

5. Zusammenfassung

Den PAK kommt aufgrund ihrer ubiquitären Verbreitung und aufgrund der carcinogenen und mutagenen Eigenschaften einiger Vertreter dieser Substanzklasse besondere Bedeutung in der Umweltchemie zu. Dabei spielt die PAK-Belastung der Böden eine wichtige Rolle, denn immerhin stellen sie den Hauptteil militärischer und industrieller Altlasten in Europa dar.

Neben der Fortentwicklung bestehender Sanierungskonzepte, rückt zunehmend die mikrobielle Degradation der PAK unter thermophilen Bedingungen in den Mittelpunkt aktueller Forschung. Jedoch bedarf es noch grundlegender Forschung zur vollständigen Klärung der Abbauewege und einer vollständigen Bilanzierung der PAK-Degradation unter technischen Maßstäben.

Ein probates Mittel zur Aufklärung des Metabolismus organischer Schadstoffe ist die Anwendung regioselektiv ^{13}C -markierter Verbindungen, die im Gegensatz zu radioaktiv-markierten Substanzen keine besonderen Vorsichtsmaßnahmen im Umgang erfordern.

In dieser Arbeit wurde die Synthese einiger spezifisch-markierter PAK durchgeführt. Es konnte dabei auf optimierte Synthesen zurückgegriffen werden, die in der Literatur beschrieben sind. Zum Teil wurden dabei neue Synthesewege erprobt, da die vorliegenden Synthesen häufig nur für kleinere Substanzmengen ausgelegt waren. Dies gilt insbesondere für [1- ^{13}C]-Phenanthren, das für eine mikrobielle Umsetzung im technischen Maßstab in größeren Mengen benötigt wurde.

Es wurden desweiteren Synthesen optimiert und durchgeführt, die zu bislang nicht dargestellten ^{13}C -markierten PAK führten, wie etwa [3- ^{13}C]-Fluoranthren oder [5- ^{13}C]-Acenaphthen. Als Basis sämtlicher Markierungssynthesen diente dabei ^{13}C -Natriumcarbonat als sehr kostengünstige Ausgangsverbindung. Aus diesem wurde *in situ* $^{13}\text{CO}_2$ generiert und mit den zu 1-Brom-(3-aryl)-propan bzw. 1-Brom-(4-aryl)-butan korrespondierenden Grignard-Reagenzien umgesetzt. Die nach dieser Methode gut zugänglichen [1- ^{13}C]-markierten araliphatischen Carbonsäuren wurden durch intramolekulare Friedel-Crafts-Reaktion cyclisiert. Nach Desoxygenierung und Aromatisierung wurden die gewünschten Zielverbindungen erhalten.

Die ^{13}C -markierten Zielverbindungen wurden in Degradationsexperimenten eingesetzt, um den Metabolismus thermophiler Mikroorganismen wie etwa *Bac. thermoleovorans* HH 2 aufzuklären., die PAK als einzige Kohlenstoff- und Energiequelle nutzen können. Mit Hilfe von $[1-^{13}\text{C}]$ -Naphthalin konnte eindeutig anhand $^{13}\text{CO}_2$ -Veratmung und der Bildung hochgradig ^{13}C -angereicherter Sekundärmetabolite wie Aminosäuren und Fettsäuren dies belegt werden. Desweiteren wurde aber auch eine vollständige Bilanzierung des Abbaus polycyclischer aromatischer Kohlenwasserstoffe am Beispiel des $[1-^{13}\text{C}]$ -Phenanthrens in Mineralisierung ($^{13}\text{CO}_2$), ^{13}C -angereicherter Biomasse und *bound residues* im technischen Maßstab realisiert.