

# Schlussbericht vom 04.08.2023

---

zu IGF-Vorhaben Nr. 22084 N

## Thema

Wissenschaftliche Absicherung einer Richtlinie zur Prüfung von Sensorsystemen für die Erfassung der Innenraumluftqualität auf Basis von VOC als Vorstufe für internationale Normen - VOC4IAQ

## Berichtszeitraum

01.10.2021 bis 31.03.2023

## Forschungsvereinigung

DECHEMA Deutsche Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V.

## Forschungseinrichtung(en)

Universität des Saarlandes, Lehrstuhl für Messtechnik

Gefördert durch:



Bundesministerium  
für Wirtschaft  
und Klimaschutz

aufgrund eines Beschlusses  
des Deutschen Bundestages



## Inhaltsverzeichnis

Projektsteckbrief.....	II
1 Einleitung .....	1
2 Stand der Technik und Forschung.....	3
3 Lösungsweg zur Erreichung des Forschungsziels .....	5
4 Durchgeführte Arbeiten .....	8
4.1 AP 1 Detaillierte Festlegung des Versuchsplans .....	8
4.1.1 Studienergebnisse zur Belastung von Innenräumen.....	8
4.1.2 Design of Experiment .....	13
4.2 AP2 Benchmark Systeme.....	17
4.3 AP3 Labormessungen .....	19
4.4 AP4 Statistische Bewertung .....	22
4.5 AP5 Feldversuche .....	29
4.5.1 Typische Innenraumverläufe .....	29
4.5.2 Geplante Events.....	33
4.5.3 Zufällige Events.....	38
4.6 AP9 Air Quality Index .....	40
4.7 AP8 Vereinfachte Testschemata .....	42
4.8 AP6 Vergiftungsprüfung .....	44
5 Diskussion der Ergebnisse .....	51
5.1 Auswahl und Konzentrationsbereiche der Zielgrößen.....	51
5.2 Labormessungen.....	51
5.3 Feldtests .....	52
5.4 Modifizierter IAQ Index & Vereinfachtes Testschema .....	54
5.5 Hypothesen .....	54
6 Zusammenfassung.....	56
7 Umsetzung der Forschungsergebnisse .....	57
7.1 Ergebnistransfer in die Wirtschaft.....	57
7.2 Verwendung der Zuwendung .....	59
7.3 Wissenschaftlich-technischer und wirtschaftlicher Nutzen der Ergebnisse für KMU und Angaben zur Finanzierbarkeit .....	60
Literaturverzeichnis .....	62
Abbildungsverzeichnis.....	65
Tabellenverzeichnis.....	67

## Projektsteckbrief

Der Innenraum als unsere „dritte Haut“ ist ein wesentlicher Baustein für gesundheitliches Wohlbefinden und für hohe Lebensqualität. Die Vermeidung von Innenraum-Luftschadstoffen, Schimmel und Allergenen ist deshalb besonders wichtig und kann maßgeblich beeinflusst werden. Derzeitige Luftqualitätssensoren nutzen in erster Linie Kohlendioxid (CO<sub>2</sub>) als Markergas. Allerdings ist nur CO<sub>2</sub> ein Indikator für Innenraumluftqualität. Die eigentlichen Schadstoffe und Quellen chemischer Belastung im Innenraum sind flüchtige organische Verbindungen (engl. volatile organic compounds, VOC), Gassensoren – insb. Halbleitersensoren (engl. metal oxide semiconductor, MOS) – können VOCs gut messen und damit einen Beitrag zur Erfassung und Verbesserung der Luftqualität in Innenräumen leisten. Jedoch mangelt es an Akzeptanz bei Anwendern, was diese auf einen fehlenden Prüfstandard zurückführen. In diesem Zusammenhang hat sich ein Fachgremium (VDI/VDE GMA FA 4.64, vorher 2.62) mit dem Blatt VDI/VDE 3518 Blatt 4 unter dem Titel „Multigassensoren - Standardisierte Prüfanweisung und Prüfgase für VOC-Detektoren zur Innenraumluftgütemessung“ die Erstellung einer nationalen Richtlinie als Aufgabe gesetzt, welche durch das Projekt wissenschaftlich abgesichert und begleitet wurde.

Als Ziel der Richtlinie resultiert eine technologie-agnostische Prüfung von VOC-Sensoren, welche einen Test von Sensorsystemen durch vereinfachte Nachbildung der komplexen Innenraumluft darstellt, aber realistische Konzentrationen und eine variable Zusammensetzung beinhaltet. Die Nachbildung der Innenraumluft wird durch Einteilung in VOC-Stoffgruppen (Aldehyde, Alkane, Alkene, Alkohole, Aromate, Ester, Glykole und Glykolether, Halogenkohlenwasserstoffe (HKW), Ketone, organische Säuren, Terpene) realisiert, wobei die VOC-Stoffgruppen durch ihre häufigsten Vertreter repräsentiert werden. Die zu testenden Konzentrationen befinden sich im Bereich typischer Werte in realen Innenräumen (basierend auf analytischen Studien des Umweltbundesamtes) und ebenso werden relevante Störgrößen für MOS-Sensoren, z. B. Feuchte, CO, Wasserstoff (H<sub>2</sub>) berücksichtigt.

Der Prozess der Richtlinienerstellung wurde wissenschaftlich und messtechnisch durch Labormessungen (Kalibrierung von Sensorsystemen, Benchmark-Erstellung, vereinfachte Testschema, Vergiftungsprüfungen) und Feldtests (Messungen in vier typischen Innenräumen, Arbeits- und Wohnräume über einen Jahreszyklus) begleitet und abgesichert. Die Messungen im Projekt lieferten dabei hilfreiche und realitätsnahe Ergebnisse zur Erstellung eines akzeptierten und vergleichbaren Luftqualitätsindex basierend auf VOC und eines realitätsnahen, praktikablen und umsetzbaren Prüfschemas für das Testen von VOC-Sensorsystemen. So wurde für den VOC-Summenwert TVOC<sub>Sens</sub> (der dominierenden Stoffgruppenvertreter) mit einem Benchmark System mit einer Messgenauigkeit im zweistelligen ppb-Bereich erreicht. Es wurde ein Luftqualitätsindex basierend auf sieben Stufen abgeleitet, welcher die Leitwerte für TVOC vom Umweltbundesamt erweitert um die Berücksichtigung VVOC (engl. Very volatile organic compounds) und die Anwesenheit vom Menschen. Dazu wurde ein vereinfachtes Prüfschema erstellt, welches die einzelnen Stufen des Luftqualitätsindex durch Variieren einzelner VOC-Konzentrationen, in Form der dominierenden Stoffgruppenvertreter, abfährt und testet. In der Realität werden hohe Indexwerte insb. durch Events wie Freisetzungen während dem Kochen erreicht.

AiF/IGF-Projekt 22084 N

*„Wissenschaftliche Absicherung einer Richtlinie zur Prüfung von Sensorsystemen für die Erfassung der Innenraumluftqualität auf Basis von VOC als Vorstufe für internationale Normen - VOC4IAQ“*

Dauer: 01.10.2021 – 31.03.2023

Unterstützt durch den projektbegleitenden Ausschuss:

- 3S GmbH
- Bosch Sensortec GmbH
- Domatec GmbH
- Dräger Safety AG & Co. KGaA
- EC Sense GmbH
- eco-INSTITUT Germany GmbH
- Infineon Technologies
- Luxgreen Climadesign GmbH
- Renesas Electronics Germany GmbH
- Sciosense Germany GmbH
- Sensirion AG
- STEINEL Vertrieb GmbH
- SIEGENIA-AUBI KG
- Testo SE & Co. KGaA
- Umweltsensortechnik GmbH

## 1 Einleitung

Nicht erst seit der Corona-Krise ist die Bedeutung der Innenraumluftqualität (engl. Indoor Air Quality, IAQ) und ihrer gezielten Erfassung zur Optimierung der Lüftung sowie zur Erfassung von Situationen, die Gesundheit und/oder Komfort in Innenräumen erfassen, stark gestiegen [1, 2]. In Industrieländern weltweit verbringen Menschen typisch 80-90 % ihrer Lebenszeit in Innenräumen. Die dortige Innenraumluftqualität ist nach wissenschaftlichen Untersuchungen zu etwa 50 % für die festgestellten Todesfälle und ernsten Erkrankungen verantwortlich, die auf schlechte Luftqualität insgesamt zurückzuführen sind [3]. Gleichzeitig wirkt sich die zunehmend bessere Isolierung von Gebäuden aus energetischen Gründen nachteilig auf die Innenraumluftqualität aus, da Luftwechselraten reduziert werden, um die CO<sub>2</sub>-Bilanz von Gebäuden zu verbessern und Energie zu sparen [2].

Derzeit beschränkt sich die Bewertung der Luftqualität in Innenräumen – so sie überhaupt technisch erfasst wird – zumeist auf die Messung der CO<sub>2</sub>-Konzentration. Seit den Arbeiten von Pettenkofer im 19. Jahrhundert gilt ein CO<sub>2</sub>-Grenzwert von 1.000 ppm als Schwellwert für Innenräume [4]. Allerdings hatte Pettenkofer bereits festgestellt, dass CO<sub>2</sub> nur ein Indikator für eine abnehmende Luftqualität bedingt durch die Anwesenheit von Menschen ist, nicht jedoch selbst für die damit verbundenen Auswirkungen (Müdigkeit, Kopfschmerzen, Schleimhaut- und Augenreizungen, Hautausschlag bis hin zum Sick Building Syndrome) als Schadgas verantwortlich ist [5, 6]. Die Grenzwerte für CO<sub>2</sub> als Schadstoff liegen deutlich höher (ab 5.000 ppm [7, 8]). Die Ursache für „schlechte Luft“ in Innenräumen sind vor allem flüchtige organische Verbindungen (engl. Volatile Organic Compounds, VOC), die aus diversen Quellen stammen, u. a. vom Menschen selbst mit seinem Stoffwechsel (Atem, Schweiß, Flatus) [9], aber auch durch Emissionen von Baumaterialien und Einrichtungsgegenständen [10] sowie Aktivitäten wie Putzen, Kochen usw. [11]. Die CO<sub>2</sub>-basierte Luftqualitätsbewertung erfasst nur den menschlichen Stoffwechsel und ergibt so ein sehr unvollständiges Bild der Innenraumluftqualität. Schon seit langem gibt es daher Empfehlungen, z. B. des Umweltbundesamtes UBA [12] sowie der Weltgesundheitsorganisation WHO [13], für eine Luftqualitätsbewertung basierend auf der sog. Gesamt-VOC-Konzentration (häufig als total VOC, TVOC bezeichnet), primär um damit verbesserte Lüftungsstrategien zu ermöglichen. Je nach Analysetechnik und Nachweisempfindlichkeit werden in Innenräumen mehr als 300 VOC in zumeist sehr geringer Konzentration detektiert. Aufgrund dieser Vielfalt, aber auch des Mangels an Sensorsystemen zu einer direkteren Verfolgung der persönlichen Exposition ist die Ursache-Wirkungs-Beziehung nicht ausreichend erforscht, so dass unklar ist, welche Stoffe besonderen Einfluss auf die Gesundheit und das Wohlbefinden der Menschen haben. Aus diesem Grund ist heute die Erfassung des Gesamt-VOC-Gehalts noch Stand der Technik, zukünftig könnten sensorbasierte Systeme mit hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung aber eine genauere Untersuchung der Ursache-Wirkungs-Zusammenhänge erlauben.

Während die Empfehlungen des UBA und der WHO auf teuren analytischen Messungen aufbauen [14, 15], die nicht für eine kontinuierliche Überwachung von Innenräumen geeignet sind, erlauben sehr preiswerte und robuste Gassensoren auf Basis von halbleitenden Metalloxiden (engl. metal oxide semiconductor, MOS-Sensoren) eine extrem sensitive Erfassung von VOC [16] mit hoher zeitlicher Auflösung. Damit sind prinzipiell ubiquitäre Sensorsysteme (IoT Devices, z. B. integriert in sog. Smart Speaker) realisierbar, die in jedem Raum die Luftqualität auf Basis der VOC-Konzentration erfassen und entweder den Nutzern die Notwendigkeit einer manuellen Lüftung signalisieren oder automatische Lüftungsanlagen steuern. Eine ganze Reihe

solcher Sensoren sowie darauf aufbauende Sensorsysteme sind heute verfügbar [17]. Als großes Markteintrittshemmnis wurde von allen Firmen unisono das Fehlen einer im Idealfall weltweit akzeptierten Prüfnorm für Sensoren und Sensorsysteme zur Erfassung der Innenraumlufthqualität durch Messung von VOC identifiziert. Im Vorhaben VOC4IAQ wurde daher der derzeitige Prozess einer Richtliniendefinition<sup>1</sup> wissenschaftlich begleitet und abgesichert, um damit zum einen die Sinnhaftigkeit der Prüfnorm sicherzustellen und gleichzeitig die Akzeptanz für Sensoren und Systeme, die nach dieser Norm geprüft werden, zu erhöhen. Dies ist eine Voraussetzung für eine breite Etablierung der neuen Sensorsysteme im Markt.

Die Initiative für die Richtliniendefinition und damit für dieses Projekt ging von den im VDI/VDE GMA Fachausschuss 4.64 beteiligten Firmen aus, die meisten Mitglieder dieses Fachausschusses haben sich parallel im projektbegleitenden Ausschuss Projektes beteiligt. Die entwickelte Richtlinie soll dann die Basis für internationale Normen bilden, die von CEN bzw. ISO erarbeitet werden.

---

<sup>1</sup> VDI/VDE-GMA Fachausschuss 4.64 Multigassensorik: VDI/VDE 3518 Blatt 4 - Projekt Multigassensoren, Standardisierte Prüfanweisung und Prüfgase für VOC-Detektoren zur Innenraumlufthgütemessung

## 2 Stand der Technik und Forschung

Aktuell existiert nur die Norm DIN ISO 16000-29:2014 [18] für die Prüfung von VOC-Detektoren. Diese beschreibt das Vorgehen zum Testen von VOC-Detektoren, basierend auf drei Messprinzipien (Halbleiter/MOS, PID-Typ, Interference-Enhanced-Reflector-Typ), wobei diese Tests spezifisch für das jeweilige Sensorprinzip und insgesamt nicht realitätsnah sind, somit keine allgemeine Aussagekraft besitzen. Für MOS-Sensoren (Halbleitertyp) wird zur Prüfung als Mehrkomponenten VOC-Detektor eine feste, nur aus zwei Komponenten bestehende Gasmischung aus n-Oktan und Xylol vorgeschrieben (vgl. DIN ISO 16000-29:2014 5.4.1.1.a). Begründet wird dies mit dem Vergleich von wenigen getesteten Prüfverfahren durchgeführt mit nur einem speziellen MOS-Sensortyp. Dieses Vorgehen ist jedoch für die Vielzahl aktueller Halbleitersensoren mit einer sehr großen Vielfalt an Schicht- und Katalysatormaterialien sowie Präparationsmethoden und Betriebsweisen nicht angemessen, da sich Funktionsweise und Reaktionsmechanismen auf den Sensoren erheblich unterscheiden. Zwingend erforderlich erscheinen in jedem Fall Tests mit unterschiedlichen Gaszusammensetzungen, die die große Komplexität der Innenraumlufzzusammensetzung angemessen widerspiegeln. Weiterhin werden relevante Störeinflüsse, z. B. Luftfeuchte, vernachlässigt und nur eine Störstoffprüfung mit  $2800 \text{ mg/m}^3$  (ca. 1500 ppm)  $\text{CO}_2$  durchgeführt (vgl. DIN ISO 16000-29:2014 5.9.4), obwohl gerade dieses Gas das Sensorsignal bei MOS-Sensoren nachweislich nicht beeinflusst. Dagegen werden omnipotente Gase wie Wasserstoff ( $\text{H}_2$ , natürlicher Hintergrund 500 ppb [19], in Innenräumen treten Konzentrationen im einstelligen ppm Bereich auf [20]) oder Kohlenmonoxid ( $\text{CO}$ , natürlicher Hintergrund 150 ppb [19], in Innenräumen bis 8 ppm [21]) nicht berücksichtigt, obwohl diese bei den meisten MOS-Sensortypen eine starke Sensorreaktion hervorrufen. Weitere potenzielle Störgase sind Methan (natürlicher Hintergrund 1820 ppb [19], in Innenräumen können speziell bei Gasherden und -heizungen deutlich höhere Konzentrationen auftreten), Lachgas ( $\text{N}_2\text{O}$ , natürlicher Hintergrund 320 ppb [19]) sowie  $\text{NO}_x$  und Ozon aus der Außenluft.

Basis für eine realitätsnahe Prüfung von VOC-Detektoren sollen aktuelle Studien darstellen, welche die Komplexität der Innenraumlufzzusammensetzung in ihrer Variationsbreite sinnvoll abbilden. Dabei müssen u. a. anorganische Gase (z. B. Wasserstoff und Kohlenmonoxid) und flüchtige organische Verbindungen berücksichtigt werden, die je nach Siedebereich in VVOC (Very Volatile Organic Compounds, z. B. Formaldehyd), VOC (Volatile Organic Compound, z. B. Toluol) und SVOC (Semi-Volatile Organic Compounds, z. B. Weichmacher) eingeteilt werden. Hierbei muss berücksichtigt werden, dass es keine einheitliche Definition für die Messung flüchtiger organischer Verbindungen gibt und selbst der Begriff VOC einmal als Oberbegriff und einmal nur für die Gruppe der mittel-flüchtigen Verbindungen genutzt wird. Tatsächlich werden in verschiedenen Normen (z. B. DIN EN ISO 16000-6, DIN EN ISO 13999-2, VDI 4300-6, Richtlinie 1999/13/EG, Richtlinie 2001/81/EG, Richtlinie 2004/42/EG) unterschiedliche Definitionen für VOC angegeben. So werden VOC in der DIN ISO 16000-29:2014 über einen Siedepunkt zwischen  $50 \text{ °C} - 100 \text{ °C}$  und  $240 \text{ °C} - 260 \text{ °C}$  definiert, wodurch das für die Innenraumlufqualität hoch relevante Formaldehyd (Siedepunkt  $-19 \text{ °C}$ ) nicht unter diese Definition fällt, Benzol (Siedepunkt  $80 \text{ °C}$ ) und Ethanol (Siedepunkt  $78 \text{ °C}$ ) Grenzfälle sind je nach genauer Bereichsdefinition. Hintergrund für diese Verwirrung sind die etablierten Referenzmessverfahren, die auf einer Absorption der flüchtigen Verbindungen auf Adsorbentmaterialien, wie Tenax, beruhen, so dass mit der anschließenden GC-MS-Analyse (Gaschromatographie-Massenspektrometrie) nur die Stoffe erfasst werden, die (a) überhaupt adsorbieren (leichtflüchtige Verbindungen, speziell Permanentgase und VVOC (Siedepunkt  $<50-100 \text{ °C}$ ), passieren den Absorber) und (b) von diesem wieder thermisch desorbiert werden können (SVOC

mit einem Siedepunkt bis 400 °C werden in der Regel nicht wieder freigesetzt). Für die Innenraumlufthqualität ist somit eine umfassendere Definition von VOC im Sinne einer Gesamt-VOC-Konzentration sinnvoll. Zu diskutieren ist, ob Methan, das auch bei sehr hohen Konzentrationen keine die Gesundheit beeinträchtigende Wirkung zeigt, berücksichtigt werden sollte, da die Konzentration in Innenräumen beachtliche Werte annehmen kann und den Gesamt-VOC-Wert allein auf Grund der ubiquitären Hintergrundkonzentration dominieren würde. Tatsächlich ist Methan in verschiedenen Normen explizit ausgeschlossen, dafür wird der Begriff NMVOC (Non-Methane Volatile Organic Compounds) genutzt [22]. Neben der genauen Definition der VOC-Zielgase müssen potenzielle Störgase identifiziert und spezifiziert werden, Störgase umfassen dabei sowohl Gase, die eine akute Sensorreaktion hervorrufen wie CO und H<sub>2</sub>, als auch solche, die eine Sensorschädigung verursachen können. Schließlich müssen die Umgebungsbedingungen definiert werden, unter denen die Systeme getestet werden, insbesondere der Temperatur- und Luftfeuchtebereich, ggfs. auch der Druckbereich.

### 3 Lösungsweg zur Erreichung des Forschungsziels

Um einen angemessenen Kompromiss zwischen der Komplexität realer Luft mit typisch über 300 verschiedenen VOC und einem praktisch handhabbaren Testschema zu erzielen, wird diskutiert, die vielen verschiedenen Substanzen durch den oder die wichtigsten, d.h. in praktischen Untersuchungen am häufigsten auftretende, Vertreter jeder Substanzklasse zu repräsentieren. Als Substanzklassen sind dabei angedacht Aldehyde, Alkane, Alkene, Alkohole, Aromate, Ester, Glykole und Glykoether, Halogenkohlenwasserstoffe (HKW), Ketone, organische Säuren, Terpene sowie ggfs. Siloxane. Die Betrachtung von Substanzklassen ist begründet, weil MOS-Sensoren häufig auf verschiedene Substanzen einer Klasse ähnlich reagieren, da die funktionelle Gruppe, die die Klasse charakterisiert, auch für die Reaktion auf der Sensoroberfläche maßgeblich ist [23]. Siloxane treten im Allgemeinen in relativ geringen Konzentrationen auf, so dass sie für die Gesamt-VOC-Konzentration von eher untergeordneter Bedeutung sind. Siloxane können auf den reaktiven Sensoroberflächen aber zur Bildung von  $\text{SiO}_2$  (Glas) führen und damit zur schleichenden Vergiftung der Sensoren. Möglich wäre daher die Betrachtung der Siloxane nur als Störgröße, ggfs. in einem separaten Teil der Prüfvorschrift zu Betrachtung der Langzeitstabilität.

Betrachtet man die oben genannten elf VOC-Klassen (ohne Siloxane) sowie die immer relevanten Störeinflüsse Feuchte,  $\text{CO}$  und  $\text{H}_2$ , so ergibt sich bereits ein 14-dimensionaler Prüfraum, der selbst bei nur drei Konzentrationen je Größe nicht mehr vollständig durch Messung aller Kombinationen ( $3^{14} = 4.782.969$ ) abgedeckt werden kann. Erschwerend kommt hinzu, dass Formaldehyd nicht gut durch andere Vertreter der Substanzklasse Aldehyde repräsentiert wird und dass Ethanol und Formaldehyd in vergleichsweise hohen Konzentrationen auftreten, von der Standard-VOC-Analytik aber wegen ihres niedrigen Siedepunktes gar nicht erfasst werden. Diese hochrelevanten und weit verbreiteten Komponenten der Innenraumluft sollten daher separat gemessen werden, was die Dimension des Prüfraums weiter erhöht. Als pragmatischer Ansatz wird eine endliche Anzahl von Prüfgasgemischen vorgeschlagen, bei der die Konzentration jeder Größe jeweils randomisiert ausgehend aus einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeitsverteilung, basierend auf den in Feldstudien beobachteten Verteilungen, gewählt wird. Die Randomisierung stellt zugleich sicher, dass der Prüfprozess nicht erkannt wird und sich somit smarte Sensorsysteme nicht in einen speziellen Prüfmodus bringen können. Je nach Sensorprinzip und Modell kann die Komplexität des Tests ggfs. durch Voruntersuchungen angepasst werden, wenn z. B. ein Sensor auf eine Substanz(klasse) keine Reaktion zeigt, kann diese aus dem Test herausgenommen werden. Der Ansatz der randomisierten Messung hat sich für die Kalibrierung von smarten Sensorsystemen als sehr zielführend erwiesen [24], es muss aber noch theoretisch und experimentell untersucht werden, wie viele statistisch unabhängige Tests, d.h. randomisierte Gasgemische, erforderlich sind, um die korrekte Funktion eines Gassensor(system)s zu prüfen. Ebenso muss sicher-gestellt werden, dass die Prüfvorschrift ausreichend universell für unterschiedliche Sensorsysteme ist, so dass neben MOS-Sensoren auch Sensoren bzw. Sensorsysteme basierend auf anderen Prinzipien untersucht werden müssen. Hier kommen vor allem Systeme auf Basis von Photo-Ionisations-Detektoren (PID) in Frage [25].

Für die Allgemeinheit, die als Endnutzer mit den Messergebnissen der VOC-Sensorsysteme konfrontiert werden, ist die Einschätzung des Messergebnisses egal in welcher Einheit problematisch, da die Bedeutung der Konzentrationsangabe nicht allgemein bekannt ist. Daher soll begleitend ein vereinfachter Luftqualitätsindex entwickelt und validiert werden, der mit wenigen einfachen Stufen eine schnelle und einfache Interpretation der Messergebnisse für jedermann gewährleistet. Als Basis könnte z. B. die hygienische Bewertung von TVOC-Werten

des Umweltbundesamtes [26] dienen, angelehnt an den weithin akzeptierten AQI (Air Quality Index) in den USA [27]. Dabei ist allerdings zu berücksichtigen, dass die dort angegebenen TVOC-Werte sich auf VOC im engeren, analytischen Sinne bezieht, also ohne VVOC und SVOC. Ein Gassensorsystem mit einem breiteren Empfindlichkeitsspektrum würde mehr Gaskomponenten als das analytische Referenzsystem erfassen und somit in der-selben Situation immer eine höhere Konzentration ermitteln. Die Grenzwerte der Stufen müssen daher angepasst werden, um dieser Erfassung weiterer Substanzen Rechnung zu tragen. Auch hierfür sind im Rahmen des Projektes aber Untersuchungen notwendig, um eine sinnvolle und breit akzeptierte Korrektur der Stufengrenzwerte definieren zu können. Diese Untersuchungen sollen im Rahmen der geplanten Feldtests durchgeführt werden.

Die oben skizzierten Labortests können immer nur eine Annäherung an die reale Welt mit ihrer deutlich größeren Komplexität darstellen. In anderen aktuellen Prüfnormen für Gassensoren und Gassensorsysteme wird daher zusätzlich immer auch eine Erprobung im Feld gefordert, sei es für die Überwachung der Außenluftqualität [28] oder für die Geruchsmessung [29]. In beiden Fällen ist eine solche Rückführung auf etablierte Referenzmesssysteme möglich, speziell für die Außenluftqualität durch Ko-Lokalisierung der zu prüfenden Systeme mit den offiziellen Referenzmessstationen (gemäß der EU Air Quality Directive 2008/50/EC). Für die Innenraumluftqualität gibt es solche Referenzmessstationen oder Messvorschriften jedoch nicht, so dass eine solche Überprüfung im Feld nicht möglich ist. Daher muss im Rahmen des Projektes geprüft werden, wie gut die Wirklichkeit durch die vorgeschlagene Laborprüfung abgebildet wird. Hierfür bieten sich Feldtests an, die zum einen durch analytische Messungen basierend auf den existierenden Standards für (V)VOC-Analytik in Innenräumen [30] begleitet werden. Durch gezielte Freisetzung von VOC wird zudem geprüft, ob die Sensorsysteme korrekte bzw. zumindest realistische Werte auch für transiente Vorgänge liefern. Da transiente Vorgänge aufgrund der unzureichenden zeitlichen Auflösung nicht mit der normgerechten Analytik begleitet werden können, sollen hierfür portable GC-PID-Systeme eingesetzt werden (Dräger X-pid, [31]).

Insgesamt muss durch umfangreiche Untersuchungen mit unterschiedlichen Sensorprinzipien und -elementen sowie Messsystemen verschiedener Hersteller sichergestellt werden, dass die entwickelte Prüfvorschrift eine konstant hohe Aussagequalität für verschiedene Sensorprinzipien und ein breites Spektrum realer Anwendungsbedingungen, also für übliche, von Menschen als Wohn- oder Arbeitsraum genutzte Innenräume, besitzt. Dies soll durch Erprobung von Sensoren und Systemen der im projektbegleitenden Ausschuss beteiligten Firmen, aber auch durch ein eigenes, wesentlich aufwendiger konstruiertes und kalibriertes Benchmark-System mit einer Mehrzahl an Sensoren, komplexer dynamischer Betriebsweise sowie optimierter Signalverarbeitung sichergestellt werden. Zudem werden wo immer möglich Referenzmethoden genutzt, um Fehler im Experiment frühzeitig erkennen und bei der Auswertung der Ergebnisse ausschließen zu können. Dies entspricht der Vorgehensweise in der Analytik, wo die Qualitätssicherung durch Vergleichsstudien zwischen Laboren sichergestellt wird.

Ausgehend vom Stand der Wissenschaft wurde eine sensorbasierte Bewertung der Innenraumluftqualität auf Basis der Gesamt-VOC-Konzentration mit hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung geprüft. Zur Erschließung der damit verbundenen Märkte ist die Etablierung eines anerkannten Prüfstandards erforderlich, dessen Entwicklung mit dem Projekt wissenschaftlich abgesichert wurde. Folgende Hypothesen sollen im Projekt belegt werden:

H1 Zur Laborprüfung von Sensoren und Sensorsystemen kann die komplexe Zusammensetzung der Innenraumlufte mit mehreren hundert VOC durch Repräsentanten der wichtigsten chemischen Gruppen adäquat nachgebildet werden.

H2 Durch gleichzeitige Beaufschlagung mit typischen Störgrößen kann die erforderliche Spezifität der Sensorsysteme geprüft werden.

H3 Es gelingt, einen Kompromiss zwischen Komplexität und Aussagekraft zu finden, so dass die Prüfung für Unternehmen, speziell KMU, wirtschaftlich durchführbar ist.

H4 Durch eine optionale Vergiftungsprüfung kann die Robustheit der Sensorsysteme für typische Anwendungsszenarien geprüft werden.

H5 Ein vereinfachter Luftqualitätsindex kann aus dem Summen-VOC-Wert abgeleitet werden, um das Messergebnis für die breite Öffentlichkeit verständlich darzustellen.

H6 Die Ergebnisse von Felduntersuchungen bestätigen die Aussagekraft der Laborprüfungen im Hinblick auf Summen-VOC-Wert, Luftqualitätsindex und Robustheit.

Diese Hypothesen wurden anhand umfangreicher experimenteller Untersuchungen an verschiedenen Sensoren und Sensorsystemen und begleitet mit Referenzanalytik untersucht. Ziel ist einerseits die Konkretisierung der Prüfvorschrift sowie ggfs. die Definition von Teilprüfungen für spezifische Zielgase oder Robustheit gegenüber Vergiftung.

## **4 Durchgeführte Arbeiten**

In diesem Kapitel werden die durchgeführten Arbeiten und die daraus resultierenden Ergebnisse den Zielen des Vorhabens in Form der Arbeitspakete gegenübergestellt.

### **4.1 AP 1 Detaillierte Festlegung des Versuchsplans**

#### **4.1.1 Studienergebnisse zur Belastung von Innenräumen**

Zu Beginn des Projektes wurden verschiedene Studien zur VOC-Belastung in Innenräumen untersucht. Dafür wurden zwei Studien der Arbeitsgemeinschaft ökologischer Forschungsinstitute e.V. (AGÖF) eine Kinder-Umwelt-Survey (KUS) und Eventstudie<sup>2</sup> ausgewählt:

- 1) Bereitstellung einer Datenbank zum Vorkommen von flüchtigen organischen Verbindungen in der Raumluft  
– AGÖF-Forschungsprojekt, Umweltbundesamt, 2008 [32]

In dieser Studie wurden 294.221 Messwerte in 2.462 verschiedenen Räumen analytisch erfasst, wobei ein Messwert der Detektion einer Substanz entspricht, während 102 Räume mehrfach bemessen wurden. Bei den Räumen handelt es sich zum Großteil um Büroräume, Klassenräume, Wohnzimmer, Schlafzimmer, Aufenthaltsräume und Kinderzimmer. Insgesamt liegen 70 % der Messwerte unter der Bestimmungsgrenze (überwiegend bei  $1 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ). Bei der Bildung von Summenwerten (Stoffgruppen) wurden die Messwerte, die kleiner als die Bestimmungsgrenze sind, nicht vernachlässigt. Die Gase, die am häufigsten über der Bestimmungsgrenze detektiert wurden, sind Toluol und Formaldehyd.

- 2) Zielkonflikt energieeffiziente Bauweise und gute Raumluftqualität – Datenerhebung für flüchtige organische Verbindungen in der Innenraumluft von Wohn- und Bürogebäuden  
– AGÖF-Forschungsprojekt, Umweltbundesamt, 2014 [33]

Für die zweite Studie wurden die Daten in zwei Teile gesplittet (2a und 2b). In 2a wurden 4.428 Räume untersucht. In 2b wurden energieoptimierte Gebäude untersucht, sodass insgesamt 600.000 Einzelmesswerte aufgenommen wurden. Neben Toluol und Formaldehyd wurden bei über 95 % der durchgeführten Messungen Acetaldehyd, Propanal, n-Hexanal und Xylol über der Bestimmungsgrenze quantifiziert.

- 3) Kinder-Umwelt-Survey (KUS) 2003/06: Innenraumluft – Flüchtige organische Verbindungen in der Innenraumluft in Haushalten mit Kindern in Deutschland  
– Umweltbundesamt, 2006 [34]

Im Kinder-Umwelt-Survey wurden die Schadstoffbelastungen von 3- bis 14-jährigen Kinder in Deutschland auf repräsentativer Basis erfasst. Bei einer zufällig ausgewählten Unterstichprobe von 1.790 Kindern aus 150 Orten wurden umfangreiche Daten zur Umweltbelastung durch chemische Schadstoffe aufgenommen. Dabei wurden in 555 Haushalte zur Probenahme drei Passivsammlertypen genutzt, welche einen Mittelwert über eine Woche aufgenommen haben. Für die sauerstoffhaltigen Stoffgruppen Alkohole, Ketone, Ester, Siloxane und Organische

---

<sup>2</sup> Event bezieht sich in diesem Sinne auf das Ereignen von VOC-Freisetzen im Sinne der menschlichen Aktivität wie Kochen, Putzen, Stoffwechsel.

Säuren liegen in dieser Studie aufgrund der Wahl der Passivsammlertypen nur unvollständige Daten vor.

In Tabelle 1 sind die nach den ersten drei Studien gemessenen Konzentrationen in P50-, P90- und P95-Perzentile für die VOC-Stoffgruppen zusammengefasst. Die Messwerte sind in der für die Analytik üblichen Einheit  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  angegeben. Anhand des P50-Wertes (50 % der Messwerte liegen unterhalb der angegebenen Konzentration), und des P95-Wertes (95 % der Messwerte liegen unterhalb der angegebenen Konzentration), lassen sich Aussagen darüber treffen, in welchem Konzentrationsbereich 45 % der Messungen liegen. Bei 5 % der Messwerte resultierten höhere Konzentrationen und bei den restlichen 50 % sind die Messwerte niedriger als der angegebene P50-Wert. Während Alkene und HKW in 95 % der Fälle mit Werten unter  $30 \mu\text{g}/\text{m}^3$  detektiert wurden und damit vernachlässigbar sind, sind Aromaten, Aldehyde und Ketone mit Werten über  $400 \mu\text{g}/\text{m}^3$  hervorzuheben gefolgt von Alkanen, Alkohole, Terpene, Ester und Glykole & Glykolether. Bei der Stoffgruppe Glykole & Glykolether sei darauf verwiesen, dass eine Bereitstellung über Gasflaschen nicht möglich ist.

Tabelle 1: VOC-Vorkommen aufgeteilt nach Stoffgruppen gemäß der durchgeführten Messungen der vorgestellten Studien [32, 33, 34].

Stoffgruppe	P50 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$				P90 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$				P95 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$			
	S1	S2a	S2b	S3	S1	S2a	S2b	S3	S1	S2a	S2b	S3
Alkane	40	29	23	15	202	149	74	85	386	309	201	168
Alkene	8	9	9	-	14	13	9	-	19	20	11	-
HKW	18	17	11	2	26	24	13	2	30	26	13	3
Aromaten	54	37	30	27	229	159	92	94	449	294	144	130
Alkohole <sup>3</sup>	42	40	31	-	184	186	137	-	331	329	208	-
Terpene	36	20	27	26	200	144	224	139	388	276	348	203
Aldehyde	117	113	99	75	358	322	255	167	494	469	350	214
Ketone	76	61	64	-	265	226	189	-	446	398	274	-
Ester	41	38	26	-	177	111	68	-	352	202	102	-
Siloxane	7	9	8	-	59	56	60	-	109	100	95	-
Organische Säuren	35	30	50	-	183	111	147	-	294	190	204	-
Glykole & Glykolether	67	40	31	-	196	113	87	-	343	212	162	-

Im nächsten Schritt wurden die Verteilung der Stoffgruppenvertreter in ihrer jeweiligen Stoffgruppe auf dominierende VOCs hin untersucht. Beginnend mit den Alkanen in Tabelle 2, wobei n-Decan, n-Undecan n-Hexan und Cyclohexan in verschiedenen Studien gleichermaßen verteilt sind. Quellen dieser Stoffe sind vor allem Außenluft, Kraftstoff, Abgase. Einen dominierenden Vertreter gibt es in dieser Stoffgruppe nicht, wobei sich die Vertreter in linear-verzweigte und zyklische Verbindungen gruppieren lassen. Daher wurden für weitere Untersuchungen die beiden Alkanvertreter n-Hexan und Cyclohexan ausgewählt.

<sup>3</sup> Aufgrund der Probenahmemethoden sind wurden die Messdaten größtenteils ohne Aufnahme einer Ethanol-Konzentration durchgeführt.

Tabelle 2: Verteilung der Alkanvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].

Stoff	P50 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$				P95 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$			
	S1	S2a	S2b	S3	S1	S2a	S2b	S3
n-Hexan	2.00	1.83	2.00	-	18.00	13.00	11.25	-
n-Heptan	3.00	2.00	1.00	1.40	22.90	14.00	11.10	22.80
n-Octan	1.00	1.00	1.00	1.10	12.60	9.00	4.00	10.30
n-Nonan	1.00	0.50	1.00	0.50	15.00	9.97	4.00	12.10
n-Decan	2.00	1.00	1.00	1.40	41.00	21.56	9.00	14.90
n-Undecan	3.00	2.00	1.00	1.40	58.00	27.99	9.20	14.80
n-Dodecan	2.00	1.00	1.00	1.10	30.90	17.40	6.00	7.90
Cyclohexan	2.00	1.00	1.00	2.50	29.80	19.14	7.10	39.10
Methylcyclohexan	1.00	0.50	0.50	1.10	17.00	9.00	3.02	26.50

In der Stoffgruppe der Aromaten dominieren Toluol und Xylol, siehe Tabelle 3, und in 90 % der Fälle wurden diese beiden über der Nachweisgrenze detektiert. Die beiden Vertreter sind weit verbreitete Lösungsmittel und Toluol wird zudem als Bestandteil für Treibstoffe verwendet. Hervorzuheben ist ebenso noch Benzol, welches zwar nur in Konzentrationen bis  $7 \mu\text{g}/\text{m}^3$  quantifiziert wurde, allerdings ist dieses auch in sehr niedrigen Konzentrationen krebserregend.

Tabelle 3: Verteilung der Aromatvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].

Stoff	P50 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$				P95 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$			
	S1	S2a	S2b	S3	S1	S2a	S2b	S3
Benzol	1.7	1.0	1.0	1.8	6.0	4.0	4.0	7.7
Toluol	12.0	7.0	6.0	13.5	90.0	51.0	51.5	57.6
Ethylbenzol	2.0	1.0	1.0	1.4	27.0	20.6	7.0	6.8
m, p-Xylol	5.0	3.0	2.0	3.2	86.5	56.0	13.1	16.0
o-Xylol	2.0	1.0	1.0	1.2	29.3	17.9	4.1	5.5
3/4-Ethyltoluol	2.0	1.0	1.0	1.4	29.0	11.0	4.9	8.3
1,2,4-Trimethylbenzol	2.0	1.0	1.0	1.5	34.4	24.0	7.0	10.3
Styrol	2.0	1.0	1.0	0.5	21.8	21.2	10.0	4.8

Tabelle 4 zeigt die Stoffgruppe der Alkohole, in welcher Ethanol, sofern analysiert, in den höchsten Konzentrationen gemessen wurde. Daneben dominiert 2-Propanol. Beides sind typische Bestandteile von Desinfektions- oder Reinigungsmitteln sowie Kosmetikprodukten. Ethanol kann mit der gängigen Analytik (Tenax-Probenahme) nicht gesammelt werden. Es wird ein separates Sorptionsmedium benötigt, weswegen Ethanol in vielen Studien nicht angegeben wird.

Tabelle 4: Verteilung der Alkoholvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].

Stoff	P50 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$				P95 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$			
	S1	S2a	S2b	S3	S1	S2a	S2b	S3
Ethanol	56.5	0.5	-	-	810.5	236.0	-	-
1-Propanol	1.5	1.0	2.0	-	23.3	38.8	27.4	-
2-Propanol	15.0	20	14.5	-	130.0	160.0	105.7	-
1-Butanol	11.0	8.0	5.0	5.4	73.9	53.0	29.0	17.6
Isobutanol	3.0	1.0	1.0	1.8	41.9	18.0	9.1	1.8
1-Pentanol	1.8	1.0	1.9	-	9.3	8.3	9.6	-
2-Ethyl-1-hexanol	2.4	3.0	3.0	2.6	20.5	23.0	11.0	11.4

Terpene werden in vielen Produkten als Duftstoffzusätze verwendet, weswegen Vertreter dieser in den meisten belebten Innenräumen vorzufinden sind, siehe Tabelle 5. Als dominierende Vertreter stellen sich alpha-Pinen und Limonen heraus, wobei Limonen vor allem durch seinen orangenartigen Duft unverkennbar ist.

Tabelle 5: Verteilung der Terpenvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].

Stoff	P50 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$				P95 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$			
	S1	S2a	S2b	S3	S1	S2a	S2b	S3
alpha-Pinen	8.0	4.0	8.0	9.8	200.0	130.0	176.0	67.6
beta-Pinen	1.0	1.0	1.0	1.2	22.0	20.0	21.2	8.3
delta-3-Caren	2.5	1.0	4.0	11.5	65.0	59.0	71.3	103.0
Limonen	6.0	4.0	5.0	2.0	200.0	130.0	176.0	67.6

Die Aldehyde werden dominiert von Formaldehyd, Acetaldehyd und n-Hexanal welche in über 90 % der Messungen über der Nachweisgrenze liegen, Tabelle 6. In den Fokus rückt dabei Formaldehyd, welches aus vielen Einrichtungsgegenständen und Textilien wie Möbel, Bodenbelägen ausgast sowie in Reinigungs- und Pflegemittel enthalten ist.

Tabelle 6: Verteilung der Aldehydvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].

Stoff	P50 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$				P95 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$			
	S1	S2a	S2b	S3	S1	S2a	S2b	S3
Formaldehyd	23.0	20.0	18.0	15.5	104.5	112.9	83.2	47.7
Acetaldehyd	4.0	4.0	3.0	2.5	94.2	70.0	72.8	50.3
Propanal	5.0	4.0	4.2	3.7	27.0	22.5	18.2	6.1
n-Pentanal	14.0	11.0	11.5	9.8	36.4	32.3	21.8	10.6
n-Hexanal	7.0	6.0	7.0	7.2	105.5	91.0	47.3	30.0
n-Nonanal	3.5	4.0	3.5	2.9	28.0	26.0	20.9	14.7
Benzaldehyd	1.5	2.0	2.0	0.5	14.7	24.9	10.5	6.6
Methylglyoxal	23.0	20.0	18.0	15.5	2.0	2.5	2.0	17.8

Bei den Ketonen dominieren Aceton und Methylethylketon mit über 80 % der Gesamtkonzentration der Stoffgruppe, Tabelle 7. Quellen der beiden Vertreter sind Lösungsmittel, Stoffwechsel des Menschen, Nagelackentferner und Reinigungsmittel.

Tabelle 7: Verteilung der Ketonvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].

Stoff	P50 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$				P95 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$			
	S1	S2a	S2b	S3	S1	S2a	S2b	S3
Methylethylketon	5.0	4.1	3.0	-	85.2	68.0	12.2	-
Methylisobutylketon	1.0	0.5	0.6	-	16.9	8.3	1.3	-
Acetophenon	1.6	1.3	1.0	2.0	6.8	6.0	5.6	-
Aceton	51.0	42.0	50.5	-	293.8	280.8	231.5	-
Cyclohexanon	0.5	1.0	1.0	-	85.2	68.0	12.2	-

Ethylacetat und n-Butylacetat sind Bestandteile von Lösungsmittel und Weichmachern und emittieren während dem Kochen. Diese beiden Ester dominieren die Stoffgruppe in allen drei Studien, wie in Tabelle 8 dargestellt ist.

Tabelle 8: Verteilung der Estervertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].

Stoff	P50 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$				P95 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$			
	S1	S2a	S2b	S3	S1	S2a	S2b	S3
Methylacetat	2.0	1.0	1.0	-	17.0	11.0	8.0	-
Ethylacetat	4.0	3.0	3.0	9.3	80.8	49.0	38.1	70.8
n-Butylacetat	3.1	2.0	1.5	4.1	110.0	62.7	11.2	30.7
Propylenglykolmonomethyletheracetat	1.0	1.0	0.5	-	31.5	15.0	2.0	-
Texanol	0.7	0.5	0.5	0.5	11.0	5.0	4.1	2.8
TXIB	0.9	0.5	0.5	1.2	9.0	6.0	2.1	5.5

Siloxane weisen insgesamt niedrigere Konzentrationen auf, welche sich vor allem auf zyklische Verbindungen beschränken. Hierbei dominiert das D5 Siloxan, wie in Tabelle 9 dargestellt ist. Siloxane sind in Reinigungsmittel, Kosmetika, Deodorants, Seifen und Waschmittel zu finden.

Tabelle 9: Verteilung der Siloxanvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].

Stoff	P50 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$				P95 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$			
	S1	S2a	S2b	S3	S1	S2a	S2b	S3
Siloxan D3	1.0	2.5	3.0	-	13.0	27.8	7.6	-
Siloxan D4	1.5	1.0	1.0	-	18.9	13.0	27.2	-
Siloxan D5	4.3	3.0	3.0	-	58.8	40.0	60.2	-
Siloxan D6	0.5	1.5	-	-	18.4	19.0	-	-
Hexamethyldisiloxan	-	0.5	0.5	-	-	0.5	0.5	-

Abschließend dominiert Essigsäure in der Stoffgruppe der organischen Säuren, Tabelle 10. Auch diese sind in Reinigungsprodukten und Kosmetika zu finden und ebenso in Nahrungsmitteln.

Tabelle 10: Verteilung der Organische Säurenvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].

Stoff	P50 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$				P95 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$			
	S1	S2a	S2b	S3	S1	S2a	S2b	S3
Essigsäure	29.5	24.0	43.0	-	150.0	149.6	152.0	-
Propionsäure	0.5	1.0	2.0	-	11.6	12.6	23.0	-
n-Pentansäure	0.5	0.5	0.5	-	66.4	4.0	4.0	-
n-Hexansäure	1.0	1.0	1.0	-	14.0	10.0	7.7	-
2-Ethylhexansäure	0.5	0.5	0.5	-	28.7	2.0	1.0	-

Auch heute werden groß angelegte Studien hauptsächlich nach DIN EN ISO 16000-6 durchgeführt, wonach die Innenraumluft ohne Anwesenheit von Menschen analysiert wird. Deshalb war es ebenso das Ziel Studien zu betrachten, die den Einfluss der menschlichen Anwesenheit berücksichtigen. Die Ergebnisse wurden mit einer vierten Studie, welche die Anwesenheit vom Menschen und somit Aktivitäten wie Kochen, Putzen berücksichtigt, verglichen.

- 4) Volatile organic compound emissions during HOMEChem
  - HOMEChem experiment (House Observations of Microbial and Environmental Chemistry), University of Texas at Austin's test house, 2021 [35]

Die HOMEChem-Studie präsentiert Ergebnisse von VOC-Emissionsmessungen aus skriptbasierten Experimenten (mit mehreren Wiederholungen) zum Kochen, Reinigen und der Anwesenheit von Menschen sowie aus ungestörten Basismessungen eines Gebäudes und seines Inhalts. In Tabelle 11 dargestellt sind die häufigsten detektierten VOCs nach

verschiedenen Situationen aufgeführt. Die dort aufgeführten VOC bestätigen die Ergebnisse der vorherigen Studien auch für die Experimente mit bewohnten Innenräumen.

Tabelle 11: Dominierende VOC nach verschiedenen Wohnsituationen aufgenommen in der HOMEChem-Studie [35].

Situation	VOC 1	VOC 2	VOC 3	VOC4	VOC 5
Unbewohnt	Essigsäure (56 ppb)	Methanol (40 ppb)	Ameisensäure (12 ppb)	Ethanol (12 ppb)	Acetaldehyd (5 ppb)
Kochen	Ethanol	Methanol	Essigsäure	Acetaldehyd	Aceton
Anwesenheit	CO2	Aceton	Isopren	Ethanol	Siloxane (D4-D6)

Fazit: Unter Vernachlässigung der Stoffgruppen mit niedrigen Konzentrationen (Alkene und HKW) und Siloxane, welche separat betrachtet werden, bleiben die Stoffgruppen mit den jeweils dominierenden Vertretern aus Tabelle 12 übrig, welche für die Messungen und das Design of Experiment im Folgenden berücksichtigt werden.

Tabelle 12: Auswahl der Stoffgruppenvertreter.

Stoffgruppe	Vertreter1	Vertreter 2
Aldehyde	Formaldehyd	Acetaldehyd
Alkane	n-Hexan	Cyclohexan
Alkohole	Ethanol	2-Propanol
Aromaten	Toluol	Xylol
Esther	Ethylacetat	n-Butylacetat
Ketone	Aceton	Methylethylketon
Organische Säuren	Essigsäure	-
Terpene	Limonen	-

#### 4.1.2 Design of Experiment

Um Sensorsysteme auf die ausgewählten VOC zu testen, wurde eine Gasmischanlage (GMA) am LMT speziell für den Anwendungsfall Innenraumluftqualität entwickelt. Die sogenannte NormGMA basiert auf dem Prinzip der Verdünnung von Prüfgasen aus Prüfgasflaschen. Mithilfe von Massenflussreglern (engl. mass flow controller, MFC) werden Prüfgase mit einer bestimmten Prüfgaskonzentration mit synthetischer Luft (bereitgestellt von einem Nullluftgenerator GT Plus 30000 Ultra-Zero Air Generator, Labor+Service GmbH & Co. KG, Dettingen, Deutschland) verdünnt.

Die NormGMA ist modular aufgebaut und es wird unterschieden zwischen einfacher Verdünnung, Normlinie, und zweifacher Verdünnung, Vorverdünnungslinie, welche einen höheren Dynamikbereich und niedrigere Konzentrationen erreicht. In beiden Fällen führt das verdünnte Prüfgas in die Messgaslinie, welcher zusätzlich Nullluft als Trägergas zugeführt wird.

Für die Variation der Feuchte wird ein Befeuchtungsmodul genutzt, wobei das Trägergas durch eine bei 20 °C temperierte Waschflasche befeuchtet wird. Der schematische Aufbau der einzelnen Module ist in Abbildung 1 gezeigt. Die NormGMA besteht aus 13 Vorverdünnungsmodulen, einem Normalmodul und dem Befeuchtungsmodul. Somit können insgesamt 15 Zielgrößen, welche möglichst sinnvoll auf VOC und Störgrößen verteilt werden, unabhängig voneinander variiert werden.

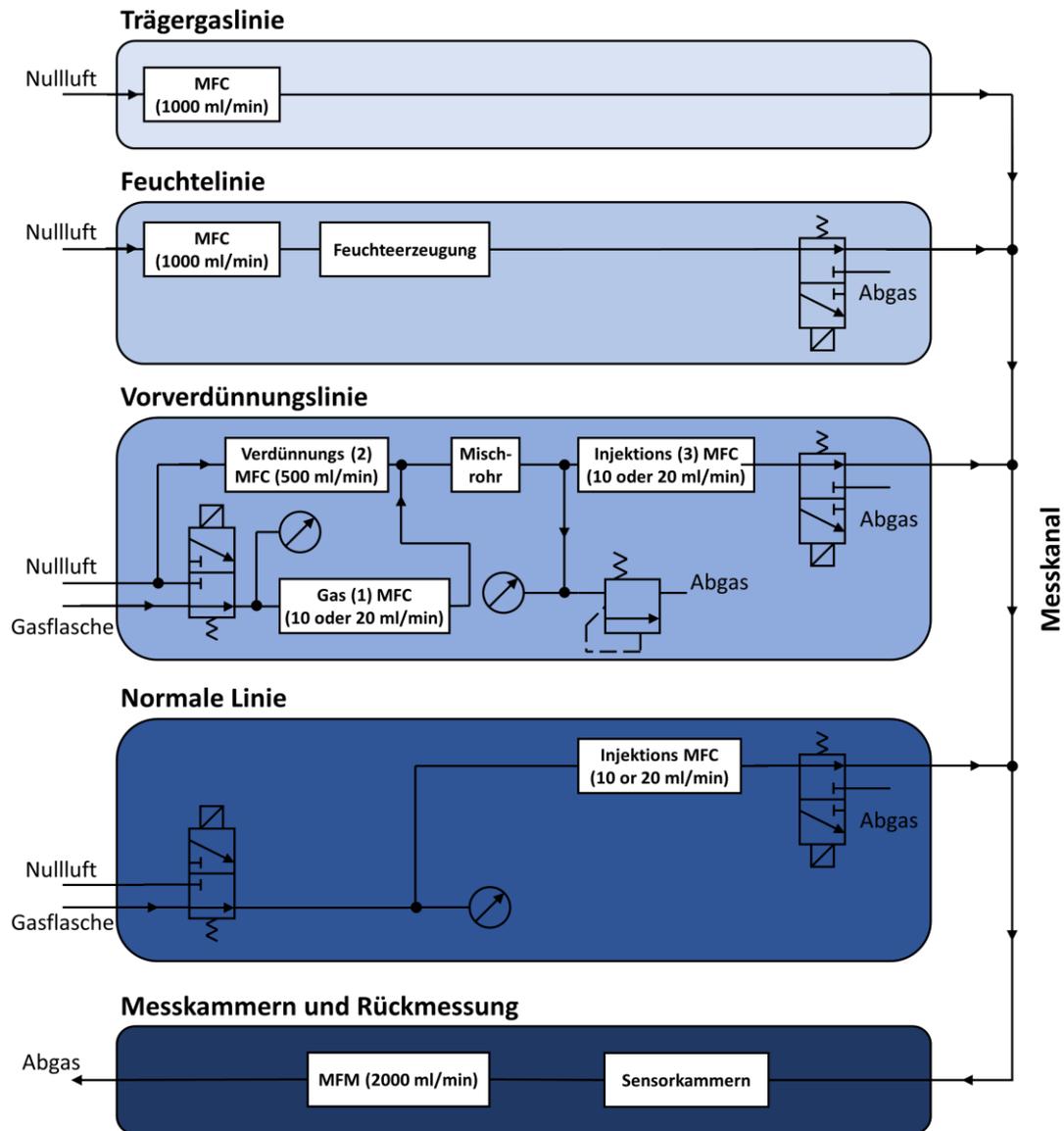


Abbildung 1: Schematischer Aufbau einer Gasmischanlage.

Bei der Auswahl der Zielgrößen wurde darauf geachtet, dass alle Stoffgruppen mit mindestens einem Repräsentanten vertreten sind und zusätzlich die Stoffgruppen mit den höchsten Konzentrationen auf zwei Repräsentanten aufgestockt wurden.

Neben der Auswahl der Zielgrößen galt es den Konzentrationsbereich für jede Variable festzulegen. Im Folgenden werden die Konzentrationen in ppb angegeben, da diese Einheit aufgrund in der Sensorik geläufiger ist. Es wurde ein Standardkonzentrationsbereich mit 1-100 ppb für VOC definiert, welcher eine typische Hintergrundbelastung nach den P95-Stoffgruppenwerten aus den vorgestellten Studien entspricht. Für Aldehyd-, Alkohol- und Keton-Vertreter wurde dieser Bereich auf 150 ppb (Ethanol sogar auf 200 ppb) aufgrund der hohen aufgetretenen Konzentrationen erweitert.

Die Innenraumlufte setzt sich nicht nur aus einem Hintergrund an VOC zusammen, sondern ist vor allem geprägt durch Events, welche auch als Freisetzungen bezeichnet werden können. In diesen Szenarien wird kurzzeitig (im Minuten- bis Stundenbereich) eine erhöhte Konzentration meist

eines VOC oder einer Stoffgruppe erreicht. Um dies mit einer Kalibrierung abdecken zu können, werden die dominierenden VOC zusätzlich in einem erweiterten Bereich angeboten, und so Events in der Gasmischanlage simuliert. Typische Konzentrationen, die dabei erreicht werden können, liegen bei 1 ppm. Dies stellt keine Obergrenze dar und es können auch höhere Konzentrationen erreicht werden, was unter anderem mithilfe des Projekts herausgefunden werden sollte.

Neben den VOC als Zielgrößen galt es Störgrößen auszuwählen und dafür Konzentrationsbereiche festzulegen. Wasserstoff weist ein atmosphärisches Grundlevel von 500 bis 550 ppb auf. Im Innenraum können Konzentrationen im niedrigen einstelligen ppm-Bereich erreicht werden, weshalb der Konzentrationsbereich auf 400 bis 2000 ppb festgelegt wurde. Für Kohlenmonoxid liegt das atmosphärische Grundlevel bei 150 ppb. Ebenso sind Konzentrationen im einstelligen ppm-Bereich erwartbar, daher wurde der Bereich auf 100 bis 2000 ppb festgelegt. Typische Feuchtevariationen können im Innenraum im Bereich von 20 % bis 75 % r.F. bei Raumtemperatur auftreten. Auf eine Berücksichtigung eines oxidierenden Gases (beispielsweise Stickoxide) musste aufgrund der Beschränkung der Gasmischanlage auf 15 Module verzichtet werden. Ebenso sind die Empfindlichkeiten von typischen VOC-Sensorsystemen auf H<sub>2</sub>, CO und Feuchte höher als auf Stickoxide und somit relevanter. Die resultierenden Bereiche für alle Ziel- und Störgrößen inklusive des VOC-Summenwerts TVOC<sub>Sens</sub> sind in Tabelle 13 dargestellt.

Tabelle 13: Konzentrationsbereiche für Ziel- und Störgrößen.

Stoffgruppe bzw. Störgröße	Zielgröße	Standard-konzentrationsbereich	Erw. Bereich
Aldehyde	Formaldehyd	1 – 150 ppb	1 – 600 ppb
Aldehyde	Acetaldehyd	1 – 150 ppb	1 – 1000 ppb
Alkane	n-Hexan	1 – 100 ppb	1 – 1000 ppb
Alkohole	Ethanol	1 – 150 ppb	1 – 1000 ppb
Alkohole	2-Propanol	1 – 150 ppb	1 – 1000 ppb
Aromaten	Toluol	1 – 200 ppb	1 – 2000 ppb
Aromaten	Xylol	1 – 100 ppb	1 – 1000 ppb
Esther	Ethylacetat	1 – 100 ppb	1 – 1000 ppb
Ketone	Aceton	1 – 150 ppb	1 – 1000 ppb
Organische Säuren	Essigsäure	1 – 100 ppb	1 – 1000 ppb
Terpene	Limonen	1 – 100 ppb	1 – 300 ppb
Störgröße	Wasserstoff	400 – 2000 ppb	400 – 2000 ppb
Störgröße	Kohlenmonoxid	100 – 2000 ppb	100 – 2000 ppb
Störgröße	Rel. Feuchte	25 – 27 %	25 – 27 %
Summenwert	TVOC <sub>Sens,ppb</sub>	115 – 1155 ppb	438 – 3200 ppb
Summenwert	TVOC <sub>Sens,µg/m<sup>3</sup></sub>	361 – 3309 µg/m <sup>3</sup>	1317 - 12335 µg/m <sup>3</sup>

Das Ziel einer umfangreichen Ausgangsmessungen war eine möglichst hohe Aussagekraft für die unterschiedlichen Fragestellungen zu Messunsicherheit, Einheit für Gesamt-VOC-Konzentration, Luftqualitätsindex etc. sicherstellen zu können. Dafür wurden 930 randomisierte Gasmische mit den ausgewählten VOC und Störgrößen mittels Latin Hypercube Sampling (kurz LHS) [36] erstellt, um jede Variable unabhängig voneinander zu variieren. Jedes Gasmisch hat eine Dauer von 25 Minuten, wobei die ersten sechs Minuten zum Spülen der Linien genutzt werden. In den ersten 300 Gasmischen wurden die VOC gemäß Standardkonzentrationsbereich variiert. In je 50 weiteren Gasmischen wurde jede Stoffgruppe mit dem erweitertem Konzentrationsbereich variiert. Am Ende wurden ca. 150 Gasmisch abwechselnd ohne 3 VOC variiert, für die Abdeckung eines besonders niedrigen VOC-Levels.

Eine typische Konzentrationsabfolge ist am Beispiel von Acetaldehyd in Abbildung 2 gezeigt. Die restlichen Zielgrößen zeigen einen ähnlichen Verlauf, wobei der erweiterte Bereich für jede Zielgröße an einer anderen Stelle variiert wurde. Für  $\text{TVOC}_{\text{Sens}}$  als Summe der verwendeten VOC ergibt sich dadurch die in Abbildung 3 dargestellte Konzentrationsabfolge.

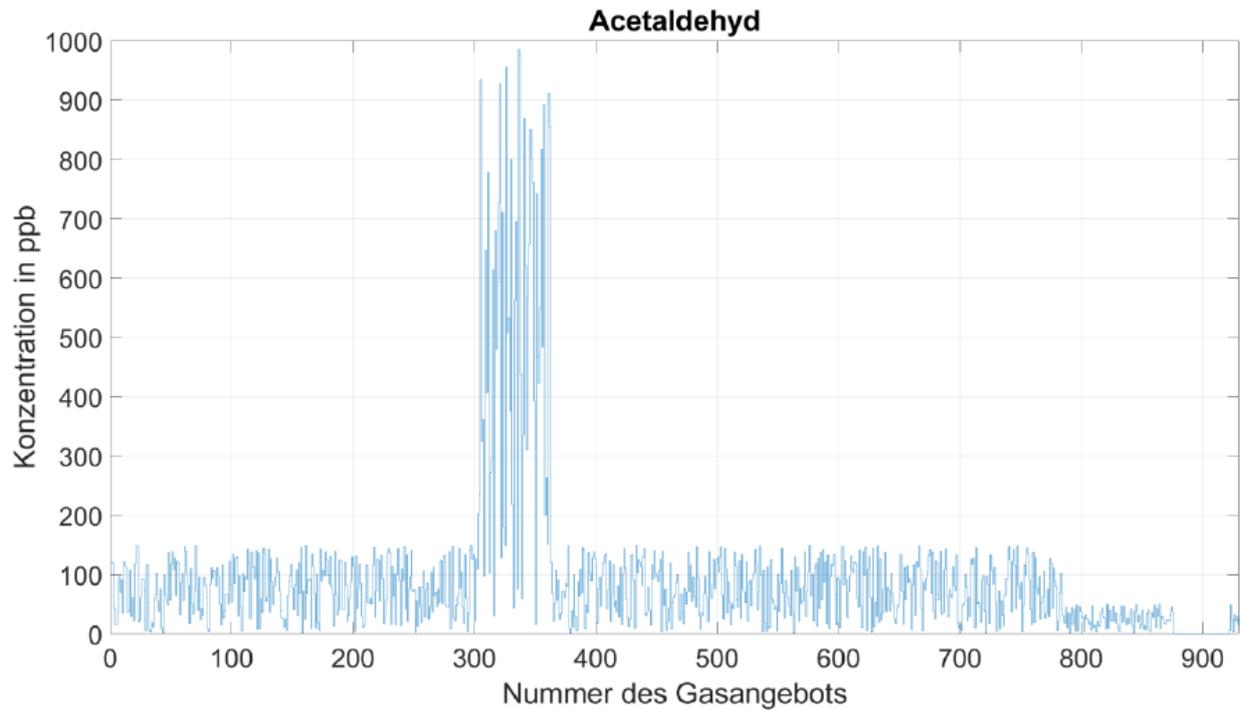


Abbildung 2: Konzentrationsabfolge Acetaldehyd für die Labormessung mit 930 randomisierten Gasgemischen.

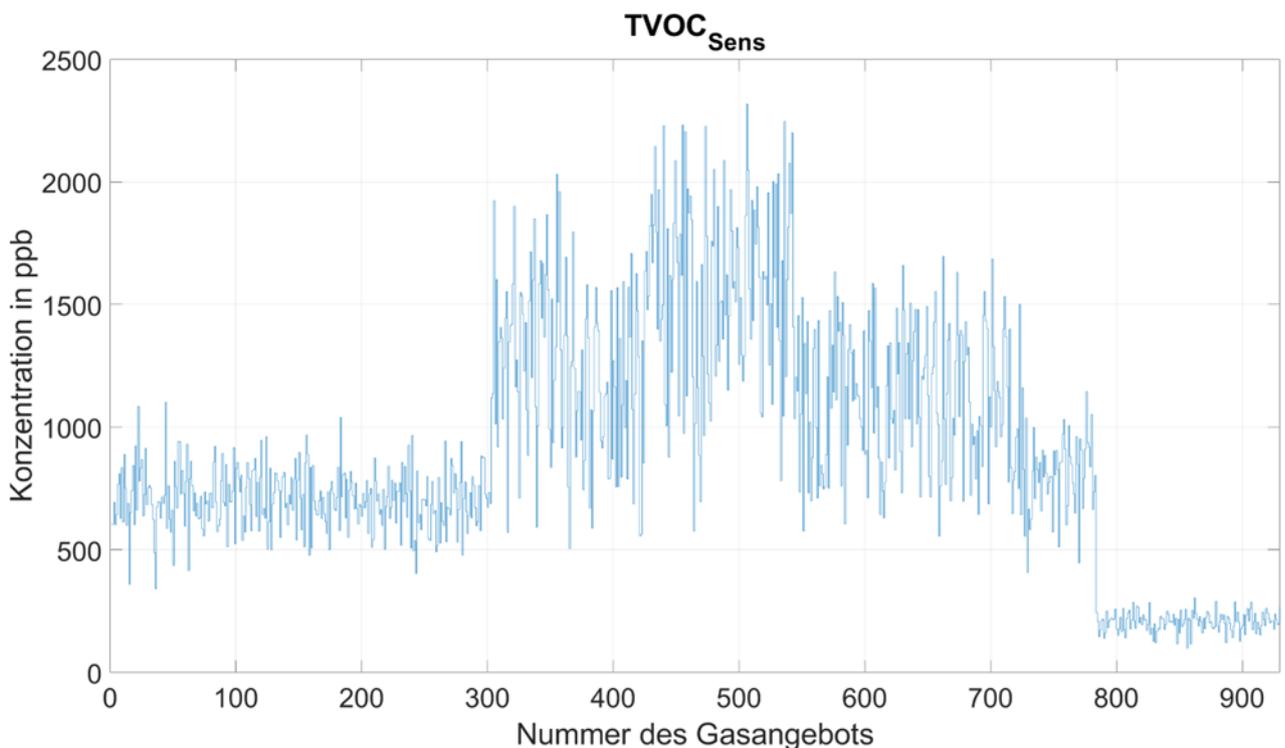


Abbildung 3: Konzentrationsabfolge  $\text{TVOC}_{\text{Sens}}$  für die Labormessung mit 930 randomisierten Gasgemischen.

## 4.2 AP2 Benchmark Systeme

Für die Aussage über die Messqualität auf Basis von low-cost Sensoren und das Design von praktikablen Testmessungen einer Richtlinie für VOC-Sensorsysteme ist es wichtig herauszufinden, was realistisch erreichbar ist. Dafür wurden vier Benchmark-Systeme aufgebaut, welche mit einer größeren Anzahl an Sensoren, komplexer dynamischer Betriebsweise, optimierter Signalauswertung und umfassender Kalibrierung ausgestattet sind. Ziel dabei ist es, ein Vergleichsmaßstab herauszufinden, welcher für einzelne Sensoren zur Orientierung als Benchmark dienen soll.

Dabei wurden die in Tabelle 14 dargestellten MOS- und CO<sub>2</sub>-Sensoren, Temperatur- und Feuchtesensoren, sowie eine elektrochemische Zelle untersucht.

Tabelle 14: Verwendete Sensoren für die vier Benchmark-Systeme.

Sensorprinzip	Sensortyp
MOS-Sensor	Bosch BME688
MOS-Sensor	Renesas ZMOD4410
MOS-Sensor	Renesas ZMOD4510
MOS-Sensor	Sciosense ENS160
MOS-Sensor	Sensirion SGP40
T/RH	Sensirion SHT35
CO <sub>2</sub> + T/RH	Sensirion SCD30
CO <sub>2</sub> + T/RH	Sensirion SCD41
EC-Zelle	EC-Sense TB600B-TVOC-10

Für die Ansteuerung und das Auslesen der Sensoren wurde eine auf einem Teensy 4.0 basierte Hardware verwendet, welche am Lehrstuhl für Messtechnik entwickelt wurde [37]. Die Sensoren wurden in Messkammern platziert, um sie an die GMA anschließen und somit vermessen zu können.

Für den Betrieb in den Feldtests wurde das Benchmark-System mit einer Pumpe (Xavitech V200) ausgestattet. Ein Raspberry Pi4 Model B dient als Steuermodul für die Sensoren und die Pumpe und sendete die aufgenommenen Messdaten per WLAN in eine Datenbank.

Für die Steigerung der Sensitivität und Selektivität wurden die Sensoren in einem Temperaturzyklus mit einer Dauer von 144 s betrieben, vgl. Abbildung 4. Der Temperaturzyklus besteht aus zwölf 400 °C-Hochtemperaturphasen mit einer Dauer von jeweils fünf Sekunden, gefolgt von zwölf Niedrigtemperaturen (100 °C bis 375 °C in 25 °C-Schritten) mit einer Dauer von jeweils sieben Sekunden.

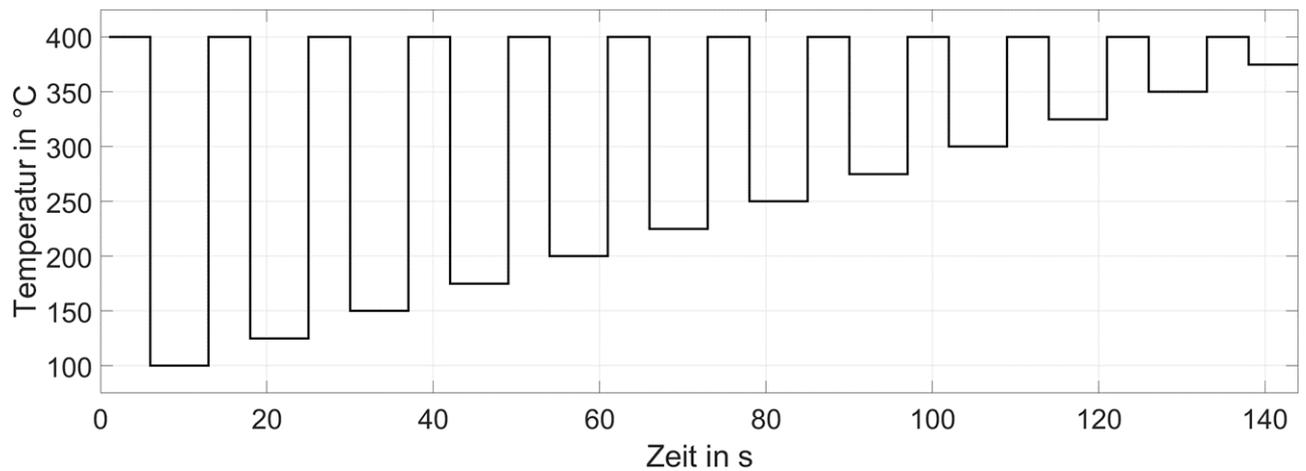


Abbildung 4: Temperaturzyklus für die dynamisch betriebenen MOS-Sensoren.

Alle Teile wurden in einer Aluminium-Box verstaut, vgl. Abbildung 5. In die Box führt ein USB-Kabel für die Stromversorgung des Raspberry Pi 4 Model B. Ein herausgeführter Schlauch dient der Zuführung der Innenraumluft zu den Sensoren, welche wie in der GMA-Messung in den Sensorkammern (Markierung I.) platziert bleiben und von der zu untersuchenden Innenraumluft durch eine Pumpe angeströmt werden.

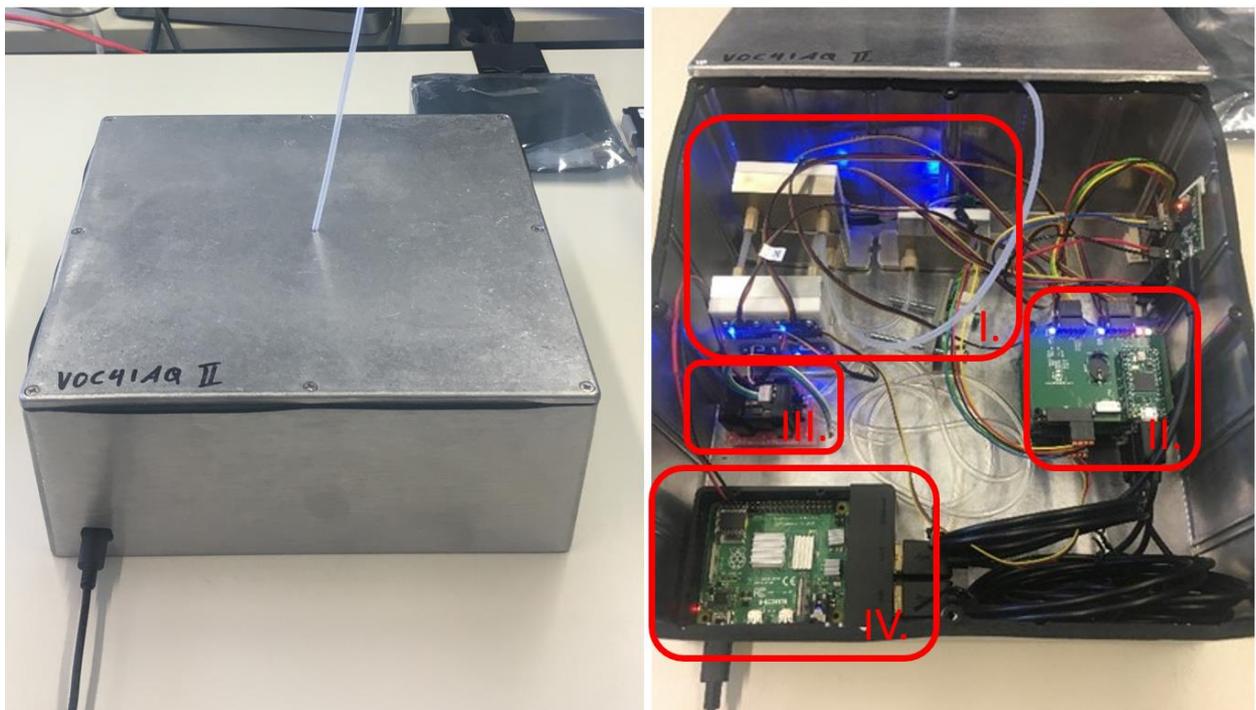


Abbildung 5: Benchmark-System, links: Kompakte Aluminium-Box mit herausführendem Schlauch, der die Innenraumluft zu den Sensoren pumpt. Rechts: Innenansicht des Benchmark-Systems mit MOS-Sensoren in Messkammern (I), Steuerhardware (II), Pumpe (III) und Raspberry Pi zur Steuerung und Datenspeicherung.

Für den Vergleich von unterschiedlichen Innenräumen wurde vier Benchmark-System (bezeichnet als VOC4IAQ I bis IV) aufgebaut, kalibriert und in den Feldtests in vier verschiedenen Arbeits- und Wohnräumen betrieben.

### 4.3 AP3 Labormessungen

Für die dynamische Betriebsweise der MOS-Sensoren ist eine Kalibrierung unabdingbar, wofür die umfangreiche Laborausgangsmessung genutzt wurde. Zusätzlich dient die Kalibrierung auch dafür Messunsicherheiten auszuwerten, welche im Wesentlichen durch den Kreuzvalidierungsfehler der Ausgabewerte ausgedrückt wird. Daher wurde die Messung mit randomisierten Gasgemischen gemäß dem Design of Experiment aus AP1 durchgeführt.

Abbildung 6 zeigt die zur Kalibrierung genutzte Signalauswertung aller Sensoren im TCO.

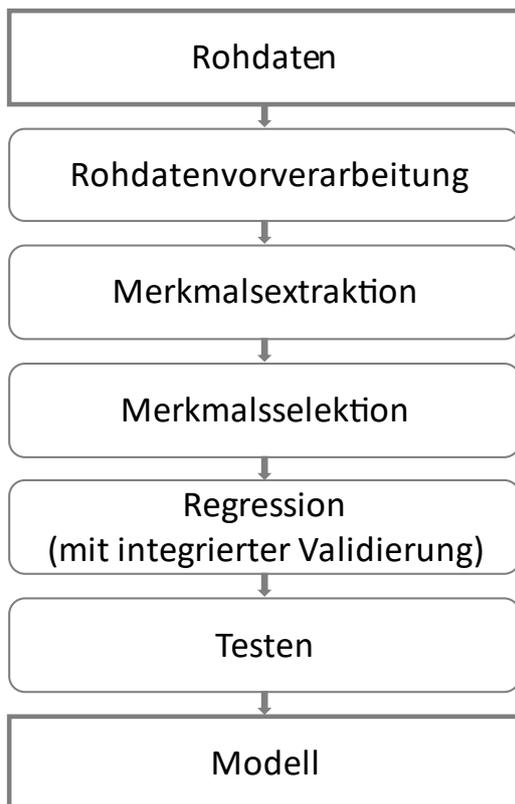


Abbildung 6: Signalverarbeitungskette Temperatur-zyklisch betriebener Sensoren.

Die Rohdaten liegen dabei in zyklischer Form vor. Die Rohdatenvorverarbeitung besteht aus einer Umwandlung der Sensorausgaben in den Leitwert in logarithmischer Darstellung. Aus dem Temperaturzyklus werden formgebende Merkmale in Form von Mittelwerten und Steigungen über 1-Sekundenintervalle berechnet. Ein typischer Temperaturzyklus mit Einteilung in 1-Sekundenintervalle für die Merkmalsextraktion ist in Abbildung 7 dargestellt.

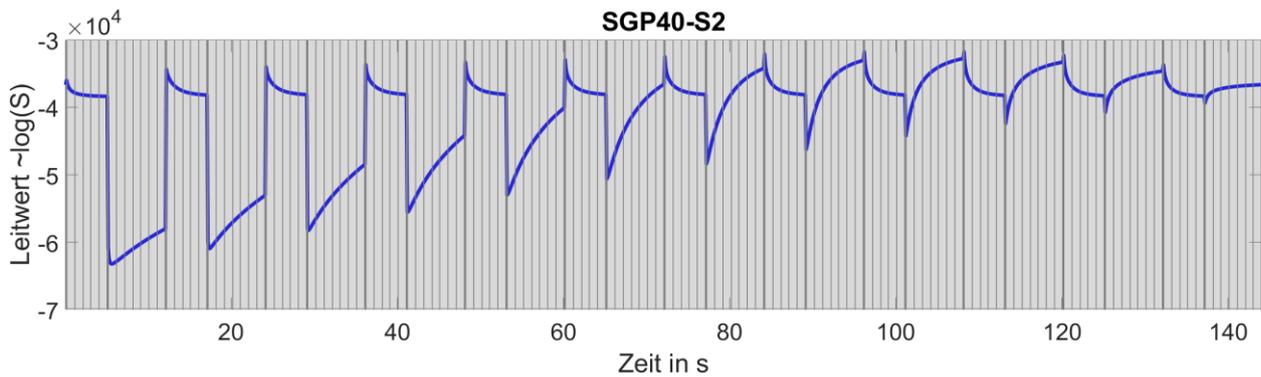


Abbildung 7: Typischer Leitwertverlauf im Temperaturzyklus mit Einteilung in 1-Sekundenintervallen

Bei der Kombination der vorgestellten fünf Sensoren entstehen dabei 3168 Merkmale (zu beachten: SGP40 und ENS160 haben jeweils 4 Einzelsensorelemente). In einem weiteren Schritt werden die wichtigsten Merkmale für die Quantifizierung einer Zielgröße selektiert. Dafür wird die Methode RFE (recursive feature elimination)-Least Squares verwendet. Details können aus [38] entnommen werden. Die anschließende Regression mit Validierung in Form der PLSR (partial least squares) optimiert die Hyperparameter (Anzahl der PLSR-Komponenten und Anzahl der Merkmale) mit dem Optimierungszielkonflikt niedrige Dimension der Hyperparameter und kleiner Fehler. Dabei kommt die 10-fache Kreuzvalidierung zum Einsatz. Die Wahl des Datensatzsplitt wird aber nicht zyklusbasiert sondern gruppenbasiert durchgeführt. Dies bedeutet, dass ganze Gasgemische für die Validierung rausgenommen werden und nicht nur einzelne Zyklen pro Gasgemisch. Daraus resultiert ein Modell, welches abschließend auf Testdaten angewendet wird, welche als Teil der Labormessung während des Modelltrainings nicht verwendet wurden. Hierfür wurden aus der Labormessung gruppenbasiert 20 % zufällig ausgewählt und als Testdaten zurückgehalten.

Der RMSE (engl. root mean square error) dient dabei als Bewertungskriterium und zeigt die Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers zwischen Stellwert und Modellausgabe an. Dieser kann für Validierung und Testen gebildet werden und gibt die Messunsicherheit an.

Im Folgenden werden die Ergebnisse des Benchmarksystems VOC4IAQ I vorgestellt. Ergebnisse in Abbildung 8 zeigen PLSR-Plots mit den in der Gasmischanlage eingestellten Konzentrationen auf der x-Achse und der Modellausgabe auf der y-Achse. Dabei ist mit Aceton eine Zielgröße dargestellt, welche mit einem  $RMSE_{\text{Test}}$  von 26 ppb bei einem Konzentrationsbereich von 1 bis 1000 ppb ein gutes Modell darstellt. Für ein einheitsloses Bewertungskriterium wird der normierte RMSE (kurz: nRMSE) verwendet, welcher den RMSE auf den Mittelwert der Zielkonzentrationen normiert und für Aceton 25 % beträgt. Auch für das  $TVOC_{\text{Sens}}$  als Summenmodell wird ein funktionierendes Modell mit einem nRMSE von 7 % erreicht.

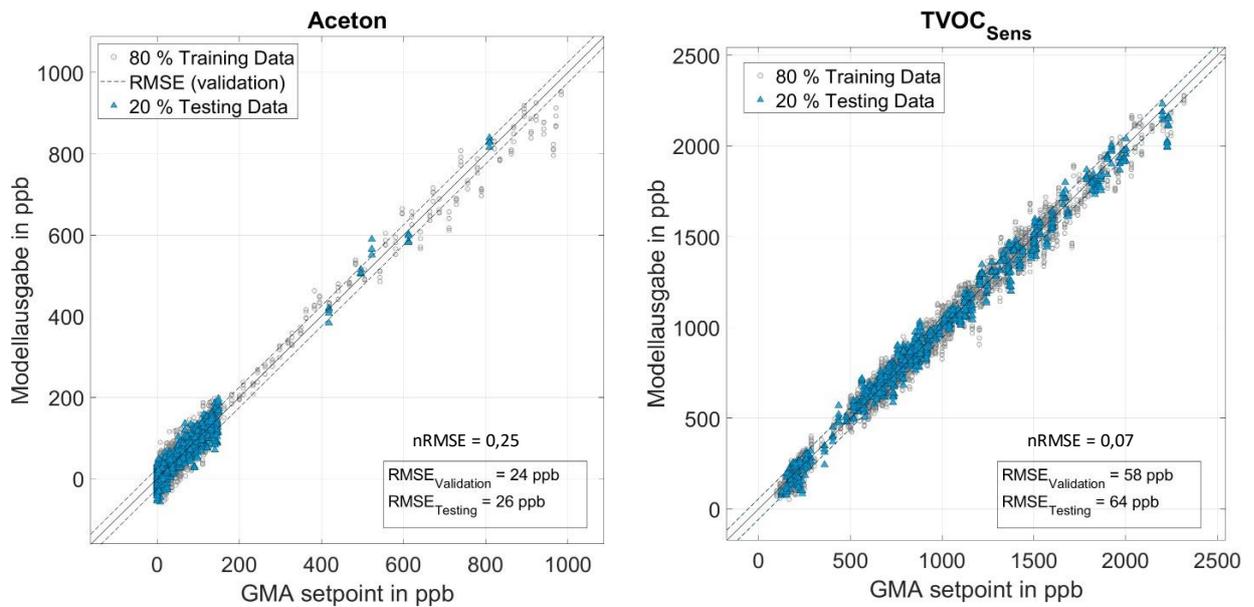


Abbildung 8: PLSR-Modelle für Aceton und TVOC<sub>Sens</sub>.

Beispiele für schlechte Modelle von einzelnen Zielgasen sind in Abbildung 9 anhand von Acetaldehyd und Formaldehyd gezeigt. Die Modellausgabe und Einstellwerte passen schlecht zusammen, was in einem  $RMSE_{Test}$  von 65 ppb und  $nRMSE$  von 70 % für Acetaldehyd resultiert.

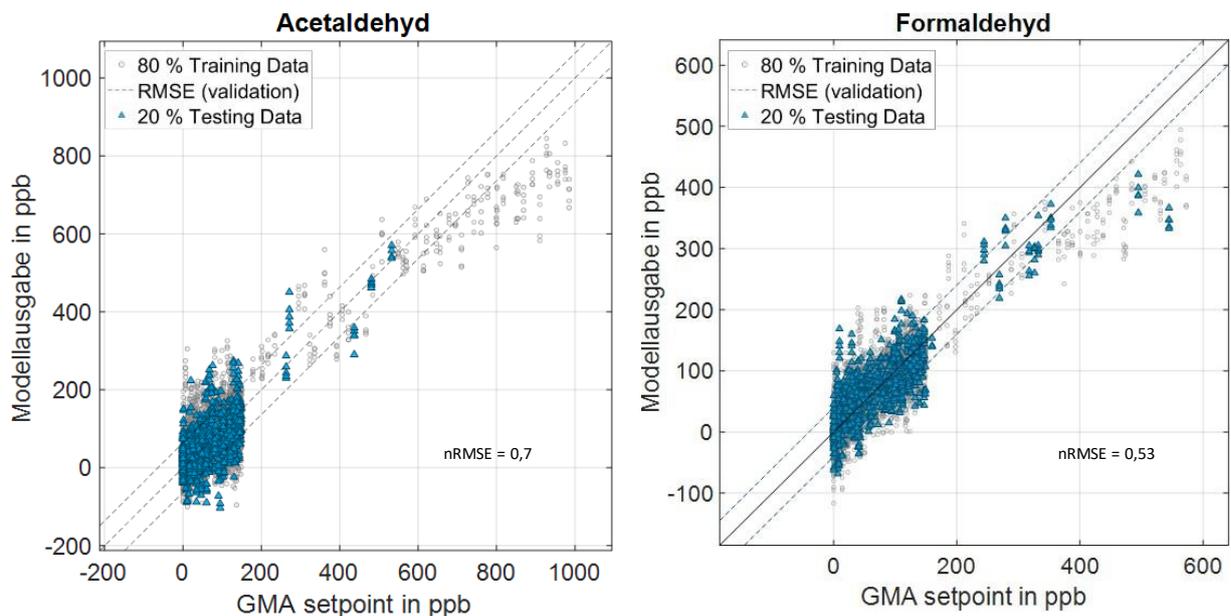


Abbildung 9: PLSR-Modelle für Acetaldehyd und Formaldehyd

In Tabelle 15 sind  $RMSE_{Test}$  und  $nRMSE$ -Werte für alle Ziel- und Störgrößen dargestellt. Dabei ist herauszulesen, dass funktionierende Modelle (mit Fehlern unter 30 %) für Aceton, Ethanol, Ethylacetat, Limonen, Toluol, TVOC<sub>Sens</sub>, Wasserstoff und Kohlenmonoxid entstehen, was Voraussetzung für den Transfer in reale Innenräume ist.

Weniger gute Modelle resultieren für Acetaldehyd, Essigsäure, Formaldehyd, n-Hexan und Xylol mit prozentualen Fehlern über 45 %. Trotzdem resultiert aus dem TVOC<sub>Sens</sub>-Modell, welches auch

aus den weniger gut reagierenden VOC entsteht, in Summe das Modell mit dem niedrigsten relativen Fehler.

Tabelle 15: RMSE-Testwerte für VOC4IAQ I.

Stör-/Zielgröße	RMSE <sub>Test</sub> in ppb	nRMSE in %
2-Propanol	34	36
Acetaldehyd	65	70
Aceton	26	26
Essigsäure	54	76
Ethanol	24	21
Ethylacetat	15	21
Formaldehyd	42	53
Limonen	5	10
n-Hexan	35	47
Toluol	23	16
Xylol	35	47
TVOC <sub>Sens,ppb</sub>	64	7
TVOC <sub>Sens,µg/m<sup>3</sup></sub>	177 µg/m <sup>3</sup>	8
Wasserstoff	60	5
Kohlenmonoxid	82	8

Im Gegensatz zur Analytik, bei welcher die typische Einheit µg/m<sup>3</sup> einer Gewichtsangabe pro Volumen entspricht, ist in der Sensorik die Einheit ppm (bzw. ppb) geläufiger, da die Reaktionen nicht auf dem Gewicht der Zielgase basieren, sondern auf Anzahl von Teilchen beispielsweise der funktionellen Gruppe. Für den Vergleich der beiden Einheiten wurden Modelle für beide Einheiten gebildet und die nRMSE<sub>Test</sub>-Werte in Tabelle 16 verglichen. Dabei schneiden die ppb-basierten Modelle für alle vier Benchmark-Systeme leicht besser ab, die relativen Fehler liegen aber nahe beieinander und deuten daraufhin, dass die Wahl der Einheit für die Modelle keinen entscheidenden Einfluss spielt. Die Abweichungen können durch die Wahl der Testdaten erklärt werden, welche für jede Modellbildung unterschiedlich ausfallen.

Tabelle 16: Vergleich der ppb- und µg/m<sup>3</sup> TVOC<sub>Sens</sub>-Modelle anhand des nRMSE<sub>Test</sub>.

Benchmark-System	TVOC <sub>Sens,ppb</sub> nRMSE in %	TVOC <sub>Sens,µg/m<sup>3</sup></sub> nRMSE in %
VOC4IAQ I	7	8
VOC4IAQ II	7	10
VOC4IAQ III	8	8
VOC4IAQ IV	7	7

#### 4.4 AP4 Statistische Bewertung

Für die Messunsicherheit nicht unwichtig ist die Dimensionalität des Prüfraums (Anzahl der unabhängigen Komponenten), welche ebenso Einfluss auf die Komplexität der GMA und somit das Laborequipments hat. Eine Berücksichtigung aller im Innenraum vorkommenden VOC (>300) ist für Labormessungen nicht möglich, aber auch nicht notwendig, da ein Großteil der VOC in sehr niedrigen Konzentrationen (<1 ppb) vorkommt und damit unter dem Detektionslimit der Sensoren liegen. Um die Dimensionalität reduzieren zu können, wurde in AP1 eine Einteilung in Stoffgruppen vorgenommen. Dies beruht auch auf der Stoffgruppentheorie, nach welcher die Reaktionen auf MOS-Sensoren durch die funktionellen Gruppen charakterisiert sind. Danach repräsentiert die Berücksichtigung eines Vertreters einer Stoffgruppe nicht nur sich selbst,

sondern die ganze Stoffgruppe, da andere Vertreter aufgrund der gleichen funktionellen Gruppe ähnlich reagieren.

Für die Untersuchung der Stoffgruppentheorie wurden sequentielle Messungen mit mind. 2 Vertretern pro Stoffgruppe durchgeführt und die formgebenden Muster im Temperaturzyklus in subjektiver Betrachtungsweise miteinander verglichen.

Abbildung 10 zeigt beispielhaft die Sensorreaktion der Stoffgruppe der Aromaten mit den Vertretern Toluol und Xylol, die nacheinander jeweils mit 1000 ppb angeboten wurde. Die resultierenden Ergebnisse sind hier und in den folgenden Abbildungen exemplarisch an einem SGP40-Schicht 2 gezeigt. Grundsätzlich ähneln sich die beiden Verläufe sehr, wobei sie in den ersten sieben Niedrigtemperaturen noch auseinander liegen und sich dann gegenseitig annähern. Dies wird durch Vorarbeiten bestätigt, in denen ein Modell, welches nur mit Toluol trainiert wurde, eine Xylol-Freisetzung ebenso detektiert hat. Soweit es hierdurch festgestellt werden kann, bestätigt sich hier die Stoffgruppentheorie, auch wenn es kleine Unterschiede zwischen den Reaktionsmustern gibt, welche auf den unterschiedlichen Molekülrest zurückzuführen sind.

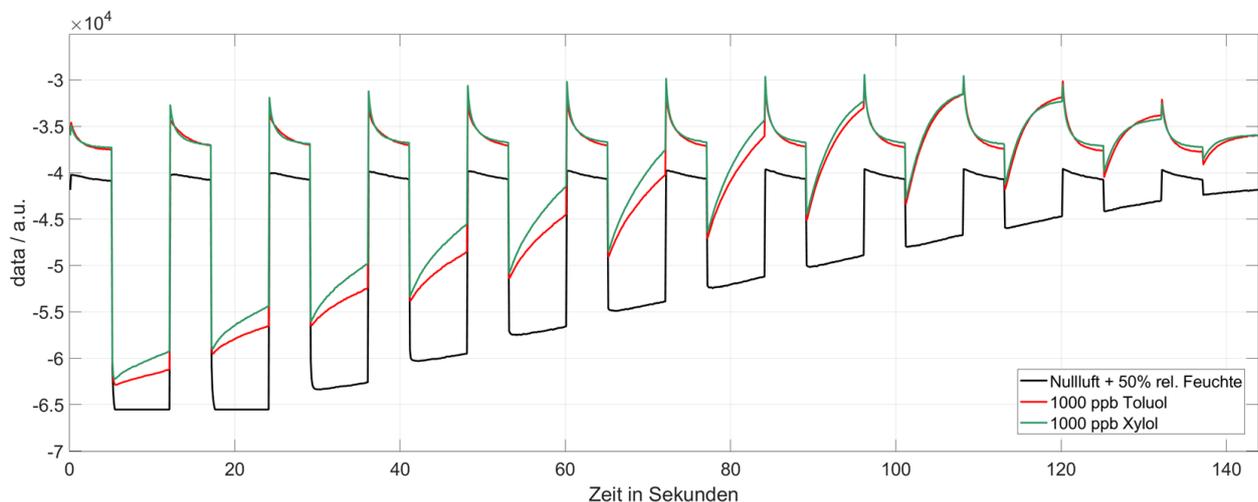


Abbildung 10: Vergleich der Sensorleitwerte eines SGP40-S2 in Temperatur-zyklischer Betriebsweise zwischen 1000 ppb Toluol und 1000 ppb Xylol als Vertreter der Aromaten.

Für die Stoffgruppen Alkohole (Ethanol und Isopropanol) in Abbildung 11 und Aldehyde (Formaldehyd, Hexanal und Acetaldehyd) in Abbildung 12, bestätigt sich für die vorgestellten Vertreter die Theorie, wobei die einzelnen Verläufe verschoben zueinander sind, welches auf Sensitivitätsunterschiede zurückzuführen ist. Die Signalmuster selbst ähneln sich aber sehr.

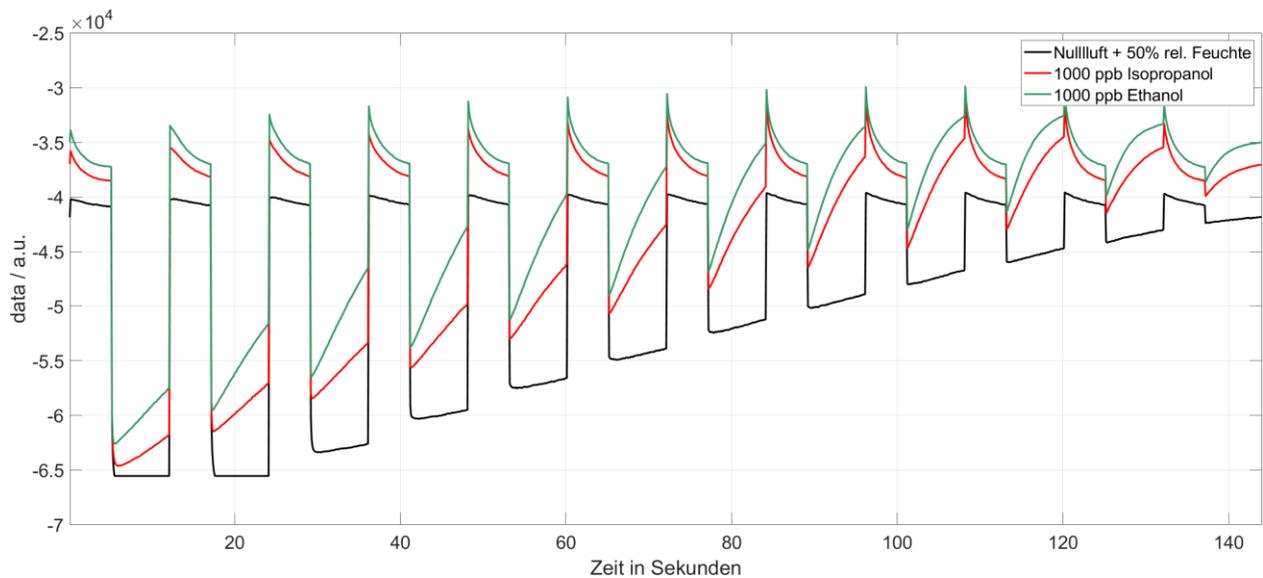


Abbildung 11: Vergleich der temperaturzyklischen Verläufe zwischen Ethanol und Isopropanol als Alkohol-Vertreter anhand eines SG40-Schicht 2.

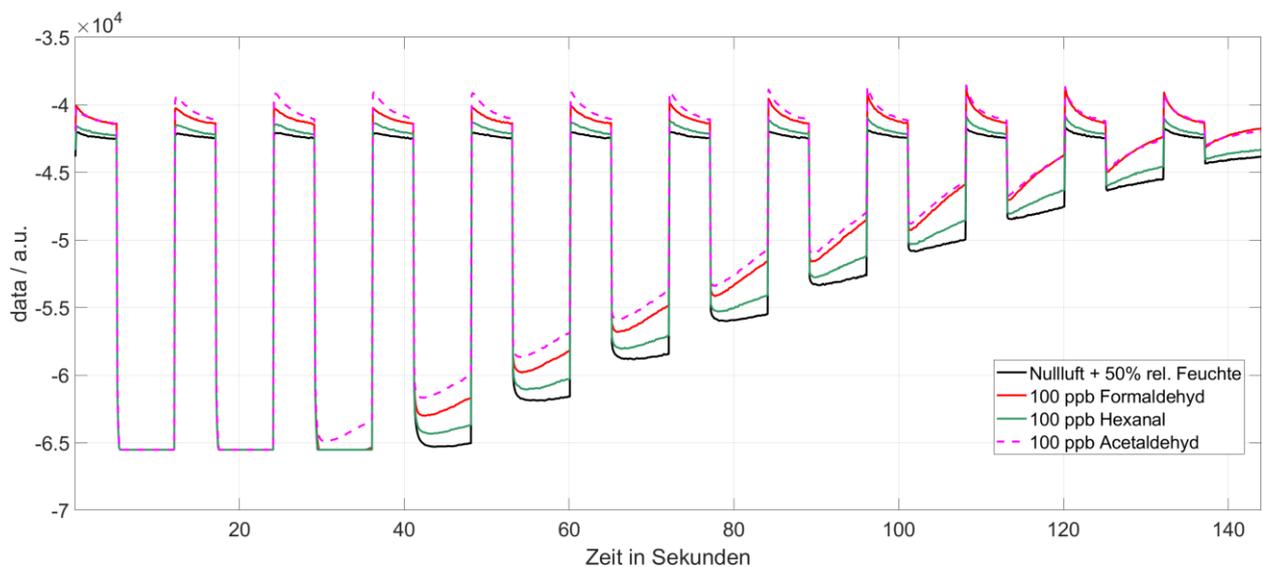


Abbildung 12: Vergleich der temperaturzyklischer Verläufe zwischen Formaldehyd, Hexanal und Acetaldehyd als Aldehyd-Vertreter anhand eines SG40-Schicht 2.

Für Alkane (Cyclohexan und n-Hexan) in Abbildung 13, Ester (Ethylacetat und Butylacetat) in Abbildung 14 und Ketone (Aceton und Butanon) in Abbildung 15, hingegen zeigen sich Unterschiede in den Signalmustern. Diese zeigen sich bei den Alkanen vor allem durch die verschiedenen Relaxationsverhalten bei den letzten drei Niedrigtemperaturen. Allgemein liegen die beiden Verläufe weit auseinander, was durch den Unterschied des Moleküls (zyklisch vs. linear-verzweigt) zu erklären sein könnte.

Der Unterschied bei den Estern ist vor allem ab der vierten Niedrigtemperatur zu erkennen. Davor lag das Butylacetat-Signal unter dem Ethylacetat-Signal, wobei sich die beiden Signale bei der vierten Niedrigtemperatur kreuzen und das Butylacetat-Signal danach darüber liegt. Ab der

drittletzen Niedrigtemperatur geht der Trend wieder in die andere Richtung, sodass das Butylacetat-Signal wieder unter dem Ethylacetat liegt.

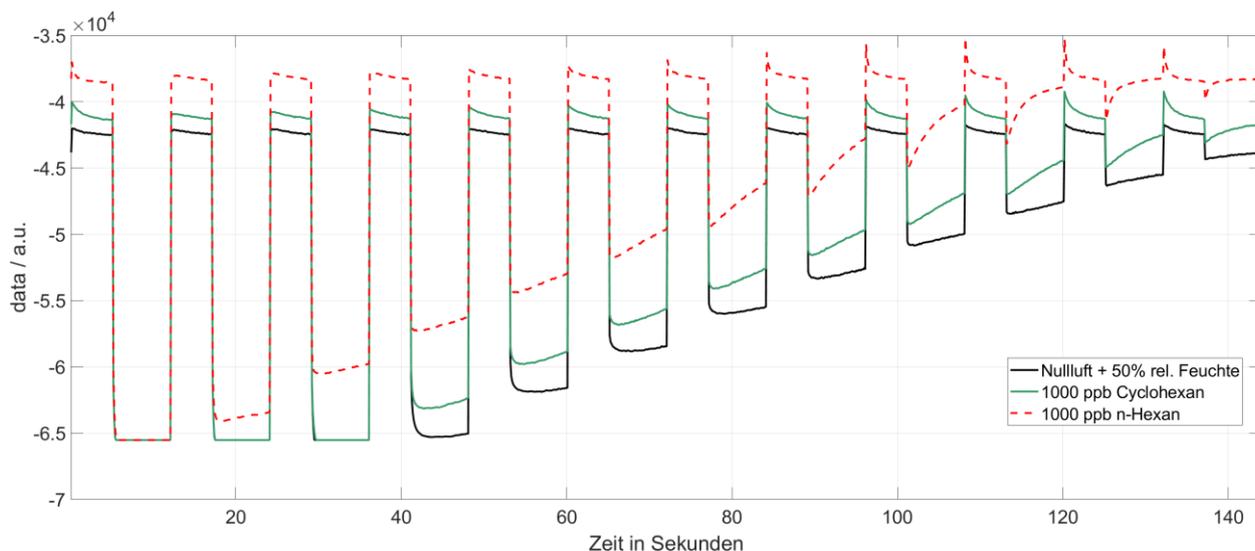


Abbildung 13: Vergleich der temperaturzyklischer Verläufe zwischen Cyclohexan und n-Hexan als Alkan-Vertreter anhand eines SG40-Schicht 2.

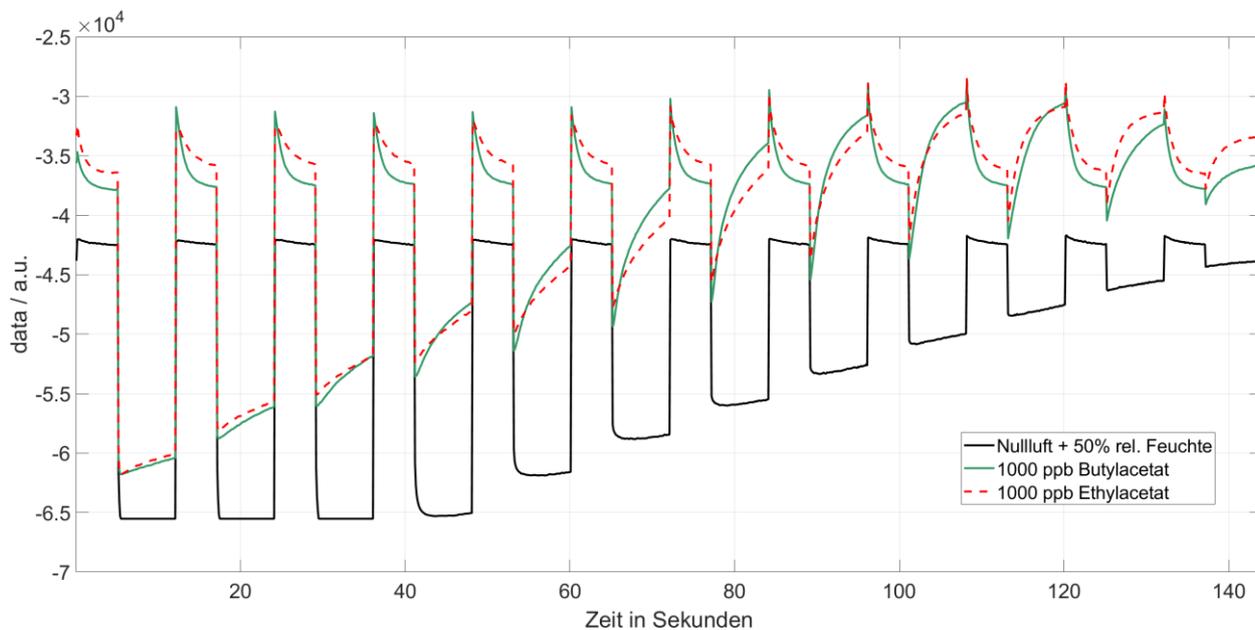


Abbildung 14: Vergleich der temperaturzyklischer Verläufe zwischen Ethylacetat und Butylacetat als Ester-Vertreter anhand eines SG40-Schicht 2.

Bei den Keton-Vertretern unterscheidet sich die Steigung in den ersten acht Niedrigtemperaturen stark, wobei sich die Verläufe bei den letzten vier Niedrigtemperaturen immer mehr annähern.

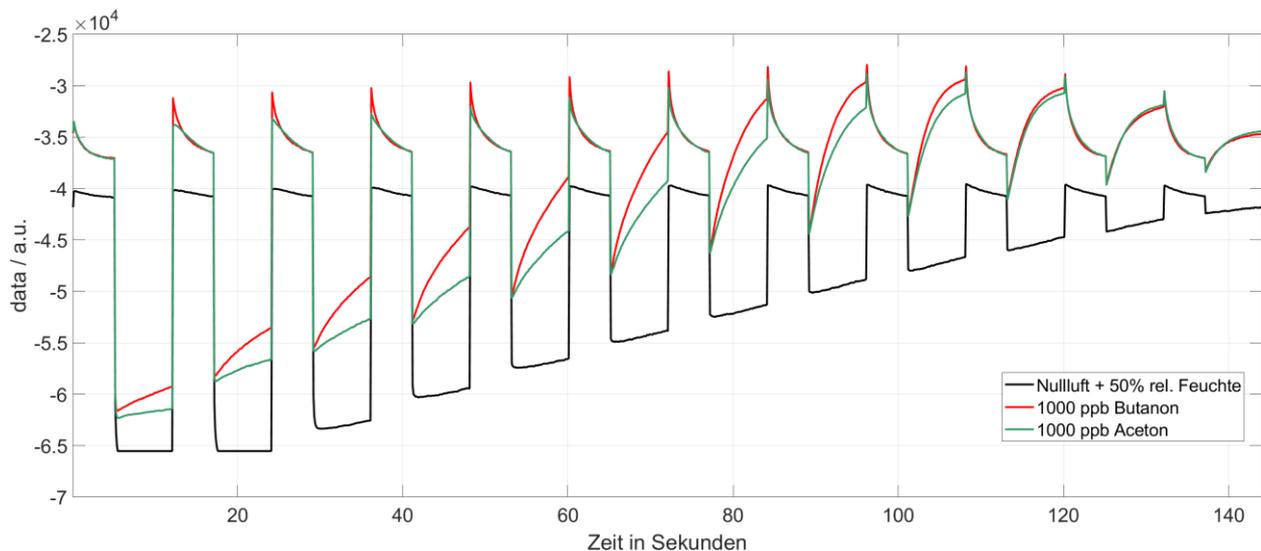


Abbildung 15: Vergleich der temperaturzyklischer Verläufe zwischen Aceton und Butanon als Keton-Vertreter anhand eines SG40-Schicht 2.

Die genauen Auswirkungen dieser Ergebnisse müssen mit weiteren Labormessungen und Signalauswertungsmethoden untersucht werden. An dieser Stelle bleibt festzuhalten, dass die subjektive Betrachtungsweise die Theorie nicht für alle Stoffgruppen bestätigen konnte. In diesen Fällen wäre es für ein geeignetes TVOC<sub>Sens</sub>-Modell notwendig für eine Repräsentation der Stoffgruppe eine Mischung von mindestens zwei Vertretern zu verwenden, um einen aussagekräftigen TVOC<sub>Sens</sub> Summenwert zu erhalten. Ebenfalls wäre eine Berücksichtigung unterschiedlicher Molekülstrukturen, wie linear verzweigte Ketten und Ringstrukturen, eine Weiterentwicklung der Einteilung.

Neben der Anzahl der Komponenten, die unabhängig voneinander variiert werden können, stellt sich die Frage, wie viele Gasgemische nötig sind, um eine ausreichende statistische Validität zur Bewertung der Messsysteme zu erzielen. Dafür muss zwischen Kalibrieren und Testen unterschieden werden, wobei das Testen in einem separaten Arbeitspaket (AP8 Vereinfachte Testschemata) untersucht wurde.

Für die Kalibrierung hängt die Anzahl der Gasgemische zum einen von der Anzahl der Komponenten, zum anderen auch von den Konzentrationsbereichen und der Verteilung der Konzentrationsbereiche ab. Daher werden nachfolgend Ergebnisse aus Messungen mit verschiedenen Verteilungen gezeigt. Die Verteilungen wurden so gewählt, dass sie die Anwendung Innenraumluftqualität abdecken:

1. Gleichverteilt + erweiterte Teilbereiche
2. Vollständig gleichverteilt
3. Logarithmisch verteilt

Der Fall (1) „Gleichverteilt + erweiterte Teilbereiche“ wurde bereits in Kapitel 4.1.2 vorgestellt. Das resultierende Histogramm für TVOC<sub>Sens</sub> ist in Abbildung 16 dargestellt.

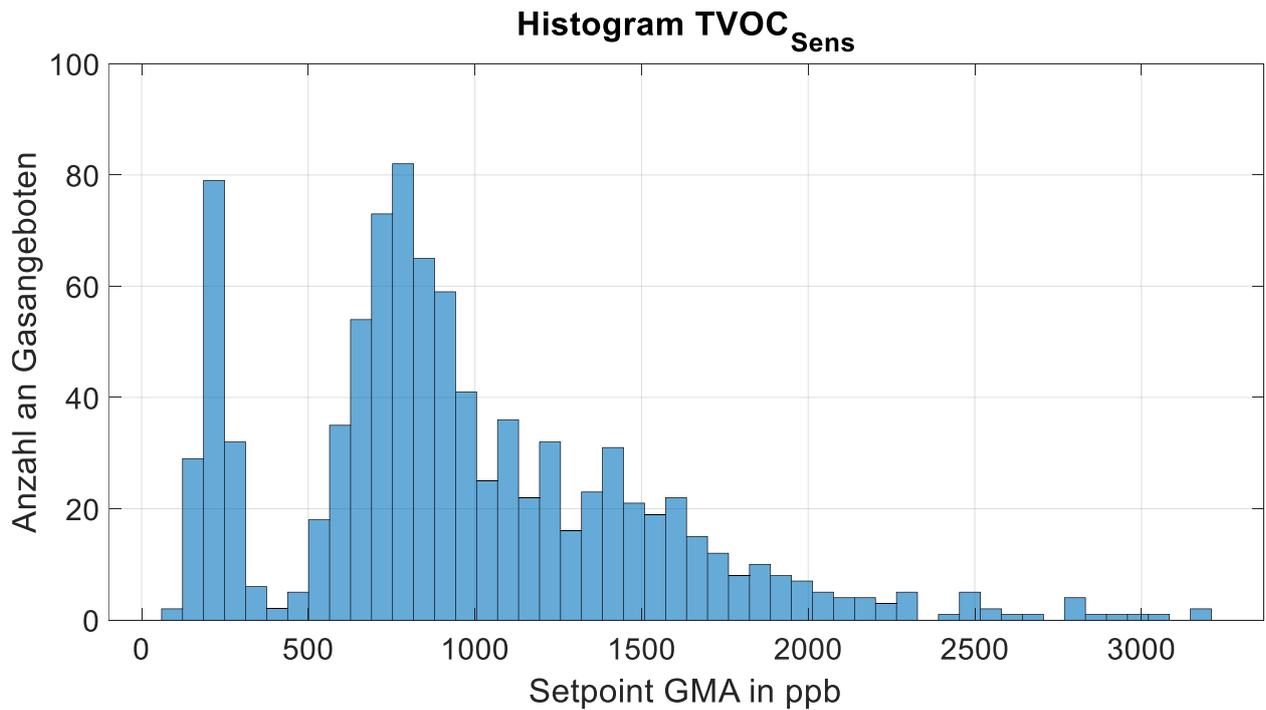


Abbildung 16: Histogramm von TVOC<sub>Sens</sub> für (1) "Gleichverteilt mit erweiterten Teilbereichen für Einzel-VOC".

Eine Vereinfachung der Verteilung stellt die Option (2) „Vollständig gleichverteilt“, welche nicht nur über den Standardkonzentrationsbereich, sondern über den erweiterten Bereich für jedes VOC über die ganze Messung gleichverteilt ist, vgl. Abbildung 17. Über den gleichen, erweiterten Bereich ist in Abbildung 18 die logarithmische Verteilung gezeigt.

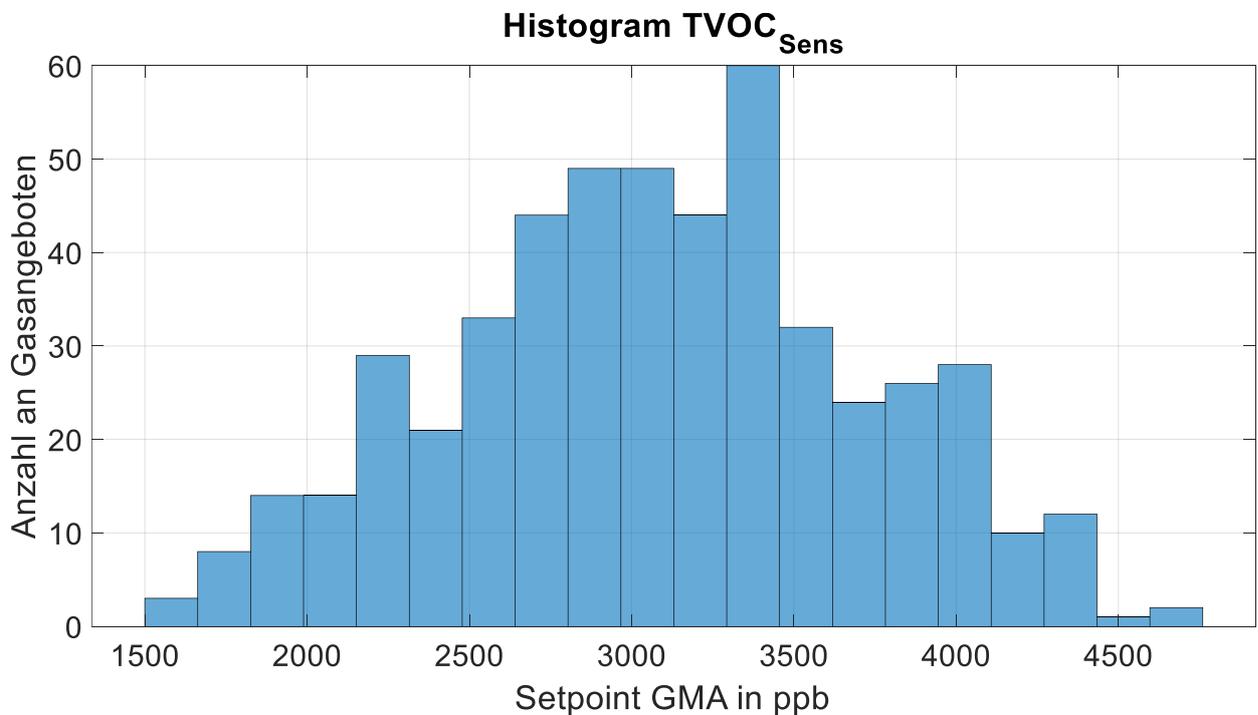


Abbildung 17: Histogramm von TVOC<sub>Sens</sub> für (2) "Vollständig gleichverteilt".

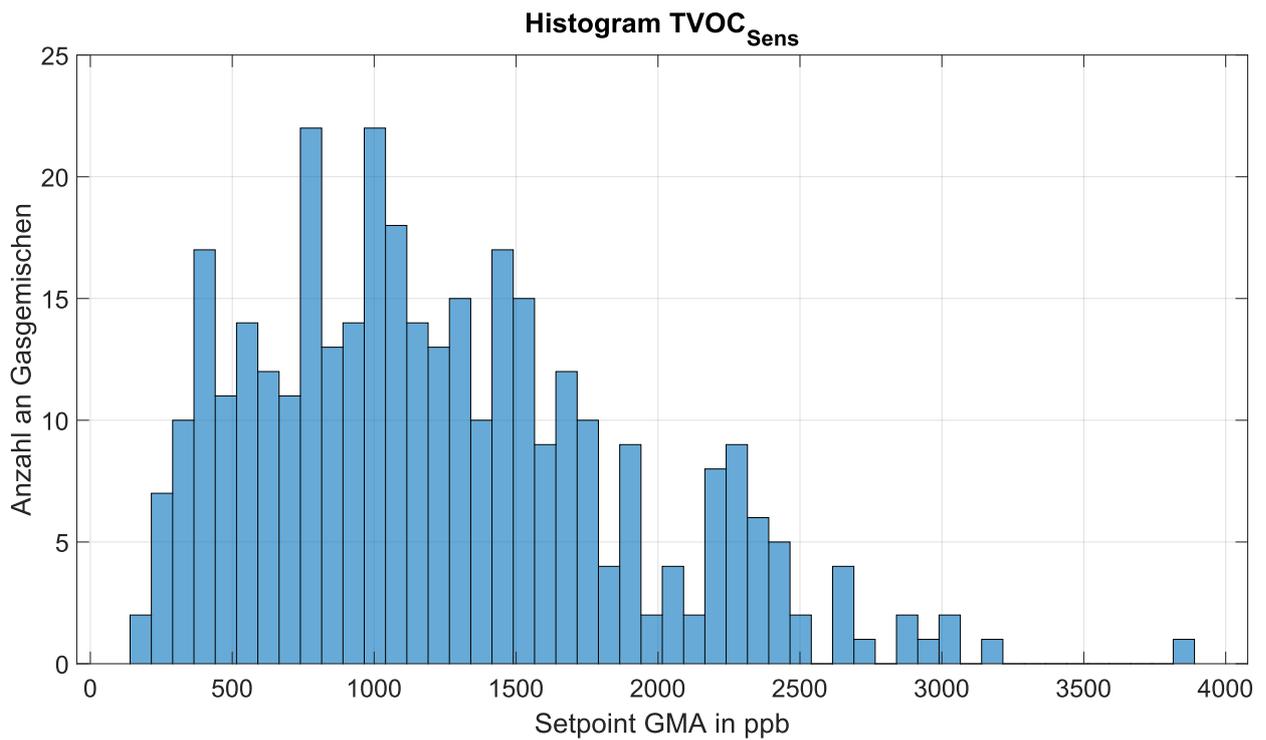


Abbildung 18: Histogramm von TVOC<sub>Sens</sub> für (3) "Logarithmisch verteilt"

Die resultierenden PLSR-Plots sind in Abbildung 19 dargestellt. Hierbei ist im Fall (2) „Vollständig gleichverteilt“ eine größere Streuung der Training- und Testdaten zu erkennen, welche auf den hohen Konzentrationsbereich zwischen 2000 und 5000 ppb zurückzuführen ist.

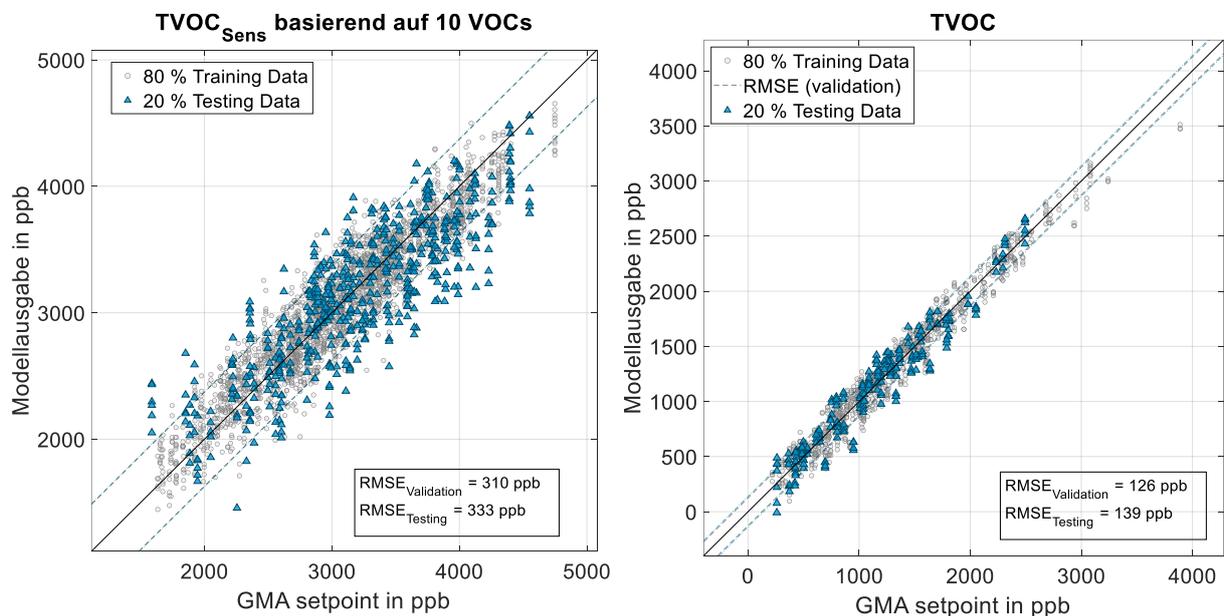


Abbildung 19: TVOC<sub>Sens</sub> PLSR-Modelle, links: von (2) "Vollständig gleichverteilt" und rechts: von (3) "Logarithmisch verteilt".

Für eine Vergleichbarkeit der Fehlerwerte ist es hierbei besonders wichtig aufgrund der unterschiedlichen Konzentrationsbereiche bzw. Verteilungen keine Absolutwerte zu vergleichen, sondern Relativwerte, was über den normierten RMSE geschieht. In Tabelle 17 sind die nRMSE-Werte der unterschiedlichen Verteilungen gegenübergestellt. Die Werte liegen mit 7 % bzw. 11 %

sehr nahe beieinander, wobei Verteilung (1) leicht zu dominieren scheint. Diese Variante ist besonders interessant, da sie die Realität in Innenräumen am besten abdeckt: größtenteils niedriger Hintergrundkonzentrationsbereich erweitert um höhere Teilbereiche, welche Events wie Kochen, Putzen, Stoffwechsel usw. berücksichtigen.

Tabelle 17: Vergleich der prozentualen nRMSE-Werte der verschiedenen Verteilungen für TVOC<sub>Sens</sub>.

Verteilung	TVOC <sub>Sens,ppb</sub> RMSE in ppb	TVOC <sub>Sens,ppb</sub> nRMSE in %
Gleichverteilt + erw. Teilbereiche (1)	64	7
Vollständig gleichverteilt (2)	333	11
Logarithmisch verteilt (3)	139	11

## 4.5 AP5 Feldversuche

Neben den Untersuchungen der Sensoren im Labor ist der Transfer in das Feld (Innenräume) entscheidend. Dafür wurden die Sensoren in vier Innenräumen betrieben und die Modelle aus der Kalibrierung auf die Messdaten angewendet. Dadurch resultieren für jede Zielgröße Modellausgaben in Form von Konzentrationswerten. Im Gegensatz zu Labormessungen ist die genaue Kenntnis der Luftzusammensetzung im Feld nicht gegeben. Über analytische Referenzmessungen können punktuell Referenzwerte aufgenommen werden und mit den Modellausgaben der Sensorsysteme verglichen werden.

Ziel der Feldtests war es zum einen verschiedene Raumsituationen (Büroraum und Wohnraum) zu untersuchen und ebenso über Langzeitfeldtests einen ganzen Jahreszyklus aufzunehmen. In diesem Zeitraum sollten neben typischen VOC-Belastungen vor allem auch Events wie Freisetzungen durch Kochen, Reinigen, Renovieren, Wohnen usw. untersucht werden.

Bei der Auswahl der Innenräume wurde eine Abdeckung von Arbeits- und Wohnraum angestrebt. Benchmark-System VOC4IAQ I wurde in einer 120 m<sup>2</sup> Wohnung platziert und sollte mit Benchmark-System VOC4IAQ III, welches in einer offenen Wohnung platziert wurde, die typischen Wohnsituationen wie Kochen, Putzen, Wohnen usw. darstellen. Benchmark-System VOC4IAQ II wurde in einem 2-Personen-Büro am Lehrstuhl für Messtechnik aufgestellt. Zusammen mit Benchmark-System VOC4IAQ IV, welches in einem Meeting-Raum der 3S GmbH, Saarbrücken aufgestellt wurde, sollten diese beiden Systeme die Arbeitsatmosphäre monitoren.

Die Messung von Absolutwerten oder Grundbelastungen im Innenraum sind nicht nur für die Sensorik, sondern auch für die Analytik, bei der Messunsicherheiten von über 30 % angegeben werden, eine Herausforderung. Daher wird im Folgenden der Fokus auf relative Verläufe gelegt, wofür sich die Sensorsysteme durch die hohe zeitliche Auflösung sehr gut eignen. Auch für die Anwendung Innenraumluftqualität selbst sind die relativen Änderungen ein wichtiger Aspekt, da dadurch Handlungsempfehlungen entstehen, wie manuelles Lüften, Eingangssignal für Lüftungssteuerung oder visuelle Benachrichtigung.

### 4.5.1 Typische Innenraumverläufe

Ein typischer Verlauf für VOC4IAQ I über ca. 2 Monate zeigt Abbildung 20. Anstelle der Absolutwerte sind insbesondere relative Änderungen, in denen sich das TVOC<sub>Sens</sub>-Modell befindet, von Interesse. Hier wird deutlich, dass es für TVOC<sub>Sens</sub> eine hohe Aktivität gibt. In 74 %

der Modellausgaben befindet sich das Signal zwischen 0 und 1000 ppb. Es gibt Events, bei denen die Ausgabe bis zu 2000 ppb ansteigt und vereinzelt auch Ausgaben mit bis zu 4000 ppb. Die Ausreißer nach unten unterhalb von 0 ppb sind auf Lüftungsevents zurückzuführen, in denen Luft mit unbekannter Zusammensetzung (möglicherweise auch oxidierende Gase) von außen in den Innenraum kommt.

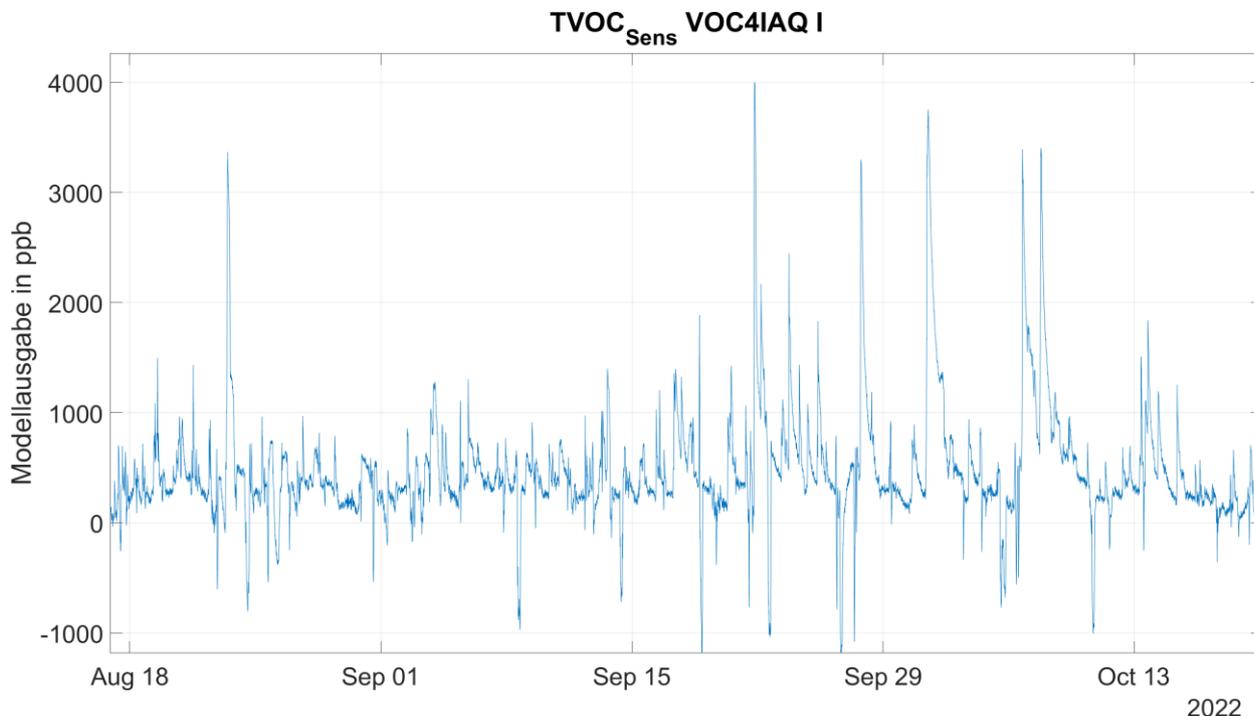


Abbildung 20: Modellausgabe TVOC<sub>Sens</sub> für VOC4IAQ I über knapp 2 Monate.

Bestätigt wird dieser Verlauf von Abbildung 21, welche das TVOC<sub>Sens</sub>-Signal über einen anderen Zeitraum in der anderen Wohnung darstellt, und die gleiche Dynamik zeigt. Zu beachten ist hierbei, dass das Grundlevel aufgrund einer fehlenden Driftkompensation in den negativen Konzentrationsbereich absinkt. Werden nur die relativen Verläufe betrachtet, bestätigt sich, dass die größte Aktivität im Bereich von 1 und 1000 ppb liegt. Wieder gibt es vereinzelt Events bis zu 4000 ppb.

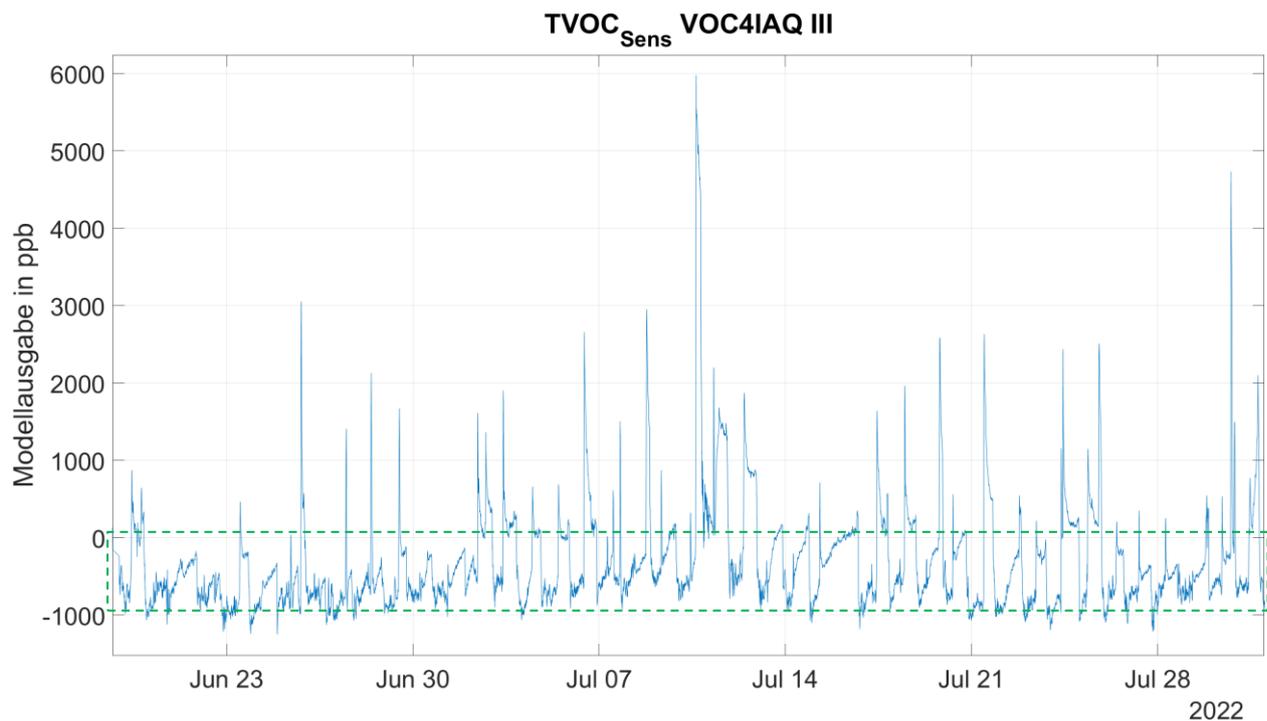


Abbildung 21: Modellausgabe TVOC<sub>Sens</sub> für VOC4IAQ III über ca. einen Monat mit Markierung des Konzentrationsbereichs mit der meisten Aktivität.

In dem Büro- und Meetingraum hingegen ist deutlich weniger Aktivität im TVOC<sub>Sens</sub>-Signal zu erkennen. Dies zeigen die Verläufe in Abbildung 22 für VOC4IAQ II und Abbildung 23 für VOC4IAQ IV. Die Ausschläge nach unten stimmen hier wieder mit den Lüftungszeiten des Raumes überein und die ansteigenden VOC-Belastungen korrelieren gut mit der Belegung des Raumes durch ein oder mehrere Personen. Dies deutet daraufhin, dass die VOC-Dynamik in Arbeitsräumen vor allem durch die Anwesenheit und konkret den Stoffwechsel von Menschen dominiert wird.

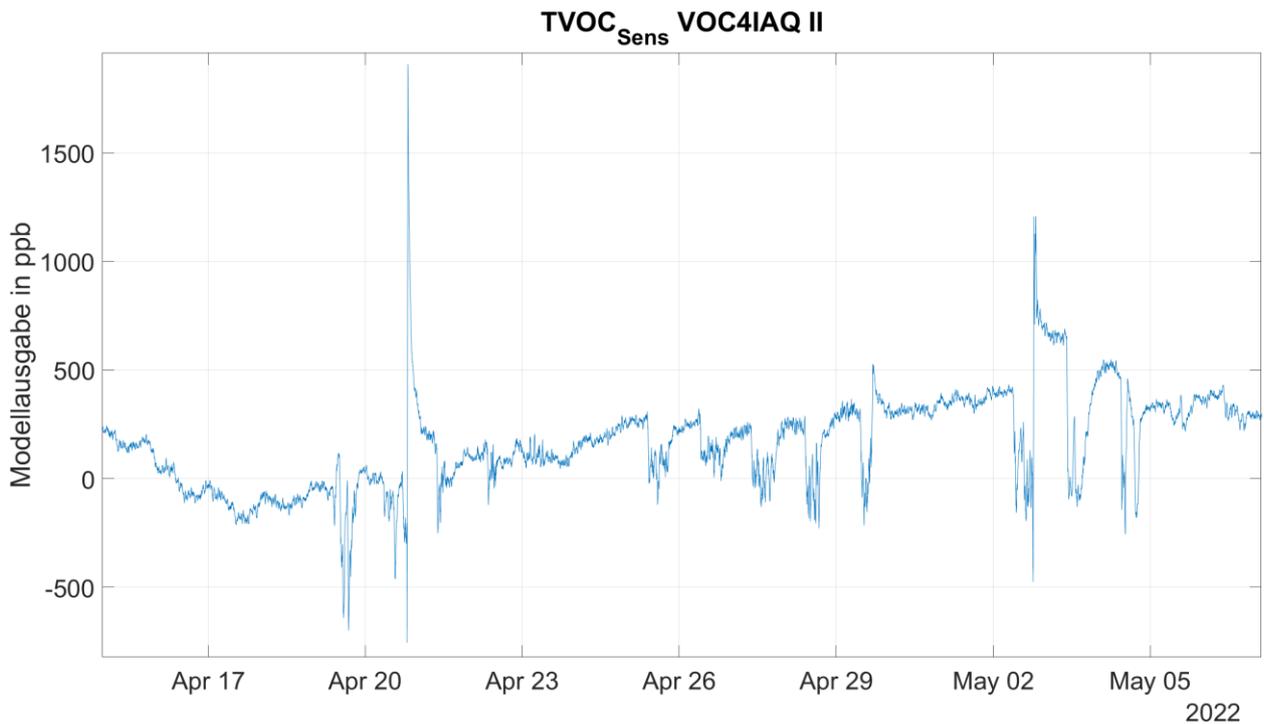


Abbildung 22: Modellausgabe TVOC<sub>Sens</sub> für VOC4IAQ II über ca. einen Monat.

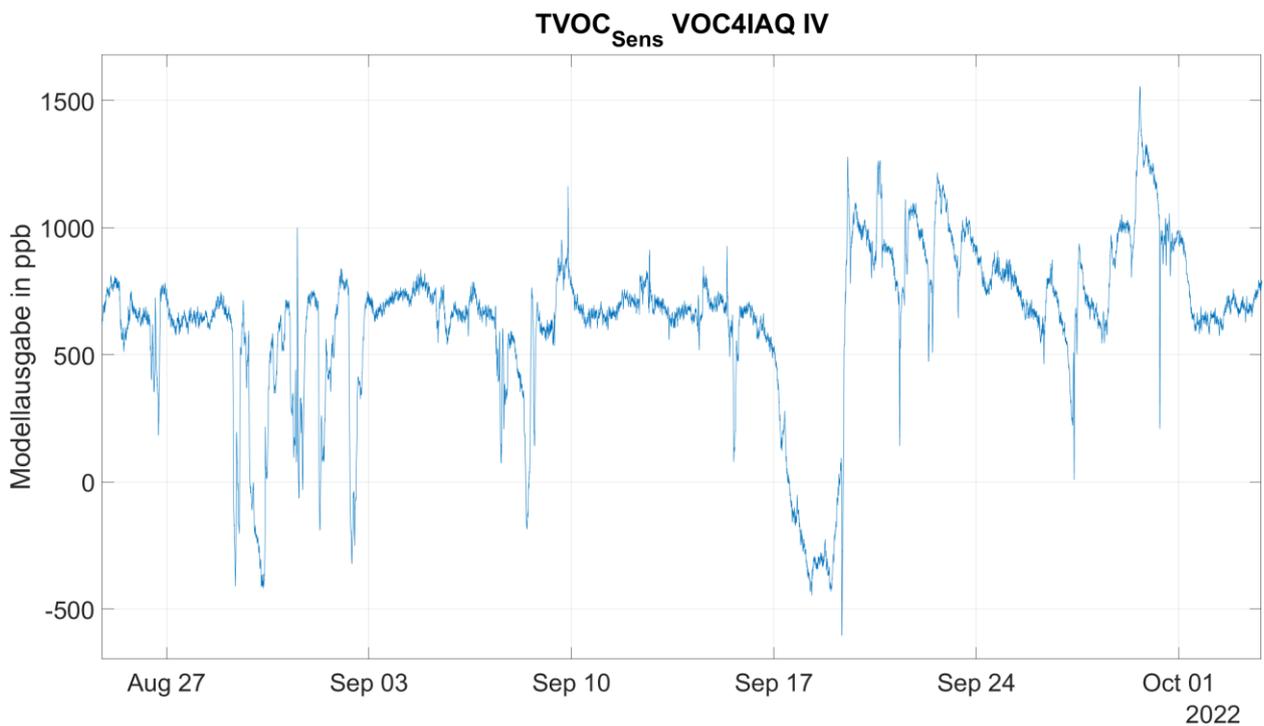


Abbildung 23: Modellausgabe TVOC<sub>Sens</sub> für VOC4IAQ IV über ca. einen Monat.

Bei näherer Betrachtung der TVOC<sub>Sens</sub>-Dynamik in den Wohnräumen durch Veranschaulichung eines kürzeren Zeitraums, wiederholt sich ein typisches Tagesverhalten, das in Abbildung 24 dargestellt ist. Beginnend mit der Nacht vom 20. September auf den 21. September ist das TVOC<sub>Sens</sub>-Signal konstant. Am Morgen folgt ein Anstieg, welcher auf die Benutzung des Bades (wahrscheinlich Kosmetikartikel, wie Deodorant) zurückzuführen ist. Danach sinkt das Signal langsam wieder, bis es während dem Lüften nochmal drastisch absinkt. Ein erneuter starker

Anstieg ist am Abend zu erkennen, welcher zeitlich zum Kochen des Abendessens passt. Dieser Tagesverlauf wiederholt sich und ist in beiden Wohnräumen zu erkennen.

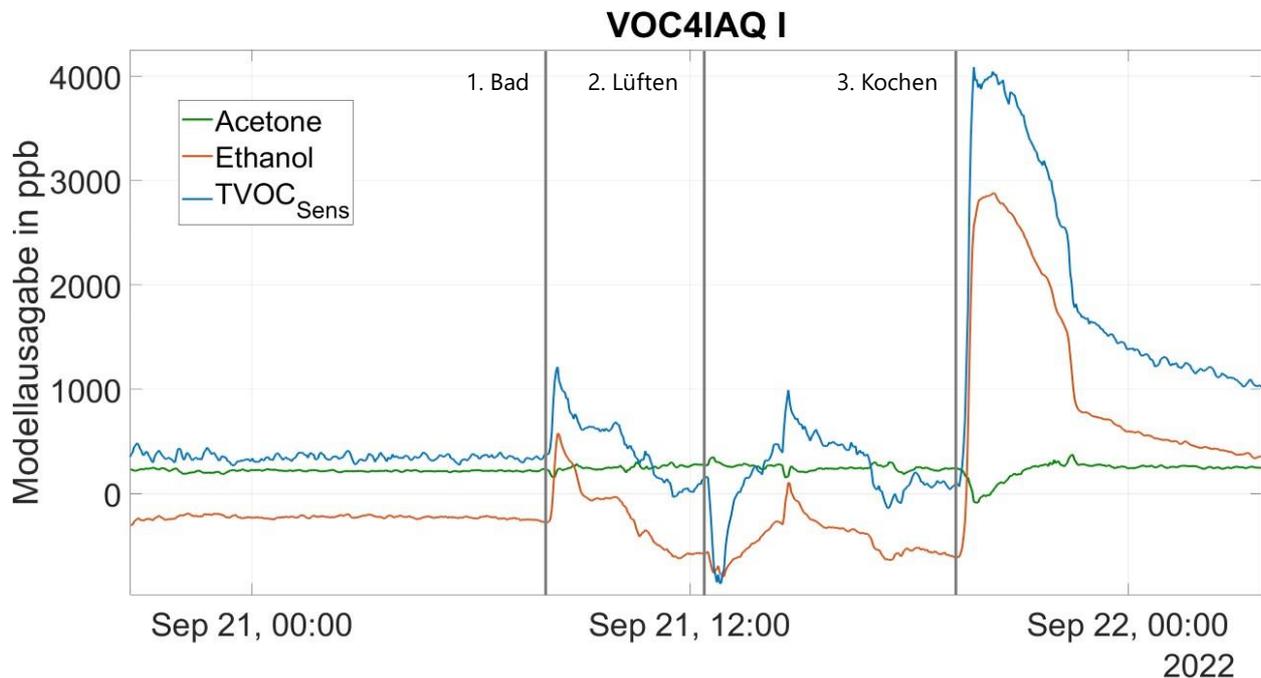


Abbildung 24: Typischer Tagesverlauf eines Wohnraumes.

Zusätzlich sind in Abbildung 24 die Modellausgaben für Aceton und Ethanol aufgetragen. Daraus wird ersichtlich, dass Ethanol für den TVOC<sub>Sens</sub>-Anstieg verantwortlich ist. Stellvertretend für die anderen VOC ist Aceton dargestellt, welches nahezu konstant bleibt, wie die anderen Signale auch.

Verdeutlicht wird dieses Verhalten bei VOC4IAQ I durch die Korrelation zwischen TVOC<sub>Sens</sub>- und Ethanol-Signal mit einem Korrelationskoeffizienten von 89 %, wohingegen die Korrelationskoeffizienten zu den restlichen VOC unter 30 % liegen (außer Isopropanol mit 75 %), bezogen auf die gesamte Messzeit im Wohnraum von einem Jahreszyklus.

#### 4.5.2 Geplante Events

Im Folgenden werden einige Auffälligkeiten, Events und Freisetzung näher betrachtet. Dabei wird auf die Darstellung der Signale, welche während den Events konstant bleiben, verzichtet.

Mit einfachen Freisetzungstest von Haushaltartikeln wurde die Funktionsweise der Modelle und der daraus resultierenden Signale verifiziert. Beispielsweise wurde Nagellackentferner mit den Inhaltsstoffen Ethylacetat, Alkohole, Duftstoffe freigesetzt. Hier sei explizit erwähnt, dass der verwendete Nagellackentferner acetonfrei war, da Nagellackentferner lange Zeit hauptsächlich Aceton beinhaltet. Das Beispiel in Abbildung 25 zeigt, dass sowohl Ethylacetat als auch Ethanol ansteigen, wie es die Inhaltsstoffe vermuten lassen, während die anderen Signale konstant bleiben.

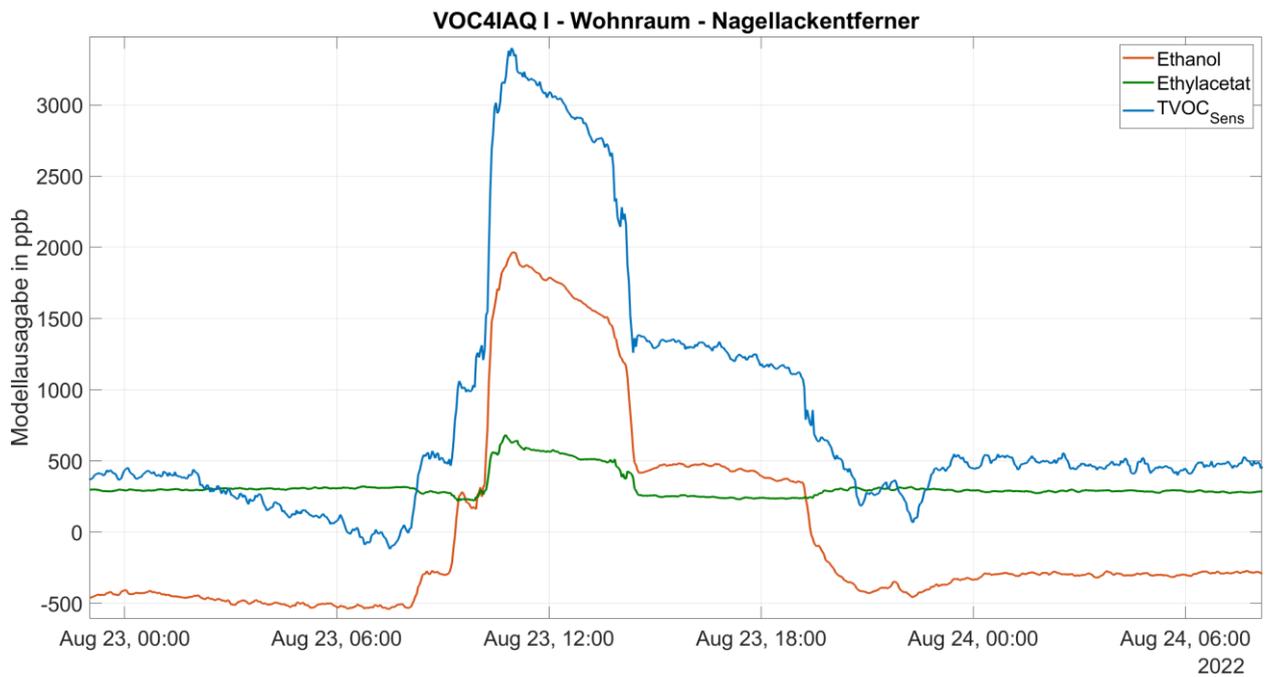


Abbildung 25: Freisetzungstest Nagellackentferner (acetonfrei) mit VOC4IAQ I.

Abbildung 26 zeigt die Freisetzung von (1) Deodorant Alkohol (2) und (3) über ein gefülltes Schnapsglas. In allen Fällen ist ein Anstieg des Ethanol- und TVOC<sub>Sens</sub>-Signals zu erkennen. Über Absolutwerte kann an dieser Stelle aufgrund der fehlenden analytischen Referenz keine Aussage getroffen werden.

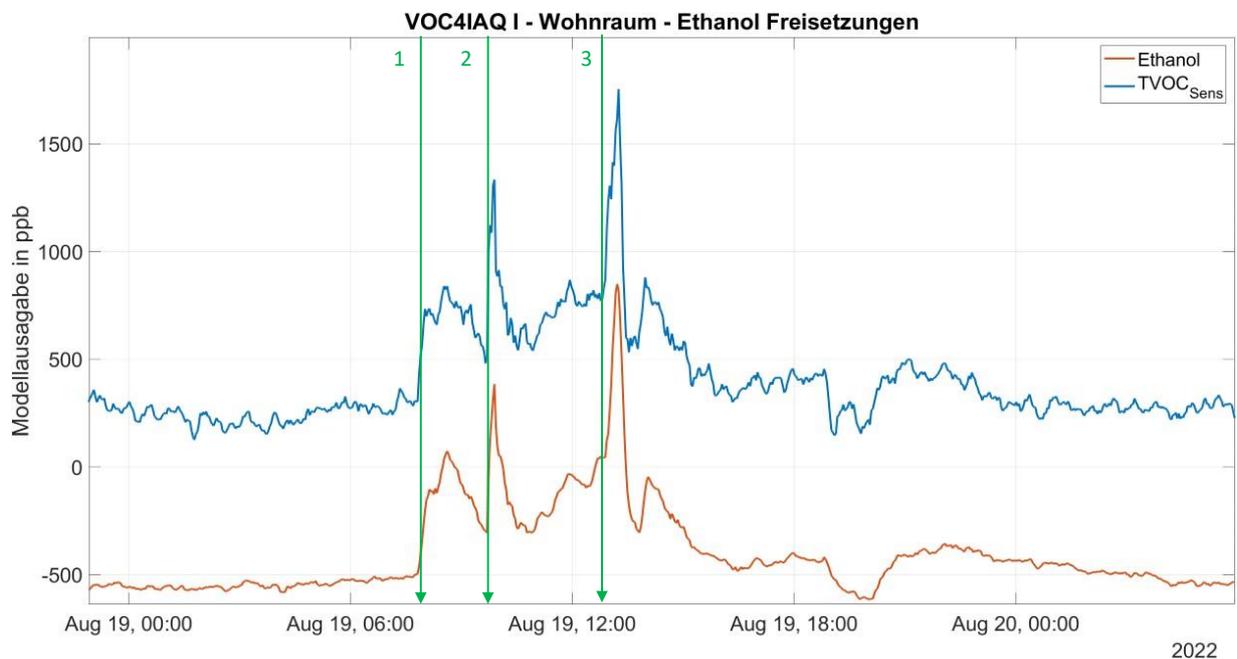


Abbildung 26: Freisetzungstest Ethanol mit VOC4IAQ I.

### Wissenschaftliches Kochen

Da analytische Referenzmessungen nur punktuell über einen Zeitraum von 30 Minuten gemittelt und mit einem messtechnischen Aufwand durchgeführt werden können, wurde versucht diese konzentriert bei zwei größeren Versuchsreihen aufzunehmen. Aus den bisherigen Ergebnissen wurden Kochevents als interessanteste Aktivitäten mit hoher VOC-Dynamik ausgewählt. In einer ersten Versuchsreihe mit dem Titel „Wissenschaftliches Kochen“ wurden im Wohnraum mit dem Benchmark-System VOC4IAQ III nacheinander drei Gerichte bzw. Getränke gekocht. Zwischen jedem Gericht wurde die Wohnung für ca. eine halbe Stunde gelüftet, um nach den VOC-Freisetzungen wieder auf ein Grundlevel zurückzukommen. Ebenso wurden während der Versuchsreihe mehrere Probenahmen durchgeführt. Dabei wurden VOC auf Tenax, VVOC auf Carboxen und Aldehyde/Ketone auf DNPH angesammelt und nach der Durchführung der Versuchsreihe zur Auswertung zum ausführenden Labor, eco-INSTITUT, geschickt.

Die resultierenden Modellausgaben für Ethanol, Isopropanol und TVOC<sub>Sens</sub> sind Abbildung 27 dargestellt. Während der einzelnen Kochvorgängen steigen alle drei Signale auf einen unterschiedlichen Wert an. Mit Beendigung des Kochvorgangs erreichen die Signale ein lokales Maximum und sinken dann langsam ab.

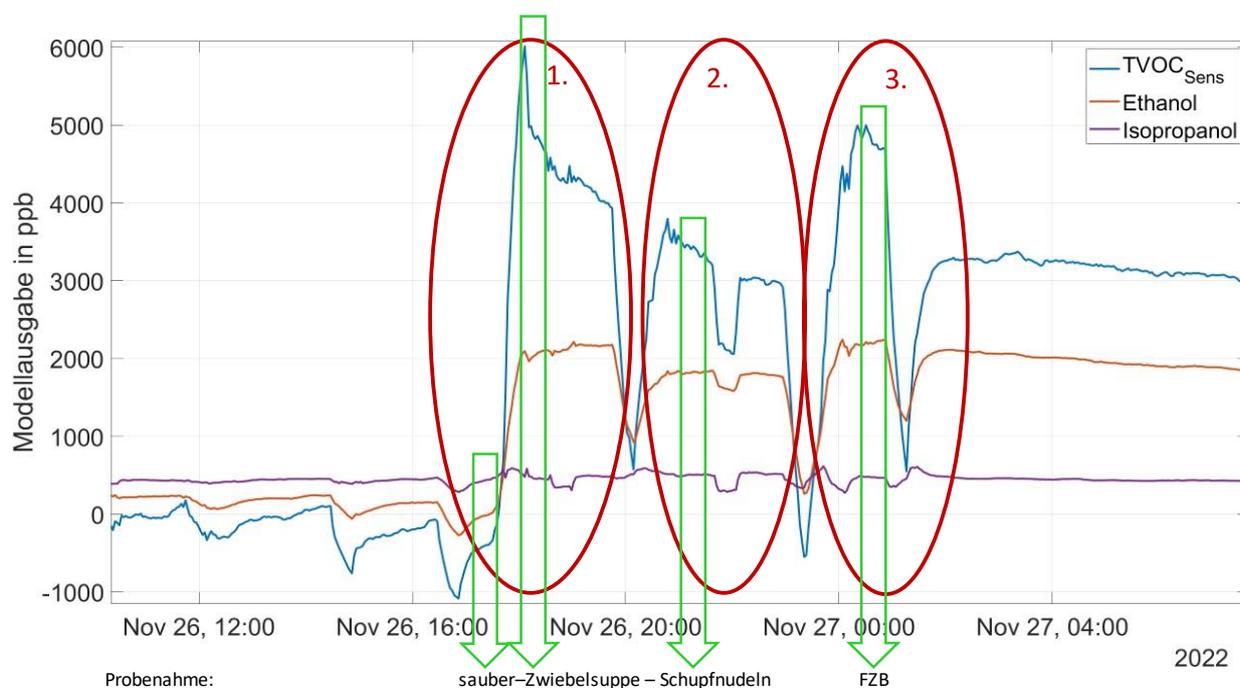


Abbildung 27: Ethanol, Isopropanol und TVOC<sub>Sens</sub>-Signale während dem Wissenschaftlichen Kochen mit 1) Zwiebelsuppe, 2) Schupfnudeln und 3) Feuerzangenbowle. In grün markiert die Zeiträume für die Probenahme für die analytische Referenzmessung.

Das höchste Signal wird anfangs beim Kochen einer Zwiebelsuppe erreicht. Mögliche Ursache dafür kann die Verwendung von Wein während dem Kochen oder das Aufbacken eines mit Ethanol konservierten Baguettes sein. Beim Kochen der Schupfnudeln mit Sauerkraut ist der Anstieg wiederum auf die Verwendung von Alkohol in Form eines Weines zurückzuführen. Das letzte Event ist auf die Zubereitung einer Feuerzangenbowle (FZB) zurückzuführen, welche mit Alkohol zubereitet wird und den Anstieg der Signale somit erklärt.

Während dieser Messreihe wurden vier Probenahmen, welche in Abbildung 27 zeitlich dargestellt sind, zur analytischen Auswertung aufgenommen: Vor dem Start des Kochens wurde eine Probe zur Aufnahme des Grundlevels im Raum aufgenommen, gefolgt von drei Probenahmen für Zwiebelsuppe, Schupfnudeln und Feuerzangenbowle. In Tabelle 18 sind zusätzlich noch zwei weitere Probenahmen aufgeführt, welche am darauffolgenden Tag aufgenommen wurden: das Backen einer Pizza und eines Brotes. Neben der TVOC-Analytik-Angabe, welche der Summe der detektierten VOC und VVOC entspricht, wird noch die detektierte Ethanol-Konzentration nach Ansammlung in der Carboxen-Probe angegeben, das Ethanol nicht nur bei dem Sensorsystem das TVOC-Signal mit ca. 90 % dominiert. Für die Probenahme „sauber“ zeigt TVOC<sub>Sens</sub> einen negativen Wert, welcher auf die fehlende Driftkompensation zurückzuführen ist. Bei allen anderen Werten liegt TVOC<sub>Sens</sub> entweder nahe bei TVOC-Analytik oder höher. Das ist dadurch erklärbar, dass bei vier analytischen Referenzmessungen die Ethanol-Konzentration so hoch war, dass die Detektorsättigung des MS erreicht wurde. Eine höhere Konzentration ist daher anzunehmen.

Tabelle 18: Vergleich zwischen TVOC-Analytik und TVOC<sub>Sens</sub> während des Wissenschaftlichen Kochens in ppb.

Probe	Ethanol-Analytik	TVOC-Analytik	TVOC <sub>Sens</sub>
sauber	94	189	-107
Zwiebelprobe	3865 <sup>4</sup>	4149 <sup>4</sup>	4745
Schupfnudeln	1410 <sup>4</sup>	2132 <sup>4</sup>	2831
FZB	1410 <sup>4</sup>	1625 <sup>4</sup>	4601
Pizza	940	1125	1387
Brot	992 <sup>4</sup>	1152 <sup>4</sup>	2783

Als Vergleich zum TVOC<sub>Sens</sub>-Signal sind in Abbildung 28 die Ausgaben eines CO<sub>2</sub>-Sensors und eines Wasserstoff-Referenzgerätes (Peak Performer 1 RCP, Peak Laboratories LLC, USA) dargestellt. Dabei ist zu erkennen, dass sowohl Wasserstoff als auch CO<sub>2</sub> während den Kochevents ansteigt, im Gegensatz zum TVOC<sub>Sens</sub>-Signal aber nicht instantan, sondern langsam ansteigend. Dies ist dadurch zu erklären, dass sowohl CO<sub>2</sub> als auch Wasserstoff nicht nur Störgrößen für VOC-Sensorsysteme sind, sondern auch als Indikator für „schlechte“ Luft genutzt werden können, solange der menschliche Stoffwechsel die einzige VOC-Quelle darstellt. Genau diesen Umstand wird während dieser Messreihe deutlich. CO<sub>2</sub> und Wasserstoff erkennen die Anwesenheit der sechs anwesenden Personen, nicht aber die Kochvorgänge, welche instantan zum Anstieg der VOC-Konzentration führen.

<sup>4</sup> In den markierten Werten wurde in den analytischen Referenzmessungen die Detektorsättigung für Ethanol erreicht. Dies bedeutet die wahre Konzentration während der Probenahme lag höher als der hier angegeben Messwert.

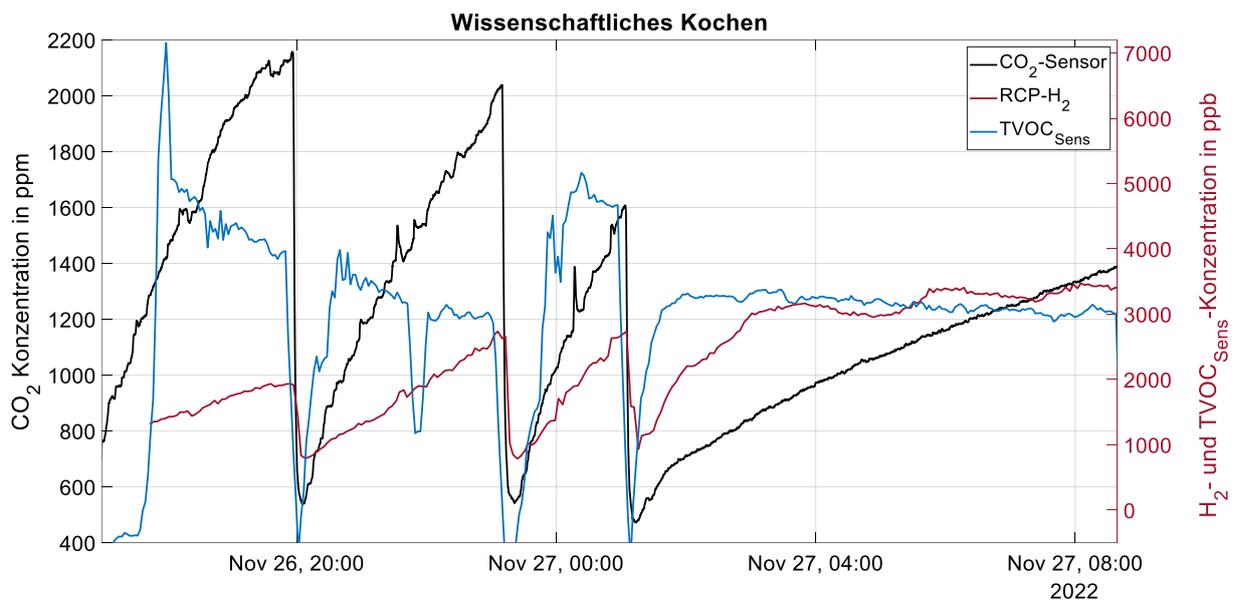


Abbildung 28: CO<sub>2</sub>-, RCP-H<sub>2</sub> und TVOC<sub>Sens</sub>-Signale während dem Wissenschaftlichen Kochen.

### Dezemberkolloquium

In der zweiten Versuchsreihe mit dem Titel „Dezemberkolloquium“ wurde in einem Seminarraum an der Universität des Saarlandes mit dem Benchmark-System VOC4IAQ II ein messtechnisches Kolloquium mit ca. 30 Personen abgehalten. Als Abschluss wurden in drei Pizzaöfen mehrere Pizzen zubereitet. Ebenso wurden wie in der vorherigen Versuchsreihe mehrere Probenahmen durchgeführt.

Die Ethanol- und TVOC<sub>Sens</sub>-Modellverläufe sind dabei in Abbildung 29 dargestellt. Auch hier dominiert Ethanol die VOC-Dynamik, wobei festzustellen ist, dass trotz mehrerer Lüftungsversuche das Erreichen eines Grundlevels nicht möglich war. Insgesamt werden Konzentrationen bis zu mehreren ppm erreicht.

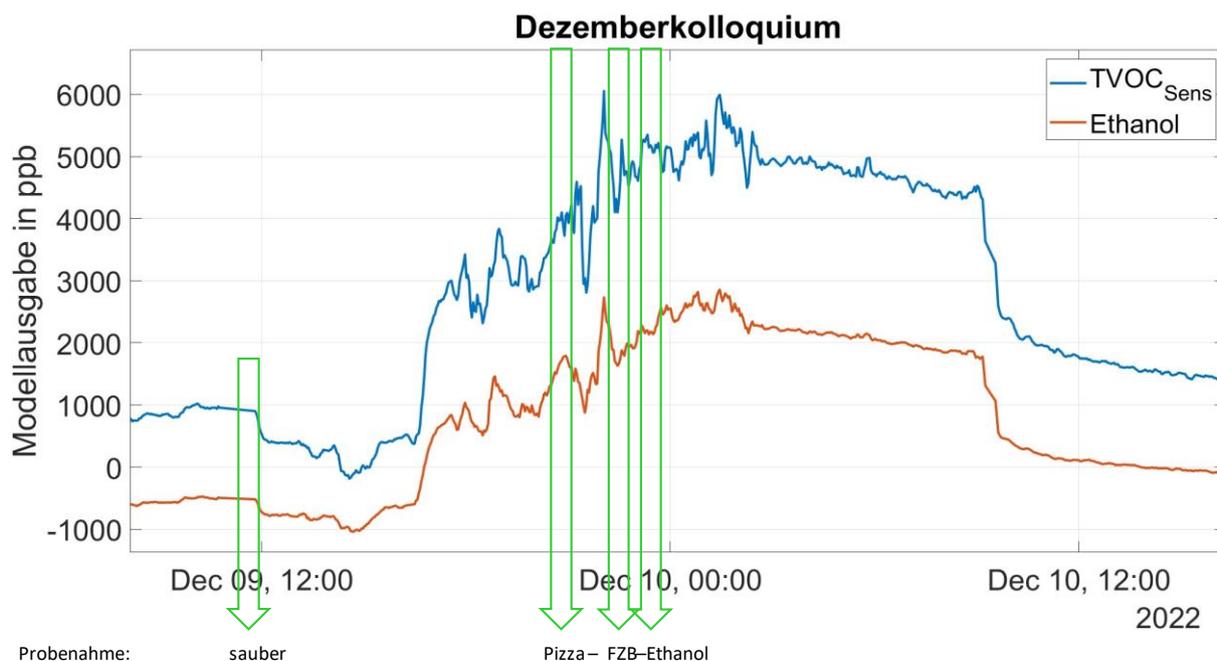


Abbildung 29: Ethanol und TVOC<sub>Sens</sub>-Signale während dem Wissenschaftlichen Kochen mit in grün markierten Zeiträumen für die Probenahmen während dem Pizza-Backen, Feuerzangenbowle und Ethanol-Freisetzung.

Im Vergleich zu dem Sensorsystem sind in Tabelle 19 die TVOC-Analytik-Werte aus den Referenzmessungen dargestellt. Die beiden TVOC-Werte liegen wieder nah beieinander, wobei die Analytik die Ethanol-Konzentration durch das Erreichen der Detektorsättigung in zwei Fällen unterschätzt.

Tabelle 19: Vergleich zwischen TVOC-Analytik und TVOC<sub>Sens</sub> während Dezemberkolloquium in ppb.

Probe	Ethanol-Analytik	TVOC-Analytik	TVOC <sub>Sens</sub>
sauber	46	147	365
Pizza	1201	1367	3169
FZB	2350 <sup>4</sup>	2533 <sup>4</sup>	4711
Ethanol	6789 <sup>4</sup>	7110 <sup>4</sup>	6582
Nächster Morgen	940	1011	3427

Auffällig ist die Abweichung der Probe „Nächster Morgen“, wobei TVOC<sub>Sens</sub> deutlich über TVOC-Analytik liegt. Hier wurde im Raum ein unangenehmer, stinkiger Geruch festgestellt, wie man ihn nach einer gewissen Zeit Belegung eines Raumes ohne Lüften kennt. Gründe für die niedrige Angabe der TVOC-Analytik könnten sein, dass für den Geruch verantwortliche Gase nicht über die Standard-Methodik detektiert werden. Im Gegensatz dazu nimmt der breit reagierende MOS-Sensor dies aber wahr.

#### 4.5.3 Zufällige Events

Neben den geplanten und vorbereiteten Messreihen mit gezielten VOC-Freisetzungen gab es auch einige zufällige Events, die während des Monitorings über einen Jahreszyklus aufgetreten und rückführbar waren. An dieser Stelle werden zwei Events näher betrachtet, welche die dominierenden Repräsentanten bestätigten. Im Wohnraum mit VOC4IAQ III wurde Anfang Dezember über die Mittagszeit ein Anstieg des TVOC<sub>Sens</sub>-Signals detektiert, welches auf ein

Ethylacetat-Event zurückzuführen war, dargestellt in Abbildung 30. In diesem Zeitraum wurde in der Wohnung ein Kleber verwendet, welcher mit dem Inhaltsstoff Ethylacetat deklariert ist. Mit diesem Event wurde nicht nur Ethylacetat als Ester validiert, sondern auch eine typische Freisetzungskonzentration von 500 bis 1000 ppb. Das TVOC<sub>Sens</sub>-Signal weist einen größeren Hub als Ethylacetat auf, was auf die Beteiligung weiterer VOC als Bestandteile des Klebers hindeutet.

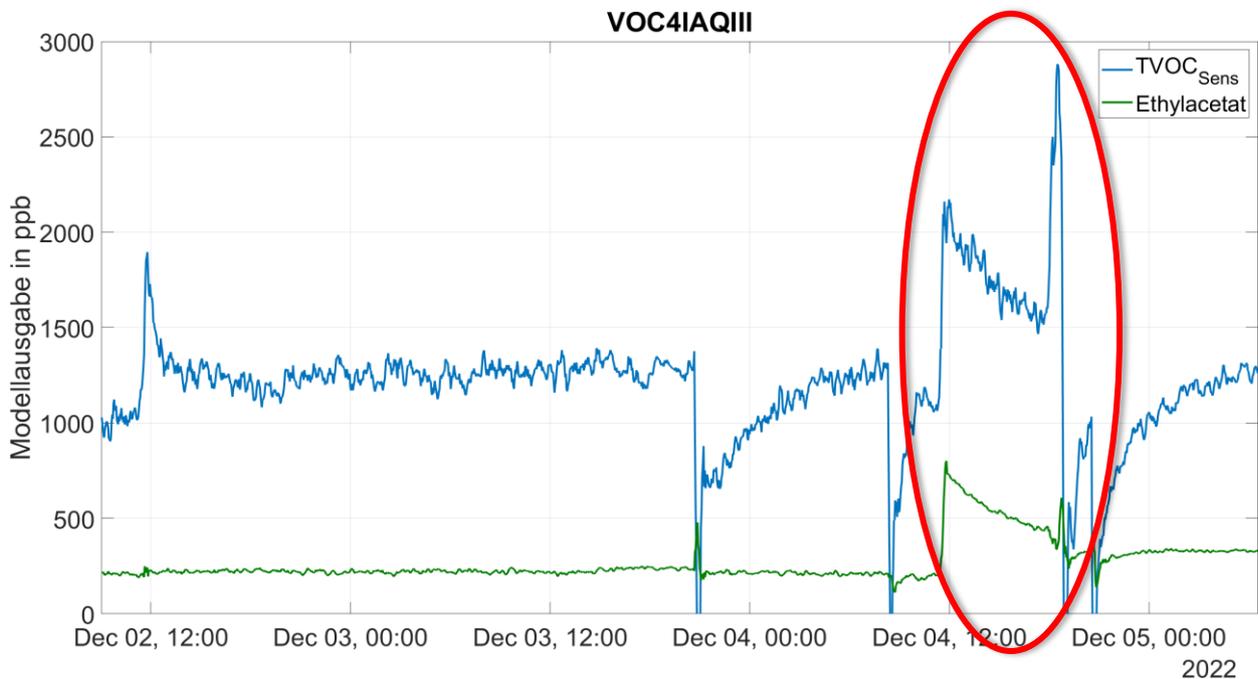


Abbildung 30: Ethylacetat-Event aufgenommen von VOC4IAQ III in Wohnraum.

Ein weiteres zufälliges Event wurde am 4. Februar 2023 in der Wohnung mit VOC4IAQ III festgestellt. Dabei wurde eine deutliche Aktivität der Modelle für Toluol und Limonen festgestellt, vgl. Abbildung 31. Diese beiden Modelle sind mit Ausnahme von Lüftungsevent über die restliche Zeit größtenteils konstant. An diesem Tag wurde in der Wohnung der Boden mit Schmierseife gereinigt. Toluol als Lösemittel und Limonen als Duftstoff sind dabei Bestandteile der Schmierseife und die Freisetzung konnte damit direkt auf die Benutzung der Schmierseife zurückgeführt werden. Es wurden Konzentrationen von bis zu 1000 ppb erreicht. Charakteristisch ist der zweifache Abfall der Signale, welcher auf die Lüftung während des Reinigens zurückzuführen ist.

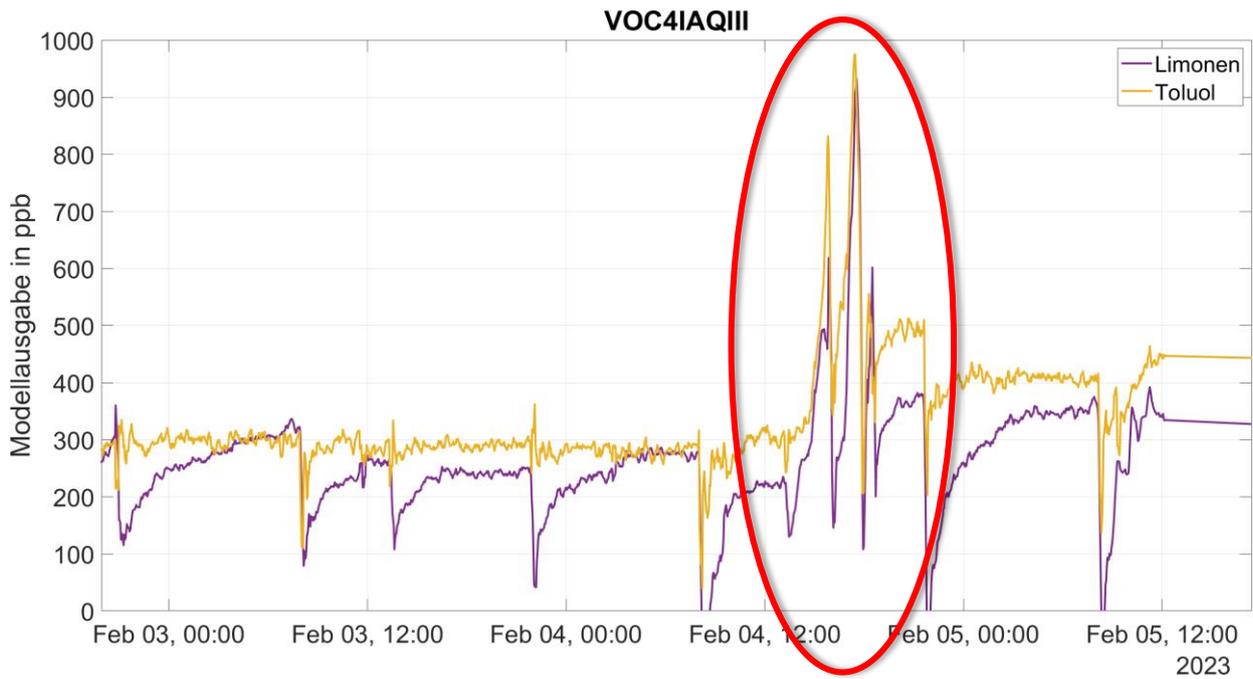


Abbildung 31: Limonen- und Toluol-Event aufgenommen von VOC4IAQ III in Wohnraum.

#### 4.6 AP9 Air Quality Index

Für die Allgemeinheit und den Endnutzer ist die Bewertung der Messergebnisse in den Einheiten ppb bzw.  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  schwierig, da die Interpretation der Konzentrationsangaben bei einem Summenwert selbst für Experten auf diesem Gebiet komplex ist. Daher war ein weiteres Ziel eine einfache Ausgabe für den Endnutzer in Form eines Index mit mehreren Stufen zu erstellen. Ausgangslage dafür war die hygienische Bewertung von TVOC-Werten des Umweltbundesamtes in Abbildung 32 [26] angelehnt an den akzeptierten AQI (Air Quality Index) in den USA [27].

##### Leitwerte für TVOC in der Innenraumlufth (2007)

Stufe	Konzentrationsbereich [mg TVOC/m <sup>3</sup> ]	Hygienische Bewertung
1	≤0,30 mg/m <sup>3</sup>	Hygienisch unbedenklich
2	0,30 - 1,0 mg/m <sup>3</sup>	Hygienisch noch unbedenklich, sofern keine Richtwertüberschreitungen für Einzelstoffe bzw. Stoffgruppen vorliegen
3	1,0 - 3,0 mg/m <sup>3</sup>	Hygienisch auffällig
4	3,0 - 10 mg/m <sup>3</sup>	Hygienisch bedenklich
5	>10 mg/m <sup>3</sup>	Hygienisch inakzeptabel

Quelle: Umweltbundesamt

Abbildung 32: Hygienische Bewertung von TVOC-Werten durch das Umweltbundesamt [26].

Die hygienische Bewertung des Umweltbundesamtes basiert aber auf Studien, welche oft den VVOC-Bereich vernachlässigen. Die Ergebnisse aus den Feldtests haben allerdings herausgestellt, dass gerade in bewohnten oder belebten Innenräumen VVOC häufig dominieren und für die VOC-Belastung verantwortlich sind. Daher war es das Ziel als Weiterentwicklung der Bewertungstabelle des Umweltbundesamtes einen modifizierten Air Quality Index basierend auf VOC zu erstellen, welcher nach statistischer Verteilung erstellt wurde. Als Grundlage wurde die Belastung von Innenräumen nach dem P95-Wert aus den vorgestellten Studien [32, 33, 34] genutzt. Mit Vielfachen (1/5, 1/2, 1, 2, 5, 10 und 100) dieses Wertes als Obergrenze, wurde der modifizierte Air Quality Index in sieben Stufen unterteilt und in dafür entsprechende TVOC<sub>Sens</sub>-Konzentrationsbereiche umgewandelt. Für die Eingliederung in bestehende oder neue Air Quality Indizes werden die Stufen des Index im Bereich von 0-500 zugeordnet. Jede Stufe wurde zudem mit einer Bezeichnung in Form einer Luftqualitätsklasse ausgestattet, welche einer statistischen Verteilung gemäß der Belastung entspricht. Die Ergebnisse der Überlegungen sind in Tabelle 20 dargestellt.

Tabelle 20: Modifizierter Air Quality Index basierend auf VOC in Zusammenarbeit mit VDI/VDE GMA FA 4.64.

TVOC <sub>Sens</sub> in ppm	Statistische Entsprechung der Obergrenze	Luftqualitätsindex	Luftqualitätsklasse
0 – 0,26	1/5 P95	0-50	Exzellent
>0,26 – 0,65	1/2 P95	51-100	Gut
>0,65 – 1,3	P95	101-150	Durchschnittlich
>1,3 – 2,6	2 P95	151-200	Gering belastet
>2,6 – 6,5	5 P95	201-250	Mäßig belastet
>6,5 - 13	10 P95	250-300	Stark belastet I
>13 – 130	100 P95	300-500	Stark belastet II

An dieser Stelle sei daraufhin gewiesen, dass mit TVOC<sub>Sens</sub> und dem daraus resultierende modifizierte Air Quality Index keine Aussagen über gesundheitliche Auswirkungen getätigt werden können, da diese von Einzelschadstoffen und individuellen Grenzwerten beruhen, die teilweise über mehrere Größenordnungen auseinander liegen.

Für die Validierung der Einteilung in die sieben Stufen wurden die TVOC-Werte zwischen Sensorsystem und Analytik während der zwei Versuchsreihen „Wissenschaftliches Kochen“ und Dezemberkolloquium genutzt. Die TVOC-Werte wurden auf die Luftqualitätsklasse zurückgeführt und sind in Tabelle 21 und

Tabelle 22 dargestellt. Analytik und Sensorsystem liegen bis auf zwei Probenahmen gleich oder eine Luftqualitätsklasse auseinander, was unter anderem daran liegt, dass die Analytik die Konzentrationen teilweise aufgrund der Detektorsättigung unterschätzt. Allgemein wird aber deutlich, dass allen Fällen eine geringe bis starke Belastung erreicht wurde, was für die Kochevents zu erwarten ist, da dabei viel VOC-Aktivität herrscht. Unter diesem Gesichtspunkt erscheint die Einteilung sinnvoll, da hier die gewünschte Ausgabe einer VOC-Belastung resultiert.

Tabelle 21: Wissenschaftliches Kochen Vergleich Air Quality Luftqualitätsklasse Analytik und Sensorsystem.

Probenbezeichnung	TVOC-Analytik	TVOC <sub>Sens</sub>
sauber	189 -> Exzellent	-107 -> Exzellent
Zwiebelprobe	4149 <sup>4</sup> -> Mäßig belastet	4745 -> Mäßig belastet
Schupfnudeln	2132 <sup>4</sup> -> Gering belastet	2831 -> Mäßig belastet
FZB	1625 <sup>4</sup> -> Gering belastet	4601 -> Mäßig belastet
Pizza	1125 -> Durchschnittlich	1387 -> Gering belastet
Brot	1152 <sup>4</sup> -> Durchschnittlich	2783 -> Mäßig belastet

Tabelle 22: Dezemberkolloquium Vergleich Air Quality Luftqualitätsklasse Analytik und Sensorsystem.

Probenbezeichnung	TVOC-Analytik	TVOC <sub>Sens</sub>
sauber	147 -> Exzellent	365 -> Gut
Pizza	1367 -> Gering belastet	3169 -> Mäßig belastet
FZB	2533 <sup>4</sup> -> Gering belastet	4711 -> Mäßig belastet
Ethanol	7110 <sup>4</sup> -> Stark belastet I	6582 -> Stark belastet I
Nächster Morgen	1011 -> Durchschnittlich	3427 -> Mäßig belastet

In Tabelle 23 ist die Verteilung der Ausgabe über den ganzen Jahreszyklus der vier Benchmark-Systeme in die entsprechenden Luftqualitätsklassen dargestellt. Für diesen Vergleich wurde nachträglich eine Driftkompensation vorgenommen. Die Luftqualitätsklassen *Stark belastet I* und *II* werden für alle vier Systeme in unter 0,1 % der Fälle ausgegeben. Konzentrationen über 6,5 ppm werden also sehr selten erreicht. Die Stufe *Mäßig belastet* wird in maximal 1 % der Ausgabewerte erreicht. Für alle Systeme befindet sich die Ausgabe in über 50 % der Fälle im Bereich *Exzellent* bis *Gut*. Der Übergangsbereich von *Durchschnittlich* bis *Gering belastet* macht zwischen 18 und 33 % der Ausgabewerte aus. Dieser Übergang stellt den interessanten Bereich dar, in welchem eine Lüftung (manuell oder automatisiert) oder eine visuelle Benachrichtigung für den Endnutzer wünschenswert ist.

Tabelle 23: Vergleich der Benchmark-Systeme nach Luftqualitätsklasseneinordnung aller Monitoring-Daten unter Berücksichtigung einer Driftkompensation.

TVOC <sub>Sens</sub> in ppm	Luftqualitäts- klasse	VOC4IAQ I Wohnraum	VOC4IAQ II Büroraum	VOC4IAQ III Wohnraum	VOC4IAQ IV Büroraum
0 – 0,26	Exzellent	42 %	35 %	42 %	47 %
>0,26 – 0,65	Gut	30 %	46 %	23 %	22 %
>0,65 – 1,3	Durchschnittlich	21 %	16 %	23 %	28 %
>1,3 – 2,6	Gering belastet	6 %	2,5 %	10 %	2 %
>2,6 – 6,5	Mäßig belastet	0,8 %	0,5 %	1 %	< 0,1 %
>6,5 - 13	Stark belastet I	< 0,1 %	< 0,1 %	< 0,1 %	< 0,01 %
>13 – 130	Stark belastet II	< 0,01 %	0 %	< 0,01 %	0 %

## 4.7 AP8 Vereinfachte Testschemata

Die für dieses Projekt genutzte GMA mit bis zu 18 unabhängigen Gaslinien und einem sechsstelligen Investitionsvolumen geht weit über die Komplexität der Testanlagen der meisten Hersteller hinaus und übersteigt die Fähigkeiten insbesondere von KMU. Zudem wünschen sich auch deren Kunden eine vereinfachte Testmöglichkeit zur Verifizierung der Funktion von Sensoren und Modulen. Ziel des Projektes war es daher ebenso vereinfachte Testschemata zu erstellen und zu untersuchen. Hierfür eignet sich der Ansatz der randomisierten Gasgemische nicht, da die Stärke dieser gerade in der Variation von vielen unabhängigen Variablen liegt, was in gängigen Laboren nicht möglich ist. Daher liegt der Ansatz der Vereinfachung darin VOC-

Sensorsysteme mit Gasgemischen zu beaufschlagen, welche die verschiedenen Stufen nach dem modifizierten Indoor Air Quality Index abdecken. Das Testschema besteht somit aus sequentiellen Gasangeboten, wobei einzelne VOC variiert werden und nicht jedes VOC gleichzeitig. Jedes Gasgemisch besteht dabei aus Normalluft (Nullluft + 500 ppb H<sub>2</sub> + 150 ppb CO und 50 % rel. Feuchte) und einer VOC-Hintergrundmischung bestehend aus Ethanol, Formaldehyd und Aceton im Verhältnis 3:1:1.

Darauf sollen VOC einzeln so zudosiert werden, um die verschiedenen Luftqualitätsklassen zu repräsentieren. Konkret wird dabei beispielsweise Ethanol in verschiedenen Konzentrationen angeboten, um in den TVOC<sub>Sens</sub>-Konzentrationsbereichen der verschiedenen Luftqualitätsklassen zu landen. Die Auswahl der VOC resultiert wiederum auf den dominierenden Repräsentanten der Stoffgruppen. Ein mögliches Testschema ist in Tabelle 24 dargestellt.

Tabelle 24: Vereinfachtes Testschema des modifizierten Indoor Air Quality Index für VOC-Messsysteme.

Luftqualitäts- klasse	Variation	c-Bereich Einzel VOC in ppm	c-Bereich VOC- Hintergrund- mischung in ppm	c-Bereich TVOC in ppm
Exzellent	1 x VOC-Gemisch	-	0,1 – 0,2	0,1 – 0,2
Gut	1 x VOC-Gemisch	-	0,4 – 0,5	0,35 – 0,55
Durchschnittlich	1 x Aceton 1 x Ethanol 1 x Cyclohexan 1 x Hexanal 1 x Limonen 1 x Toluol	0,5 – 0,55	0,4 – 0,5	0,9 – 1,05
Gering belastet	6 x Einzel VOC (s. o.)	1,4 – 1,6	0,4 – 0,5	1,8 – 2,1
Mäßig belastet	6 x Einzel VOC (s. o.)	3,7 – 4,5	0,4 – 0,5	4,1 – 5
Stark belastet I	1 x Aceton & Hexanal 1 x Ethanol & Cyclohexan 1 x Toluol & Limonen	8,6 – 10	0,4 – 0,5	9 – 10,5
Stark belastet II	1 x Aceton & Ethanol & Cyclohexan & Toluol & Hexanal & Limonen	19,6 – 49,5	0,4 – 0,5	20 – 50

Die Luftqualitätsklassen *Exzellent* und *Gut* werden auch in der Realität vor allem durch niedrige VOC-Hintergrundkonzentrationen erreicht. Zum Testen dieser Luftqualitätsklassen wird daher das VOC-Hintergrundgemisch variiert. Die Luftqualitätsklassen *Durchschnittlich* bis *Mäßig belastet* werden durch Variation der Einzel-VOC (Aceton, Ethanol, Cyclohexan, Hexanal, Limonen und Toluol) getestet und die beiden Stufen *Stark belastet* werden durch Kombination mehrerer VOC erreicht.

Das resultierende quasistatische Signal eines Sensors im Temperaturzyklus einer solchen Testmessung zeigt Abbildung 33. Diese Prüfung wurde um eine Variation der Störgrößen H<sub>2</sub> und CO (jeweils 1000, 1500 und 2000 ppb) und relativer Feuchte (25, 50 und 65 %) erweitert.

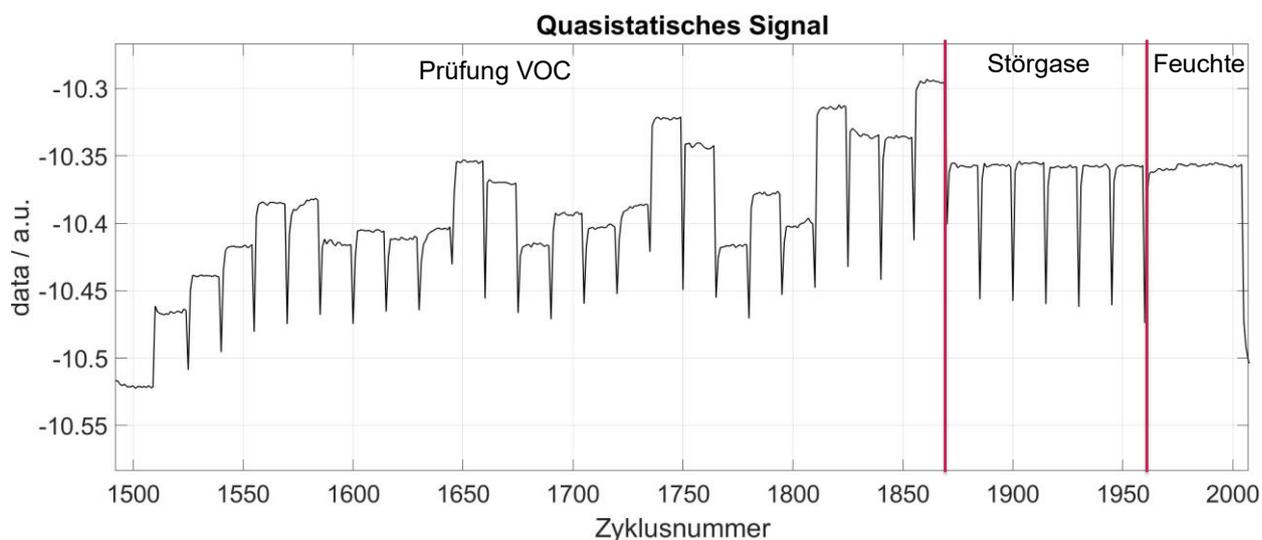


Abbildung 33: Typisches quasistatisches Sensorsignal eines temperaturzyklisch betriebenen Sensors (Ende 400 °C-Hochtemperaturphase) für eine Messung nach dem vereinfachten Testschema.

Die Messung wurde mit Sensoren aus dem Benchmark-System, welche mit der vorgestellten umfangreichen Labormessung kalibriert wurden, durchgeführt. Das vereinfachte Testschema wurde als Testdaten in das Regressionsmodell eingegeben und Ausgabewerte auf die richtige Einordnung in die Luftqualitätsklassen geprüft. Die Ergebnisse sind in Tabelle 25 dargestellt.

Tabelle 25: Ergebnisse des vereinfachten Prüfschemas eines anonymisierten Sensors.

TVOC <sub>Sens</sub> in ppm	Luftqualitätsklasse	Richtige VOC-Detektorausgabe	Kommentar
0,16	Exzellent	17/20	3 Ausgabewerte in „Gut“
0,48	Gut	10/20	10 Ausgabewerte in „Durchschnittlich“
0,98	Durchschnittlich	89/120	8 Ausgabewerte in „Gut“ 23 Ausgabewerte in „Gering belastet“
1,98	Gering belastet	100/120	10 Ausgabewerte in „Durchschnittlich“
4,48	Mäßig belastet	80/100	10 Ausgabewerte in „Stark belastet I“
8,3	Stark belastet I	60/60	-
20,8	Stark belastet II	20/20	-

Mit 376 von 460 richtig ausgegeben Modellausgaben weist der Sensor 82 % Trefferquote vor. In den Fällen, in denen die Sensor-Modellausgabe falsch liegt, beträgt die Abweichung lediglich eine Stufe. Somit zeigt dieser Ansatz eines Prüfschemas eine sinnvolle Testmöglichkeit von VOC-Sensorsystemen auf den modifizierten Indoor Air Quality Index.

#### 4.8 AP6 Vergiftungsprüfung

Ergänzend zur Prüfung der Vorhersagequalität für VOC-Konzentrationen wurde ein Prüfschema zur Bewertung der Robustheit gegenüber Vergiftung entworfen und getestet werden. Anhand der vorgestellten Studien [32, 33, 34] wurden Siloxane als typische Sensorgifte identifiziert, wobei die zyklischen Siloxane vor allem Decamethylcyclopentasiloxan (D5) in den höchsten Konzentrationen detektiert wurde, siehe Tabelle 26.

Tabelle 26: Verteilung der Siloxanvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].

Stoff	P50 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$				P95 in $\mu\text{g}/\text{m}^3$			
	S1	S2a	S2b	S3	S1	S2a	S2b	S3
Siloxan D3	1.0	2.5	3.0	-	13.0	27.8	7.6	-
Siloxan D4	1.5	1.0	1.0	-	18.9	13.0	27.2	-
Siloxan D5	4.3	3.0	3.0	-	58.8	40.0	60.2	-
Siloxan D6	0.5	1.5	-	-	18.4	19.0	-	-
Hexamethyldisiloxan	-	0.5	0.5	-	-	0.5	0.5	-

Anhand des P95-Wertes kann eine erwartete Dosis für einen mehrjährigen Betrieb in Innenräumen bestimmt werden, mit welcher eine Vergiftung zeitlich gerafft durch das Anbieten höherer Siloxan-Konzentrationen in Labormessungen durchgeführt werden kann. Die Vergiftung wurde dabei in mehreren Teilschritten durchgeführt, zwischen welchen anhand vereinfachter Charakterisierungsmessungen der Vergiftungszustand der Sensoren getestet wurde. Ziel der Vergiftungsprüfung ist es typische Siloxanbelastungen über die Lebensdauer eines Sensors (10 Jahre) zeitlich gerafft dem Sensor in Labormessungen anzubieten. Aufgrund von diversen Laborausfällen konnte eine lediglich eine Raffung der ersten sechs Monate Lebensdauer durchgeführt werden. Zusätzlich wurde geprüft, ob ab bestimmten Konzentrationen eine andersartige (schnellere oder langsamere) Degradation der Sensoren eintreten, da die Prüfung dann bei niedrigeren, näher an realen Werten liegenden Konzentrationen, aber über längere Zeit erfolgen müsste. Diese zwei Effekte (Dosis- vs. Konzentrationseffekt) wurden in zwei Messreihen mit jeweils neuen Sensoren untersucht, da die Sensoren nach einer Messreihe durch die Reaktionen mit Siloxan irreversibel geschädigt sind. Dafür wurde in der ersten Messreihe mit 7 ppm D4 und in der zweiten Messreihe mit 1,8 ppm D4 vergiftet. Aufgrund des niedrigen Dampfdrucks von Decamethylcyclopentasiloxan (D5) wurde Octamethylcyclotetrasiloxan (D4) verwendet. Die resultierenden Vergiftungsschritte und Dosen sind Tabelle 27 zu entnehmen.

Tabelle 27: Design of Experiment Vergiftungsmessreihen mit Octamethylcyclotetrasiloxan (D4).

Vergiftungsschritt	1	2	3	4	5	6	7
Zeitraum in Monaten	0,5	1	2	3	4	5	6
Dosis in ppm*h	1,46	2,92	5,84	8,76	11,68	14,6	17,52
Dauer Vergiftungsschritt in h (1. Messreihe 7 ppm)	0,21	0,21	0,42	0,42	0,42	0,42	0,42
Dauer Vergiftungsschritt in h (2. Messreihe 1,8 ppm)	0,81	0,81	1,62	1,62	-	3,24	-

Für die Bewertung der Vergiftung und des Sensorzustandes wurden zu Beginn und nach jedem Vergiftungsschritt Charakterisierungsmessungen durchgeführt. Dabei wurden mit Aceton, Toluol und Ethanol typische VOC in sequentiellen Angeboten mit je drei Konzentrationen nach Tabelle 28 genutzt. Der Hintergrund für jedes Gasangebot stellt eine Normalluftatmosphäre dar (Nullluft + 1,8 ppm Methan + 500 ppb  $\text{H}_2$  + 150 ppb CO + 50 % rel. Feuchte).

Tabelle 28: Auswahl Zielgase und Konzentrationen für Charakterisierungsmessung.

Zielgas	Konzentr. 1 in ppb	Konzentr. 2 in ppb	Konzentr. 3 in ppb
Kohlenmonoxid	12	8	16
Aceton	3	4	2
Toluol	2	1	1,5
Ethanol	1	2	1,5
Wasserstoff	1,5	2	1

Die Reihenfolge der sequentiellen Gasangebote ist in Abbildung 34 dargestellt und wurde quasirandomisiert festgelegt, sodass keine ansteigenden oder abfallenden resultieren. Die Dauer eines Gasangebots beträgt eine Stunde, wobei zwischen den Gasangeboten jeweils eine Normalluftphase mit einer Dauer von 30 Minuten eingefügt wurde.

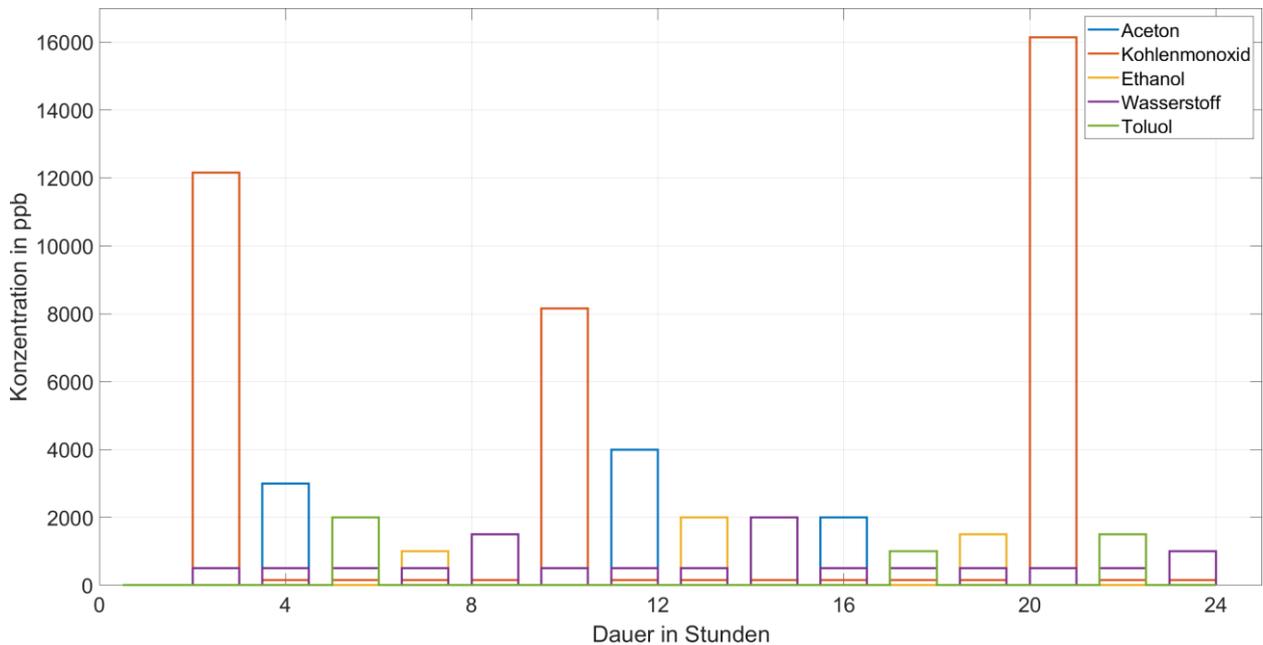


Abbildung 34: Reihenfolge der sequentiellen Gasangebote in der Charakterisierungsmessung.

Ein typisches quasistatisches Sensorsignal eines temperaturzyklisch betriebenen Sensors einer Charakterisierungsmessung ist in Abbildung 35 dargestellt.

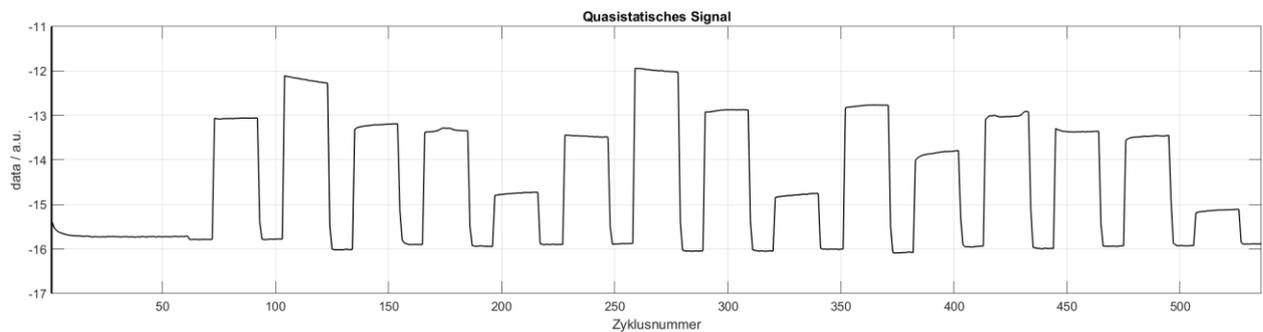


Abbildung 35: Typisches Sensorsignal im Temperaturzyklus (Ende einer 400°C Hochtemperaturphase) während Charakterisierungsmessung

Als Bewertungskriterium wird der Verlauf der Sensorresponse nach Formel (1) über die einzelnen Vergiftungsschritte betrachtet, welche das Sensitivitätsverhalten nach den Vergiftungsschritten widerspiegelt. Normiert wird die Sensitivität auf die erste Charakterisierung vor der ersten Vergiftung, um die verschiedenen Zielgrößen vergleichbar miteinander zu machen.

$$\text{Sensorresponse} = \frac{G_{\text{Gas}} - G_{\text{Nullluft}}}{G_{\text{Nullluft}}} \quad (1)$$

Sensorresponse wird für jedes Zielgas gebildet aus  $G_{\text{Gas}}$ , was dem Leitwert während eines Gasangebots und  $G_{\text{Nullluft}}$  was dem Leitwert während Nullluftphase vor dem Gasangebot entspricht.

Gezeigt werden im Folgenden Ergebnisse eines anonymisierten Sensors (ohne Diffusionsbarriere, welcher die typischen Verläufe darstellt. Abbildung 36 zeigt den Verlauf der normierten Sensorresponse für Aceton über die ersten 6 Monate für einen anonymisierten Sensor. Die Angaben 7 ppm und 1,8 ppm stellen die unterschiedliche Siloxankonzentration dar, mit welcher die Sensoren vergiftet wurden. Die größte Änderung zeigt sich in beiden Fällen in den ersten 2 Wochen. Dazu nimmt die Sensitivität bei der höheren Siloxankonzentration schneller ab, was auf einen Konzentrationseffekt hindeutet.

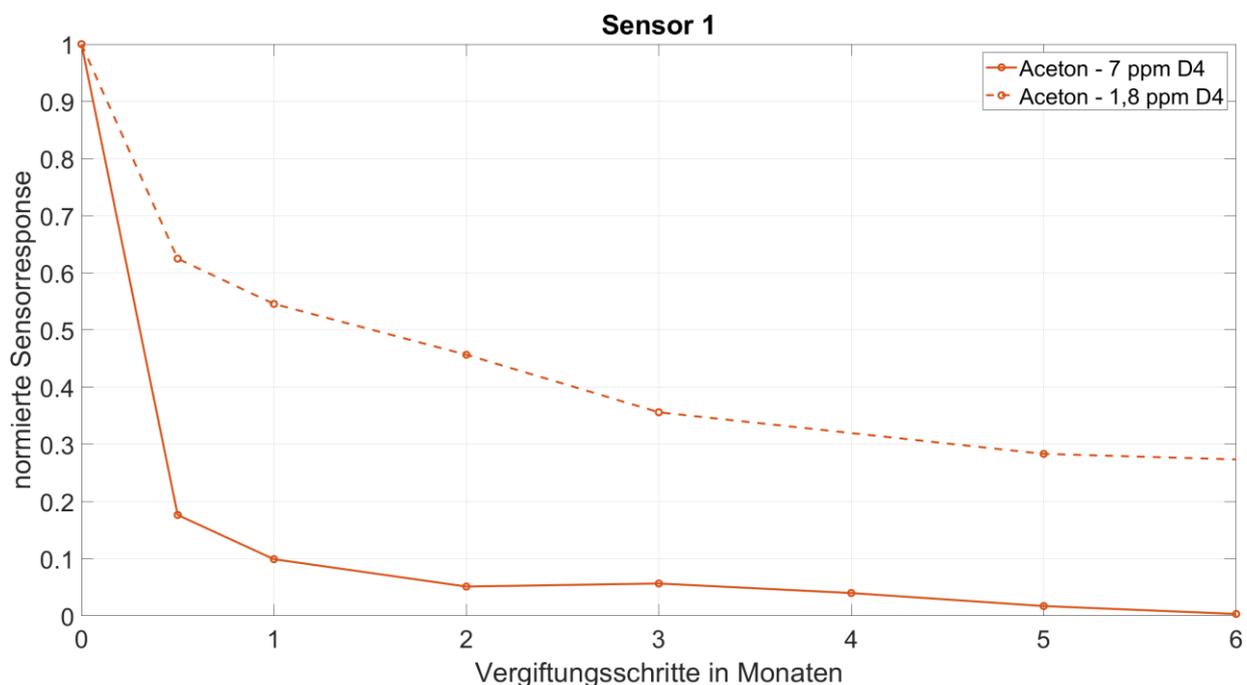


Abbildung 36: Sensitivitätsverhalten für die beiden Vergiftungsmessreihen anhand des Zielgases Aceton.

In Abbildung 37 sind zusätzlich die Verläufe für Toluol und Ethanol dargestellt, die einen möglichen Konzentrationseffekt bestätigen, da die Sensorresponse auch für diese VOC mit der höheren Vergiftungskonzentration deutlich unter der niedrigen Vergiftungskonzentration liegt.

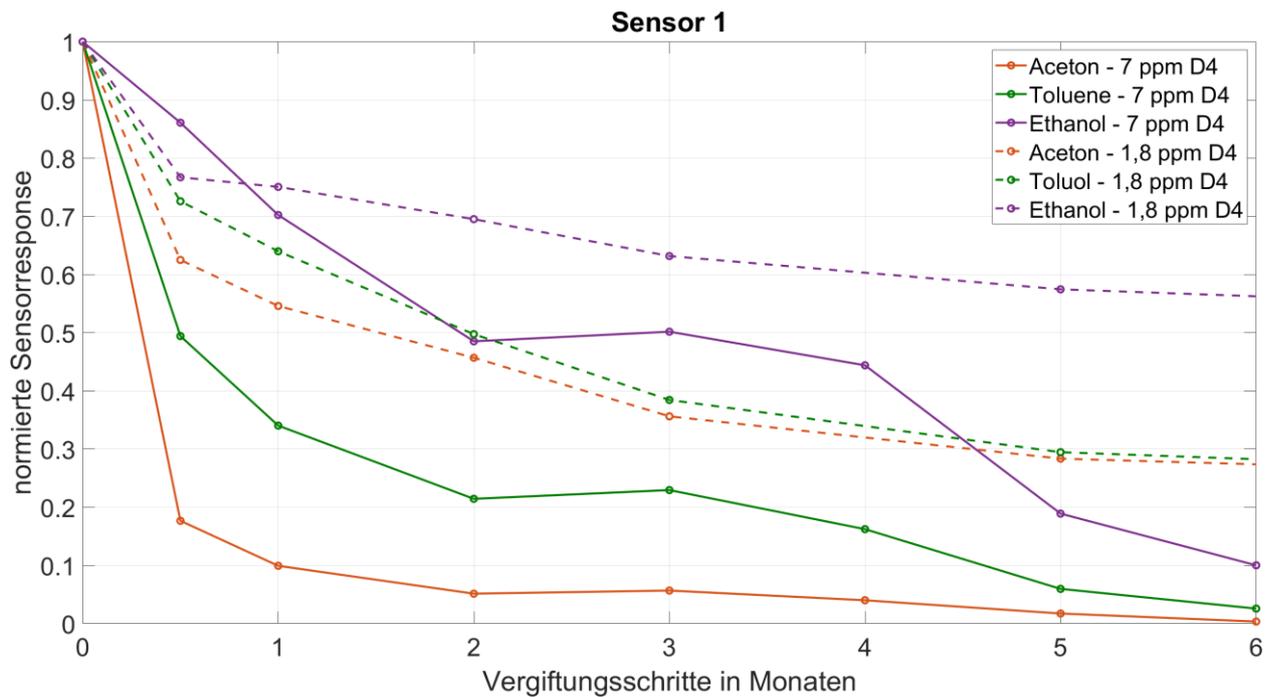


Abbildung 37: Sensitivitätsverhalten für die beiden Vergiftungsmessreihen anhand der Zielgase, Aceton, Toluol und Ethanol.

Abbildung 38 zeigt, dass die CO-Sensitivität bei niedriger Siloxankonzentration stabiler bleibt als bei hoher Siloxankonzentration. Bei Wasserstoff nimmt die Sensitivität sogar zu.

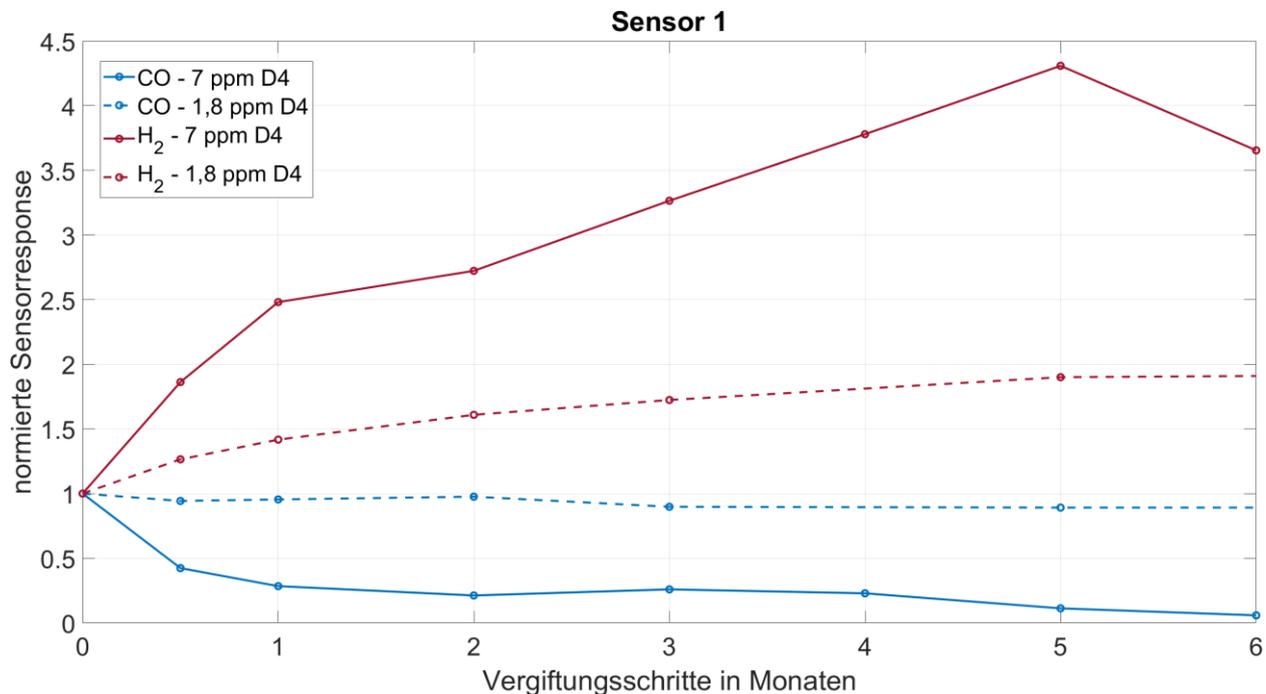


Abbildung 38: Sensitivitätsverhalten für die beiden Vergiftungsmessreihen anhand der Zielgase Wasserstoff und Kohlenmonoxid.

Da vor allem im ersten halben Monat die größten Veränderungen auftreten, wurden weitere Sensoren mit Vorbehandlung verwendet. Das bedeutet vor der ersten Charakterisierung bzw. Vergiftung wurden diese Sensoren schon für 3 Tage in Büroatmosphäre betrieben.

In Abbildung 39 dargestellt, liegen die Verläufe der beiden Vergiftungskonzentrationen hier näher beieinander. Die Verläufe ähneln eher den „neuen“ Sensoren mit niedriger Vergiftungskonzentration, was dadurch bestätigt wird, dass das Einlaufen in der Büroatmosphäre eine Art Angiften durch die Reaktion mit Siloxan in niedriger Konzentration darstellt.

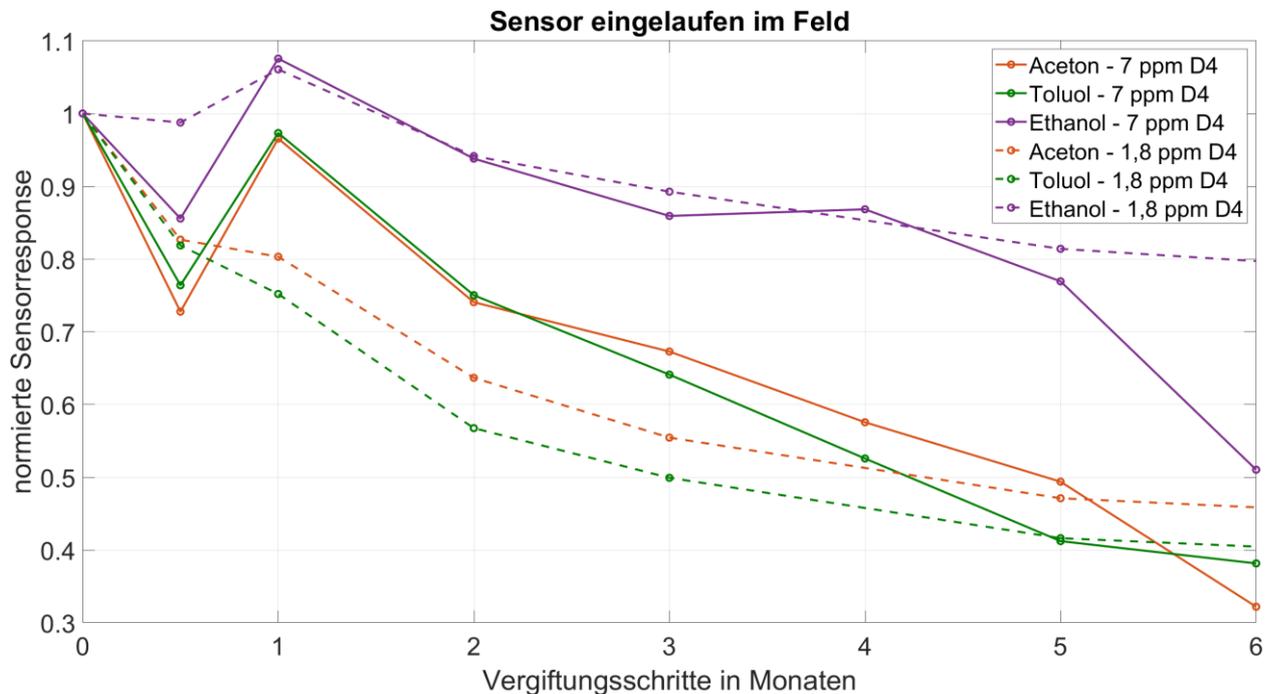


Abbildung 39: Sensitivitätsverhalten eingelaufener Sensoren für die beiden Vergiftungsmessreihen anhand der Zielgase Aceton, Toluol und Ethanol.

Dieses Verhalten wird durch Abbildung 40 für Wasserstoff und Kohlenmonoxid bestätigt, da die Kohlenmonoxid-Sensitivität beim eingelaufenen Sensor stabil bleibt und die Wasserstoff-Sensitivität wieder ansteigt ähnlich zu der niedrigen Vergiftungskonzentration eines „neuen“ Sensors aus Abbildung 38.

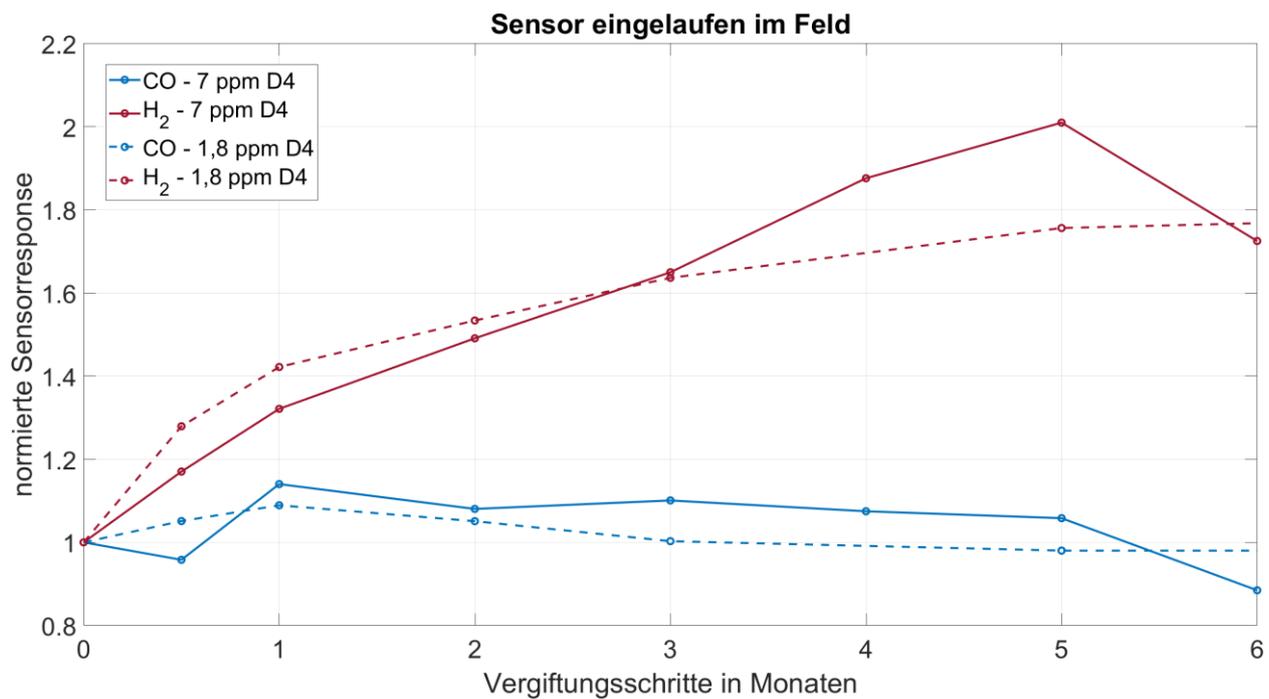


Abbildung 40: Sensitivitätsverhalten eingelaufener Sensoren für die beiden Vergiftungsmessreihen anhand der Zielgase Wasserstoff und Kohlenmonoxid.

Die Auswertung der Sensoren mit statischer Betriebsweise war aufgrund messtechnischer Probleme nicht möglich.

## **5 Diskussion der Ergebnisse**

### **5.1 Auswahl und Konzentrationsbereiche der Zielgrößen**

Die Auswahl der VOC und Konzentrationsbereiche beruhen auf drei Studien deutscher Forschungseinrichtungen, die oft ohne Anwesenheit von Menschen durchgeführt wurden. Eine der größten Quellen von VOC werden dadurch unterdrückt, der Mensch selbst. Durch die Anwesenheit vom Menschen in Form des Stoffwechsels aber auch durch Handlungen wie Kochen, Reinigen, Basteln, usw. werden VOC freigesetzt und beeinflussen die VOC-Dynamik in Innenräumen maßgeblich. Somit unterschätzt die VOC-Analytik die Belastung im Innenraum in den meisten Fällen. Dazu kommt noch, dass in der VOC-Analytik mit Tenax nur der mittlere Flüchtigkeitsbereich nach der WHO-Definition detektiert wird. Trotzdem belegen die Feldtests die Auswahl der Repräsentanten der einzelnen Stoffgruppen dadurch, dass Events mit diesen Repräsentanten festgestellt werden konnten. Auch die Konzentrationsbereiche von bis zu 1000 ppb werden durch die Events bestätigt, welche sich in diesem Bereich bewegen und nur selten darüber liegen.

Von großer Bedeutung ist daher die ständige Validierung der Studienergebnisse durch neue Studien, welche im Optimalfall die menschliche Aktivität als VOC-Quelle berücksichtigen und auch den VVOC-Bereich mit aufnehmen. Durch die Richtlinie können an dieser Stelle auch VOC-Messsystem für die Aufnahme solcher Studien genutzt werden. Dazu kommt, dass sich die VOC-Belastung von Land zu Land unterscheiden kann, da die Belastung von Lebensmitteln, Kosmetika, Einrichtungsgegenständen, Reinigungsmitteln usw. resultiert, welche von Land zu Land unterschiedlich sind.

### **5.2 Labormessungen**

In Labormessungen konnte die Stoffgruppentheorie teilweise bestätigt werden. Grundsätzlich können an dieser Stelle nur Aussagen durch empirische Messungen getroffen werden (keine materialwissenschaftlichen Untersuchung möglich). Für die Stoffgruppen Aromate, Alkohole und Aldehyde konnte bei zwei Vertretern die Theorie mit subjektiver Betrachtungsweise anhand eines Sensorelements bestätigt werden. Für die Stoffgruppen Ester, Ketone und Alkane konnte dies nicht bestätigt werden. Hier stellt sich auch die Frage, ob die „schlechte“ Sensitivität der Sensorsysteme auf diese Stoffgruppe der Grund dafür sein könnte. Wenn schon kein valides Modell für Formaldehyd gebildet werden kann, stellt sich die Frage, ob die Stoffgruppentheorie anhand dieses Modells überhaupt gezeigt werden kann. Ebenso wurde die Theorie anhand eines einzelnen Sensorelements gezeigt. Aufgrund der unterschiedlichen sensitiven Schichten und Additive jedes Sensors kann daher mit dieser subjektiven Betrachtungsweise keine allgemeingültige Aussage getroffen werden. Für eine objektive Bewertung sind geeignete statistische Methoden notwendig, welche automatisiert Muster in den Daten erkennen.

Für eine endgültige Aussage müssen weitere Messungen durch Hinzunahme weiterer Vertreter durchgeführt werden, beispielsweise auch der bisher nicht betrachteten Stoffgruppen Terpene und Organische Säuren. Neben der Betrachtung von temperaturzyklischen Verläufen wäre eine alternative Vorgehensweise, welche die Modellbildung bereits beinhaltet, wünschenswert. Eine Möglichkeit wäre das Durchführen von mehreren randomisierten Kalibriermessungen, wobei jeweils ein Vertreter pro Stoffgruppe vertreten ist, welcher in jeder Kalibriermessung durch einen anderen Vertreter ausgetauscht wird. Auf die eine Kalibriermessung kann dann Vertreter Nummer 1 trainiert werden, wobei die zweite randomisierte Messung als Testdaten genutzt wird, um die Stoffgruppenkonzentration vorherzusagen. Dieses Konzept gilt es weiter zu verfolgen, um

mehr Aussagen über die Stoffgruppentheorie tätigen zu können, da sie den Modellbildungsschritt berücksichtigt und nicht auf Basis von Sensorrohwerten getroffen wird.

Eine weitere Arbeitshypothese bezog sich darauf: Wie viele Gasangebote für Kalibrierung benötigt werden. Neben der Auswahl der Zielgase spielt dabei die Verteilung der Gasangebote über die Konzentrationsbereiche die entscheidende Rolle. Hierbei überzeugte die Verteilung „Gleichverteilt + erweiterte Teilbereiche“ mit den besten Ergebnissen. Dies ist umso interessanter, da diese Verteilung der realen Innenräume am besten widerspiegelt, da sie von einem niedrigen Hintergrund dominiert werden, welcher punktuell durch Events mit Freisetzungen einzelner VOC erweitert wird. Die Feldtests haben dieses Verhalten bestätigt indem bei Kochevents beispielsweise Ethanol oder bei Reinigungsereignissen Toluol und Limonen freigesetzt wurden. Wie viele Gasangebote dann letztendlich benötigt werden, ist Bestandteil aktueller und geplanter Untersuchungen. Die ganze Kalibrierung an sich hat mit 930 Gasangeboten und 25 Minuten pro Gasangebot eine Dauer von ca. 17 Tagen. Sowohl die komplexe GMA als auch die Dauer der Messung sind für KMUs nicht realisierbar. Das Ziel ist es deshalb die Messzeit deutlich zu verkürzen. Voruntersuchungen zeigen hier, dass 500 Gasangebote ausreichen könnten und Versuche mit neuronalen Netzen zeigen, dass sogar 7 % der Messdaten für eine ausreichende Messgenauigkeit ausreichen könnten [39]. Die weitere Frage, die sich stellt, ist, wie die ausreichende Messgenauigkeit definiert ist. Es gilt also einen Kompromiss zwischen Messgenauigkeit und Messdauer zu finden, wobei beide Ziele in einem definierten Rahmen erreicht werden.

Mit der Vergiftungsprüfung wurde ein Vergiftungs- inklusive Prüfschema vorgestellt, mit welchem die Sensorsysteme auf Robustheit gegenüber zyklischen Siloxanverbindungen getestet werden können. Neben der Raffung der zeitlichen Vergiftung mit typischen Dosen, welchen Sensorsysteme über 6 Monate ausgesetzt sind, wurde auch ein möglicher Konzentrationseffekt untersucht. Für die temperaturzyklisch betriebenen Sensoren, war ein solchen Konzentrationseffekt auch zu sehen. Offen bleibt die Frage, ob es eine Art Schwellenkonzentration gibt, ab der die Vergiftung deutlich schneller abläuft oder ob es ein lineares Verhalten ist. Die Auswirkungen eines Konzentrationseffektes auf Sensoren bei statischer Betriebsweise konnten aufgrund von Fehlern bei der Messdurchführung nicht untersucht werden. Für die nähere Betrachtung des Konzentrationseffektes werden weitere Messreihen benötigt. Da die größte Änderung der Sensitivität im ersten Monat zu sehen war, stellt sich auch die Frage, welche Rolle neben der Vergiftung Einlaufeffekte spielen. Konkret: Was könnten mögliche Effekte beim initialen Betreiben von Sensoren sein? Wie wirken sich diese aus? Welche Rolle spielt die Atmosphäre und die Dauer des Einlaufens? Diese Fragen sind Bestandteil aktueller Forschungsarbeiten und sollen in zukünftigen Vergiftungsuntersuchungen mit aufgenommen werden.

### **5.3 Feldtests**

Die 1-Jahres-Feldtests in den vier verschiedenen Innenräumen haben gezeigt, dass sowohl die Modelle für TVOC<sub>Sens</sub> als auch die Einzel-VOC-Modelle die VOC-Dynamiken aufnehmen und darstellen können. Vor allem die hohe zeitliche Auflösung ermöglicht eine detaillierte Betrachtung der Freisetzungen und deren Quelle. So lassen sich nicht nur VOC-Belastungen aufnehmen, sondern auch deren Ursache, nämlich welches VOC für die Freisetzung verantwortlich ist. Dies konnte in einigen Fällen durch provozierte und zufällige Events gezeigt werden. Es sei aber auch dazu gesagt, dass es nicht in allen Fällen eindeutig ist. So funktioniert die Rückführung auf die Stoffgruppe zwar sehr gut, welcher Vertreter der Stoffgruppe verantwortlich ist, ist nicht immer

klar zu identifizieren. Schließlich wurden pro Stoffgruppe auch maximal zwei Vertreter in der Kalibrierung berücksichtigt. In der quantitativen Bestimmung von Einzel-VOC liegt dann die Limitierung der VOC-Sensorsysteme. Nichtsdestotrotz lassen sich Relativverläufe der Gesamt-VOC-Belastung gut darstellen. Dies zeigt sich in den zwei Wohnräumen, in welchen viel VOC-Dynamik zu erkennen ist. Geprägt wird diese Dynamik von Ethanol, was vor allem auf menschliche Aktivität zurückzuführen ist. Neben Aktivitäten wie Putzen, Benutzung von Kosmetikartikeln und Basteln wurden häufig bei Kochevents hohe VOC-Belastungen festgestellt. Bei den zwei Versuchsreihen „Wissenschaftliches Kochen“ und „Dezemberkolloquium“ hat sich außerdem gezeigt, dass die VOC-Belastungen selbst während oder nach Lüftungsevents wieder angestiegen sind, obwohl der Kochvorgang bereits beendet war. Dies deutet daraufhin, dass sich die VOC auch in Möbel, Kleidungsstücken oder Einrichtungsgegenständen festsetzen können und das typische kurze Stoßlüften für eine Beseitigung der VOC-Belastung nicht ausreicht. In weiteren Einzelevents konnten neben Ethanol aber auch Freisetzungen durch VOC wie Ethylacetat, Limonen und Toluol festgestellt werden, welche die dominierenden Repräsentanten aus der untersuchten Studien bestätigten.

Für die Validierung der TVOC<sub>Sens</sub>-Ausgaben wurden die zwei Versuchsreihen „Wissenschaftliches Kochen“ und „Dezemberkolloquium“ analytisch engmaschig begleitet. Im Vergleich zu dem TVOC-Analytik-Wert gebildet aus den Probenahmen mit Tenax, Carboxen und DNPH für VOC und VVOC erzielten die Sensorsysteme ähnliche Ergebnisse. So konnte mit dem Benchmark-System eine Messqualität im Bereich der Analytik erzielt werden. Mit den aufgetretenen hohen Konzentrationen hatte selbst die Analytik Probleme, da im Falle von Ethanol die Detektorsättigung erreicht wurde und die VOC-Belastung somit unterschätzt wurde. Gleichzeitig muss auch festgehalten werden, dass die Stärke der Analytik in der selektiven Bestimmung von Absolutwerten liegt, was mit Sensorsystemen nur schwer erreichbar ist. Genau an dieser Stelle liegt das Potential in einer Kombination aus Sensorsystemen und Analytik. Während mit Sensorsystemen Relativverläufe zeitlich hochaufgelöst dargestellt werden können, kann dies als Anregung genutzt werden, um bei hohen Belastungen eine analytische Rückmessung zu initialisieren, mit der die genaue Zusammensetzung der hohen Belastung analysiert werden kann.

Ein weiterer spannender Aspekt ergab der Vergleich zwischen CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>-Referenz als Anwesenheitstracker mit dem TVOC<sub>Sens</sub>-Modell als direkter Schadstoffsignal. Während das CO<sub>2</sub>-Signal während der Anwesenheit von mehreren Personen langsam ansteigt und den VOC-Schadstoffanteil durch den menschlichen Stoffwechsel repräsentiert, berücksichtigt es keine anderen Quellen von VOC und wird deshalb lediglich als Indikator für „schlechte Luft“ bezeichnet, solange der menschliche Stoffwechsel die einzige VOC-Quelle ist. Im Falle der beiden Versuchsreihen stellte das Kochen verschiedener Gerichte aber eine weitere VOC-Quelle dar, weshalb das TVOC<sub>Sens</sub>-Signal die bessere Option für die Darstellung der VOC-Belastung im Raum war. Da in den beiden Wohnräumen die VOC-Dynamik beherrscht wurde von Kosmetika, Reinigungsmittel und Kochvorgängen zeigte sich keine Korrelation zwischen CO<sub>2</sub> und TVOC<sub>Sens</sub>. Bei den Büroräumen wiederum war die VOC-Belastung geprägt von der Anwesenheit von Menschen. Lediglich wenige Reinigungsereignisse waren mit dem CO<sub>2</sub>-Sensor nicht zu detektieren, ansonsten korrelierten TVOC<sub>Sens</sub> und CO<sub>2</sub>-Verläufe miteinander. Dies verdeutlicht nochmal den Mehrwert eines VOC-Sensorsystems, zeigt aber ebenso die Berechtigung von CO<sub>2</sub>-Sensoren für Innenräume bei denen der Mensch die einzige Quelle von VOC darstellt.

## **5.4 Modifizierter IAQ Index & Vereinfachtes Testschema**

Mithilfe des modifizierten Indoor Air Quality Index wurden im Vergleich zur hygienischen Bewertung von TVOC-Werten vom UBA die Stufengrenzen nach oben angepasst und mit zwei weiteren Stufen versehen. Die Erweiterung und das Hinzufügen eines Index in die geläufige Skalierung von 1 bis 500 stellt eine mögliche Eingliederung zu anderen Air Quality Indizes basierend auf anderen Schadstoffen dar. Zudem kann durch Bezeichnungen für die statistische Belastung von „Exzellente“ bis „Stark belastet“ eine Akzeptanz bei Endnutzern geschaffen werden. Die Schwäche des modifizierten Indoor Air Quality Index steckt im Ursprung der Grenzwerte, welche auf P95-Werten nach den vorgestellten Studien gewählt wurden. Die Situation in Innenräumen und somit die Studienlage kann sich ständig ändern und weiterentwickeln und je nach Auswirkungen hat dies auch eine Anpassung der Grenzen für die einzelnen Stufen zur Folge. Zudem beziehen sich die Studien auf Messungen in Deutschland, wobei sich die VOC-Belastung und die Studienlage in anderen Ländern deutlich unterscheiden kann. Dazu kommt, dass groß angelegte Studien basierend auf VOC-Messungen im Innenraum mit einer hohen statistischen Aussagekraft auch nicht in jedem Land durchgeführt und veröffentlicht werden.

Für die Akzeptanz des modifizierten Air Quality Index ist ein vereinfachtes Testschema notwendig. Im Idealfall sollen mit den aktuell vorhandenen Laboranlagen der KMU oder Prüfanstalten Testmessungen durchgeführt werden können. Das vorgestellte Testschema stellt einen annehmbaren Kompromiss zwischen Durchführbarkeit und Aussagekraft der Tests dar, da alle Repräsentanten der Stoffgruppen in mehreren Konzentrationen getestet werden. Auf die gleichzeitige Variation von mehreren VOC-Komponenten in einem Gasgemisch wurde im Sinne der Durchführbarkeit verzichtet. Dieser Schritt kann auch damit begründet werden, dass Freisetzungen in der Realität ebenso von einzelnen VOC dominiert werden. Die Schwäche des Testschemas liegt in der Festlegung der Repräsentanten. So werden die Sensoren beispielsweise mit Ethanol als Alkohol-Repräsentant getestet, damit ist aber nicht garantiert, dass der Sensor in der Realität auch auf Isopropanol reagiert. Die Stoffgruppentheorie liefert dazu erste Ergebnisse, wurde aber nicht abschließend für alle Sensoren, Betriebsmodi und Stoffgruppenvertreter gezeigt. Außerdem kommen durch die Entwicklung der Technik auch immer neue (Bau-)Materialien, Kosmetikartikel, Einrichtungsgegenstände usw. mit geänderten Inhaltsstoffen auf den Markt, welche die heute typischen Repräsentanten ablösen können. Somit ist eine ständige Validierung der Atmosphäre im Innenraum notwendig.

## **5.5 Hypothesen**

Im Projektantrag wurden 6 Hypothesen aufgestellt, welche es während der Projektdauer zu untersuchen gab. Diese werden im Folgenden nochmals skizziert und deren Untersuchung zusammengefasst dargestellt.

*H1 Zur Laborprüfung von Sensoren und Sensorsystemen kann die komplexe Zusammensetzung der Innenraumluft mit mehreren hundert VOC durch Repräsentanten der wichtigsten chemische Gruppen adäquat nachgebildet werden:*

Die Reduzierung der komplexen Zusammensetzung in Stoffgruppen wurde anhand der drei vorgestellten Studien [32, 33, 34] untersucht. Durch die Stoffgruppentheorie und das Auftreten der Repräsentanten in den Feldtests wurde dies nochmals die Einteilung und die Wahl der Repräsentanten nochmals bestätigt. Dieser Prozess muss aufgrund der sich ständig ändernden Begebenheiten in Innenräumen laufend validiert werden.

*H2 Durch gleichzeitige Beaufschlagung mit typischen Störgrößen kann die erforderliche Spezifität der Sensorsysteme geprüft werden:*

Diese Hypothese wurde durch zum einen durch Labormessungen wie die Kalibrierung und das vereinfachte Testschema gezeigt, wobei Messungen mit den typischen Störgrößen stattgefunden haben. Die Feldtests haben gezeigt, dass Wasserstoff- und Feuchtevariationen von den Sensoren kompensiert werden können. Kohlenmonoxid-Variationen sind in den ausgewählten Innenräumen nicht vorgekommen (lediglich durch Lüften), daher kann diese Spezifität nicht gezeigt werden. Ebenso wurde für oxidierende Gase wie Ozon, NO<sub>x</sub> keine Quereinflüsse festgestellt. Für diese Untersuchung müssten mehr unterschiedliche Innenräume betrachtet und analytisch rückgemessen werden.

*H3 Es gelingt, einen Kompromiss zwischen Komplexität und Aussagekraft zu finden, so dass die Prüfung für Unternehmen, speziell KMU, wirtschaftlich durchführbar ist:*

Die durchgeführten Arbeiten zum vereinfachten Testschema zeigen Tests, welche im Gegensatz zu der komplexen Kalibriermessung mit randomisierten Gasgemischen stark vereinfacht wurden und somit durchführbar für KMU sind. Gleichzeitig bieten die Tests durch die Stoffgruppentheorie und die dominierenden Repräsentanten eine hohe Aussagekraft für den Anwendungsfall Innenraumluftqualität auf VOC-Basis.

*H4 Durch eine optionale Vergiftungsprüfung kann die Robustheit der Sensorsysteme für typische Anwendungsszenarien geprüft werden:*

Die Vergiftungsprüfungen zeigen, dass es scheinbar neben dem Dosiseffekt auch einen Konzentrationseffekt gibt. Beide Effekte zeigen vor allem in der Anfangszeit (Raffung des ersten Monats) die größte Auswirkung. Kombiniert mit dem vereinfachten Testschema kann hierdurch eine Vergiftungsprüfung die Robustheit der Sensorsysteme für die Anwendung Innenraumluft durchgeführt werden.

*H5 Ein vereinfachter Luftqualitätsindex kann aus dem Summen-VOC-Wert abgeleitet werden, um das Messergebnis für die breite Öffentlichkeit verständlich darzustellen:*

Die Erarbeitung des modifizierten Indoor Air Quality Index aus der Summe der Repräsentanten stellt einen vergleichbaren Wert dar, welcher klar definiert ist und sich somit von den vielen verschiedenen aktuellen Sensor-TVOC-Werten absetzt. Die Erweiterung um einen Indexwert von 1 bis 500 und die Angabe einer Luftqualitätsklasse (Exzellente bis Stark belastet) sind auch für die breite Öffentlichkeit, ohne die Kenntnis über Konzentrationsangaben zu verstehen.

*H6 Die Ergebnisse von Felduntersuchungen bestätigen die Aussagekraft der Laborprüfungen im Hinblick auf Summen-VOC-Wert, Luftqualitätsindex und Robustheit:*

Die Felduntersuchungen haben die Auswahl der Repräsentanten und Konzentrationsbereiche bestätigt. Der TVOC<sub>Sens</sub>-Wert ist dabei vergleichbar mit dem analytisch aufgenommenen TVOC-Wert durch Tenax, Carboxen und DNPH. Die Unterschiede entstanden durch Messgerätspezifikationen wie der Detektorsättigung des MS bei hohen Ethanol-Konzentrationen beispielsweise während Kochevents. Über den ganzen Jahreszyklus bietet das TVOC<sub>Sens</sub>-Modell ein robustes und stabiles Signal und eignet sich somit auch für längere Betriebszeiten.

## 6 Zusammenfassung

Das Ziel der Arbeiten im Projekt war eine Richtlinie zur Prüfung von Sensorsystemen für die Erfassung der Innenraumluftqualität auf Basis von VOC wissenschaftlich zu begleiten und abzusichern.

Der erste Schritt bestand aus der Identifizierung der Zielgrößen und Konzentrationsbereiche. Da im Innenraum mehrere hunderte unterschiedliche VOC analytisch nachweisbar sind und viele Sensoren auf eine Vielzahl, bis alle VOC reagieren, war es das Ziel auf eine praktikable Anzahl an VOC zu reduzieren, gleichzeitig aber die Realität in Innenräumen repräsentieren zu können. Daher wurden die VOC in zwölf Stoffgruppen eingeteilt und die in drei Studien dominierende Stoffgruppenvertreter in Innenräumen herausgestellt. Diese Stoffgruppenvertreter dienten als Repräsentant für die Stoffgruppe und wurden in verschiedenen Labormessungen untersucht.

Mit den Labormessungen wurden verschiedene Sensoren auf die Anwendung hin kalibriert und getestet. Hierfür wurden vier Benchmark-Systeme aufgebaut, welche mit jeweils mehreren Sensoren, dynamischer Betriebsweise und optimierter Signalauswertung eine im Idealfall bestmögliche zu erreichende Messgenauigkeit ergeben. Für TVOC<sub>Sens</sub> lag diese im zweistelligen ppb-Bereich. Um auch einzelne Sensoren testen zu können wurden vereinfachte Testschemata untersucht, welche auf einem realitätsnahen Hintergrundmix mit Normalluft und einem niedrigen VOC-Mix basieren, worauf einzelne VOC in sequentiellen Angeboten in höheren Konzentrationen angeboten werden (entspricht realitätsnahen Events basierend auf Freisetzungen einzelner VOC). Mit diesen ist es in gängigen Laboren möglich Sensoren zu testen und damit auch vergleichbar untereinander zu machen.

Mit der Kalibrierung der Benchmark-Systeme wurden diese dann für einen Jahreszyklus in vier verschiedenen Innenräumen betrieben. Dabei wurden jeweils zwei Wohnungen und zwei Büroräume ausgesucht, welche die typischen Innenraumarten darstellen. Durch dieses Monitoring wurde die Wahl der Stoffgruppen und Stoffgruppenvertreter in bewohnten/belebten Innenräumen validiert. Gleichzeitig wurden damit typische VOC-Belastungen in Innenräumen untersucht, welche vor allem von sehr flüchtigen Alkoholen dominiert wurden.

Zusammengefasst konnten die Hypothesen durch Labor- und Feldmessungen in Innenräumen messtechnisch belegt werden und lieferten zudem wertvolle Ergebnisse für die Erstellung einer Richtlinie zur Prüfung von Sensorsystemen für die Erfassung der Innenraumluftqualität auf Basis von VOC.

Die Ergebnisse aus VOC4IAQ stellen die Basis für ein Folgeprojekt dar (ZIM-Projekt: BELAIR), in dem VOC-Sensorsysteme in mehreren renovierten Mietwohnungen installiert werden, um dort im ersten Schritt die VOC-Belastung nach Renovierung und im bewohnten Zustand zu monitoren. In zweiten Schritt soll eine Lüftungsanlage mit den Zielen verbesserte Innenraumluftqualität und Energieersparnis, basierend auf den Sensormessungen, gesteuert werden.

## **7 Umsetzung der Forschungsergebnisse**

### **7.1 Ergebnistransfer in die Wirtschaft**

Nach Abschluss der hier vorgestellten Forschungsarbeiten sind große Teile der nutzbaren Potenziale und bestehende Herausforderungen für VOC-Sensorsysteme für die Anwendung Innenraumluftqualität aufgezeigt.

Der Ergebnistransfer zu den KMU war durch die in Tabelle 29 enthaltenen Maßnahmen bereits während der Projektlaufzeit gewährleistet. Die Erkenntnisse des Projekts wurden dabei vor allem in den Sitzungen des projektbegleitenden Ausschusses direkt mit den Projektpartnern kommuniziert und diskutiert. Zudem wurden die Ergebnisse auf zahlreichen nationalen und internationalen Tagungen präsentiert und ausführliche Ergebnisse ebenso in einer Fachzeitschrift dokumentiert.

In der Diskussion mit den Vertretern wurden weitere Untersuchungsziele im Bezug auf VOC-Sensorsysteme diskutiert. Die weiteren noch geplanten Transfermaßnahmen nach Projektende sind in Tabelle 30 enthalten.

Weiterhin sollen die Aktivitäten in diesem Themengebiet durch weitere Forschungsvorhaben oder bilaterale Kooperationen mit KMU vertieft werden. Schon direkt nach Projektende wurde mit vielen KMU der direkte Kontakt für weitere Untersuchungen aufgenommen.

Somit existieren zahlreiche Möglichkeiten, um KMU die Ergebnisse der Untersuchungen erfolgreich verfügbar zu machen.

Tabelle 29: Durchgeführte Transfermaßnahmen während der Projektlaufzeit.

Maßnahme	Ziel	Ort/Rahmen	Zeitpunkt
Projektdarstellung	Bekanntmachung des Projekts	Webseite des LMT	Seit 10/2021
Projektvorstellung und Diskussion der Arbeiten und Ergebnisse bei pbA-Sitzungen	Informationsweitergabe an Mitglieder des pbA	Saarbrücken bzw. Microsoft Teams	Kick-Off: 08.10.2021 1. Sitzung: 18.02.2022 2. Sitzung: 02.06.2022 3. Sitzung: 31.08.2022 4. Sitzung: 30.11.2022 Abschlusssitzung: 15.03.2023
Publikationen auf internationalen Tagungen	Präsentation der Forschungsergebnisse, Feedback aus der Scientific Community	Air Sensors International Conference (ASIC), Pasadena, USA	11.-13.05.2022
		International Symposium on Olfaction and Electronic Nose (ISOEN), Aveiro, Portugal	29.05.-01.06.2022
		Euroensors, Leuven, Belgium	19.-23.09.2022
		16. Dresdner Sensor-Symposium, Dresden, Deutschland	05.-07.12.2022
Beiträge in Fachzeitschriften, bevorzugt als open access	Internationale Publikation der Ergebnisse, Erreichen eines großen Leserkreises, Feedback aus der Scientific Community	MDPI Atmosphere 10.3390/atmos13101614	02.10.2022
		Zenodo dataset	12.07.2022
Masterarbeit Jannis Morsch	Einbindung von Studierenden in die Forschungsarbeit als Projekt- und Abschlussarbeiten	Masterarbeit	2022

Tabelle 30: Bereits durchgeführte und geplante Transfermaßnahmen nach Projektabschluss

Maßnahme	Ziel	Ort/Rahmen	Zeitpunkt
Abschlussbericht	Vorstellung der Ergebnisse für einen großen Kreis potenzieller Sensor- und Sensorsystemhersteller	Webseite des Lehrstuhls, Dechema	Q4/2023
Publikationen auf internationalen Tagungen	Präsentation der Forschungs-ergebnisse, Feedback aus der Scientific Community	Healthy Buildings 2023 Europe, Aachen, Deutschland	11.-14.06.2023
		IEEE I2MTC 2023, International Instrumentation and Measurement Technology Conference, Kuala Lumpur, Malaysia	22.-25.05.2023
Beiträge in Fachzeitschriften, bevorzugt als open access	Internationale Publikation der Ergebnisse, Erreichen eines großen Leserkreises, Feedback aus der Scientific Community	MDPI Atmosphere 10.3390/atmos14071123	13.06.2023
Dissertation Johannes Amann	Publizierung der Ergebnisse, Dokumentation des wiss. Fortschritts	Dissertation	2025
Dissertation Yannick Robin	Publizierung der Ergebnisse, Dokumentation des wiss. Fortschritts	Dissertation	2024
Masterarbeit Dennis Arendes	Einbindung von Studierenden in die Forschungsarbeit als Projekt- und Abschlussarbeiten	Masterarbeit	2022-2023
Einbringen in die universitäre Lehre	Information über die Ergebnisse an Studierende, Erweiterung des „Wissensschatzes“ der AbsolventInnen	Lehrveranstaltungen Gasmesstechnik, Sensorsignalverarbeitung	Ab Q3/2023
Weiterbildung, Industrietransfer der Ergebnisse	Weiterbildung von Mitarbeitern, vor allem von KMUs, Aufbau eines großen Anwenderkreises	Weiterbildungsseminare national (AMA Weiterbildung) und international (NetMon)	Ab Q3/2023
Personaltransfer	Verbreitung der Ergebnisse/der Anwendung in der Industrie	Wechsel von wiss. MitarbeiterInnen in Industrie	Ab 2024

## 7.2 Verwendung der Zuwendung

Das Forschungsprojekt wurde dem Antrag entsprechend sowie unter Berücksichtigung der Anregungen des pbA (Treffen am 08.10.2021, 18.02.2022, 02.06.2022, 31.08.2022, 30.11.2022

und 15.03.2023) bearbeitet. Es wurde stets darauf geachtet, die zur Verfügung stehende Ausstattung sowie die von pbA-Mitgliedern bereitgestellten vorhabensbezogenen Aufwendungen der Wirtschaft (vAW) sinnvoll zu nutzen. Die durchgeführten Arbeiten waren zur Erreichung der Ziele des Projekts notwendig und angemessen.

Das Forschungsprojekt wurde am LMT durch wissenschaftliches Personal nach Einzelansatz A.1 des Finanzierungsplans (28,68 PM) mit Unterstützung von studentischen Hilfskräften bearbeitet. Die Mitarbeiter waren für die Durchführung des Projekts in Form von Labor- und Feldmessungen inklusive Auswertung zuständig und wurden mit den eingesetzten Personalzuwendungen finanziert.

Es wurden keine Geräte beschafft (Einzelansatz B des Finanzierungsplans). Leistungen Dritter (Einzelansatz C des Finanzierungsplans) wurden in Form eines Unterauftrags über Referenzanalysen für Innenraumluftqualität an das eco-INSTITUT mit 24.984,05 € gemäß Antrag in Anspruch genommen. Das eco-INSTITUT als akkreditiertes Labor für VOC-Analytik speziell in Innenräumen gewährleistete die notwendigen Referenzmessungen mit hoher analytischer Qualität-

### **7.3 Wissenschaftlich-technischer und wirtschaftlicher Nutzen der Ergebnisse für KMU und Angaben zur Finanzierbarkeit**

Das Fehlen einer geeigneten Richtlinie für VOC-Sensorsysteme stellt für zahlreiche Firmen eine unzufriedene Marktlage da. Zum einen sind die Kunden unzufrieden, da jeder Sensorhersteller nach eigenem Ermessen Ausgabewerte und Testanforderungen definiert. Zum anderen sehen sich die Sensorhersteller aufgrund einer fehlenden Richtlinie dazu gezwungen.

Daher war das Ziel dieser Forschungsarbeit die Richtlinienerstellung nach VDI/VDE-GMA FA 4.64 wissenschaftlich und messtechnisch zu unterstützen. Hierfür wurden verschiedene Sensoren in Labormessungen mit unterschiedlichen Aspekten getestet und für KMU umsetzbare Testschemata erstellt. Die Ergebnisse wurden dann durch Feldmessungen am Anwendungsort (Innenraum) validiert. Ziel war es über die Projektdauer realitätsnahe Messwerte für VOC-Belastungen im Innenraum aufzunehmen. Konkret beinhaltete dies die Festlegung der Zielgrößen, Konzentrationsbereiche und vereinfachter Testschemata. Dadurch soll eine akzeptierte Richtlinie resultieren, deren Vorgaben realistisch zu erreichen sind und nicht einem theoretisch unerreichbaren Ziel entsprechen. Zudem soll mit der Richtlinienerstellung ein Standard geschaffen werden, mit dem nicht nur MOS-Sensoren sondern auch andere Sensorprinzipien auf die VOC-Anwendung im Innenraum getestet werden können. Die erfolgreiche Projektarbeit beschleunigte die Richtlinienerstellung, welche sich in der finalen Phase befindet, maßgeblich und soll noch in 2023 veröffentlicht werden.

Somit entstehen für die Sensorhersteller neue Qualitätsziele, welche ihre Sensoren erreichen sollen. Gleichzeitig entsteht für den Kunden eine Akzeptanz gegenüber der Sensormesswerte, da diese eine klare Definition nach Richtlinie haben und die Sensoren somit miteinander verglichen werden können. Durch die Untersuchung der vereinfachten Testschemata entsteht auch für KMU eine Test-Möglichkeit der Sensoren in den eigenen Laboren. Gerade für KMU stellt dieser Bestandteil eine wichtige Voraussetzung dar, um nicht auf teure Dienstleistungen externer Labor angewiesen zu sein.

Die Etablierung des angestrebten Prüfstandards und speziell dessen Begleitung durch wissenschaftliche Untersuchungen und Veröffentlichungen ist Voraussetzung für die breite

Akzeptanz neuer Sensorlösungen zur Erfassung der Innenraumluftqualität. Damit sind erheblich kleinere und kostengünstigere Lösungen möglich, sowohl als Modul zur Integration in diversen Geräten (Smart Speaker, Dunstabzugshaube, Brandmelder, Lampen oder Steckdosen) als auch als Standalone Gerät entweder zur festen Montage oder als mobile Sensorlösung. Je nach Anwendung sind Stückzahlen von einigen Tausend bis zu mehreren Millionen p.a. möglich, so dass selbst bei niedrigen Stückkosten (ab 10 € für anwendungsspezifische Sensormodule) ein Marktvolumen von einigen 10 Mio. € p.a. mittelfristig allein in Europa erschlossen wird. Durch die frühzeitige Etablierung des Prüfstandards gewinnen die beteiligten deutschen Unternehmen, speziell KMU, einen erheblichen Wettbewerbsvorteil, den sie für die Gewinnung von Marktanteilen auf den deutlich größeren Märkten in Nordamerika und Fernost, aber auch Indien und Südamerika nutzen können.

Ergänzend können auch neuartige Dienstleistungen etabliert werden, z. B. die Erfassung der persönlichen Gesamtexposition im Tagesverlauf oder die Aufdeckung von besonders hohen Konzentrationsspitzen durch tragbare VOC-Sensorsysteme. Hierfür ist insbesondere die hohe zeitliche Auflösung relevant, die mit auf Sampling beruhenden analytischen Systemen routinemäßig nicht erzielt werden kann. Eine Probenahme bei Auftreten hoher Konzentrationen würde eine tiefergehende Ursachenanalyse ermöglichen, so dass diese Systeme auch für die Forschung im Bereich Medizin und Umwelt von großem Interesse wären und weitere neue Märkte speziell für KMU erschließen.

## Literaturverzeichnis

- 1 A.P. Jones (1999) Indoor air quality and health, Atmospheric Environment, 33 (28), pp 4535-4564, DOI 10.1016/S1352-2310(99)00272-1
- 2 H.-P. Hutter, H. Moshhammer, P. Wallner, P. Tappler, F. Twrdik, E. Ganglberger, S. Geissler, A. Wenis (2005) Auswirkungen energiesparender Maßnahmen im Wohnbau auf die Innenraumlufthqualität und Gesundheit, Abschlussbericht Forschungsvorhaben F 1469, Bundesministerium für Wirtschaft und Arbeit.
- 3 A. Asikainen, P. Carrer, S. Kephelopoulos, E. de Oliveira Fernandes, P. Wargocki, O. Hänninen (2016) Reducing burden of disease from residential indoor air exposures in Europe (HEALTHVENT project), Environmental Health, 15, S35, DOI 10.1186/s12940-016-0101-8
- 4 M. Pettenkofer (1858) Besprechung Allgemeiner auf die Ventilation bezüglicher Fragen über den Luftwechsel in Wohngebäuden. J.G. Cotta. München
- 5 V. Soni, P. Singh, V. Shree, V. Goel (2018) Effects of VOCs on Human Health. In: Sharma N., Agarwal A., Eastwood P., Gupta T., Singh A. (eds) Air Pollution and Control, Springer, Singapore. DOI 10.1007/978-981-10-7185-0\_8
- 6 Umweltbundesamt: Sick Building Syndrom, 07.11.2017, online: <https://www.umweltbundesamt.de/themen/gesundheit/belastung-des-menschen-ermitteln/umweltmedizin/sick-building-syndrom>, zuletzt abgerufen am 03.08.2023
- 7 GESTIS-Stoffdatenbank, Gefahrstoffinformationssystem der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung, Eintrag zu Kohlenstoffdioxid, <https://gestis.dguv.de/data?name=001120>, abgerufen am 03.08.2023
- 8 H. Grams, O. Hehl, J. Dressmann (2008) Gesundheitliche Bewertung von Kohlendioxid in der Innenraumlufth, Umweltbundesamt, Bundesgesundheitsblatt-Gesundheitsforschung - Gesundheitsschutz 2008 · 51:1358–1369, DOI 10.1007/s00103-008-0707-2
- 9 X. Tang, P. K. Misztal, W.W. Nazaroff, A. H. Goldstein (2016) Volatile Organic Compound Emissions from Humans Indoors, Environ. Sci. Technol. 2016, 50, 23, 12686–12694, DOI 10.1021/acs.est.6b04415
- 10 W.W. Liu, Y.P. Zhang, Y. Yao & J.G. Li (2012) Indoor decorating and refurbishing materials and furniture volatile organic compounds emission labeling systems: A review, Chinese Science Bulletin volume 57, pp 2533–2543, DOI 10.1007/s11434-012-5208-x
- 11 M. Marć, M. Śmiełowska, J. Namieśnik, B. Zabiegała (2018) Indoor air quality of everyday use spaces dedicated to specific purposes—a review, Environmental Science and Pollution Research 25, pp. 2065–2082, DOI 10.1007/s11356-017-0839-8
- 12 B. Müller, A. Mertes, A.M. Scutaru (2016) Innenraumlufthqualität nach Einbau von Bauprodukten in energieeffizienten Gebäuden, Umweltbundesamt. Online: <http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/innenraumlufthqualitaet-nach-einbau-von-bauprodukten>, zuletzt abgerufen am 03.08.2023.
- 13 World Health Organization (2010) WHO Guidelines for Indoor Air Quality: Selected Pollutants, Geneva. Online: [http://www.euro.who.int/\\_data/assets/pdf\\_file/0009/128169/e94535.pdf](http://www.euro.who.int/_data/assets/pdf_file/0009/128169/e94535.pdf), zuletzt abgerufen am 06.01.2021.
- 14 W. Birmili, M. Kolossa-Gehring, K. Valtanen, M. Dębiak, T. Salthammer (2018) Schadstoffe im Innenraum – aktuelle Handlungsfelder, Bundesgesundheitsblatt 61:656–666 DOI 10.1007/s00103-018-2737-8

- 15 DIN ISO 16000-6 Innenraumluftverunreinigungen - Teil 6: Bestimmung von VOC in der Innenraumluft und in Prüfkammern, Probenahme auf TENAX TA®, thermische Desorption und Gaschromatographie mit MS/FID
- 16 A. Mirzaei, S.G. Leonardi, G. Neri (2016) Detection of hazardous volatile organic compounds (VOCs) by metal oxide nanostructures-based gas sensors: A review. *Ceramics International* 42. DOI 10.1016/j.ceramint.2016.06.145.
- 17 Andreas Schütze, Tilman Sauerwald (2020) Indoor air quality monitoring; in: Eduard Llobet (ed.): *Advanced Nanomaterials for Inexpensive Gas Microsensors*, Elsevier, pp. 209-234, ISBN: 978-0-12-814827-3, doi: 10.1016/B978-0-12-814827-3.00011-6
- 18 DIN ISO 16000-29 Innenraumluftverunreinigungen - Teil 29: Prüfverfahren für VOC-Detektoren (ISO 16000-29:2014), Beuth Verlag.
- 19 R. Schleyer, E. Bieber, M. Wallasch (2013) Das Luftmessnetz des Umweltbundesamtes. Umweltbundesamt, online: <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/das-luftmessnetz-des-umweltbundesamtes>, zuletzt aufgerufen am 07.01.2021
- 20 C. Schultealbert, T. Baur, A. Schütze, T. Sauerwald (2018) Investigating the role of hydrogen in the calibration of MOS gas sensors for indoor air quality monitoring, *Conf. Proc. Indoor Air 2018*, July 22-27, 2018, Philadelphia, USA.
- 21 G.W. Traynor, M.G. Apte, A.R. Carruthers, J.F. Dillworth, D.T. Grimsrud, L.A. Gundel, (1987) Indoor air pollution due to emissions from wood-burning stoves, *Environ. Sci. Technol.* 21, 691–697, doi:10.1021/es00161a010.
- 22 Wikipedia: Flüchtige organische Verbindungen, sowie die dort verlinkten Quellen, [https://de.wikipedia.org/wiki/Fl%C3%BCchtige\\_organische\\_Verbindingen](https://de.wikipedia.org/wiki/Fl%C3%BCchtige_organische_Verbindingen), zuletzt aufgerufen am 03.08.2023
- 23 A. Schütze, A. Gramm, T. Rühl (2004) Identification of Organic Solvents by a Virtual Multisensor System with Hierarchical Classification, *IEEE Sensors J* 4 (6), pp. 857-863
- 24 T. Baur, M. Bastuck, C. Schultealbert, T. Sauerwald, A. Schütze (2020) Random gas mixtures for efficient gas sensor calibration, *J. Sens. Sens. Syst.* 9, pp. 411-424, DOI 10.5194/jsss-9-411-2020
- 25 L. Spinelle, M. Gerboles, G. Kok, S. Persijn, T. Sauerwald (2017) Review of Portable and Low-Cost Sensors for the Ambient Air Monitoring of Benzene and Other Volatile Organic Compounds, *MDPI Sensors* 17(7), 1520, DOI 10.3390/s17071520
- 26 Umweltbundesamt (2007): Beurteilung von Innenraumluftkontaminationen mittels Referenz- und Richtwerten, Handreichung der Ad-hoc-Arbeitsgruppe der Innenraumlufthygiene-Kommission des Umweltbundesamtes und der Obersten Landesgesundheitsbehörden, *Bundesgesundheitsblatt - Gesundheitsforschung - Gesundheitsschutz*, 50:990–1005, DOI 10.1007/s00103-007-0290-y
- 27 <https://www.epa.gov/outdoor-air-quality-data>, zuletzt aufgerufen am 03.08.2023, siehe auch <https://www.airnow.gov/aqi/aqi-basics/>, zuletzt aufgerufen am 03.08.2023
- 28 CEN / TC 264 / WG 42 Ambient air - Air quality sensors: Performance evaluation of sensors for gaseous pollutants and particulate matter monitoring in ambient air, current status presented by M. Gerboles at workshop Setting standards for low-cost Air Quality sensors, see above
- 29 CEN / TC 264 / WG 41 Ambient air - Electronic sensors for odorant monitoring: Status report presented by T. Conrad at workshop Setting standards for low-cost Air Quality sensors, see above
- 30 DIN ISO 16000-6 - Entwurf Innenraumluftverunreinigungen - Teil 6: Bestimmung organischer Verbindungen (VVOC, VOC, SVOC) in Innenraum- und Prüfkammerluft durch

- aktive Probenahme auf Adsorptionsröhrchen, thermischer Desorption und Gaschromatographie mit MS oder MS FID (ISO/DIS 16000-6:2020)
- 31 Dräger X-pid® 9000/9500 Mehrgasmessgerät, Produktinformation, <https://www.draeger.com/Products/Content/x-pid-9000-9500-pi-9104789-de-master.pdf>, zuletzt aufgerufen am 03.08.2023
  - 32 H. Hofmann and P. Plieninger (2008): Bereitstellung einer Datenbank zum Vorkommen von flüchtigen organischen Verbindungen in der Raumluft, <https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/publikation/long/3637.pdf>, zuletzt aufgerufen am 03.08.2023
  - 33 H. Hofmann, G. Erdmann and A. Müller (2014): Zielkonflikt energieeffiziente Bauweise und gute Raumluftqualität – Datenerhebung für flüchtige organische Verbindungen in der Innenraumluft von Wohn- und Bürogebäuden (Lösungswege), [https://www.agoef.de/fileadmin/user\\_upload/dokumente/forschung/AGOEF-Abschlussbericht\\_VOC\\_DB\\_II-barrierefrei.pdf](https://www.agoef.de/fileadmin/user_upload/dokumente/forschung/AGOEF-Abschlussbericht_VOC_DB_II-barrierefrei.pdf), zuletzt aufgerufen am 03.08.2023
  - 34 C. Schulz, D. Ullrich and H. Pick-Fuß (2010): Kinder-Umwelt-Survey (KUS) 2003/06: Innenraumluft-Flüchtige organische Verbindungen in der Innenraumluft in Haushalten mit Kindern in Deutschland. Berlin, Germany:: Umweltbundesamt.
  - 35 C. Arata, P. K. Misztal, Y. Tian, D. M. Lunderberg, K. Kristensen, A. Novoselac, M. E. Vance, D. K. Farmer, W. W. Nazaroff, A. H. Goldstein (2021): Volatile organic compound emissions during HOMEChem. *Indoor Air*, 31(6), 2099-2117, DOI: 10.1111/ina.12906
  - 36 M. D. McKay, R. J. Beckman and W. J. Conover (1979): A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code, *Technometrics*, 42(1), pp. 55-61, DOI: 10.1080/00401706.2000.10485979
  - 37 C. Fuchs, H. Lensch, O. Brieger, T. Baur, C. Bur and A. Schütze (2022). Concept and realization of a modular and versatile platform for metal oxide semiconductor gas sensors: A Versatile Platform to Measure Analog and Digital Gas Sensors. *tm-Technisches Messen*, 89(12), 859-874, DOI: 10.1515/teme-2022-0046
  - 38 T. Baur, J. Amann, C. Schultealbert and A. Schütze (2021): Field study of metal oxide semiconductor gas sensors in temperature cycled operation for selective VOC monitoring in indoor air. *Atmosphere*, 12(5), 647, DOI: 10.3390/atmos12050647
  - 39 Y. Robin, J. Amann, P. Goodarzi, T. Schneider, A. Schütze and C. Bur (2022): Deep Learning Based Calibration Time Reduction for MOS Gas Sensors with Transfer Learning. *Atmosphere*, 13(10), 1614, DOI: 10.3390/atmos13101614

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Schematischer Aufbau einer Gasmischanlage.....	14
Abbildung 2: Konzentrationsabfolge Acetaldehyd für die Labormessung mit 930 randomisierten Gasgemischen. ....	16
Abbildung 3: Konzentrationsabfolge TVOC <sub>Sens</sub> für die Labormessung mit 930 randomisierten Gasgemischen. ....	16
Abbildung 4: Temperaturzyklus für die dynamisch betriebenen MOS-Sensoren.....	18
Abbildung 5: Benchmark-System, links: Kompakte Aluminium-Box mit herausführendem Schlauch, der die Innenraumluft zu den Sensoren pumpt. Rechts: Innenansicht des Benchmark-Systems mit MOS-Sensoren in Messkammern (I), Steuerhardware (II), Pumpe (III) und Raspberry Pi zur Steuerung und Datenspeicherung. ....	18
Abbildung 6: Signalverarbeitungskette Temperatur-zyklisch betriebener Sensoren.....	19
Abbildung 7: Typischer Leitwertverlauf im Temperaturzyklus mit Einteilung in 1-Sekundenintervallen.....	20
Abbildung 8: PLSR-Modelle für Aceton und TVOC <sub>Sens</sub> .....	21
Abbildung 9: PLSR-Modelle für Acetaldehyd und Formaldehyd.....	21
Abbildung 10: Vergleich der Sensorleitwerte eines SGP40-S2 in Temperatur-zyklischer Betriebsweise zwischen 1000 ppb Toluol und 1000 ppb Xylol als Vertreter der Aromaten.....	23
Abbildung 11: Vergleich der temperaturzyklischen Verläufe zwischen Ethanol und Isopropanol als Alkohol-Vertreter anhand eines SG40-Schicht 2. ....	24
Abbildung 12: Vergleich der temperaturzyklischer Verläufe zwischen Formaldehyd, Hexanal und Acetaldehyd als Aldehyd-Vertreter anhand eines SG40-Schicht 2.....	24
Abbildung 13: Vergleich der temperaturzyklischer Verläufe zwischen Cyclohexan und n-Hexan als Alkan-Vertreter anhand eines SG40-Schicht 2.....	25
Abbildung 14: Vergleich der temperaturzyklischer Verläufe zwischen Ethylacetat und Butylacetat als Ester-Vertreter anhand eines SG40-Schicht 2.....	25
Abbildung 15: Vergleich der temperaturzyklischer Verläufe zwischen Aceton und Butanon als Keton-Vertreter anhand eines SG40-Schicht 2.....	26
Abbildung 16: Histogramm von TVOC <sub>Sens</sub> für (1) "Gleichverteilt mit erweiterten Teilbereichen für Einzel-VOC". ....	27
Abbildung 17: Histogramm von TVOC <sub>Sens</sub> für (2) "Vollständig gleichverteilt". ....	27
Abbildung 18: Histogramm von TVOC <sub>Sens</sub> für (3) "Logarithmisch verteilt".....	28
Abbildung 19: TVOC <sub>Sens</sub> PLSR-Modelle, links: von (2) "Vollständig gleichverteilt" und rechts: von (3) "Logarithmisch verteilt".....	28
Abbildung 20: Modellausgabe TVOC <sub>Sens</sub> für VOC4IAQ I über knapp 2 Monate.....	30
Abbildung 21: Modellausgabe TVOC <sub>Sens</sub> für VOC4IAQ III über ca. einen Monat mit Markierung des Konzentrationsbereichs mit der meisten Aktivität. ....	31
Abbildung 22: Modellausgabe TVOC <sub>Sens</sub> für VOC4IAQ II über ca. einen Monat.....	32
Abbildung 23: Modellausgabe TVOC <sub>Sens</sub> für VOC4IAQ IV über ca. einen Monat. ....	32
Abbildung 24: Typischer Tagesverlauf eines Wohnraumes. ....	33
Abbildung 25: Freisetzungstest Nagellackentferner (acetonfrei) mit VOC4IAQ I.....	34
Abbildung 26: Freisetzungstest Ethanol mit VOC4IAQ I. ....	34
Abbildung 27: Ethanol, Isopropanol und TVOC <sub>Sens</sub> -Signale während dem Wissenschaftlichen Kochen mit 1) Zwiebelsuppe, 2) Schupfnudeln und 3) Feuerzangenbowle. In grün markiert die Zeiträume für die Probenahme für die analytische Referenzmessung. ....	35
Abbildung 28: CO <sub>2</sub> -, RCP-H <sub>2</sub> und TVOC <sub>Sens</sub> -Signale während dem Wissenschaftlichen Kochen. ....	37

Abbildung 29: Ethanol und TVOC <sub>Sens</sub> -Signale während dem Wissenschaftlichen Kochen mit in grün markierten Zeiträumen für die Probenahmen während dem Pizza-Backen, Feuerzangenbowle und Ethanol-Freisetzung. ....	38
Abbildung 30: Ethylacetat-Event aufgenommen von VOC4IAQ III in Wohnraum. ....	39
Abbildung 31: Limonen- und Toluol-Event aufgenommen von VOC4IAQ III in Wohnraum. ....	40
Abbildung 32: Hygienische Bewertung von TVOC-Werten durch das Umweltbundesamt [26]. .	40
Abbildung 33: Typisches quasistatisches Sensorsignal eines temperaturzyklisch betriebenen Sensors (Ende 400 °C-Hochtemperaturphase) für eine Messung nach dem vereinfachten Testschema.....	44
Abbildung 34: Reihenfolge der sequentiellen Gasangebote in der Charakterisierungsmessung. ....	46
Abbildung 35: Typisches Sensorsignal im Temperaturzyklus (Ende einer 400°C Hochtemperaturphase) während Charakterisierungsmessung .....	46
Abbildung 36: Sensitivitätsverhalten für die beiden Vergiftungsmessreihen anhand des Zielgases Aceton.....	47
Abbildung 37: Sensitivitätsverhalten für die beiden Vergiftungsmessreihen anhand der Zielgase, Aceton, Toluol und Ethanol.....	48
Abbildung 38: Sensitivitätsverhalten für die beiden Vergiftungsmessreihen anhand der Zielgase Wasserstoff und Kohlenmonoxid. ....	48
Abbildung 39: Sensitivitätsverhalten eingelaufener Sensoren für die beiden Vergiftungsmessreihen anhand der Zielgase Aceton, Toluol und Ethanol. ....	49
Abbildung 40: Sensitivitätsverhalten eingelaufener Sensoren für die beiden Vergiftungsmessreihen anhand der Zielgase Wasserstoff und Kohlenmonoxid. ....	50

## Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: VOC-Vorkommen aufgeteilt nach Stoffgruppen gemäß der durchgeführten Messungen der vorgestellten Studien [32, 33, 34].	9
Tabelle 2: Verteilung der Alkanvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].	10
Tabelle 3: Verteilung der Aromatvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].	10
Tabelle 4: Verteilung der Alkoholvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].	10
Tabelle 5: Verteilung der Terpenvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].	11
Tabelle 6: Verteilung der Aldehydvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].	11
Tabelle 7: Verteilung der Ketonvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].	11
Tabelle 8: Verteilung der Estervertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].	12
Tabelle 9: Verteilung der Siloxanvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].	12
Tabelle 10: Verteilung der Organische Säurenvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].	12
Tabelle 11: Dominierende VOC nach verschiedenen Wohnsituationen aufgenommen in der HOMEChem-Studie [35].	13
Tabelle 12: Auswahl der Stoffgruppenvertreter.	13
Tabelle 13: Konzentrationsbereiche für Ziel- und Störgrößen.	15
Tabelle 14: Verwendete Sensoren für die vier Benchmark-Systeme.	17
Tabelle 15: RMSE-Testwerte für VOC4IAQ I.	22
Tabelle 16: Vergleich der ppb- und $\mu\text{g}/\text{m}^3$ TVOC <sub>Sens</sub> -Modelle anhand des nRMSE <sub>Test</sub> .	22
Tabelle 17: Vergleich der prozentualen nRMSE-Werte der verschiedener Verteilungen für TVOC <sub>Sens</sub> .	29
Tabelle 18: Vergleich zwischen TVOC-Analytik und TVOC <sub>Sens</sub> während des Wissenschaftlichen Kochens in ppb.	36
Tabelle 19: Vergleich zwischen TVOC-Analytik und TVOC <sub>Sens</sub> während Dezemberkolloquium in ppb.	38
Tabelle 20: Modifizierter Air Quality Index basierend auf VOC in Zusammenarbeit mit VDI/VDE GMA FA 4.64.	41
Tabelle 21: Wissenschaftliches Kochen Vergleich Air Quality Luftqualitätsklasse Analytik und Sensorsystem.	42
Tabelle 22: Dezemberkolloquium Vergleich Air Quality Luftqualitätsklasse Analytik und Sensorsystem.	42
Tabelle 23: Vergleich der Benchmark-Systeme nach Luftqualitätsklasseneinordnung aller Monitoring-Daten unter Berücksichtigung einer Driftkompensation.	42
Tabelle 24: Vereinfachtes Testschema des modifizierten Indoor Air Quality Index für VOC-Messsysteme.	43
Tabelle 25: Ergebnisse des vereinfachten Prüfschemas eines anonymisierten Sensors.	44
Tabelle 26: Verteilung der Siloxanvertreter nach den vorgestellten Studien [32, 33, 34].	45
Tabelle 27: Design of Experiment Vergiftungsmessreihen mit Octamethylcyclotetrasiloxan (D4).	45
Tabelle 28: Auswahl Zielgase und Konzentrationen für Charakterisierungsmessung.	46
Tabelle 29: Durchgeführte Transfermaßnahmen während der Projektlaufzeit.	58
Tabelle 30: Bereits durchgeführte und geplante Transfermaßnahmen nach Projektabschluss.	59