

**Tagungsnummer**

V213

**Thema**

Kommission VII: Bodenmineralogie

Neue Ansätze zur Quantifizierung und Charakterisierung pedogener Minerale und Mineraltransformation

**Autoren**A. Fritzsche<sup>1</sup>, T. Ritschel<sup>1</sup>, K. Totsche<sup>1</sup><sup>1</sup>Friedrich-Schiller-Universität Jena, LS Hydrogeologie, Jena**Titel**

Quantifizierung von Goethit in Mischproben mit FTIR-Spektroskopie

**Abstract**

Infrarot (IR)-spektroskopische Untersuchungen ermöglichen eine gleichzeitige und unkomplizierte Analyse von anorganischen und organischen Bestandteilen komplexen Mischproben (z.B. Boden). Aufgrund der Überlagerung von Absorptionsbanden werden die IR-Spektren solcher Proben überwiegend auf qualitativer Basis interpretiert. Bei quantitativen Ansätzen, wie z.B. der Berechnung von Bandenverhältnissen, besteht die Gefahr, dass Hintergrundsignale und deren Variabilität nur unzureichend berücksichtigt werden. Die vorliegende Studie präsentiert einen chemometrischen Ansatz, um einzelne Substanzen in komplexen IR-Spektren voneinander reproduzierbar zu diskriminieren. Hierbei erfolgt mittels Positiver Matrixfaktorisierung (PMF) die Zerlegung der IR-Spektren in eine Linearkombination aus Gehalt und Spektrum von Einzelkomponenten. Bei Bedarf können dabei bekannte Spektren von Referenzsubstanzen benutzt werden, um die der Faktorenanalyse inherente Uneindeutigkeit zu begrenzen. Zudem können die Eindeutigkeit und Reproduzierbarkeit der PMF-Lösungen durch komplementäre statistische Parameter überwacht werden.

Dieser Ansatz wurde bzgl. der Wiederfindung von kolloidalem Goethit in Grundwasser erprobt. Der Anteil Goethit-induzierter Banden konnte dabei von Banden anorganischer (Quarz, Kaolinit etc.) und organischer Verbindungen (autochthoner und allochthoner OM) in den IR-Spektren von getrockneten Grundwasserproben erfolgreich diskriminiert und quantifiziert werden. Abhängig von der Fragestellung könnten demnach auch weitere Grundwasserbestandteile neben Goethit quantifiziert werden. PMF ist damit ein geeigneter Ansatz, um IR-Spektren reproduzierbar in einzelne Komponenten zu zerlegen, die Spektrum und Gehalt der Einzelsubstanzen in Mischproben reflektieren.