

## Tagungsnummer

P31

## Thema

Kommission II: Bodenchemie

Freie Themen

## Autoren

H. Lewandowski<sup>1</sup>, C. von Sperber<sup>2</sup>, W. Amelung<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Forschungszentrum Jülich, Agrosphäre (IBG-3), Jülich; <sup>2</sup>Universität Bonn, INRES-Institut für Bodenwissenschaften, Bonn

## Titel

Sauerstoffisotopenaustausch an Oxiden – Raman Messungen mit Mischungen aus Nitrat, Sulfat und Phosphat

## Abstract

Der Austausch der Sauerstoffisotope O-16 und O-18 ist ein Indikator für biologische Kreisläufe wichtiger Nährstoffe wie Nitrat, Sulfat oder Phosphat im Boden. Dabei setzen sich die Austauschreaktionen in realen Systemen aus verschiedenen biotischen und abiotischen Einzelreaktionen zusammen (z.B. mit und ohne Beteiligung von Mikroorganismen). Um diese verschiedenen Mechanismen unterscheiden zu können, ist es nötig mit Modellsystemen einzelne Teilmechanismen zu beschreiben. In dem Poster stellen wir erste Messungen zum abiotischen Sauerstoffisotopenaustausch mittels Raman-Spektroskopie an einer Mischung aus Nitrat, Sulfat und Phosphat vor. Raman-Spektroskopie ist eine Lichtstreuungsmethode, die Schwingungen symmetrischer Moleküle detektiert. Da diese Molekülschwingungen von den Massen der beteiligten Atome abhängen, verändern sich bei einem Isotopenaustausch die für die Schwingungen charakteristischen Wellenzahlen der Banden im Raman-Spektrum. Bei einem schrittweisen Austausch der 3 Sauerstoffatome im Nitrat ( $\text{NO}_3^-$ ) sind während einer Zeitreihe 4 Banden für die symmetrische N-O Valenzschwingung zu beobachten, deren Intensität (? Fläche unter der Bande) sich mit der Zeit ändert. Bei Sulfat ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) sind wegen der 4 Sauerstoffatome 5 Banden vorhanden. Beim Phosphat ( $\text{PO}_4^{3-}$ ) liegen die 5 Banden so dicht, dass nur eine Umhüllende erkennbar ist, deren Maximum sich mit der Zeit verschiebt. Für eine quantitative Bestimmung der Kinetik des Isotopenaustausches muss der relative Anteil jedes Isotopologs während der Austauschreaktion als Funktion der Zeit bestimmt werden. Dazu werden die Bandensignale integriert, bzw. bei überlappten Signalen entfaltet und integriert. Für jeden Isotopologen ergibt sich so eine charakteristische Zeitkurve, die dann mit den Geschwindigkeitsgesetzen der Reaktionskinetik beschrieben werden kann. Die in diesem Poster gezeigten Arbeiten beschäftigen sich mit dem abiotischen O-16 -> O-18 Austausch einer 3-fach Mischung aus  $\text{KNO}_3$ ,  $\text{K}_2\text{SO}_4$  und  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  in O-18 angereichertem Wasser bei Temperaturen größer als 90°C. Bei niedrigeren Temperaturen konnte kein abiotischer Sauerstoffisotopenaustausch beobachtet werden. Die Geschwindigkeitsgesetze für die Isotopologen der drei Oxide werden vorgestellt.