

## Tagungsnummer

V114

## Thema

Kommission II: Bodenchemie

Schicksal, Wechselwirkungen und Wirkung von bodenfremden Stoffen im Boden

## Autoren

M. Wisgott<sup>1</sup>, J. Heil<sup>1</sup>, B. Stumpe<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Bergische Universität Wuppertal, Geographie, Wuppertal

## Titel

Modellierung des Sorptionverhaltens von zwei beispielhaften persistenten organischen Schadstoffen an die Bodenfestphase basierend auf spektralen Daten und multivariater statistischer Analysen

## Abstract

Persistente organische Schadstoffe (POPs) stellen eine große Gefahr dar. Vor diesem Hintergrund ist ein Risikomanagement über den Verbleib der POPs im Boden von großem Interesse. Deshalb war es das Ziel dieser Studie ein zuverlässiges, schnelles und kostengünstiges Verfahren zu entwickeln, das die Sorption und Desorption an zwei modellhaften POPs vorhersagen kann. Dazu wurden 4-n-Nonylphenol (NP) und Perfluorooctansäure (PFOA) ausgewählt.

Für die Entwicklung eines Prognosemodells wurden 72 Bodenproben zunächst nach Textur, Kohlenstoff-, Eisenoxid- und Manganoxidgehalt sowie pH-Wert hin konventionell analysiert. Von allen Bodenproben wurden darüber hinaus FTIR-Spektren im mittleren Infraroten Bereich gemessen. Die Sorption der Schadstoffe an den Boden wurde mit Hilfe von Batch Versuchen erfasst.

Auf der Grundlage der FTIR Daten, welche Summenparameter der chemischen Bodenzusammensetzung darstellen, wurde, unter einer breiten Variation von statistischen Auswertungen, ein Vorhersagemodell zur Verbreitung der Tenside im Boden erstellt.

Grundsätzlich war die Sorption von Nonylphenol und Perfluorooctansäure linear über alle Bodenproben hinweg. Trotzdem konnten signifikante Unterschiede in den Sorptionskoeffizienten ( $K_D$ -Werten) festgestellt werden. Während für PFOA die  $K_D$ -Werte im Bereich zwischen 2 und 80 ml g<sup>-1</sup> lagen, wurden für NP Werte von 25 bis 1000 ml g<sup>-1</sup> gemessen. Mit Hilfe einer multiplen Regressionsanalyse konnte bestimmt werden, dass die Sorption im Fall von PFOA signifikant von den Eisenoxidgehalten sowie den organischen Kohlenstoffgehalten abhängig war. Bei Nonylphenol war lediglich eine Abhängigkeit von den  $C_{org}$ -gehalten zu beobachten.

Da verschiedene Adsorptionsmechanismen der beiden POPs zu beobachten waren, wurden zwei unterschiedliche Prognosemodelle entwickelt. Auf Grundlage der Tatsache, dass die spektralen Daten Informationen zu der chemischen Bodenzusammensetzung aufweisen, wurden die konventionell erlangten Ergebnisse gegen die spektralen Daten kalibriert. Dadurch konnten die spektralen Bereiche identifiziert werden, welche die Informationen zu den Eisenoxid- und organischen Kohlenstoffgehalten trugen. Die relevanten spektralen Bereiche wurden verwendet, um das Vorhersagemodell, basierend auf dem Random Forrest Algorithmus, aufzubauen.