

Charakterisierung und Identifikation technologener Substrate mit Hilfe der FTIR-Spektroskopie

Thomas Engel¹ | Dr. Britta Stumpe¹ | Dr. Bernd Steinweg²
 info@thomasengel.net | britta.stumpe@rub.de | bernd.steinweg@moenchengladbach.de

¹ Geographisches Institut der Ruhr-Universität Bochum
 AG Bodenkunde / Bodenökologie
 Lehrstuhlinhaber: Prof. Dr. Bernd Marschner

² Stadtverwaltung Mönchengladbach
 Dezernat II (Finanzen, Umwelt) | Fachbereich Umweltschutz und Entsorgung (64)
 Untere Bodenschutzbehörde | MÖNCHENGLADBACH

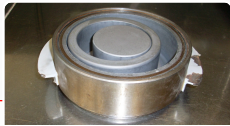
EINFÜHRUNG IN DIE THEMATIK

- > Technologene Substrate (in Boden eingebaute Aschen aus Hausmüllverbrennung und Schlacken aus Verhüttungsprozessen)
- > Charakteristik: Schlacken zum Teil hochgradig Schwermetall belastet.
- Aschen in Schadstoffen entsprechend Ausgangsmaterial sehr heterogen in Zusammensetzung
- > Idee: FTIR-Spektroskopie als kostengünstige Alternative zu zeit- und kostenintensiven Schwermetallanalytik-Methoden.

MATERIAL

10 Gießereischlacken (GS) | 19 Eisenhüttenschlacken (EHS) | 10 Metallhüttenschlacken (MHS) | 5 Müllverbrennungaschen (MVA)

METHODENENTWICKLUNG



Feinmahlen des Probenmaterials

- > Retsch RS 1 Schwingscheibmühle



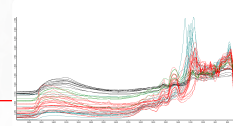
Trocknung des Probenmaterials

- > Trockenschrank
- > 60 Minuten bei 105°C
- > Exsiccator



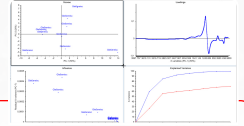
Messung mittels FTIR-Spektroskop

- > Bruker Tensor 27 + HTS-XT
- > 5 Parallelen
- > 4.000 - 400 cm⁻¹



Spektralanalyse Bruker OPUS 6.5

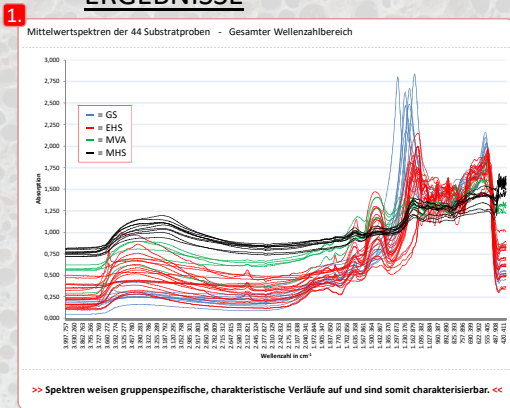
- > Spektralkontrolle
- > Prüfung auf Plausibilität



Statistische Auswertung

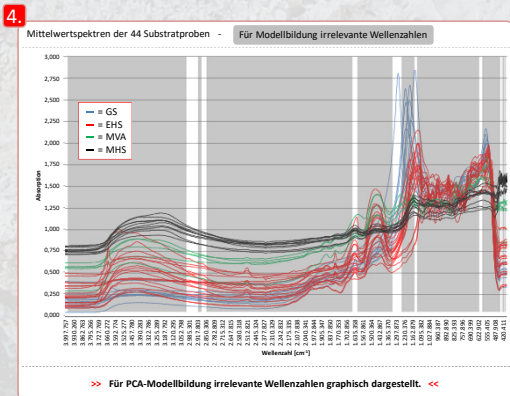
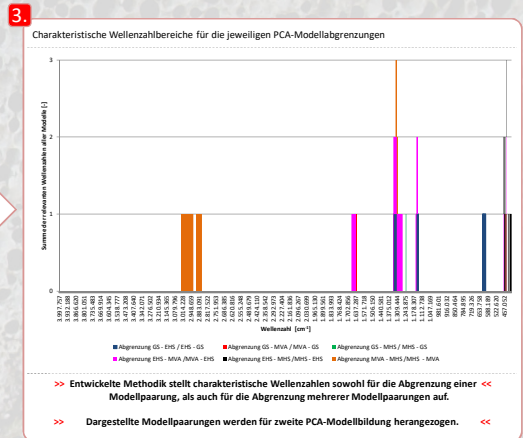
- > Spektralnormierung
- > Finden bester Parameterkombination
- > Relevante Wellenzahlen finden

ERGEBNISSE



2. Ergebnisse der 1. SIMCA-Klassifikation
 Signifikanzniveau: 0,1%

	PCA_GS	PCA_EHS	PCA_MVA	PCA_MHS
GS ES-143-2	*			
GS ES-501-A	*			
GS ES-566	*			
GS GM-Muesli	*			
GS P2010-01747-00	*			
GS P2010-01999-00	*			
GS P2010-02078-00	*			
GS P2010-02104-00	*			
GS P2010-02142-00	*			
GS P2010-02413-00	*			
EHS (HOB) ES-018-1		*		
EHS (HOB) ES-063-1		*		
EHS (HOB) ES-500		*		
EHS (HOB) ES-502		*		
EHS (HOB) ES-517		*		
EHS (HOB) ES-561		*		
EHS (HOB) ES-574		*		
EHS (HOB) ES-588		*		
EHS (HOB) ES-590		*		
EHS (HOB) ES-596		*		
EHS (HOB) P10-02014		*		
EHS (HOB) P10-01207		*		
EHS (HOB) P10-01285		*		
MVA ES-106-1			*	
MVA ES-107-1			*	
MVA ES-101-1			*	
MVA ES-129-2			*	
MVA TS2			*	
MHS (WOB) ES-528				*
MHS (WOB) ES-535				*
MHS (WOB) ES-553				*
MHS (WOB) ES-566				*
MHS (WOB) ES-584				*
MHS (WOB) ES-618				*
MHS (WOB) ES-538				*
MHS (WOB) ES-577				*
MHS (WOB) ES-602				*
MHS (WOB) ES-603				*
MHS (WOB) ES-103-1				*
MHS (WOB) ES-126-1A				*
MHS (WOB) ES-138-1				*
MHS (WOB) ES-158-1				*
MHS (WOB) ES-168-1				*
MHS (WOB) TS1				*



5. Ergebnisse der 2. SIMCA-Klassifikation
 Signifikanzniveau: 0,1%

	PCA_GS	PCA_EHS	PCA_MVA	PCA_MHS
GS ES-143-2	*			
GS ES-501-A	*			
GS ES-566	*			
GS GM-Muesli	*			
GS P2010-01747-00	*			
GS P2010-01999-00	*			
GS P2010-02078-00	*			
GS P2010-02104-00	*			
GS P2010-02142-00	*			
GS P2010-02413-00	*			
EHS (HOB) ES-018-1		*		
EHS (HOB) ES-063-1		*		
EHS (HOB) ES-500		*		
EHS (HOB) ES-502		*		
EHS (HOB) ES-517		*		
EHS (HOB) ES-561		*		
EHS (HOB) ES-574		*		
EHS (HOB) ES-588		*		
EHS (HOB) ES-590		*		
EHS (HOB) ES-596		*		
EHS (HOB) P10-02014		*		
EHS (HOB) P10-01207		*		
EHS (HOB) P10-01285		*		
MVA ES-106-1			*	
MVA ES-107-1			*	
MVA ES-101-1			*	
MVA ES-129-2			*	
MVA TS2			*	
MHS (WOB) ES-528				*
MHS (WOB) ES-535				*
MHS (WOB) ES-553				*
MHS (WOB) ES-566				*
MHS (WOB) ES-584				*
MHS (WOB) ES-618				*
MHS (WOB) ES-538				*
MHS (WOB) ES-577				*
MHS (WOB) ES-602				*
MHS (WOB) ES-603				*
MHS (WOB) ES-103-1				*
MHS (WOB) ES-126-1A				*
MHS (WOB) ES-138-1				*
MHS (WOB) ES-158-1				*
MHS (WOB) ES-168-1				*
MHS (WOB) TS1				*

Σ **Zusammenfassung**

- Die Spektren der untersuchten Komponentengruppen der GS, EHS, MVA und MHS weisen charakteristische Verläufe auf.
- Klassifikation über gesamten Wellenzahlbereich (4.000 - 400 cm⁻¹) liefert bei [Signifikanzniveau 0,1%] häufig Falschklassifizierungen.
- Relevante Wellenzahlen der Modellbildung existieren und sind auffindbar.
- Berücksichtigung charakteristischer Wellenzahlen bei Modellbildung und Klassifikation minimiert Anzahl Falschklassifizierungen bei gleichem Signifikanzniveau.

Charakterisierung und Identifikation technologener Substrate mit Hilfe von FTIR-Spektroskopie ist möglich.

Technologie / Methodik bietet hohes Maß an bodenkundlichem Potential.