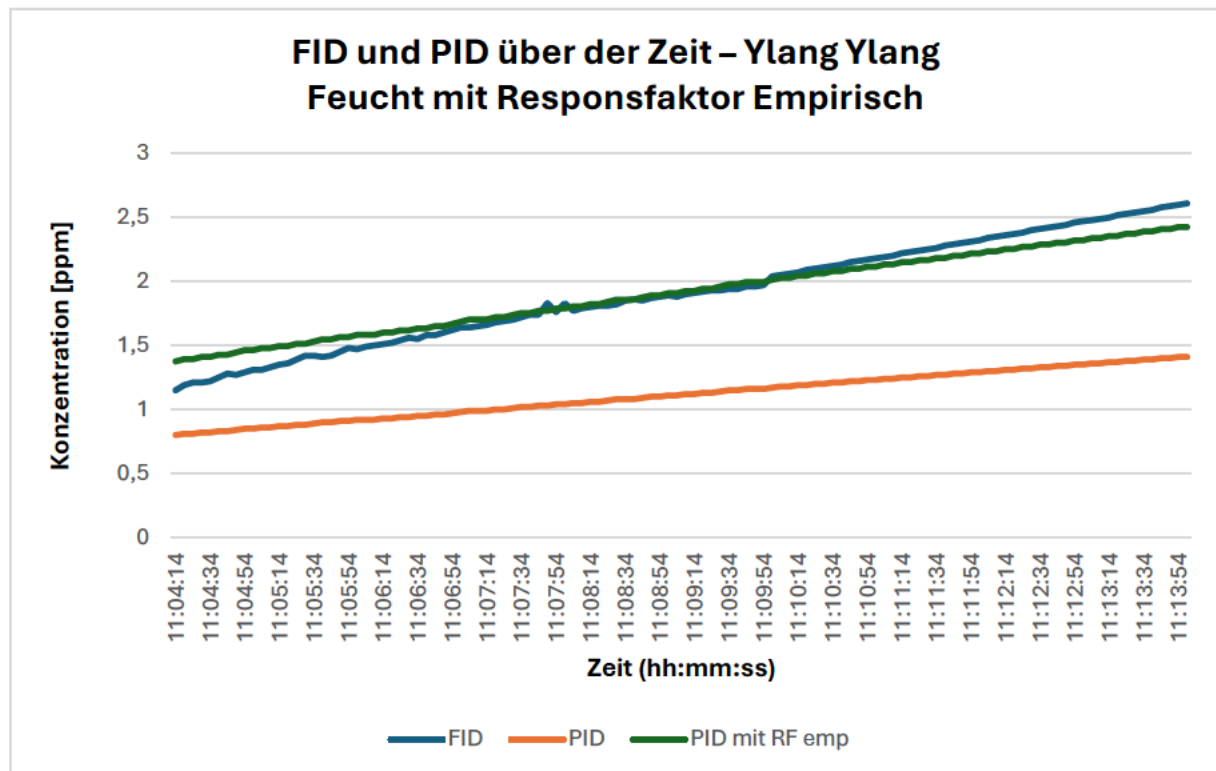


Abbildung 11: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Ylang Ylang-Öl Feucht mit dem R_{emp}

Tabelle 7: Darstellung der Messergebnisse von Ylang Ylang-Öl während der Feuchtbedingung mit dem R_{emp}

Responsefaktor = 1,719	FID	PID
Standartabweichung	0,409	0,306
Max	2,610	2,424
Mittelwert	1,912	1,912

Wird der empirisch berechnete Responsefaktor angewendet ($RF_{emp} = 1,719$), gleichen sich die PID-Werte den FID-Messungen deutlich besser an (Abbildung 11). Der Mittelwert des FID lag bei 1,912 ppm, während der korrigierte PID denselben Wert (1,912 ppm) erreichte. Auch die Maximalwerte näherten sich stark an (FID: 2,610 ppm, PID_{RF} : 2,424 ppm). Die

Standardabweichung blieb für beide Detektoren vergleichbar niedrig (0,409 ppm für den FID und 0,306 ppm für den PID mit RF). Dies zeigt, dass die empirische Korrektur den systematischen Unterschied zwischen FID und PID bei feuchten Bedingungen weitgehend ausgleicht. Damit wird deutlich, dass die Anwendung eines empirisch bestimmten Responsefaktors eine praktikable Methode darstellt, um die Messergebnisse des PID an die Referenzwerte des FID anzugleichen. Besonders unter erschwerten Messbedingungen wie erhöhter Luftfeuchtigkeit verbessert sich dadurch die Vergleichbarkeit der beiden Messsysteme erheblich.

5.1.6 Ylang-Ylang-Öl Feuchtbedingungen mit Mix-Responsefaktor

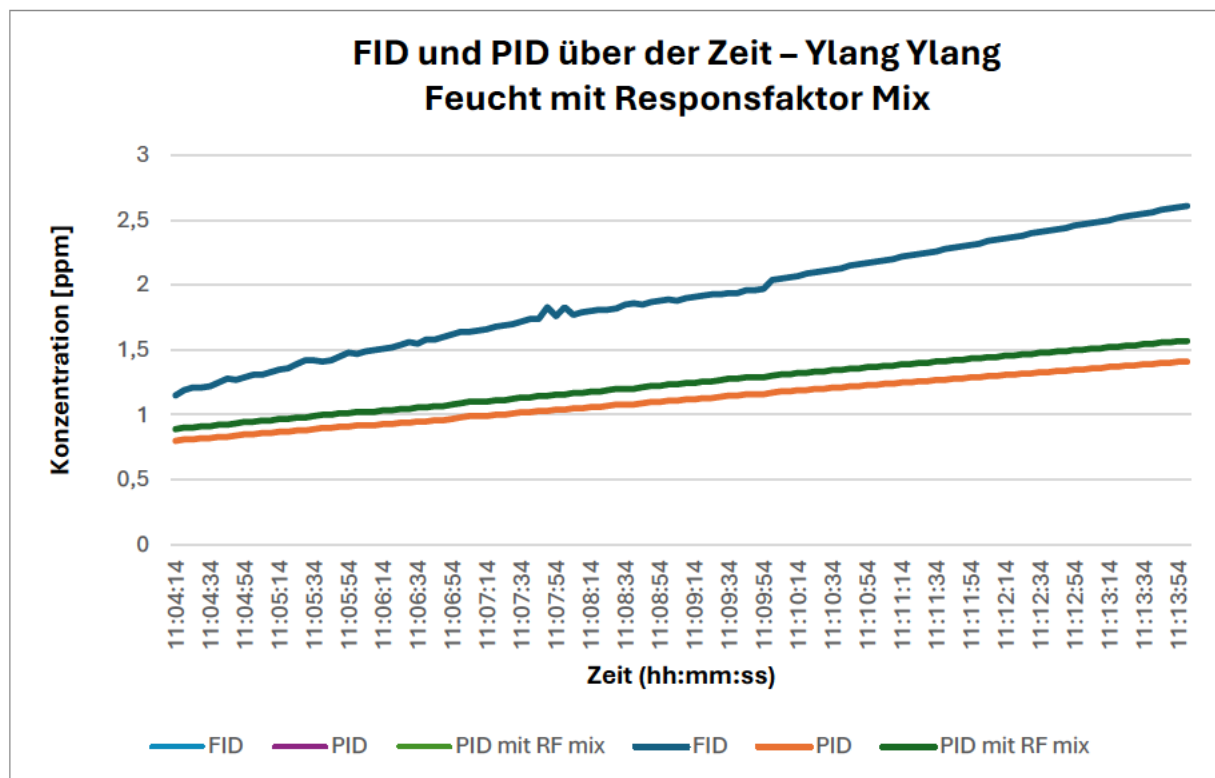


Abbildung 12: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Ylang Ylang-Öl Feucht mit R_{mix}

Tabelle 8: Darstellung der Messergebnisse von Ylang Ylang-Öl während der Feuchtbedingungen mit dem R_{mix}

Responsefaktor = 1,112	FID	PID
Standartabweichung	0,409	0,199
Max	2,610	1,568
Mittelwert	1,912	1,237

Unter Anwendung des tabellarisch abgeleiteten Mischungs-Responsefaktors ($RF_{\text{mix}} = 1,112$) zeigt sich eine deutliche, aber unvollständige Annäherung der PID-Werte an die FID-Signale (Abbildung 122). Während der Mittelwert des FID bei 1,912 ppm lag, erreichte der korrigierte PID lediglich 1,237 ppm. Die Maximalwerte wiesen eine noch größere Differenz auf: 2,610 ppm beim FID gegenüber 1,568 ppm beim PID mit RF_{mix} . Die Standardabweichungen blieben mit 0,409 pm (FID) und 0,199 ppm (PID_{mix}) zwar niedrig, spiegelten aber die geringere Signalintensität des PID wider. Insgesamt zeigt sich, dass die Anwendung des tabellarischen Mischungsfaktors die Werte zwar in die richtige Richtung verschiebt, die Diskrepanz zum FID jedoch nicht vollständig ausgeglichen wird. Dies ist auf die komplexe Zusammensetzung des Öls zurückzuführen, bei der die tabellarischen Responsefaktoren für Einzelkomponenten nicht die reale Matrix abbilden können. Der empirische Faktor (vgl. Kap. 5.1.4) führte hier zu einer deutlich besseren Übereinstimmung.

5.2.1 Teebaumöl Trockenbedingungen

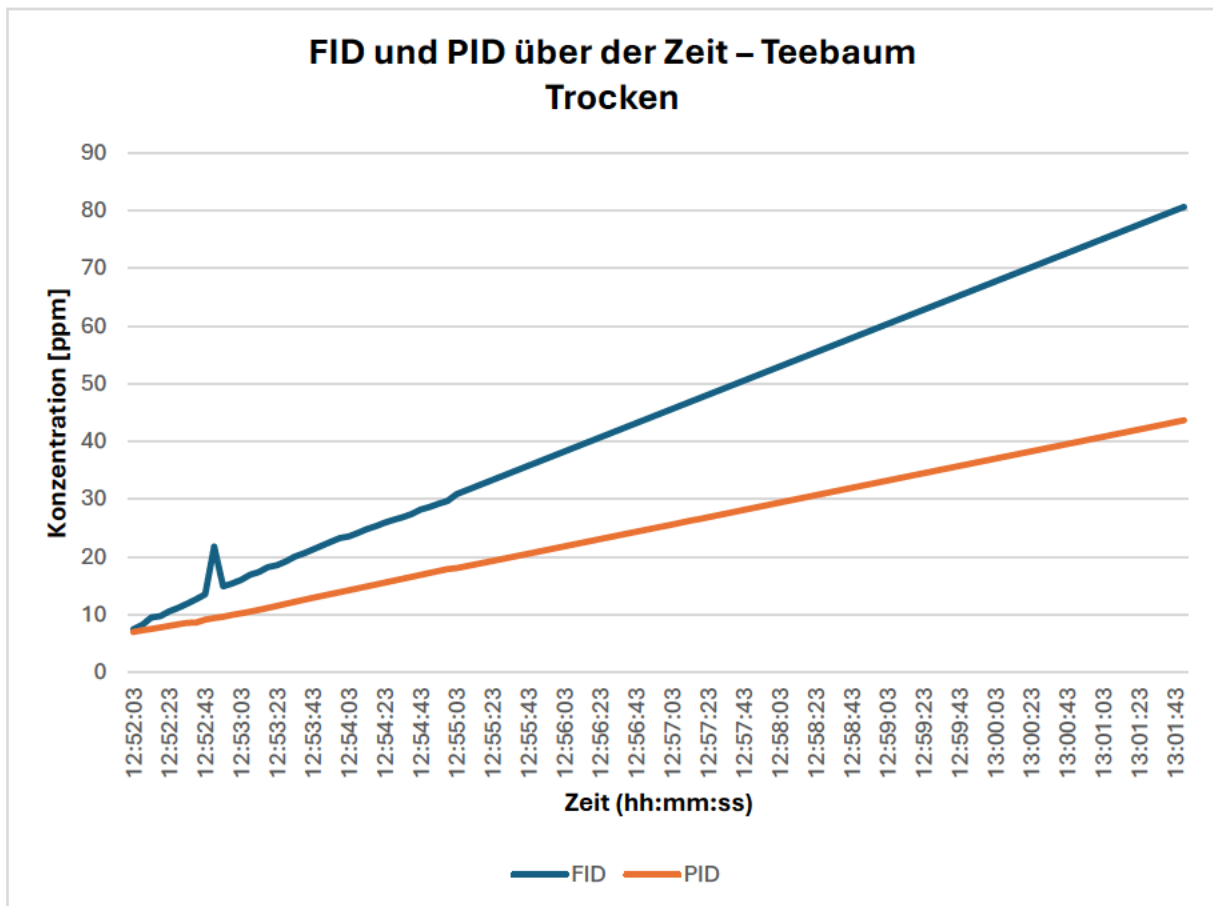


Abbildung 13: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit – Teebaum-Öl Trocken

Tabelle 9: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Trockenbedingungen

	FID	PID
Standartabweichung	21,014	10,779
Max	80,630	43,670
Mittelwert	44,715	25,157

Die Messungen mit Teebaumöl unter Trockenbedingungen zeigen eine deutliche Signaltrennung zwischen FID und PID (Abbildung 133). Der FID registrierte Maximalwerte von 80,630 ppm, während der PID lediglich 43,670 ppm erreichte. Auch die Mittelwerte verdeutlichen diesen Unterschied: 44,715 ppm beim FID gegenüber 25,157 ppm beim PID. Die Standardabweichungen lagen bei 21,014 ppm (FID) und 10,779 ppm (PID), was die insgesamt stärkere Signalstreuung im FID widerspiegelt. Trotz dieser Abweichungen verliefen beide Kurven über den gesamten Messzeitraum gleichmäßig ansteigend und zeigten eine weitgehend lineare Entwicklung. Diese Ergebnisse machen deutlich, dass der PID die VOC-Konzentrationen von Teebaumöl systematisch unterschätzt. Der Effekt fällt hier stärker aus als bei Ylang-Ylang-Öl, was auf die höhere Komplexität und Dominanz einzelner schwerer ionisierbarer Monoterpenalkohole im Teebaumöl zurückzuführen ist.

5.2.2 Teebaumöl Trockenbedingungen mit R_{emp}

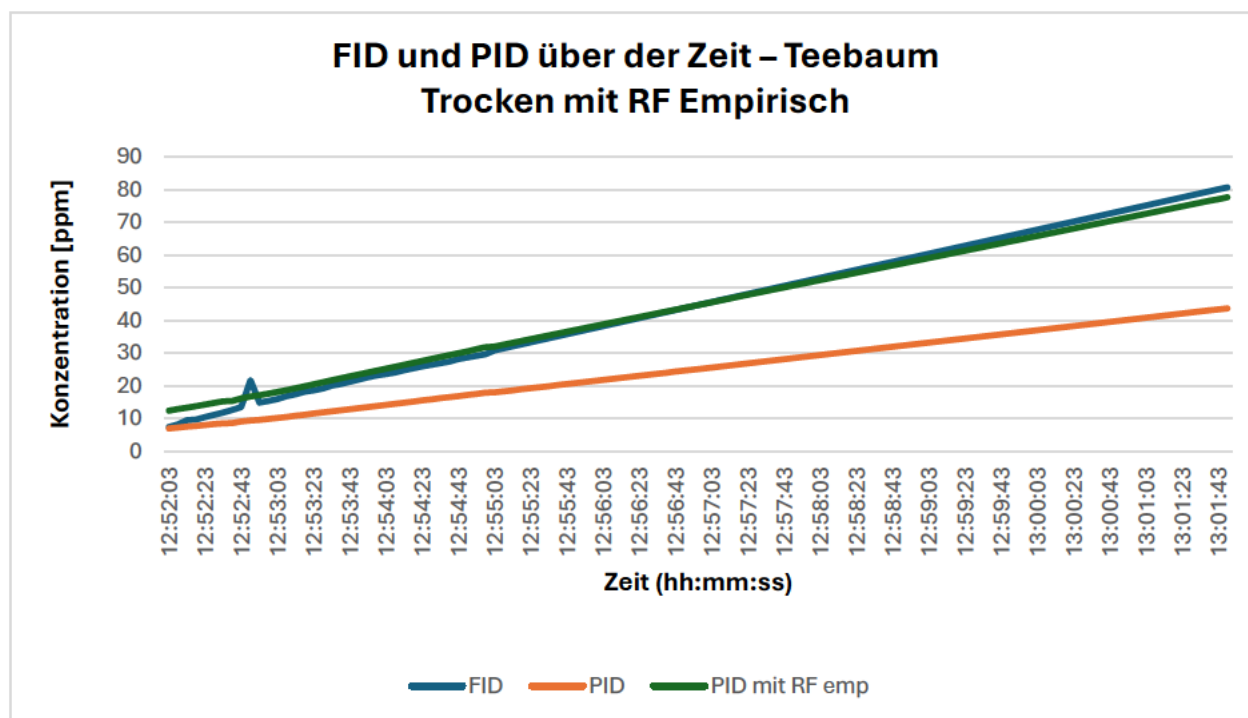


Abbildung 14: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit – Teebaum-Öl Trocken mit dem R_{emp}

Tabelle 10: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Trockenbedingungen mit dem R_{emp}

Responsefaktor = 1,777	FID	PID
Standartabweichung	21,015	19,160
Max	80,630	77,622
Mittelwert	44,715	44,715

Unter Anwendung des empirisch berechneten Responsefaktors ($RF_{emp} = 1,777$) konnte das PID-Signal an die FID-Messungen angepasst werden (Abbildung 144). Während das unveränderte PID-Signal im Mittel nur 44,715 ppm zeigte, ergab die Korrektur einen neuen Mittelwert von 44,715 ppm, der exakt mit dem FID übereinstimmt. Die Standardabweichungen lagen nach der Anpassung bei 21,015 ppm (FID) und 19,160 ppm (PID korrigiert), was auf eine vergleichbare Signalstreuung hinweist. Damit zeigt sich, dass der empirisch bestimmte Responsefaktor eine sehr gute Übereinstimmung zwischen beiden Detektoren herstellt. Besonders für komplex zusammengesetzte Proben wie Teebaumöl erweist sich diese Korrektur als geeigneter Ansatz, um die systematische Unterschätzung durch den PID weitgehend auszugleichen.

5.2.3 Teebaumöl Trockenbedingungen mit Mix-Responsefaktor

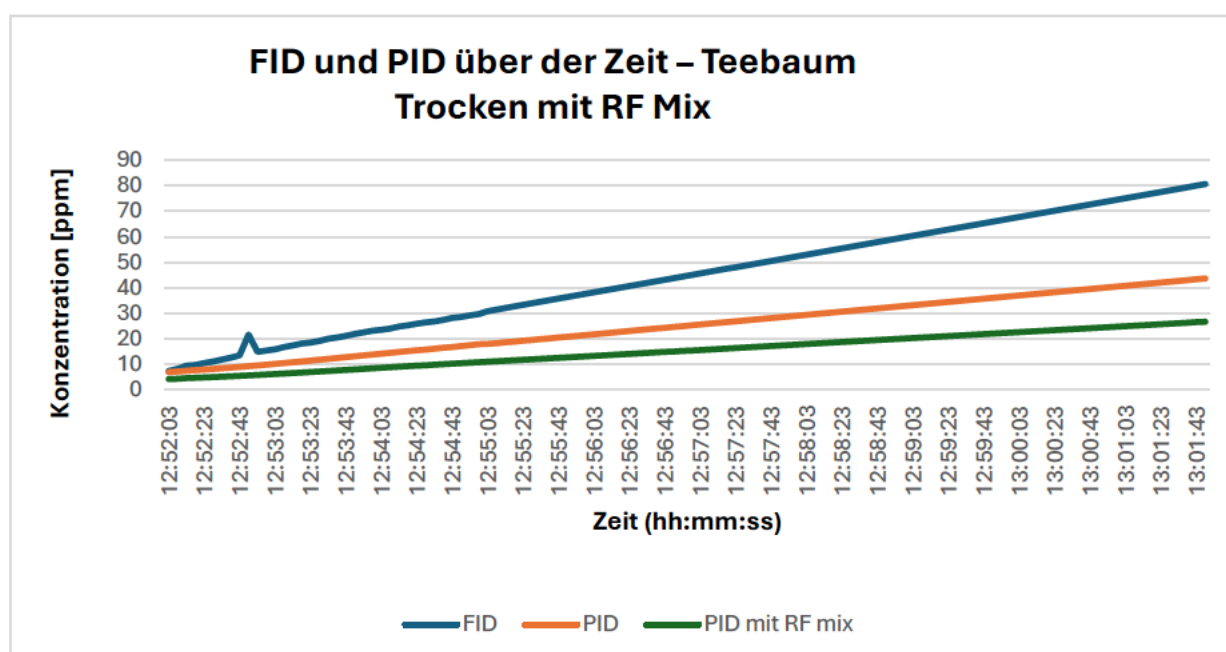


Abbildung 15: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Teebaum-Öl Trocken mit R_{mix}

Tabelle 11: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Trockenbedingungen mit dem R_{mix}

Responsefaktor = 0,612	FID	PID
Standartabweichung	21,014	6,601
Max	80,630	26,741
Mittelwert	44,715	15,405

Für die Berechnung des tabellarischen Responsefaktors ($RF_{\text{mix}} = 0,612$) wurde die Zusammensetzung des Teebaumöls anhand der Literaturwerte berücksichtigt und mit den von Honeywell veröffentlichten CF-Werten kombiniert. Die Anwendung dieses Faktors auf die PID-Messungen führte jedoch nicht zu einer zufriedenstellenden Angleichung an die FID-Ergebnisse (Abbildung 155). Während der FID im Mittel 44,715 ppm registrierte, erreichte das korrigierte PID-Signal nur 15,405 ppm. Auch die Maximalwerte zeigten eine deutliche Diskrepanz: 80,630 ppm (FID) gegenüber lediglich 26,741 ppm (PID korrigiert). Die Standardabweichung des korrigierten PID-Signals betrug 6,601 ppm, was zwar eine geringe Streuung zeigt, jedoch die starke systematische Abweichung nicht kompensieren kann. Diese Ergebnisse verdeutlichen, dass die tabellarische Berechnung des RF für komplexe Substanzgemische wie Teebaumöl nur eingeschränkt geeignet ist. Die Vielzahl an Einzelkomponenten mit unterschiedlichen Ionisationspotenzialen und Responsefaktoren kann mit einem gemittelten Faktor nicht adäquat abgebildet werden. Deutlich bessere Ergebnisse wurden mit dem empirisch bestimmten RF erzielt (vgl. Kap. 5.2.2).

5.2.4 Teebaumöl – Feuchtbedingungen

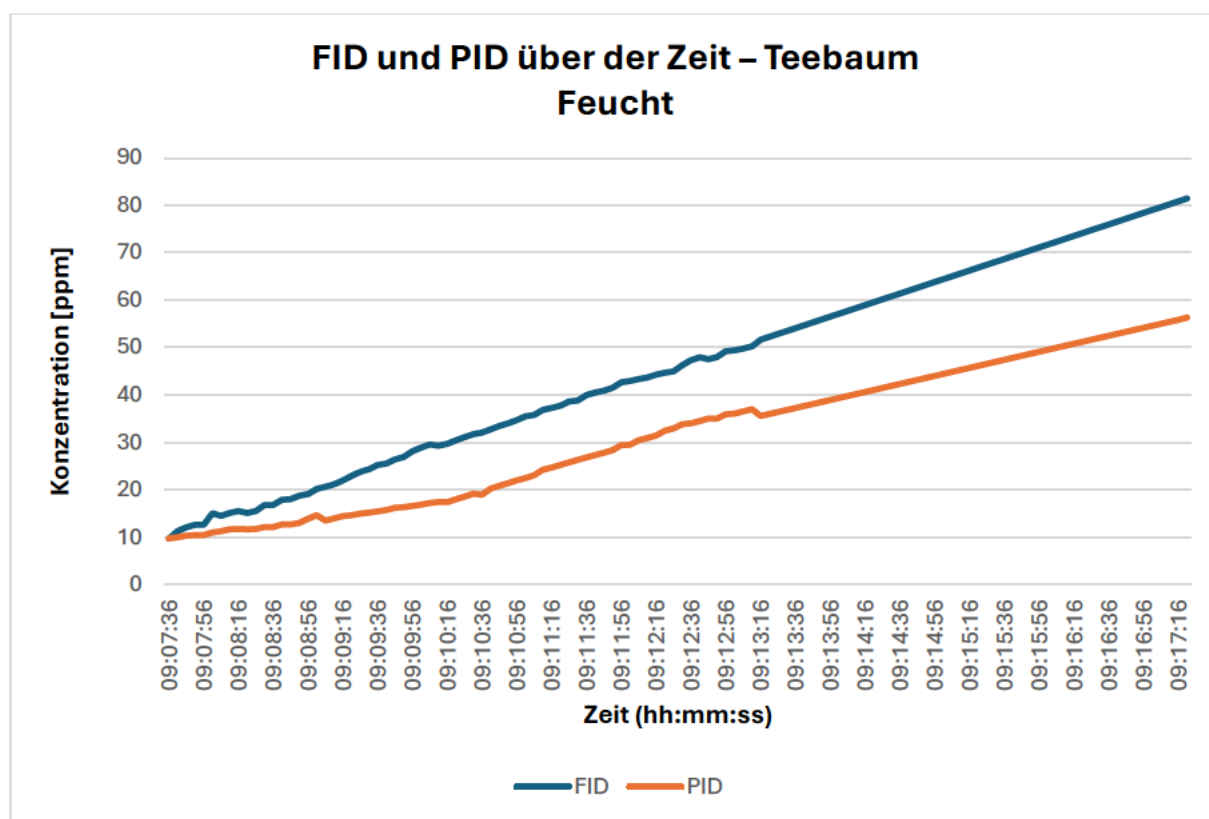


Abbildung 16: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Teebaum-Öl Feucht

Tabelle 12: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Feuchtbedingungen

	FID	PID
Standartabweichung	20,803	14,491
Max	81,450	56,300
Mittelwert	45,878	31,501

Unter erhöhter Luftfeuchtigkeit zeigten die Messungen mit Teebaumöl ein ähnliches Verhalten wie bei den Trockenmessungen, allerdings mit insgesamt niedrigeren Konzentrationen auf Seiten des PIDs. Der FID registrierte im Mittel 45,878 ppm, während der PID lediglich 31,501 ppm anzeigte (Abbildung 166). Die Maximalwerte lagen bei 81,450 ppm (FID) und 56,300 ppm (PID). Damit bestätigt sich auch unter Feuchtbedingungen die grundsätzliche Tendenz, dass der PID die tatsächliche Konzentration systematisch unterschätzt. Die Differenz zwischen beiden Detektoren ist im Vergleich zu den Trockenbedingungen leicht verringert, was möglicherweise mit Adsorptionseffekten oder einer veränderten Ionisationswahrscheinlichkeit durch den erhöhten Wasserdampfanteil zusammenhängt. Die Standardabweichung betrug

beim FID 20,803 ppm und beim PID 14,491 ppm, womit beide Geräte eine vergleichbare relative Streuung zeigten. Auffällig ist, dass der PID unter Feuchtbedingungen eine stabilere Signalentwicklung aufwies als in den Trockenmessungen, was darauf hindeutet, dass die Feuchtigkeit eine gewisse Dämpfung von Signalspitzen bewirkt. Insgesamt lässt sich feststellen, dass der PID unter Feuchtbedingungen ebenfalls niedrigere Konzentrationen misst als der FID, jedoch eine deutlich geglättete Signalcharakteristik zeigt. Dies bestätigt die bekannte Sensitivität photoionisationsbasierter Systeme gegenüber Luftfeuchtigkeit (DHS 2014, Hori *et al* 2015).

5.2.5 Teebaumöl – Feuchtbedingungen mit R_{emp}

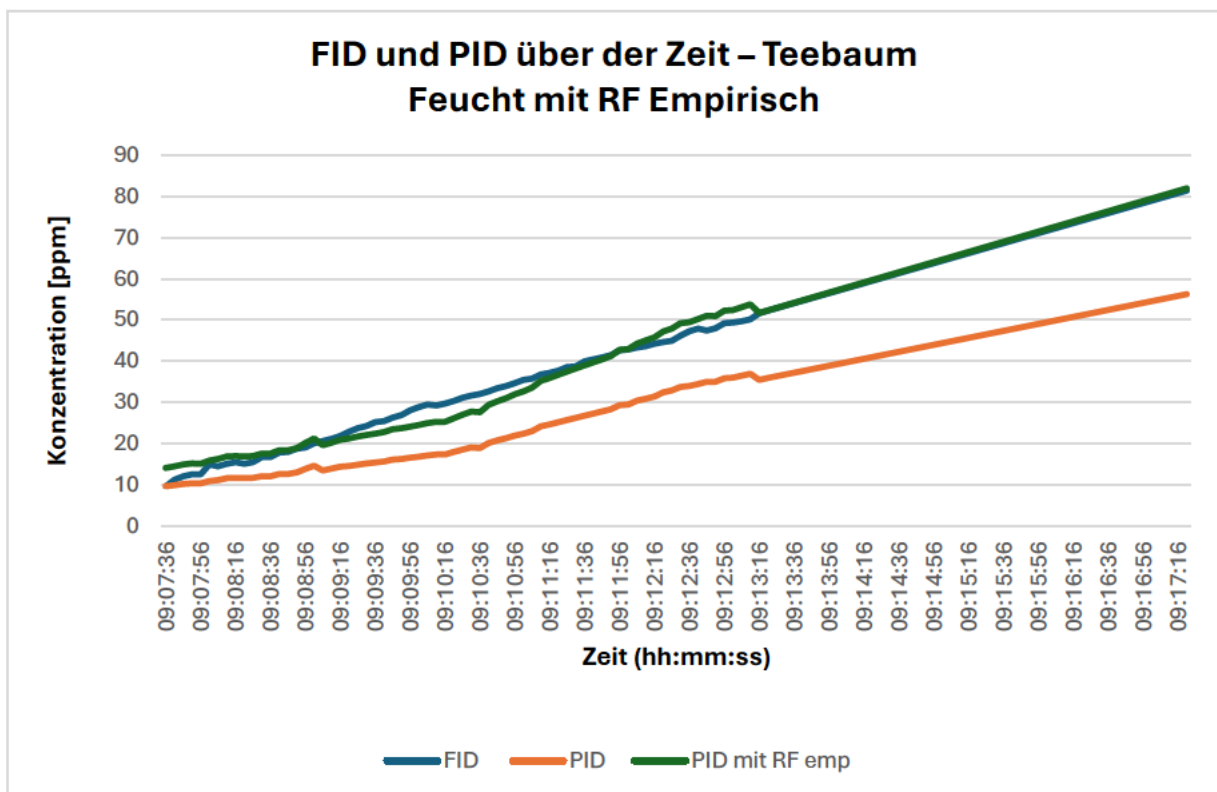


Abbildung 17: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Teebaum-Öl Feucht mit dem R_{emp}

Tabelle 13: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Feuchtbedingung mit dem R_{emp}

Responsefaktor =1,456	FID	PID
Standartabweichung	20,803	21,105
Max	81,450	81,994
Mittelwert	45,878	45,878

Zur Korrektur der PID-Daten unter Feuchtbedingungen wurde ein empirischer Responsefaktor berechnet. Dieser betrug 1,456 und wurde auf die PID-Messwerte angewandt.

Nach der Korrektur stimmten die Mittelwerte von FID und PID überein (45,878 ppm). Die Maximalwerte zeigten nur geringe Abweichungen (81,450 ppm FID und 81,994 ppm PID) voneinander. Die Standardabweichung lag bei 20,803 ppm (FID) und 21,105 ppm (PID), womit beide Geräte eine vergleichbare Signalstreuung aufwiesen. Das korrigierte Signal des PIDs verlief nun nahezu deckungsgleich mit dem des FIDs (Abbildung 177). Damit bestätigt sich, dass die Anwendung eines empirisch bestimmten RF die Abweichungen zwischen beiden Detektoren erheblich reduziert und die Vergleichbarkeit deutlich verbessert. Die Ergebnisse zeigen, dass der empirische RF unter Feuchtbedingungen zuverlässiger anwendbar ist als ein tabellarisch abgeleiteter Mischungs-RF, da dieser die tatsächliche Signalantwort der komplexen Öl-Matrix nicht vollständig erfassen kann. Dies unterstreicht die Relevanz experimenteller Kalibrierungen im praktischen Einsatz (vgl. Honeywell 2018; DHS 2014).

5.2.6 Teebaumöl – Feuchtbedingungen mit tabellarischem Mischungs-Responsefaktor

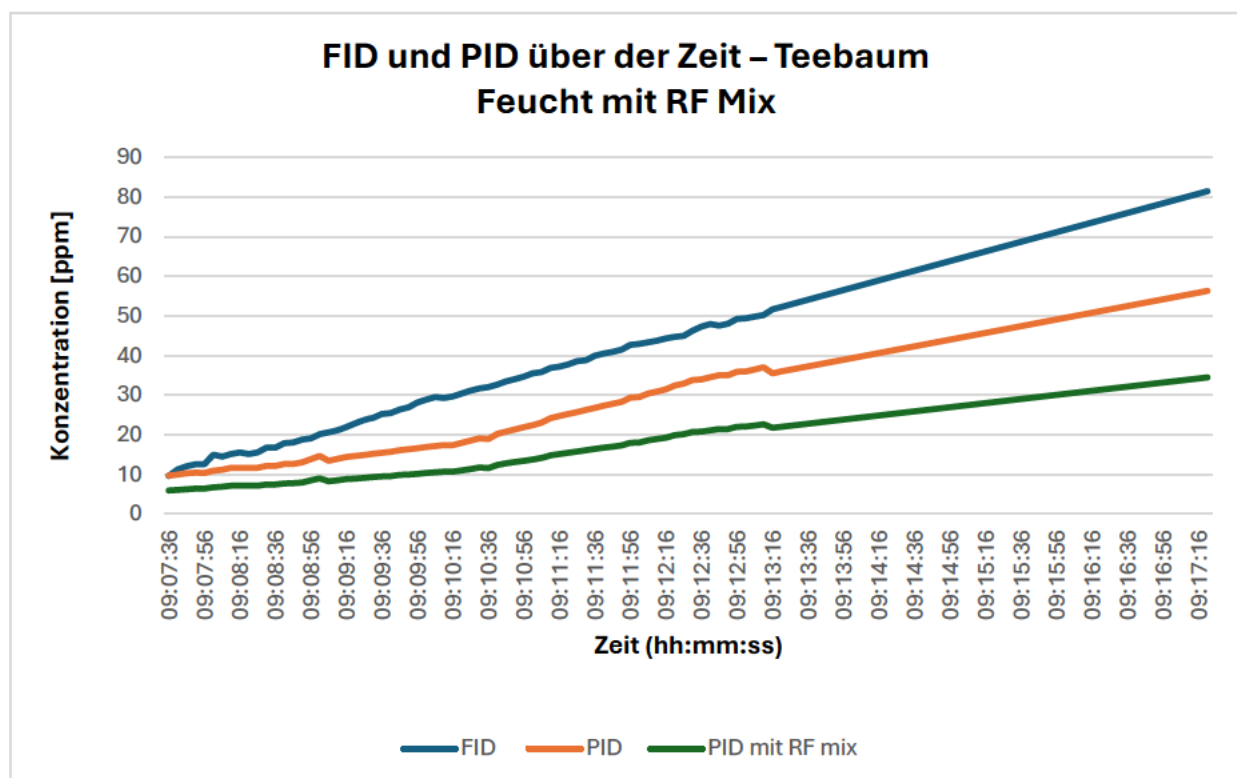


Abbildung 18: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Teebaum-Öl Feucht mit dem R_{mix}

Tabelle 14: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Feuchtbedingung mit dem R_{mix}

Responsefaktor = 0,612	FID	PID
Standartabweichung	20,803	8,874
Max	81,450	34,475
Mittelwert	45,878	19,290

Zur Korrektur der PID-Daten unter Feuchtbedingungen wurde ein tabellarisch abgeleiteter Mischungs-Responsefaktor (RF_{mix}) angewandt. Dieser betrug 0,612 und basiert auf den in der Honeywell/RAE-Tabelle veröffentlichten Korrekturfaktoren einzelner Ölkomponenten. Nach der Anwendung dieses Faktors ergaben sich für den FID ein Mittelwert von 45,878 ppm und ein Maximalwert von 81,450 ppm, während der korrigierte PID einen Mittelwert von 19,290 ppm sowie einen Maximalwert von 34,475 ppm aufwies. Die Standardabweichung lag bei 20,803 ppm (FID) und 8,874 ppm (PID). Trotz der Korrektur blieb eine deutliche Abweichung zwischen beiden Geräten bestehen, da der PID auch nach Anpassung deutlich niedrigere Konzentrationen registrierte (Abbildung 188). Dies verdeutlicht, dass die Anwendung tabellarischer Mischungsfaktoren bei komplexen Proben wie ätherischen Ölen nur eingeschränkt geeignet ist. Die große Bandbreite an VOC-Komponenten mit unterschiedlichen Ionisationspotenzialen führt dazu, dass eine pauschale tabellarische Korrektur nicht die gesamte Signalantwort abbilden kann. Die Ergebnisse unterstreichen, dass die Genauigkeit der PID-Daten bei komplexen Mischungen wie Teebaumöl durch empirisch bestimmte RF-Werte wesentlich besser gewährleistet werden kann als durch tabellarische Mischungen.

5.3.1 Isopropanol Trockenbedingungen

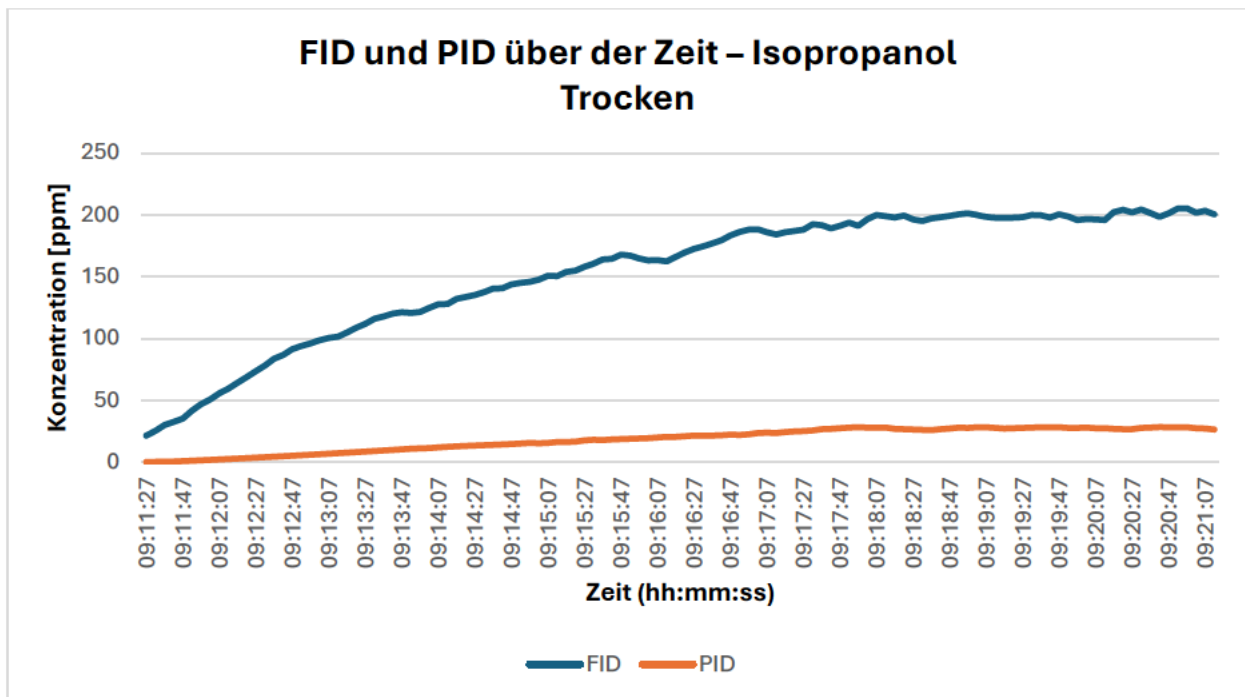


Abbildung 19: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Isopropanol Trocken

Tabelle 15: Darstellung der Messergebnisse des Isopropanols während der Trockenbedingung

	FID	PID
Standartabweichung	51,314	9,313
Max	205,240	28,350
Mittelwert	153,801	18,333

Unter Trockenbedingungen zeigte sich bei der Messung mit Isopropanol ein deutlicher Unterschied zwischen FID und PID. Der FID registrierte im Mittel 153,801 ppm mit einem Maximalwert von 205,240 ppm, während der PID einen deutlich niedrigeren Mittelwert von 18,333 ppm erreichte, mit einem Maximalwert von 28,350 ppm. Die Standardabweichung betrug 51,314 ppm beim FID und lediglich 9,313 ppm beim PID, was auf eine stärkere Signalstreuung des FID hinweist. Im Verlauf des Messintervalls (Abbildung 19) zeigte der FID eine stabile Signalentwicklung mit klar erkennbarer Sättigungstendenz oberhalb von 200 ppm. Der PID hingegen registrierte niedrigere Maximalwerte, allerdings mit insgesamt geringeren Schwankungen. Dies deutet darauf hin, dass der PID bei hohen Konzentrationen von Isopropanol weniger anfällig für Signalinstabilitäten ist, während der FID durch eine größere Streuung geprägt war. Die Messergebnisse verdeutlichen, dass der FID die erwartete

Referenzfunktion erfüllt und stabile Werte liefert, während der PID ohne Korrektur deutlich abweichende und niedrigere Konzentrationen anzeigt. Dies bestätigt die Notwendigkeit einer Korrektur mittels tabellarischem oder empirischem Responsefaktor.

5.3.2 Isopropanol – Trockenbedingungen mit R_{emp}

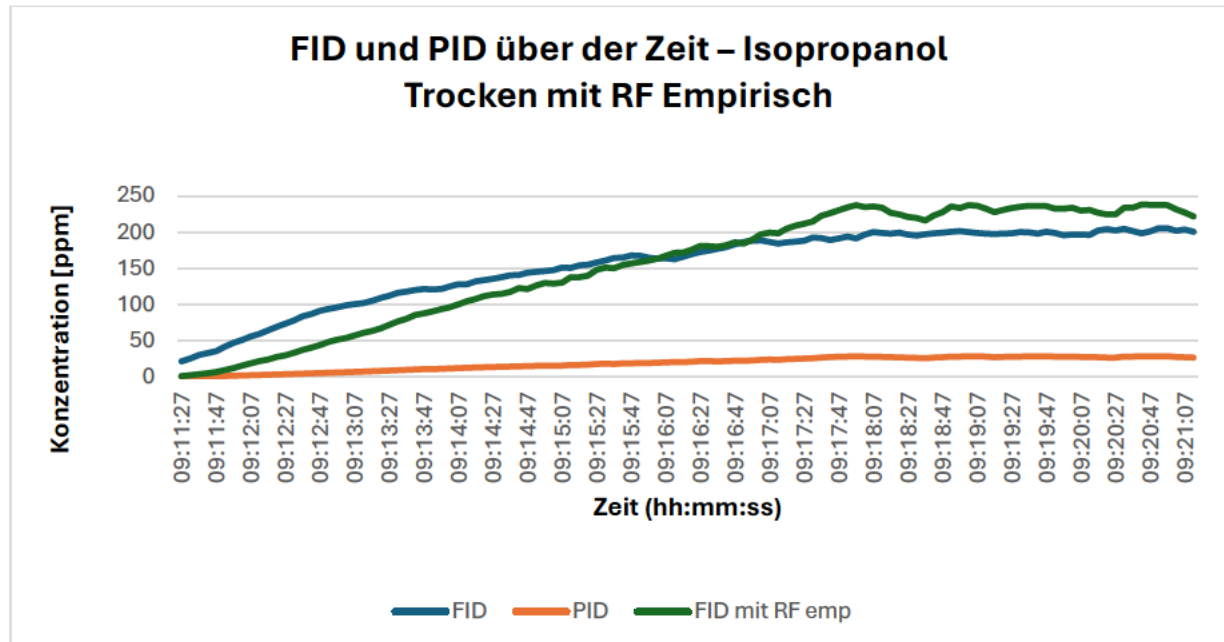


Abbildung 20: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Isopropanol Trocken dem R_{emp}

Tabelle 16: Darstellung der Messergebnisse des Isopropanols während der Trockenbedingung mit dem R_{emp}

Responsefaktor = 8,389	FID	PID
Standartabweichung	51,314	78,136
Max	205,240	237,836
Mittelwert	153,801	153,801

Zur Korrektur der PID-Daten wurde ein empirisch bestimmter Responsefaktor angewendet, der bei 8,389 lag. Dieser Wert wurde auf die PID-Messreihe übertragen, um die Abweichungen zum FID zu reduzieren. Nach der Korrektur näherten sich die Mittelwerte deutlich an. Der FID lag bei 153,801 ppm, während der korrigierte PID-Mittelwert 153,801 ppm betrug. Die Maximalwerte zeigten ebenfalls Unterschiede (205,204 ppm FID und 237,836 ppm PID korrigiert). Die Standardabweichung betrug 51,314 ppm (FID) und 78,136 ppm (PID korrigiert), was auf eine höhere Signalstabilität des korrigierten PID-Signals hinweist. Im Zeitverlauf (Abbildung 2020) wurde sichtbar, dass der korrigierte PID den Verlauf des FIDs insgesamt besser widerspiegelt, auch wenn die absolute Übereinstimmung nicht vollständig erreicht

wurde. Besonders in Phasen mit hohen Konzentrationen bleibt eine Differenz bestehen, was vermutlich auf nichtlineare Effekte im PID-Ansprechverhalten zurückzuführen ist. Die Ergebnisse verdeutlichen, dass die Anwendung eines empirischen RF zwar die Vergleichbarkeit verbessert, bei hohen Konzentrationen jedoch weiterhin systematische Unterschiede bestehen bleiben. Dies bestätigt, dass für Substanzen wie Isopropanol, die eine hohe Flüchtigkeit und starke PID-Antwort besitzen, eine tabellarische oder gerätespezifische Kalibrierung zuverlässiger ist.

5.3.3 Isopropanol – Trockenbedingungen mit RF_{mix}

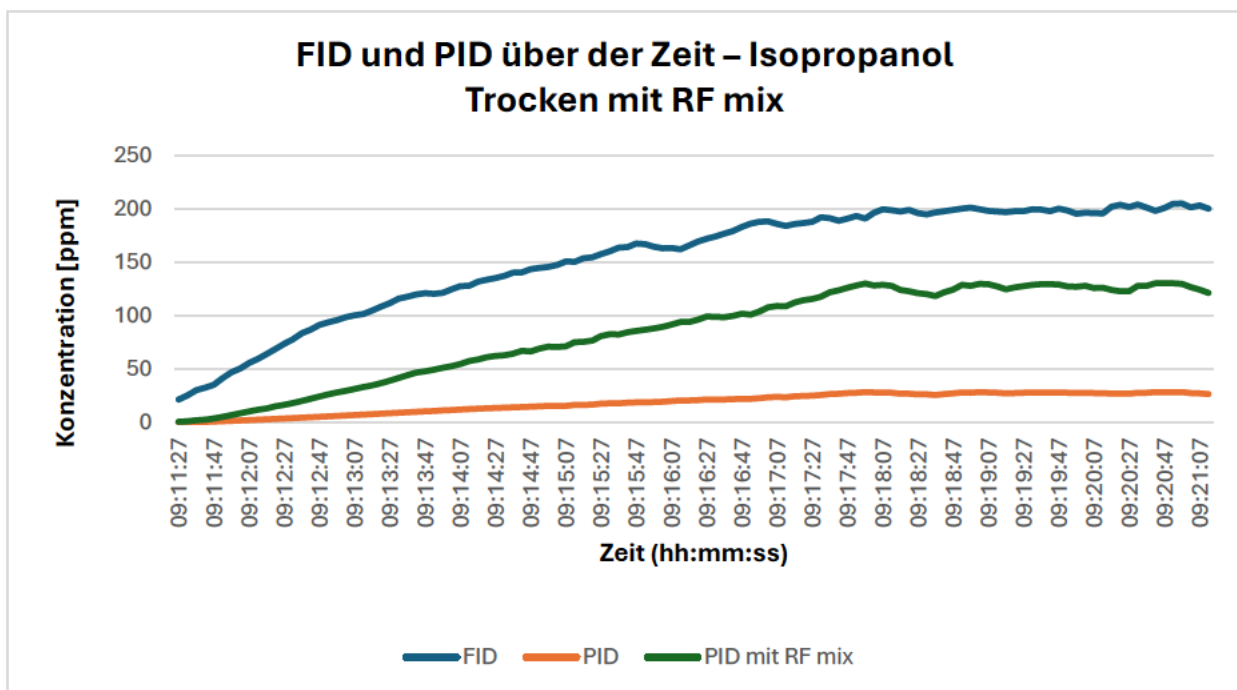


Abbildung 21: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Isopropanol Trocken dem R_{mix}

Tabelle 17: Darstellung der Messergebnisse des Isopropanols während der Trockenbedingung mit dem R_{mix}

Responsefaktor = 4,6	FID	PID
Standartabweichung	51,314	42,844
Max	205,240	130,410
Mittelwert	153,801	84,332

Neben dem empirisch bestimmten Responsefaktor wurde ein tabellarischer Mischungs-RF auf die PID-Daten angewendet. Dieser lag bei 4,6 und basiert auf den von Honeywell publizierten Responsefaktoren für Isopropanol (RAE Systems by Honeywell 2014). Die Korrektur führte dazu, dass der mittlere PID-Wert auf 84,332 ppm angehoben wurde, während der FID-

Mittelwert bei 153,801 ppm lag. Trotz der Anpassung bleibt damit eine deutliche Abweichung bestehen. Auch die Maximalwerte unterscheiden sich weiterhin erheblich (130,410 ppm PID korrigiert und 205,240 ppm FID). Die Standardabweichung des korrigierten PID-Signals betrug 42,844 ppm, während der FID mit 51,314 ppm eine etwas größere Streuung zeigte. Im zeitlichen Verlauf (Abbildung 211) zeigte sich, dass der korrigierte PID zwar näher an die FID-Kurve herangeführt wurde, jedoch insbesondere bei höheren Konzentrationen deutliche Unterschiede bestehen blieben. Dies unterstreicht die Limitierung tabellarischer RF-Werte, die nicht die gesamte Signalcharakteristik und Matrixeffekte realer Messungen abbilden können. Insgesamt zeigt sich, dass der tabellarische Mischungs-RF die Messwerte zwar in die richtige Größenordnung verschiebt, jedoch keine vollständige Angleichung an den FID erreicht. Dies bestätigt die höhere Praxistauglichkeit empirisch bestimmter RF-Werte, die direkt aus realen Messungen abgeleitet werden.

5.3.4 Isopropanol – Feuchtbedingungen

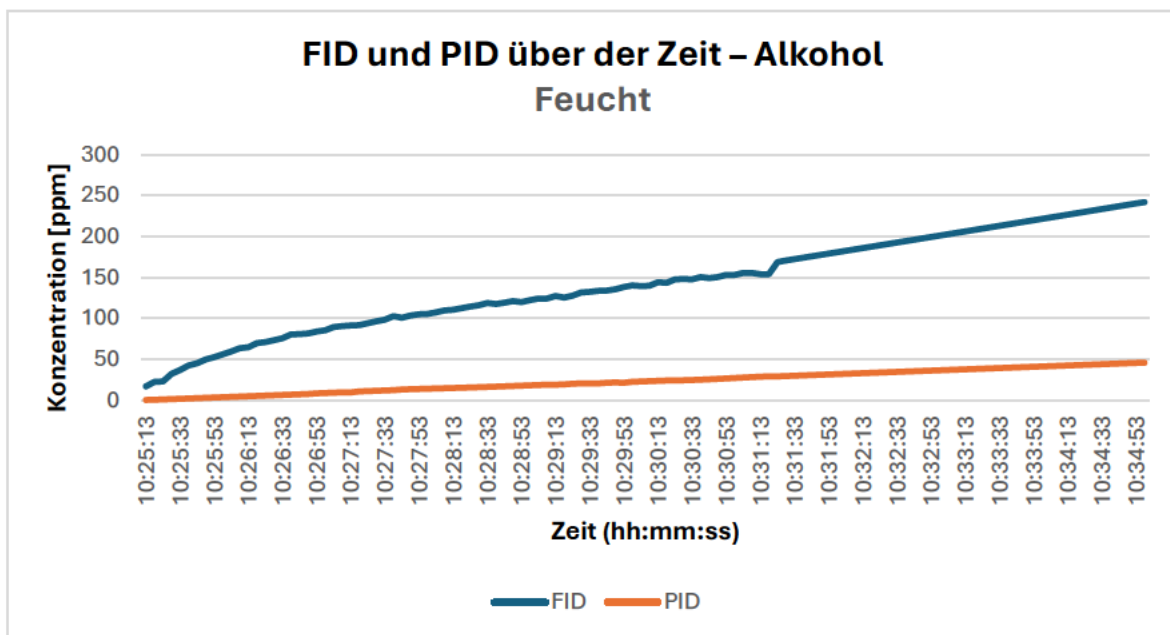


Abbildung 22: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Isopropanol mit Feuchtbedingungen

Tabelle 18: Darstellung der Messergebnisse des Isopropanols während der Feuchtbedingungen

	FID	PID
Standartabweichung	58,542	13,193
Max	242,180	45,680
Mittelwert	142,623	23,026

Unter erhöhter Luftfeuchtigkeit zeigte sich ein deutlich stärkerer Unterschied zwischen FID und PID als unter Trockenbedingungen. Der FID erreichte einen Mittelwert von 142,623 ppm, während der PID 23,026 ppm registrierte. Auch die Maximalwerte verdeutlichen diese Diskrepanz: Der FID stieg bis auf 242,180 ppm, während der PID lediglich 45,680 ppm erreichte. Die Signalstreuung war beim FID mit einer Standardabweichung von 58,542 ppm höher als beim PID (13,193 ppm). Im zeitlichen Verlauf (Abbildung 222) zeigt sich, dass der FID einen kontinuierlichen Anstieg der Konzentration aufwies, während der PID stark abgeflachte Werte registrierte und somit die realen Konzentrationen unterschätzte. Diese Ergebnisse bestätigen den bekannten Effekt, dass PIDs unter Feuchtbedingungen deutlich anfälliger für Signalunterdrückung sind. Die Wassermoleküle im Messgas konkurrieren mit den zu detektierenden VOCs um die Ionisation durch die UV-Lampe, was zu einer systematischen Unterschätzung der Konzentrationen führt.

5.3.5 Isopropanol – Feuchtbedingungen mit R_{emp}

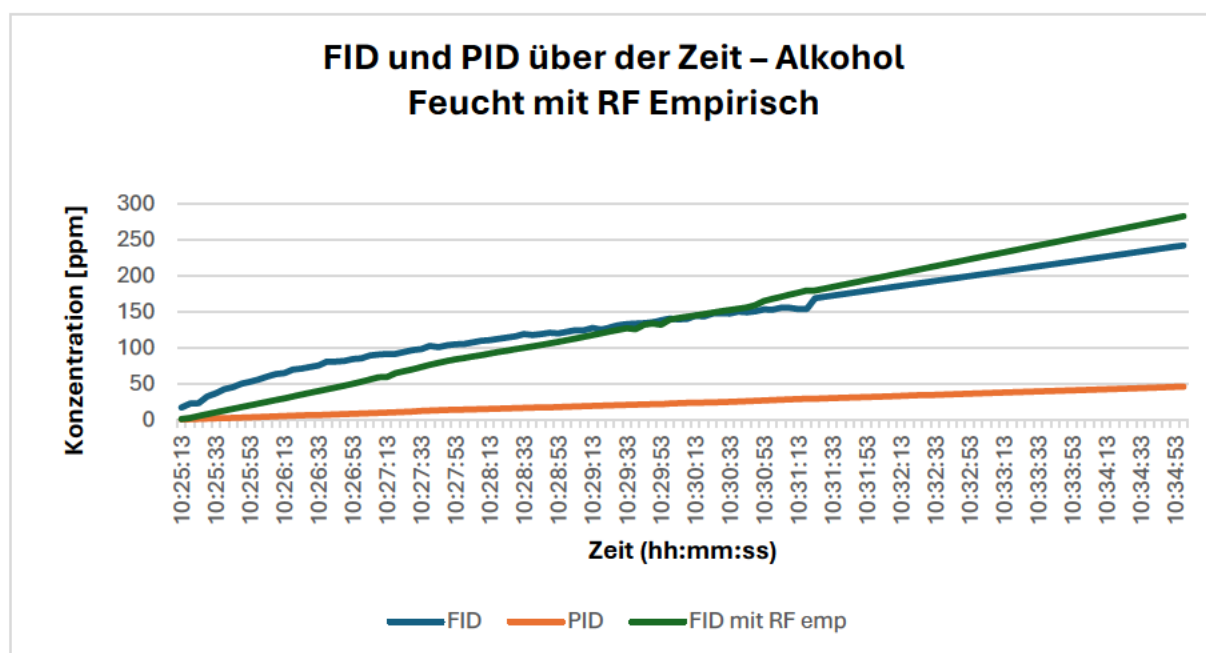


Abbildung 23: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Isopropanol mit Feuchtbedingungen mit R_{emp}

Tabelle 19: Darstellung der Messergebnisse des Isopropanols während der Feuchtbedingungen mit R_{emp}

Responsefaktor = 6,194	FID	PID
Standartabweichung	58,542	81,716
Max	242,180	282,939
Mittelwert	142,623	142,623

Unter Feuchtbedingungen zeigte der FID für Isopropanol einen Mittelwert von 142,623 ppm bei einem Maximalwert von 242,180 ppm. Die Standardabweichung lag bei 58,542 ppm, was auf eine Signalstreuung hindeutet. Der PID erfasste im gleichen Messzeitraum deutlich niedrigere Werte mit einem Mittelwert von 142,623 ppm und einem Maximalwert von 282,939 ppm. Die Streuung war mit einer Standardabweichung von 81,716 ppm höher als beim FID. Nach Anwendung des empirisch bestimmten Responsefaktors von 6,194 wurden die PID-Signale angepasst. Der korrigierte PID-Mittelwert stieg dadurch auf 142,623 ppm, womit nahezu vollständige Übereinstimmung mit den FID-Messwerten erzielt wurde. Auch die Maximalwerte lagen mit 282,939 ppm (PID korrigiert) und 242,180 ppm (FID) in vergleichbarer Größenordnung, wobei die PID-Korrektur leicht höhere Spitzenwerte zeigte. Die Abbildung 233 verdeutlicht, dass die Anwendung des empirischen RF die Abweichung zwischen beiden Geräten signifikant verringert. Der PID liefert nach Korrektur ein Messsignal, das dem FID über weite Teile des Verlaufs ähnlich ist.

5.3.6 Isopropanol – Feuchtbedingungen mit tabellarischem Responsefaktor

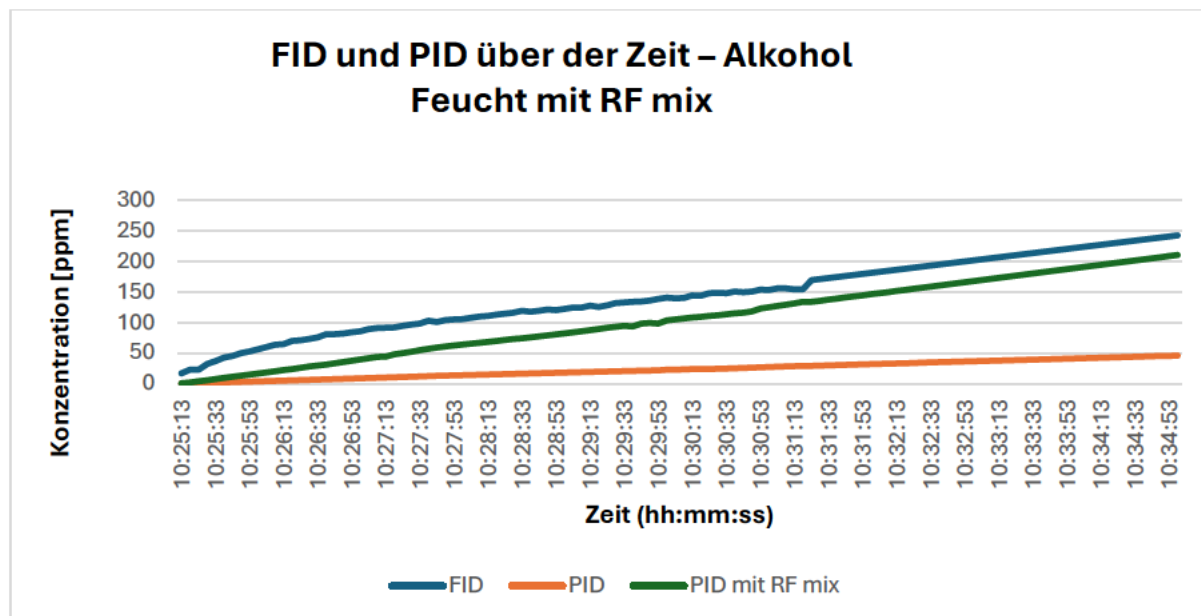


Abbildung 24: Messergebnisse vom FID und PID über der Zeit - Isopropanol mit Feuchtbedingungen mit R_{mix}

Tabelle 20: Darstellung der Messergebnisse des Isopropanols während der Feuchtbedingungen mit R_{mix}

Responsefaktor = 4,6	FID	PID
Standartabweichung	58,542	60,687
Max	242,180	210,128
Mittelwert	142,622	105,920

Für die Anwendung des tabellarischen Responsefaktors (RF_{mix}) wurde der von Honeywell veröffentlichte Wert für Isopropanol (4,6) verwendet. Nach der Korrektur ergaben sich jedoch weiterhin Abweichungen zwischen den Signalen von FID und PID. Die Mittelwerte zeigten zwar eine Annäherung, lagen jedoch nicht deckungsgleich (FID: 142,622 ppm, PID korrigiert: 105,920 ppm). Auch die Maximalwerte unterschieden sich deutlich (FID: 242,180 ppm, PID korrigiert: 210,128 ppm). Die Standardabweichung des PID war mit 60,687 ppm ebenfalls höher, während der FID eine Abweichung von 58,542 ppm aufwies. Insgesamt verdeutlicht diese Auswertung, dass der tabellarische RF_{mix} die komplexen Einflüsse von Feuchtigkeit und Matrixeffekten nicht zuverlässig erfassen konnte (Abbildung 244). Im Gegensatz dazu zeigte der empirisch bestimmte RF (vgl. Kap. 5.3.5) eine deutlich bessere Anpassung an die realen Bedingungen. Dies bestätigt, dass tabellarische Werte zwar als Orientierung dienen können, für präzise Vor-Ort-Messungen jedoch nicht ausreichen.

5.4.1 Ylang-Ylang-Öl – Vergleich Trocken- und Feuchtbedingungen

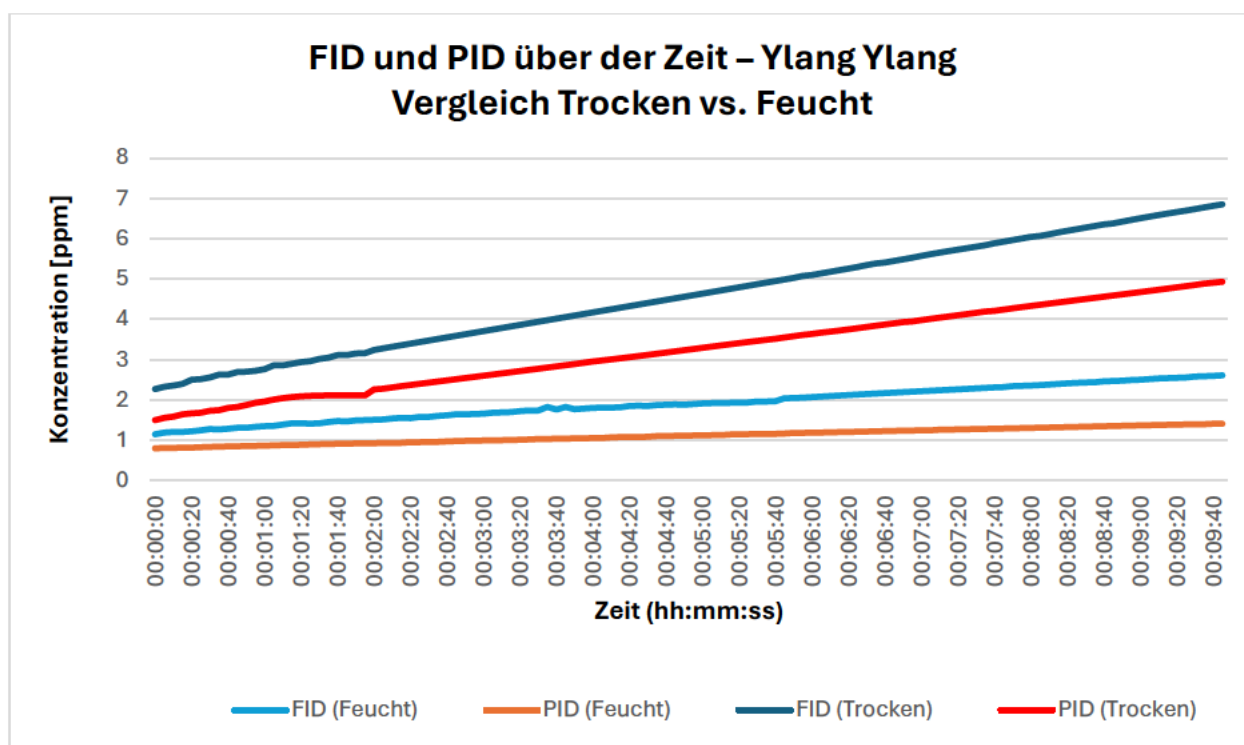


Abbildung 25: Vergleich der Trocken- und Feuchtbedingungen des Ylang Ylang-Öls

Tabelle 21: Darstellung der Messergebnisse des Ylang Ylang-Öls während der Feuchtigkeitsmessung

Feucht	FID	PID
Standartabweichung	0,409	0,178
Max	2,610	1,410
Mittelwert	1,912	1,112

Tabelle 22: Darstellung der Messergebnisse des Ylang Ylang-Öls während der Trockenmessung

Trocken	FID	PID
Standartabweichung	1,327	0,982
Max	6,850	4,930
Mittelwert	4,581	3,249

Der direkte Vergleich der Messungen unter Trocken- und Feuchtbedingungen (Abbildung 255) verdeutlicht Unterschiede in der Signalantwort von FID und PID. Unter Trockenbedingungen erreichte der FID einen Mittelwert von 4,581 ppm bei einem Maximum von 6,850 ppm, während der PID einen Mittelwert von 3,249 ppm und ein Maximum von 4,930 ppm registrierte. Die Signalstreuung war mit Standardabweichungen von 1,327 ppm (FID) und 0,982 ppm (PID) moderat und entsprach den beobachteten linearen Signalverläufen. Unter Feuchtbedingungen lagen die Werte insgesamt niedriger. Der FID verzeichnete einen Mittelwert von 1,912 ppm bei einem Maximum von 2,610 ppm, der PID erreichte lediglich einen Mittelwert von 1,112 ppm und einen Maximalwert von 1,410 ppm. Die Standardabweichung fiel mit 0,409 ppm (FID) und 0,178 ppm (PID) geringer aus, was die stabileren, aber schwächeren Signale widerspiegelt. Insgesamt zeigt sich, dass erhöhte Luftfeuchtigkeit insbesondere den PID deutlich stärker beeinflusst als den FID. Während der FID unter beiden Bedingungen vergleichbare Signalverläufe aufwies, reduzierte sich die Signalintensität des PID unter Feuchtbedingungen um etwa ein Drittel. Dies bestätigt die in der Literatur beschriebenen Empfindlichkeiten des PID gegenüber Wasserdampf.

5.4.2 Teebaumöl – Vergleich Trocken- und Feuchtbedingungen

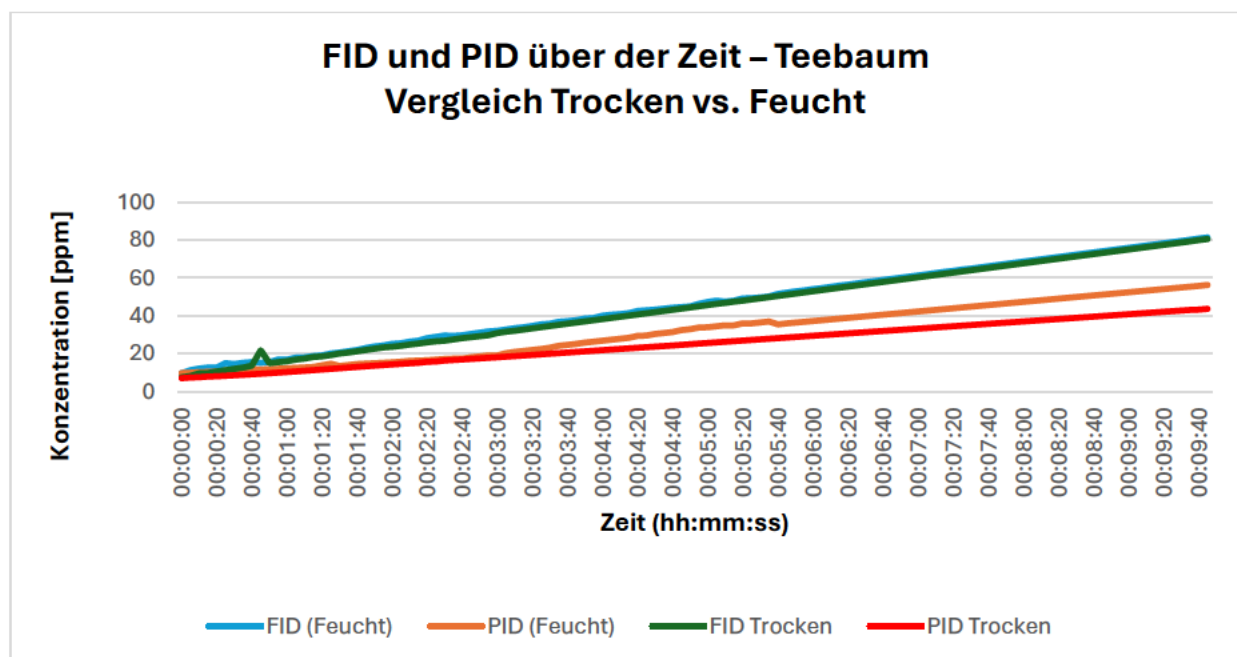


Abbildung 26: Vergleich der Trocken- und Feuchtbedingungen des Teebaum-Öls

Tabelle 23: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Feuchtigkeitsmessung

Feucht	FID	PID
Standartabweichung	20,803	14,491
Max	81,450	56,300
Mittelwert	45,878	31,502

Tabelle 24: Darstellung der Messergebnisse des Teebaum-Öls während der Trockenmessung

Trocken	FID	PID
Standartabweichung	21,014	10,780
Max	80,630	43,670
Mittelwert	44,715	25,157

Auch beim Teebaumöl zeigen sich im direkten Vergleich von Trocken- und Feuchtbedingungen deutliche Unterschiede zwischen FID- und PID-Signal (Abbildung 26). Unter Trockenbedingungen erreichte der FID einen Mittelwert von 44,715 ppm bei einem Maximum von 80,630 ppm. Der PID registrierte dagegen einen Mittelwert von 25,157 ppm mit einem Maximum von 43,670 ppm. Die Standardabweichungen betrugen 21,014 ppm (FID) und 10,780 ppm (PID) und spiegeln die vergleichsweise breite Streuung der Werte wider. Unter Feuchtbedingungen lagen die Mittelwerte insgesamt höher. Der FID erreichte im Mittel 45,878 ppm bei einem Maximum von 81,450 ppm, während der PID einen deutlich erhöhten Mittelwert von 31,502 ppm mit einem Maximum von 56,300 ppm verzeichnete. Die Standardabweichungen lagen bei 20,803 ppm (FID) und 14,491 ppm (PID). Im Gegensatz zu den Messungen mit Ylang-Ylang-Öl führte die höhere Luftfeuchtigkeit bei Teebaumöl nicht zu einer Abschwächung, sondern zu einer verstärkten Signalantwort des PID. Der FID zeigte dagegen in beiden Fällen nahezu konstante Ergebnisse. Dies weist darauf hin, dass die komplexe Matrix des Teebaumöls in Verbindung mit hoher Luftfeuchtigkeit die Ionisationsprozesse im PID begünstigen kann, was in der Literatur für einzelne polare Terpene bereits beschrieben wurde.

5.4.3 Isopropanol – Vergleich Trocken- und Feuchtbedingungen

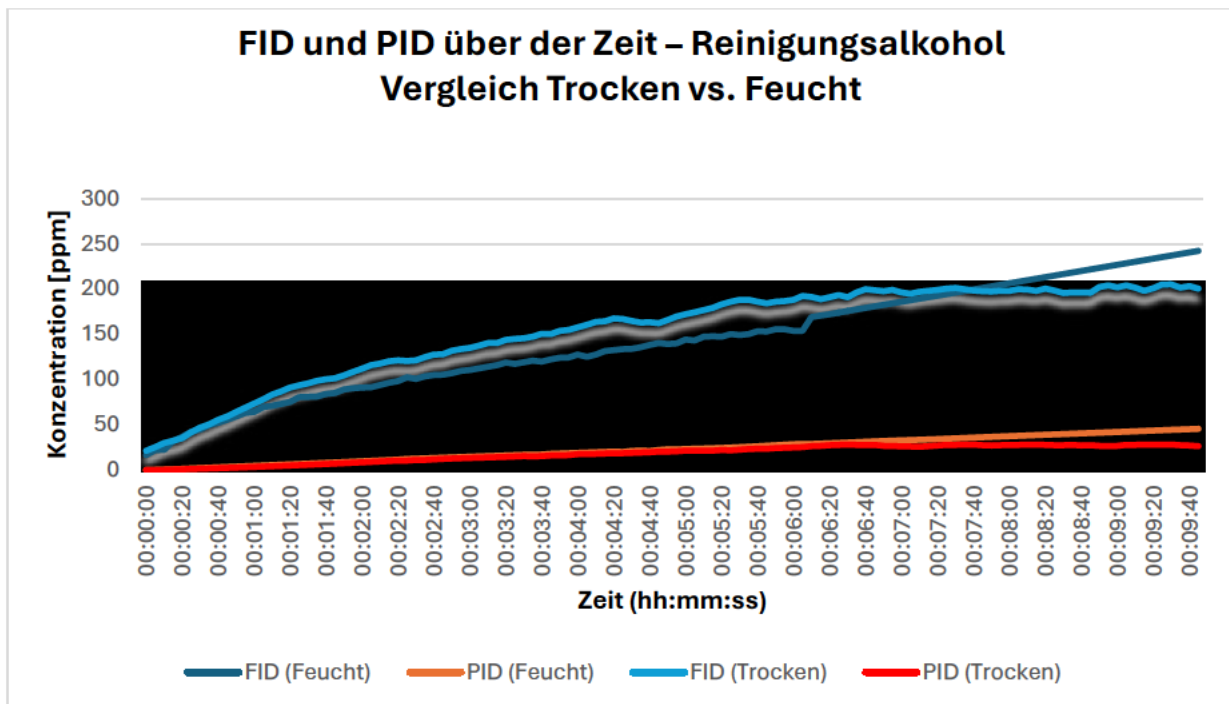


Abbildung 27: Vergleich der Trocken- und Feuchtbedingungen von Isopropanol

Tabelle 25: Darstellung der Messergebnisse von Isopropanol während der Feuchtigkeitsmessung

Feucht	FID	PID
Standartabweichung	58,542	13,193
Max	242,180	45,680
Mittelwert	142,623	23,026

Tabelle 26: Darstellung der Messergebnisse von Isopropanol während der Trockenmessung

Trocken	FID	PID
Standartabweichung	51,314	9,314
Max	205,240	28,350
Mittelwert	153,801	18,333

Die Messungen mit Isopropanol zeigen im direkten Vergleich von Trocken- und Feuchtbedingungen Unterschiede zwischen den beiden Detektoren (Abbildung 277). Unter Trockenbedingungen erreichte der FID einen Mittelwert von 153,801 ppm bei einem Maximum von 205,240 ppm. Der PID registrierte dagegen deutlich niedrigere Konzentrationen mit einem Mittelwert von 18,333 ppm und einem Maximum von 28,350 ppm. Die Standardabweichungen betrugen 51,314 ppm (FID) und 9,314 ppm (PID), was die höhere Signalstreuung des FID unterstreicht. Unter Feuchtbedingungen verringerte sich der FID-Mittelwert auf 142,623 ppm, während der PID leicht erhöhte Werte von 23,026 ppm im Mittel und ein Maximum von 45,680 ppm verzeichnete. Auch die Standardabweichungen veränderten sich: 58,542 ppm (FID) und 13,193 ppm (PID). Im Gegensatz zu den Beobachtungen bei den ätherischen Ölen führte die erhöhte Luftfeuchtigkeit bei Isopropanol nicht zu einer Abschwächung, sondern zu einer verstärkten Signalantwort des PID, während der FID vergleichsweise stabil blieb. Dies deutet darauf hin, dass die PID-Ionisation bei Alkoholen durch die erhöhte Luftfeuchtigkeit unterstützt werden kann. Vergleichbare Effekte sind in der Literatur beschrieben, insbesondere bei polaren Substanzen, die durch intermolekulare Wechselwirkungen mit Wassermolekülen leichter ionisierbar werden.

5.4 Zusammenfassung der Messergebnisse

Die Messergebnisse zeigen Unterschiede in der Leistungsfähigkeit von FID und PID bei der Erfassung flüchtiger organischer Verbindungen (VOCs).

Ylang-Ylang-Öl

Unter Trockenbedingungen erreichte der FID-Maximalwerte von rund 6,850 ppm, während der PID lediglich 4,930 ppm registrierte. Die Mittelwerte lagen bei 4,580 ppm (FID) und 3,249 ppm (PID). Unter Feuchtbedingungen reduzierten sich die Messwerte beider Systeme. Der FID erreichte nur noch 2,610 ppm (Max), der PID 1,410 ppm. Der empirisch bestimmte Responsefaktor ($RF \approx 1,719$) konnte die PID-Daten an die FID-Daten angleichen.

Teebaumöl

Bei Trockenmessungen lagen die Maximalwerte des FID bei 80,630 ppm, während der PID nur 43,670 ppm erreichte. Die Mittelwerte betrugen 44,715 ppm (FID) und 25,157 ppm (PID). Unter Feuchtbedingungen lagen die Werte insgesamt höher: der FID erreichte bis zu 81,450 ppm, der PID 56,300 ppm. Die empirische Korrektur mit einem $RF (\approx 1,456)$ führte zu einer nahezu vollständigen Angleichung der Mittelwerte (45,878 ppm FID und 31,502 ppm PID).

Isopropanol (Reinigungsalkohol, 70 %)

Unter Trockenbedingungen registrierte der FID hohe Konzentrationen mit bis zu 205,240 ppm, während der PID lediglich 28,350 ppm erreichte. Die Mittelwerte lagen bei 153,801 ppm (FID) und 18,333 ppm (PID). Unter Feuchtbedingungen erreichte der FID-Werte bis 242,180 ppm, während der PID mit 45,680 ppm höhere Signale als im Trockenzustand aufwies. Der empirische RF ($\approx 6,194$) führte zu einer Angleichung der Werte, wobei die Korrektur insbesondere den Feuchte-Effekt kompensierte.

Gesamtbetrachtung

Der FID zeigte über alle Substanzen hinweg robuste, konsistente Signale, die sich nur geringfügig durch Luftfeuchtigkeit beeinflussen ließen. Der PID reagierte empfindlicher auf Matrixeffekte und Luftfeuchtigkeit. Während biogene Substanzen (Öle) unter Feuchtebedingungen schwächer erfasst wurden, zeigte sich bei Isopropanol eine verstärkte Signalantwort. Empirisch bestimmte Responsefaktoren verbesserten die Vergleichbarkeit der Messwerte erheblich und lieferten zuverlässigere Korrekturen als tabellarische Misch-RF-Werte.

6 Diskussion

Die Messergebnisse unterstreichen die unterschiedlichen Stärken und Grenzen von FID und PID in der VOC-Analytik. Der FID bestätigte seine Rolle als robustes Referenzgerät. Er zeigte in allen Versuchsreihen eine Stabilität, eine lineare Signalantwort und eine weitestgehende Unempfindlichkeit gegenüber Luftfeuchtigkeit. Diese Eigenschaften begründen seine verankerte Stellung in normativen Messverfahren. Demgegenüber offenbarte der PID sowohl Vorteile als auch Einschränkungen. Seine hohe Sensitivität und unmittelbare Einsatzbereitschaft machten ihn besonders geeignet für mobile Vor-Ort-Messungen. Allerdings traten deutliche Abweichungen von den FID-Ergebnissen auf. Bei den untersuchten Substanzen zeigten sich klare Unterschiede: bei den komplexen Mischungen von Ylang-Ylang- und Teebaumöl unterschätzte der PID die Konzentrationen systematisch, da viele enthaltene Monoterpene und Sesquiterpene nur schwach auf UV-Ionisation ansprechen. Bei Isopropanol hingegen wurden nach der Berücksichtigung des Responsefaktors im Vergleich zum FID teilweise höhere Signale registriert. Damit bestätigt sich, dass die Matrixzusammensetzung entscheidend dafür ist, ob der PID eher zu Unter- oder Überschätzungen neigt. Zudem erwies sich die Luftfeuchtigkeit als erheblicher Einflussfaktor. Während biogene Terpene bei höherer Feuchte deutlich schwächer detektiert wurden, zeigten sich bei Isopropanol verstärkte Signale. Ein zentraler Befund ist die Relevanz empirisch bestimmter Responsefaktoren. Nur mit diesen ließ sich die Abweichung zwischen FID und PID

signifikant verringern. Tabellenbasierte Mischungsfaktoren reichten dagegen nicht aus, um komplexe Substanzmatrizen adäquat zu korrigieren. Für die praktische Anwendung bedeutet dies, dass der PID ein nützliches Werkzeug für Screening-Messungen sein kann. Allerdings müssen die Werte durch empirische RF-Korrekturen ergänzt werden, um quantitativ belastbare Ergebnisse liefern zu können.

Darüber hinaus ist kritisch anzumerken, dass in dieser Arbeit kein Standardreferenzmaterial eingesetzt wurde, obwohl diese in der Literatur häufig für Vergleichsstudien genutzt werden. Ein solcher Ansatz hätte die Vergleichbarkeit zwischen beiden Detektoren weiter erhöht, war jedoch aufgrund fehlender Verfügbarkeit sowie zusätzlicher organisatorischer und sicherheitstechnischer Anforderungen nicht umsetzbar. Stattdessen lag der Fokus auf praxisnahen Substanzen, um die Unterschiede der Detektoren unter realitätsnahen Bedingungen herauszustellen.

7 Fazit

Ziel dieser Arbeit war es, die Leistungsfähigkeit eines Photoionisationsdetektors (PID) im Vergleich zu einem Flammenionisationsdetektor (FID) bei der Messung flüchtiger organischer Verbindungen zu bewerten. Untersucht wurden mit Ylang-Ylang- und Teebaumöl zwei biogene VOC-Gemische sowie Isopropanol als anthropogene Referenzsubstanz, jeweils unter trockenen und feuchten Umgebungsbedingungen.

Die Ergebnisse zeigten, dass der FID auch unter variierenden Umgebungsbedingungen stabile und reproduzierbare Daten liefert und somit unverzichtbar als Referenzverfahren bleibt. Der PID bietet demgegenüber den Vorteil einer schnellen und flexiblen Vor-Ort-Erfassung, seine Messergebnisse sind jedoch stark von der Substanzmatrix und der Luftfeuchtigkeit abhängig. Während die ätherischen Öle die Grenzen der Technologie verdeutlichten, eignete sich Isopropanol als definierte Referenzsubstanz. Damit beantwortet die Arbeit, die in der Einleitung formulierte Fragestellung: der PID kann als Screening-Instrument genutzt werden, jedoch nur eingeschränkt und stets in Abhängigkeit von empirisch bestimmten Korrekturfaktoren. Ein wesentlicher Befund ist, dass tabellarische Mischungsfaktoren für komplexe Substanzen nicht ausreichen. Erst empirisch bestimmte Responsefaktoren ermöglichen es, PID-Signale zuverlässig mit FID-Daten in Einklang zu bringen.

Aus den Ergebnissen lassen sich folgende Schlussfolgerungen ableiten:

- Der FID bleibt das zentrale Referenzinstrument für normierte VOC-Messungen.
- Der PID ist für Screening-Aufgaben wertvoll, sollte jedoch nur mit empirisch ermittelten RF-Korrekturen für quantitative Aussagen eingesetzt werden.
- Die Luftfeuchtigkeit ist ein kritischer Einflussfaktor und muss berücksichtigt werden.
- Ein kombinierter Einsatz von FID und PID bietet in der Praxis Vorteile: der PID ermöglicht eine schnelle Einschätzung, der FID liefert die validierte Referenz.

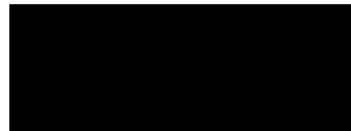
Für den konkreten Einsatzbereich der DEKRA-Messstelle für Luftreinhaltung ergibt sich jedoch eine klare Einschränkung: in der Praxis werden überwiegend komplexe Stoffgemische und unbekannte VOC-Matrizes untersucht, deren genaue Zusammensetzung im Vorfeld nicht bekannt ist. Eine zuverlässige PID-Nutzung ohne empirische Korrekturfaktoren ist in diesem Umfeld nicht möglich. Da diese Faktoren nur durch parallele Referenzmessungen mit einem FID bestimmt werden können, würde der organisatorische und technische Mehraufwand den Vorteil einer schnellen Screening-Messung aufheben. Damit ist der PID für den routinemäßigen Einsatz in diesem Kontext nur eingeschränkt geeignet und stellt eher ein ergänzendes Hilfsinstrument dar, nicht jedoch eine eigenständige Alternative zum FID.

Eidesstaatliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit eigenständig und ohne fremde Hilfe angefertigt habe. Textpassagen, die wörtlich oder dem Sinn nach auf Publikationen oder Vorträgen anderer Autoren beruhen, sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegt und auch nicht veröffentlicht.

Hamburg, 22.09.2025

Ort, Datum

A solid black rectangular box used to redact the signature of the author.

Unterschrift (Timo Blockhaus)

Literaturverzeichnis

Antoniadou I, Poole C F, Mastovska K and Spanik I 2019 Investigating the performance characteristics of the barrier discharge ionization detector and comparison to the flame ionization detector for the gas chromatography of volatile organic compounds *Journal of Chromatography A* **1605** 360356

BAuA 2024 *Technische Regeln für Gefahrstoffe (TRGS) 900 – Arbeitsplatzgrenzwerte* (Dortmund: Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin (BAuA)) Online: <https://www.baua.de/DE/Angebote/Rechtstexte-und-Technische-Regeln/Regelwerk/TRGS/pdf/TRGS-900.pdf>

Bekanntmachung des Umweltbundesamtes 2014 Ermittlung und Beurteilung chemischer Verunreinigungen der Luft von Innenraumarbeitsplätzen (ohne Tätigkeit mit Gefahrstoffen): Gemeinsame Mitteilung der Arbeitsgruppe Luftanalysen der Ständigen Senatskommission zur Prüfung gesundheitsschädlicher Arbeitsstoffe der Deutschen Forschungsgemeinschaft und der Ad-hoc-Arbeitsgruppe Innenraumrichtwerte der Kommission Innenraumlufthygiene und der Obersten Landesgesundheitsbehörden *Bundesgesundheitsbl.* **57** 1002–18

Bundesministerium für Umwelt N und nukleare S (BMU) 2021 *Kabinettsbeschluss zur Neufassung der Ersten Allgemeinen Verwaltungsvorschrift zum Bundes-Immissionsschutzgesetz - Technischen Anleitung zur Reinhaltung der Luft (TA Luft)* (Berlin)

Chakira A, Garcia C, Soria C, Minier J and Chillet M 2022 Effect of Flower Development Stages on the Dynamics of Volatile Compounds in Ylang-Ylang (*Cananga odorata*) Essential Oil *Horticulturae* **8** 986

D'Arco M, Ferraro A, Ricci L and Baldelli A 2022 Advanced FTIR techniques for trace gas detection *Applied Spectroscopy Reviews* **57** 441–67

Deutsches Institut für Normung (DIN) 2013 *DIN EN 12619:2013 — Stationary source emissions — Determination of the mass concentration of total gaseous organic carbon at low concentrations in flue gases — Continuous flame ionisation detector method* (DIN)

Dewulf J and Van Langenhove H 2002 Analysis of volatile organic compounds using gas chromatography *Trends in Analytical Chemistry* **21** 637–46

DHS 2014 *Flame and Photo Ionization Detectors, Portable* (U.S. Department of Homeland Security)

Dr. Ulrich 2019 *FID-Modulsystem* (Testa GmbH)

Driscoll J N, Clarici J B and GmbH W 1967 Ein neuer Photoionisationsdetektor für die Gas-Chromatographie

Frausto-Vicencio I and et al. 2021 Characterizing the Performance of a Compact BTEX GC-PID for Near-Real Time Analysis and Field Deployment *Sensors* **21** 2095

Honeywell Analytics and Honeywell RAE Systems 2018 *MiniRAE Lite+ – Tragbares VOC-Überwachungsgerät: Technisches Datenblatt (DS-1019-04_DE)* (Honeywell International Inc.)

Hori H, Inoue Y, Koga M, Saito I, Yamasaki A, Takahashi Y and Yamaguchi N 2015 Comparison of sensor characteristics of three real-time monitors for organic vapors *Journal of Occupational Health* **57** 171–9

International Organization for Standardization 2017 ISO 4730:2017 Essential oil of Melaleuca, terpinen-4-ol type (Tea Tree oil)

International Organization for Standardization (ISO) 2010 *ISO 25140-1:2010 Air quality - Direct-reading portable gas monitors - Performance requirements for instruments to measure volatile organic compounds with photoionization detectors - Part 1: General requirements* (Geneva: ISO)

Jensen N R, Andersen M P S and Hjorth J 2023 Real-time measurement of VOCs using proton-transfer-reaction mass spectrometry *Atmospheric Measurement Techniques* **16** 5261–77

Liaud C and et al. 2014 Experimental performances study of a transportable GC-PID and two thermo-desorption-based methods coupled to FID and MS detection to assess BTEX exposure at sub-ppb level in air *Talanta* **129** 203–9

LUBW Landesanstalt für Umwelt M und N B-W 2011 *Vergleichende Prüfung von Vor-Ort-Analytik-Geräten in der Neckartalaue in Stuttgart – Bad Cannstatt* (Karlsruhe: LUBW Landesanstalt für Umwelt, Messungen und Naturschutz Baden-Württemberg)

Moura P, Brito J and Alves J 2022 GC-IMS for rapid VOC detection in environmental samples *International Journal of Environmental Analytical Chemistry* **102** 2881–94

Moura P, Dias A and Gomes D 2023 Ion mobility spectrometry for real-time monitoring of volatile organic compounds *Clean Technologies and Environmental Policy* **25** 345–59

Poole C F 2015 Ionization-based detectors for gas chromatography *Journal of Chromatography A* **1421** 137–53

RAE Systems by Honeywell 2024 *PID Response Factor Chart (TN-106)* (RAE Systems by Honeywell)

RAE Systems by Honeywell 2014 *Technical Note 120_Measuring PID Correction Factors For Volatile Compounds With RAE Systems Instruments* (RAE Systems by Honeywell)

Rat der Europäischen Union 1999 *Richtlinie 1999/13/EG des Rates vom 11. März 1999 über die Begrenzung von Emissionen flüchtiger organischer Verbindungen, die bei bestimmten Tätigkeiten und in bestimmten Anlagen bei der Verwendung organischer Lösungsmittel entstehen*

Rezende G C, Le Calvé S, Brandner J J and Newport D 2020 Characterization of a modular microfluidic photoionization detector *Sensors and Actuators B: Chemical* **324** 128667

Scientific Committee on Consumer Safety (SCCS) 2025 *Scientific Opinion on Tea Tree Oil (CAS/EC No. 68647-73-4 /285-377-1)* (Luxembourg: European Commission, Directorate-General for Health and Food Safety (DG SANTE)) Online: https://health.ec.europa.eu/scientific-committees/scientific-committee-consumer-safety-sccs/sccs-opinions_en#final-opinions

Tan L T H, Lee L H, Yin W F, Chan C K, Abdul Kadir H, Chan K G and Goh B H 2015 Traditional Uses, Phytochemistry, and Bioactivities of *Cananga odorata* (Ylang-Ylang) *Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine* **2015** 896314–896314

WHO 2000 *Air quality guidelines for Europe* (Copenhagen: World Health Organization, Regional Office for Europe)

Winskowski J 1983 Gaschromatographische Identifizierung von Stoffen anhand von Indexziffern und unterschiedlichen Detektoren *Chromatographia* **17** 160–5

Wolff M 1967- 2021 *Sensor-Technologien Band 3: Stoffmenge, Konzentration, Analytik* (De Gruyter Oldenbourg) Online: <https://www.degruyter.com/isbn/9783110702040>

Zimmermann S, Krippner P, Vogel A and Muller J 2002 Miniaturized flame ionization detector for gas chromatography

Zimmermann S, Wischhusen S and Müller J 2000 Micro flame ionization detector and micro flame spectrometer *Sensors and Actuators B: Chemical* **63** 159–66