

Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

INRES-Bodenwissenschaften



Bestimmung von organischem Kohlenstoff und C-Pools (POM, BC) in Bodenproben des Intensiv- und Extensivprogramms (Humusmonitoring) mittels konventioneller Techniken und mittels MIRS-PLSR

Abschlussbericht

30. November 2010

Landesamt für Natur,

Umwelt und Verbraucherschutz

Nordrhein-Westfalen



Autoren:

Prof. Dr. Wulf Amelung

PD Dr. Gerhard Welp

Universität Bonn, INRES-Bodenwissenschaften, Nußallee 13, 53115 Bonn

Projektleitung, korrespondierender Autor:

Prof. Dr. Wulf Amelung (wulf.amelung@uni-bonn.de)

Auftraggeber:

LANUV

Landesamt für Natur,

Umwelt und Verbraucherschutz

Nordrhein-Westfalen

Leibnizstraße 10

45659 Recklinghausen

Projektkoordination:

Dr. Andrea Hädicke (Andrea.Haedicke@lanuv.nrw.de)



Das Projekt ist Teil der Anpassungspolitik des Landes Nordrhein-Westfalen und wurde mit Mitteln des Ministeriums für Umwelt und Naturschutz, Landwirtschaft und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen finanziert. Weitere Informationen zum Thema Anpassung an den Klimawandel sowie die Anpassungsstrategie des Landes Nordrhein-Westfalen finden Sie im Internet unter: www.klimawandel.nrw.de

Inhalt

1	Motivation	5
2	Umfang der durchgeführten Untersuchungen	6
2.1	Geplante Leistungen	6
2.2	Abweichungen vom geplanten Messprogramm.....	6
3	Material und Methoden.....	7
3.1	Bestimmung von drei POM-Fraktionen.....	7
3.2	MIR-Spektroskopie	7
3.3	Herkunft der Bodenproben	9
4	Ergebnisse und Diskussion	11
4.1	Verteilung der POM-Fraktionen in Proben des Monitoringprogramms	11
4.1.1	Gesamter organischer Kohlenstoff (Corg) im Oberboden	11
4.1.2	POM in Oberböden	13
4.1.3	Gesamter organischer Kohlenstoff (Corg) im Unterboden	17
4.1.4	POM in Unterböden	18
4.2	Ableitung von Corg- und POM-C-Gehalten aus MIR-Spektren	20
4.2.1	Corg-Ableitung aus MIR-Spektren	20
4.2.2	POM-Ableitung aus MIR-Spektren.....	21
4.2.3	POM-C-Vorhersage für Bodenproben des Extensivprogramms	29
4.3	Ableitung von BC-Gehalten aus MIR-Spektren	31
5	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen.....	33
6	Ausblick	35
7	Literaturquellen.....	37
8	Anhang.....	39

1 Motivation

Die exakte Quantifizierung von Gehalts- oder Vorratsänderungen des organischen Kohlenstoffs ist elementare Voraussetzung, um die Auswirkungen von Klimaveränderungen auf die Quellen- oder Senkenfunktion von Böden für Kohlenstoff und klimarelevante Spurengase abzuschätzen. Da Humusgehalte von Ackerböden jedoch nur sehr langsam auf sich ändernde Rahmenbedingungen (Bewirtschaftung, Klima) reagieren, ist es wichtig, nicht nur den gesamten organischen Kohlenstoff (Corg) zu erfassen, sondern v.a. auch die zeitlichen Dynamik von C-Pools zu quantifizieren, die sensitiv auf Klima- und Nutzungseinflüsse reagieren. Wir halten hierfür den fein- und grobpartikulären Kohlenstoff (POM: *particulate organic matter*) als besonders geeignet (s.a. Christensen, 1996; Amelung et al., 1998; Lobe et al., 2005), denn diese Fraktionen sind sensorischen Messmethoden zugänglich (vgl. Bornemann et al., 2010) und unterliegen keiner witterungsabhängigen Ausbeute wie vermutlich mikrobieller C oder Interaggregat-C. Die POM-Fraktion – mit typischen Umsatzraten im Bereich von ca. 0,5 – 60 Monaten - kann darüber hinaus direkt als Eingabeparameter für C-Simulationsmodelle (RothC u.a.) dienen (Coleman et al., 1997; Skjemstad et al., 2004; Jones et al., 2005).

Die POM-Analyse ist zeit- und kostenintensiv und stellt damit bei sich wiederholenden Beprobungen im Sinne eines Monitoring eine finanzielle Belastung dar. Prinzipiell ist es jedoch möglich, wie für eine Reihe anderer Bodenparameter auch, POM schnell und kostengünstig über mid-infrarotspektroskopische Kenngrößen abzuschätzen (Zimmermann et al., 2007; Pätzold et al., 2008; Bornemann et al., 2010). Vor diesem Hintergrund erschien der Versuch sinnvoll, auch für dieses Probenset parallel zu den konventionellen Analysenverfahren eine POM-Kalibration für die MIR-Spektroskopie zu erarbeiten. Für den künftigen Einsatz von Simulationsmodellen ist als weitere Fraktion noch der sogenannte inerte Kohlenstoff (auch elementarer oder schwarzer Kohlenstoff bzw. Black Carbon genannt) gefragt. Diese Fraktion sollte mittels vorhandener Kalibrationsmodelle (vgl. Bornemann et al., 2008) ebenfalls mittels MIR-Spektroskopie abgeschätzt werden.

2 Umfang der durchgeführten Untersuchungen

2.1 Geplante Leistungen

Folgende Untersuchungen sollten im Rahmen dieses Vorhabens von INRES-Bodenwissenschaften durchgeführt werden:

- 1 Intensivprogramm mit 45 Flächen; zwei Bodenproben pro Fläche (Ober- und Unterboden; Bodenproben werden vom Geologischen Dienst bereit gestellt)
 - 1.1 Bestimmung von zwei POM-Fractionen (53 – 250 µm, 250 – 2000 µm) in 90 Bodenproben
 - 1.2 Aufnahme der MIR-Spektren von 90 Bodenproben
 - 1.3 Erstellung eines PLSR-basierten Modells zur Ableitung von POM-Gehalten aus MIR-Spektren; Ableitung von Black Carbon (BC) mittels vorhandener Kalibration
- 2 Extensivprogramm mit 155 Flächen; je eine Bodenprobe (Proben werden bereitgestellt)
 - 2.1 Bestimmung von zwei POM-Fractionen in ca. 15 Bodenproben, um PLSR-Modell von (1.3) zu überprüfen (notwendig, da die Streubreite von Bodenkennwerten in diesem Probensatz größer sein wird)
 - 2.2 Aufnahme der MIR-Spektren von 155 Bodenproben
 - 2.3 Modellüberprüfung und Ableitung von POM- und BC-Gehalten aus MIR-Spektren

2.2 Abweichungen vom geplanten Messprogramm

Da sich im zeitlich parallel laufenden SFB-TR32-Projekt eine Differenzierung der partikulären organischen Substanz in drei Fraktionen als sinnvoll erwies (Bornemann et al., 2010), wurde abweichend vom ursprünglichen Angebot eine dritte Fraktion abgeseibt und mit analysiert. Die Bestimmung dieser Fein-POM-Fraktion (20 – 53 µm) ist wegen der geringen Sieb-Maschenweite sehr arbeitsaufwändig; die unten aufgeführten Ergebnisse lassen den zusätzlichen Aufwand jedoch als lohnend erscheinen.

3 Material und Methoden

3.1 Bestimmung von drei POM-Fractionen

Die POM-Fraktionierung wurde in Anlehnung an Christensen (1992) sowie Amelung und Zech (1999) mit Hilfe einer Ultraschalldispersierung durchgeführt. In Abb. 1 ist der Ablauf des Verfahrens graphisch dargestellt. Nach einer ersten, leichten Ultraschallbehandlung (60 J ml^{-1}), die noch kein Aufbrechen von Mikroaggregaten bewirkt (Kölbl et al., 2005), wird die Grob-POM-Fraktion (POM1: $2000\text{--}250 \mu\text{m}$) durch eine Nass-Siebung gewonnen. Der abfiltrierte Rückstand wird ein zweites Mal mit Ultraschall belegt (240 J ml^{-1}). Anschließend werden mittels Siebung die Mittel-POM-Fraktion (POM2: $250\text{--}53 \mu\text{m}$) und die Fein-POM-Fraktion (POM3: $53\text{--}20 \mu\text{m}$) gewonnen. Die abgeseibten Fraktionen werden bei $40 \text{ }^\circ\text{C}$ getrocknet. Der C_{tot} -Gehalt in diesen Proben wird mittels Elementaranalyse ermittelt (ISO10694, 1995; Bestimmungsgrenze $0,1 \text{ } \%$ C); eventuell vorhandene Carbonate werden gasvolumetrisch nach Scheibler analysiert (Bestimmungsgrenze $0,1 \text{ } \%$ CaCO_3). Der Corg-Gehalt ergibt sich dann durch Abzug des anorganischen Kohlenstoffs von C_{tot} . Die Qualität der im INRES-Bodenwissenschaften durchgeführten C-Analysen konnte im Rahmen eines Ringversuchs bestätigt werden.

3.2 MIR-Spektroskopie

Für die Aufnahme der MIR-Spektren wurde ein FT-IR Spektrometer (Modell Tensor 27; Bruker) verwendet. Die Probenzufuhr erfolgte mit einem Autosampler (HTS-XT; Bruker). Das Spektrometer arbeitet mit diffuser Reflektion (DRIFT-MIRS). Eine Lichtquelle sendet Licht, also elektromagnetische Strahlung, im mittleren infraroten Bereich zwischen 8000 und 400 cm^{-1} ($1250\text{--}16700 \text{ nm}$) mit einer Auflösung von 4 cm^{-1} , das auf die Probe trifft. Dieses regt die Schwingungen der Bindungen in Molekülen an, wodurch Energie absorbiert wird. Das Licht wird von der Probe diffus reflektiert, durch einen Spiegel gebündelt und mit einem durch flüssigen Stickstoff gekühlten Hg-Cd-Te-Detektor erfasst. Die Absorption kann in einem Spektrum aufgezeichnet werden. Differenzen beruhen darauf, dass unterschiedliche Bindungen spezifische Schwingungen und damit eine für sie typische Absorption aufweisen. Zur Veranschaulichung sind in Abb. 2 die Mittelwertspektren von Bodenproben aus den drei untersuchten Naturräumen dargestellt. Augenfällig ist dabei, dass bei der blauen Linie (= Westfälische Bucht) kohlenstoffbürtige Signale deutlich stärker hervortreten (z.B. Peaks bei 1677 , 2850 und 2920 cm^{-1}), während umgekehrt bei den Mittelwert-

spektren der Böden aus dem Niederrheinischen Tiefland (grüne Linie) und der Rheinischen Bucht (rote Linie) Signale von Tonmineralen (z.B. bei 3625 und 3700 cm^{-1}) ein größeres Gewicht haben.

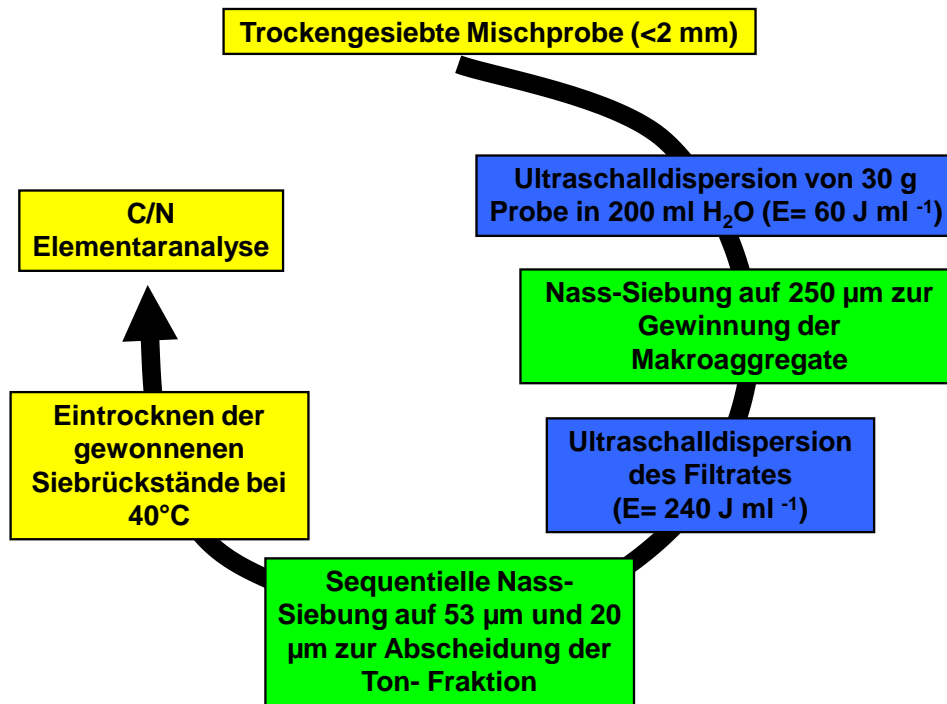


Abb. 1: Gewinnung von drei POM-Fractionen mittels Ultraschalldispersion

Von jeder Probe wurden ca. 20 mg gemahlener Boden auf eine Mikrotiterplatte aufgebracht und dort mit einem Stempel verdichtet, so dass eine ebene und glatte Oberfläche entstand. Jede Probe wurde mit fünf Wiederholungen angelegt, die jeweils 120-mal gescannt wurden, um Abweichungen in der Erstellung der Spektren zu minimieren.

Die aufgenommenen Spektren werden zunächst automatisch um den Wasserdampf und das natürlich in der Luft enthaltene Kohlenstoffdioxid (CO₂) korrigiert und anschließend automatisch auf Abweichungen zu den Wiederholungen untersucht. Die Spektrenanalyse erfolgt mit der Software OPUS QUANT (© Bruker) mit der Partial Least Square Regression-Methode (PLSR) unter Nutzung des PLS 1-Algorithmus nach Martens und Naes (1989).

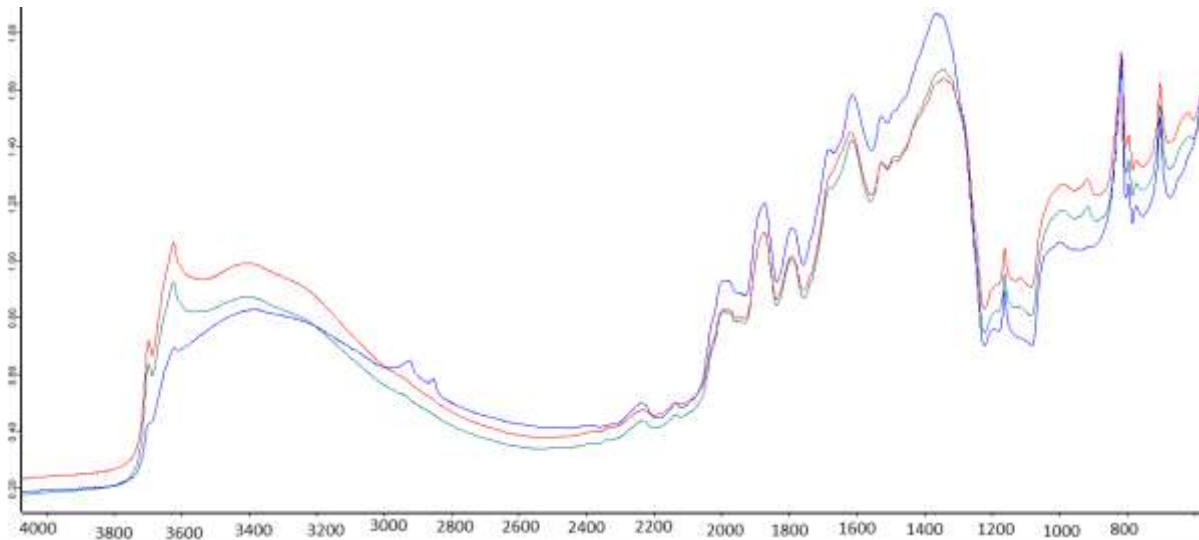


Abb. 2: Mittelwertspektren für Bodenproben aus den Naturräumen Niederrheinisches Tiefland (grüne Linie), Rheinische Bucht (rote Linie) und Westfälische Bucht (blaue Linie); x-Achse: Wellenzahl (cm^{-1}); y-Achse: Absorptionseinheiten

Das Programm zerlegt die Spektralmatrix X und die Ground Truth-Matrix Y in mehrere Variablen, Loadings genannt. Hierbei wird automatisch die Kovarianz zwischen den Ergebnissen aus der Spektrenanalyse und den konventionell ermittelten Laboraten gebildet und maximiert. Aufgrund des PLS 1-Algorithmus wird der ersten Variablen die größte Vorhersagekraft zugeordnet. Die darauf folgenden Variablen erklären einen immer kleineren Teil des Modells, wobei der Anteil jeder einzelnen Variable sukzessive abnimmt. Der Vorgang wird solange fortgesetzt, bis keine weitere Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit festzustellen ist. Die einzelnen Variablen können mit Hilfe der ihnen zugeordneten Multiplikatoren zum Ursprungsspektrum zusammengesetzt werden. Aus den Spektren kann nun eine Aussage über den Gehalt einer bestimmten Komponente gebildet werden, indem eine Regression aus Vorhersage und klassischer Analyse erstellt wird, sodass die Variablen, die die größte Aussagegenauigkeit besitzen, ausgewählt werden können.

3.3 Herkunft der Bodenproben

Für eine Bewertung der Ergebnisse ist es sinnvoll, die Herkunft der Bodenproben regional zu differenzieren. Abb. 3 ist zu entnehmen, dass sich die Proben des – hier im Vordergrund stehenden – Intensivprogramms auf das Niederrheinische Tiefland

(„NT“), die Rheinische Bucht („RB“) und die Westfälische Bucht („WB“) konzentrieren. Folgende Stichworte sind für die nachfolgende Diskussion von Bedeutung:

- Niederrheinisches Tiefland: (Braunerde-, Pseudogley-)Parabraunerden aus Löß
- Rheinische Bucht: Braunerden und Parabraunerden aus Löß
- Westfälische Bucht: (Gley-)Podsole aus Sand; Veredlungsbetriebe (s. hierzu Abb. 4)

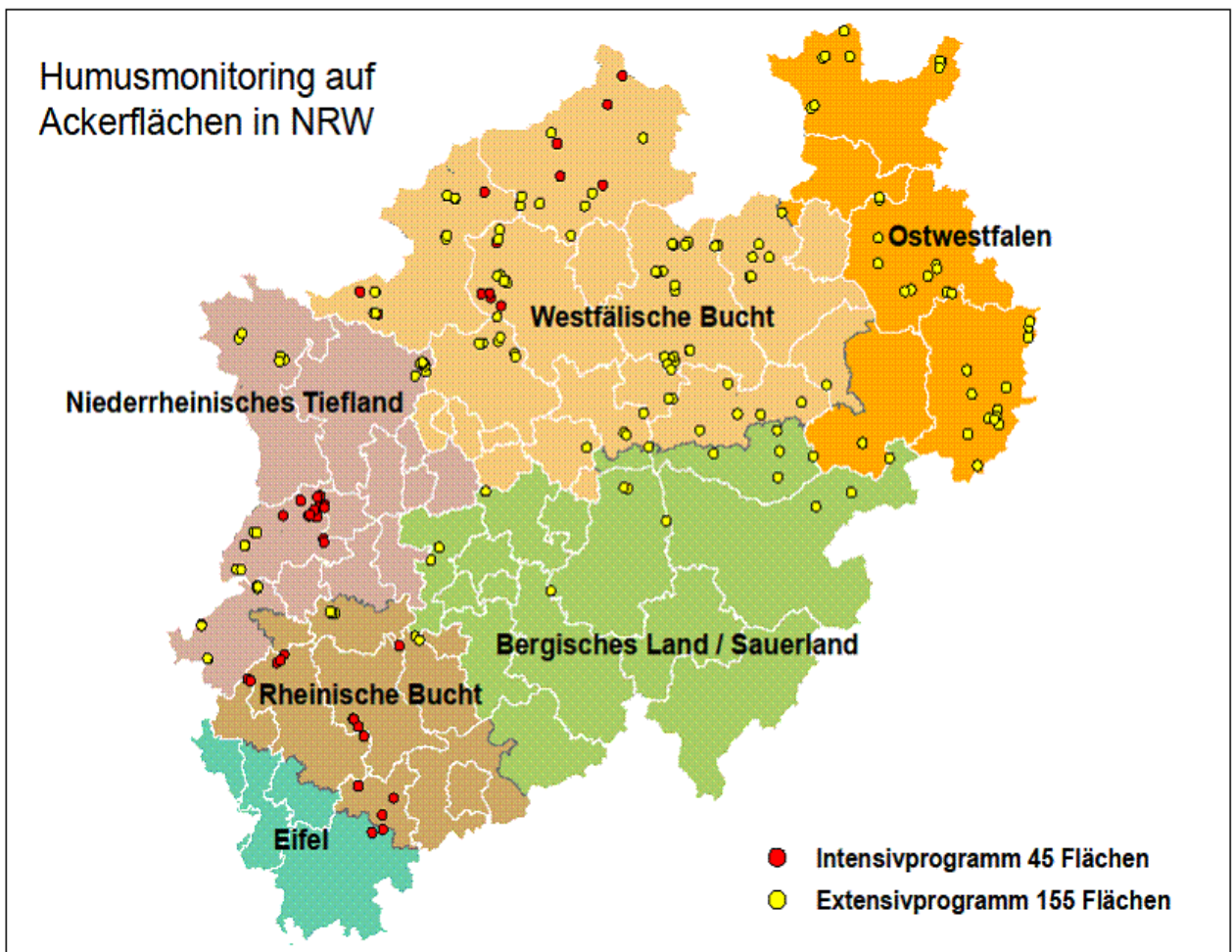


Abb. 3: Geographische Lage der Entnahmestandorte

4 Ergebnisse und Diskussion

4.1 Verteilung der POM-Fractionen in Proben des Monitoringprogramms

4.1.1 Gesamter organischer Kohlenstoff (Corg) im Oberboden

Die Corg-Gehalte der Oberböden bewegen sich in der Rheinischen Bucht und im Niederrheinischen Tiefland auf einem vergleichbaren Niveau; mit 1,13 % (RB) und 1,15 % (NT) unterscheiden sich die mittleren Corg-Werte nicht signifikant. Ein Vergleich der Rahmenbedingungen, die Einfluss auf den Humusgehalt von Ackerböden nehmen, ergibt folgendes Bild:

- Das Ausgangsmaterial der Böden (überwiegend Löß) und die Viehdichte ($< 1 \text{ GE ha}^{-1}$) sind in beiden Regionen vergleichbar.
- Die klimatische Wasserbilanz weist im NT höhere Werte auf (meist 150-250 mm) als in der RB (meist 25-150 mm). Da nach Wessolek und Schmitt (2005) an trockeneren Standorten weniger Humus gefunden wird, würde dieses – ceteris paribus – für niedrigere Corg-Werte in der RB sprechen. Allerdings hat die klimatische Wasserbilanz bei schluffreichen Böden wahrscheinlich weniger Einfluss auf den Humusstatus, da diese wegen ihres hohen Wasserspeichervermögens auch in Trockenjahren eine hohe Biomasseproduktion aufweisen können.
- Die im NT gelegenen Testflächen sind in den vergangenen sechs Jahren etwa doppelt so häufig organisch gedüngt worden wie die Flächen in der RB (Jacobs, pers. Mitteilung).
- Die Fruchtfolge der RB-Flächen ist reicher an Getreide (56 %) als die Fruchtfolge der NT-Flächen (36 %), die gleichzeitig einen signifikanten Anteil an Gemüsebau (17 %) aufweisen (Jacobs, pers. Mitteilung).

Im vorliegenden Fall gleichen sich offensichtlich die z. T. gegenläufigen Einflüsse aus und bedingen einen vergleichbaren Humusstatus.

In der Westfälischen Bucht („Münsterland“, WB) wurden primär sandige Ackerböden beprobt, die bodentypologisch als Podsole und Gley-Podsole anzusprechen sind. Obwohl diese Böden substratbedingt weniger Humus speichern können als lehmig-tonige Böden, gibt es mehrere mögliche Ursachen dafür, dass in der WB der Humuslevel annähernd doppelt so hoch ist wie in den beiden anderen Regionen:

- Die hohe Viehdichte in dieser Region (Abb. 4) bedingt ein höheres Niveau an organischer Düngung (insbesondere Gülle). Daneben spielen in der Westfälischen Bucht besondere Bewirtschaftungsformen mit tiefreichender Bearbeitung sowie der hohe Anteil von Wirtschaftsdüngern einschließlich früher beigemischem Hofkehricht und Aschen sowie Plaggenwirtschaft eine stärkere Rolle als in den anderen Regionen (Milbert, pers. Mitteilung).
- Die Fruchtfolge ist in der WB im Vergleich zu RB und NT reicher an Getreide und ärmer an Hackfrüchten (Jacobs, pers. Mitteilung).
- Untersuchungen an Waldböden zeigen, dass die Podsole und Gley-Podsole im Münsterland aufgrund ihrer spezifischen Pedogenese höhere Humusvorräte aufweisen als die Böden in Waldgebieten des durch Löss geprägten Rheinlandes (Steedte-Gaudich, pers. Mitteilung): sowohl Podsolierung als auch Vergleyung beinhalten einen gehemmten Humusabbau. Inwieweit die Ackerböden in der WB trotz z. T. sehr langer Ackernutzung noch von diesen höheren Vorräten zehren, ist nicht quantifizierbar.

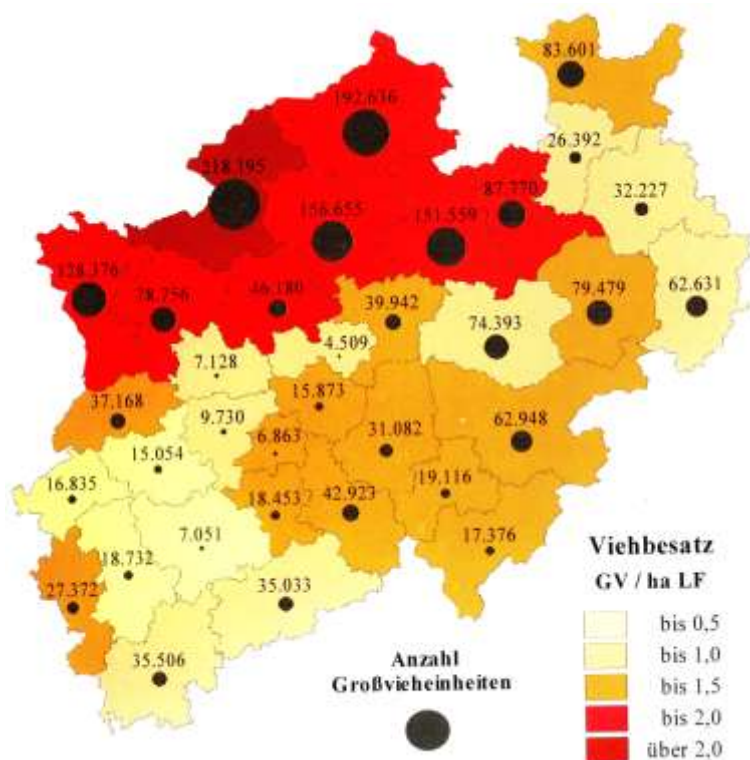


Abb. 4: Anzahl der Großvieheinheiten pro ha landwirtschaftlicher Nutzfläche in NRW (Quelle: Zerger und Haas, 2003)

Eine von INRES-Bodenwissenschaften erarbeitete Studie zur zeitlichen Entwicklung von Humusgehalten in Ackerböden von NRW, bei der ca. 7000 Datensätze des FIS-StoBo ausgewertet wurden, kommt für den Zeitraum von 2000 – 2003 zu regional differenzierten Corg-Gehalten, die sich in fast idealer Weise mit den hier ermittelten Werten decken (Preger et al., 2006). Dieses kann als indirekte Bestätigung für die Qualität und Repräsentanz der Standortauswahl im Humusmonitoringprogramm gewertet werden. Auch eine Auswertung der von der LUFA-NRW durchgeführten Humusanalysen von Ackerböden bestätigt die hier gefundene regionale Differenzierung (Jacobs, pers. Mitteilung).

4.1.2 POM in Oberböden

Die in der partikulären organischen Substanz gebundenen C-Mengen (POM-C in g C / 100 g Boden) bzw. Anteile (POM-C/Corg) liegen im mittleren bis oberen Bereich dessen, was in der Literatur für Ackerböden angegeben wird (Skjemstad et al., 2004; Zimmermann et al., 2007).

Wie bei den Gesamtgehalten an organischem Kohlenstoff (Corg) sind auch bei den drei untersuchten POM-Fractionen die Gehalte und die Anteile bei den Proben aus der RB und dem NT sehr ähnlich (Tab. 1, Abb. 5, 6). In beiden Regionen ergibt die Summe der drei Fraktionen einen Anteil von ca. 25 % an Corg. Dabei dominiert die POM3-C-Fraktion mit 12,8 (RB) und 12,1 % (NT) (Tab. 1). Die POM2-C-Fraktion bildet das Schlusslicht (Anteile RB: 4,9 %, NT: 5,5 %) und POM1-C nimmt eine Mittelstellung ein (Anteile RB: 7,4 %, NT: 8,5 %).

Die POM-Fraktionierung der Böden aus der WB ergibt ein völlig anderes Bild. In den Ackerböden dieser Region ist es primär zu einer C-Anreicherung in der POM1- und POM2-Fraktion gekommen (Tab. 1, Abb. 5, 6). Gegenüber den beiden anderen Regionen ist in der WB die C-Menge in der POM1- und POM2-Fraktion im Mittel um den Faktor 2,2 bzw. 3,4 erhöht. POM3 als stabilste partikuläre Fraktion profitiert nicht von dem stark erhöhten C-Niveau: Der Gehalt an POM3-C (Ø 0,12 %) ist sogar niedriger als in den anderen Regionen (Ø 0,14 %); der Anteil von POM3-C an Corg (WB: 6,1 %) ist nur halb so hoch wie in den anderen Regionen (RB: 12,6 %, NT: 12,1 %). Das in der RB und im NT gültige Muster der POM-Verteilung (3 > 1 > 2) stellt sich als Konsequenz in der WB ganz anders dar: 2 ≥ 1 > 3.

Die regional differenzierten Ergebnisse lassen erkennen, dass – zumindest für die Fraktionen 1 und 2 – mit steigenden Corg-Gehalten auch die C-Mengen in diesen

Größenfraktionen ansteigen. Ein direkter überregionaler Vergleich von Corg- und POM-C-Werten bestätigt, dass die POM-C-Mengen in den Fraktionen 1 und 2 hoch signifikant und positiv mit den Corg-Gehalten korrelieren (Abb. 7). Für die Fein-POM-Fraktion dagegen (POM3-C) ist diese positive Beziehung nicht gegeben: bei Corg-Gehalten bis 2 % schwanken den POM3-C-Gehalte unabhängig von Corg zwischen etwa 0,05 und 0,2 % (eine Probe 0,3 %) mit einem Schwerpunkt um 0,15 %; dieses POM-C-Niveau um 0,15 % wird auch bei Corg-Gehalten > 2 % nicht wesentlich überschritten.

Tab. 1: Corg- und POM-C-Gehalte sowie POM-C-Anteile an Corg in 45 Ackerböden aus verschiedenen Regionen in NRW (Oberboden) (POM-C: g C in einer POM-Größenfraktion pro 100 g Boden bzw. %; POM-C/Corg: Anteil der POM-C-Menge in einer Größenfraktion bezogen auf den gesamten organischen Kohlenstoff) (25. – 75. Perzentil in Klammern)

		Rhein. Bucht	Ndrh. Tiefland	Westf. Bucht	alle Proben
Corg	(%)	1,13	1,15	2,02	1,43
	(%)	(1,06 - 1,21)	(1,04 - 1,26)	(1,37 - 2,42)	(0,91 - 1,52)
POM1-C	(%)	0,086	0,102	0,206	0,131
	(%)	(0,061 - 0,090)	(0,071 - 0,099)	(0,125 - 0,257)	(0,072 - 0,157)
POM2-C	(%)	0,057	0,066	0,209	0,11
	(%)	(0,046 - 0,062)	(0,051 - 0,063)	(0,148 - 0,271)	0,054 - 0,172)
POM3-C	(%)	0,145	0,139	0,118	0,134
	(%)	(0,104 - 0,169)	(0,122 - 0,156)	(0,097 - 0,142)	(0,109 - 0,151)
POM1-C/Corg	(%)	7,4	8,5	10,5	8,8
POM2-C/Corg	(%)	4,9	5,5	10,7	7,1
POM3-C/Corg	(%)	12,6	12,1	6,1	10,4

Eine Ursache für das abweichende Verhalten von POM3-C könnte eine Kohlenstoff-Sättigung dieser Fraktion sein. Untersuchungen von Gulde et al. (2008) an Bodenproben aus Dauerdüngungsversuchen zeigten an, dass bei stark erhöhter organischer Düngung kleinere (= stabilere) POM-Fraktionen nicht mehr zusätzlich C aufnahmen und damit eine Sättigung anzeigten, während die grobe POM-Fraktion weiterhin C sequestrierte (s.a. Bornemann et al., 2010). Übertragen auf die Böden der WB lässt sich vermuten, dass die sandigen, humusreichen Ackerböden offensichtlich durch einen Prozess der hierarchischen Sättigung geprägt sind. Die Fein-POM-Fraktion dieser Böden kann substratbedingt nur etwa 1,5 g C kg⁻¹ Boden (bzw. 0,15 %) speichern. Dementsprechend steigen bei hohen C-Einträgen die C-Mengen in den gröberen POM-Fraktionen überproportional an. Allerdings sind diese Fraktionen labiler und weisen schnellere Umsatzraten auf als POM3. Dieses hat zur Folge, dass

die C-Speicherung in groben POM-Fractionen weniger dauerhaft ist als die Sequestrierung in stabileren Fraktionen.

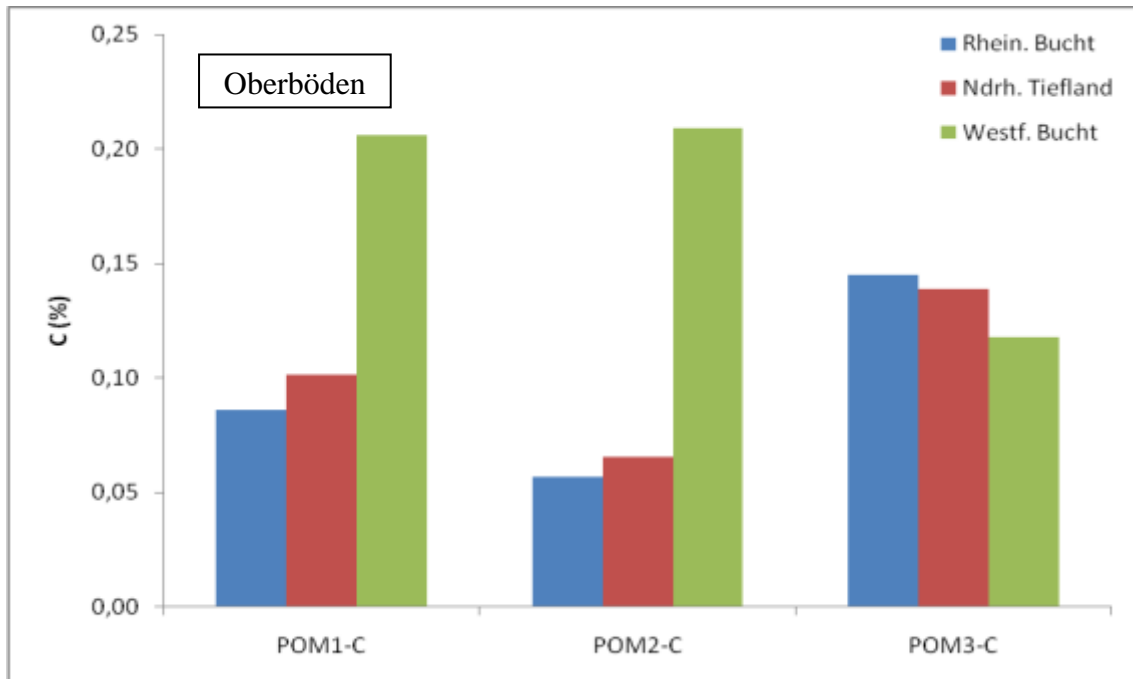


Abb. 5: Mittlere POM-C-Gehalte (g C/100 g Boden) der verschiedenen Größenfraktionen der partikulären organischen Substanz in Oberbodenproben von Ackerböden aus verschiedenen Regionen in NRW (POM1-C: 2000-250 µm; POM2-C: 250-53 µm; POM3-C: 53-20 µm)

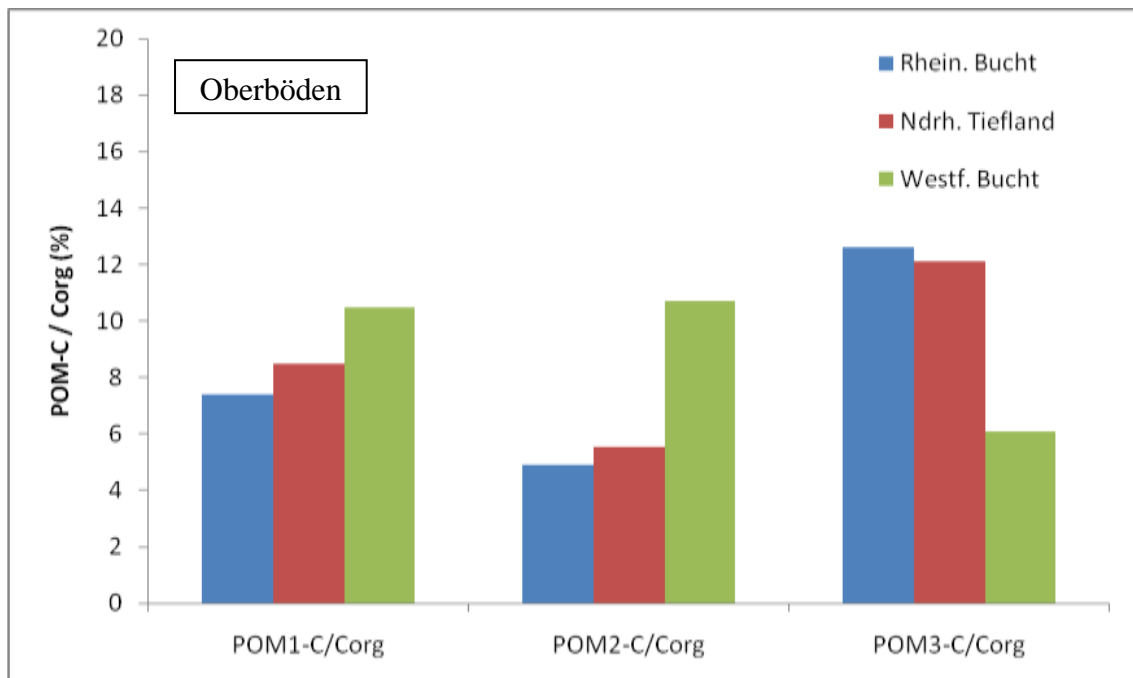


Abb. 6: Mittlere prozentuale Anteile des partikulären organischen Kohlenstoffs (POM-C) am gesamten organischen Kohlenstoff (Corg) in Oberbodenproben von Ackerböden aus verschiedenen Regionen in NRW (POM1-C: 2000-250 µm; POM2-C: 250-53 µm; POM3-C: 53-20 µm)

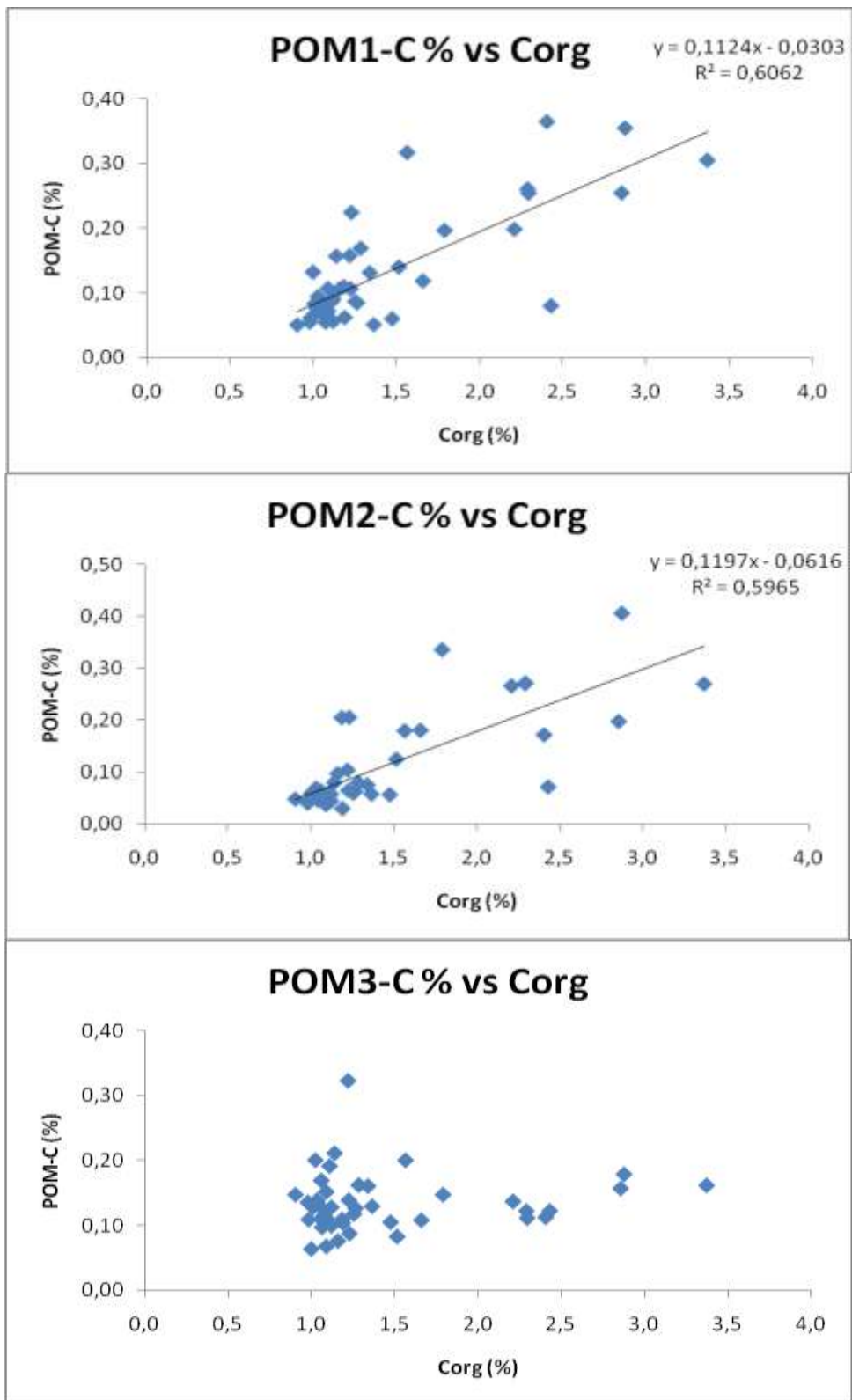


Abb. 7: Beziehungen zwischen den Gesamtgehalten an organischem Kohlenstoff (Corg) und den POM-C-Gehalten (POM-C: g C in einer POM-Größenfraktion pro 100 g Boden bzw. %)

Da POM1 und POM2 sensitiv auf Klimaänderungen reagieren (Amelung et al., 1998), sollten v.a. diese Fraktionen künftig im Monitoringprogramm untersucht werden. Und weil die WB höhere Anteile an Kohlenstoff in diesen beiden Fraktionen aufweist als die RB und das NT, ist wahrscheinlich, dass der Einfluss von Klimaänderungen an solchen Standorten schneller erkannt werden kann als auf den Standorten der anderen Regionen.

4.1.3 Gesamter organischer Kohlenstoff (Corg) im Unterboden

Die Corg-Gehalte nehmen unterhalb des Pflughorizontes deutlich ab. Wie beim Oberboden sind die mittleren Gehalte in den Regionen RB (Corg 0,45 %) und NT (0,46 %) nahezu identisch, während sich in der WB auch im Unterboden signifikant mehr Corg findet (Ø 0,75 %; Tab. 2). Diese höheren Gehalte im Unterboden müssen nicht nutzungsbedingt sein, sondern könnten wie oben ausgeführt auch auf Prozesse der Vergleyung (= gehemmter Humusabbau) und Podsolierung (= Humusverlagerung) zurückgeführt werden. Grundsätzlich bestätigen die gemessenen Gehalte andere Untersuchungen, nach denen organischer Kohlenstoff im Unterboden signifikant zur C-Speicherung von Böden beiträgt.

Tab. 2: Corg- und POM-C-Gehalte sowie POM-C-Anteile an Corg in 45 Ackerböden aus verschiedenen Regionen in NRW (Unterboden) (POM-C: g C in einer POM-Größenfraktion pro 100 g Boden bzw. %; POM-C/Corg: Anteil der POM-C-Menge in einer Größenfraktion bezogen auf den gesamten organischen Kohlenstoff) (25. – 75. Perzentil in Klammern)

		Rhein. Bucht	Ndrh. Tiefland	Westf. Bucht	alle Proben
Corg	(%)	0,45	0,46	0,77	0,57
	(%)	(0,39 - 0,49)	(0,42 - 0,51)	(0,28 - 1,02)	(0,38 - 0,56)
POM1-C	(%)	0,022	0,028	0,108	0,053
	(%)	(0,010 - 0,028)	(0,019 - 0,037)	(0,034 - 0,138)	(0,019 - 0,043)
POM2-C	(%)	0,018	0,023	0,094	0,045
	(%)	(0,012 - 0,021)	(0,016 - 0,029)	(0,052 - 0,145)	(0,014 - 0,050)
POM3-C	(%)	0,038	0,044	0,031	0,037
	(%)	(0,034 - 0,042)	(0,042 - 0,046)	(0,014 - 0,041)	(0,034 - 0,044)
POM1-C/Corg	(%)	4,3	6,2	18,6	9,7
POM2-C/Corg	(%)	3,6	5,1	17	8,5
POM3-C/Corg	(%)	8,3	9,9	4,4	7,5

Trotz des unterschiedlichen Humuslevels in den Oberböden ist die relative Abnahme zum Unterboden hin in den drei Regionen sehr einheitlich. Setzt man den Corg-

Gehalt des Oberbodens gleich 100 %, so ergeben sich für die Schicht bis 60 cm relative Werte von 37, 40 und 38 % (RB, NT, WB).

4.1.4 POM in Unterböden

Da die partikuläre organische Substanz als labiles Übergangsstadium gilt, das von frisch eingetragenen Streustoffen bis zu mikrobiell gebildeten Umbauprodukten reicht, können nach gegenwärtigem Kenntnisstand folgende Ergebnisse für die Verteilung von POM im Bodenkörper erwartet werden:

- der Oberboden ist die primäre Bildungsstätte von POM
- eine POM-Bildung im Unterboden ist möglich, wenn z.B. abgestorbene Pflanzenwurzeln humifiziert werden
- eine Verlagerung von POM aus dem Ap-Horizont in den Unterboden ist wahrscheinlich von untergeordneter Bedeutung
- der Anteil von POM-C an Corg ist deshalb im Unterboden deutlich geringer als im Oberboden; dieses sollte insbesondere für die labileren POM-Fractionen ($1 > 2$) gelten.

Wie erwartet sind die POM-C-Gehalte des Unterbodens in allen untersuchten Proben gegenüber dem Ap-Horizont erniedrigt. Der Gradient der Abnahme ist jedoch je nach POM-Fraktion und regionalspezifisch variabel (Abb. 8, 9; Tab. 2) und in einigen Fällen deutlich geringer als ursprünglich angenommen.

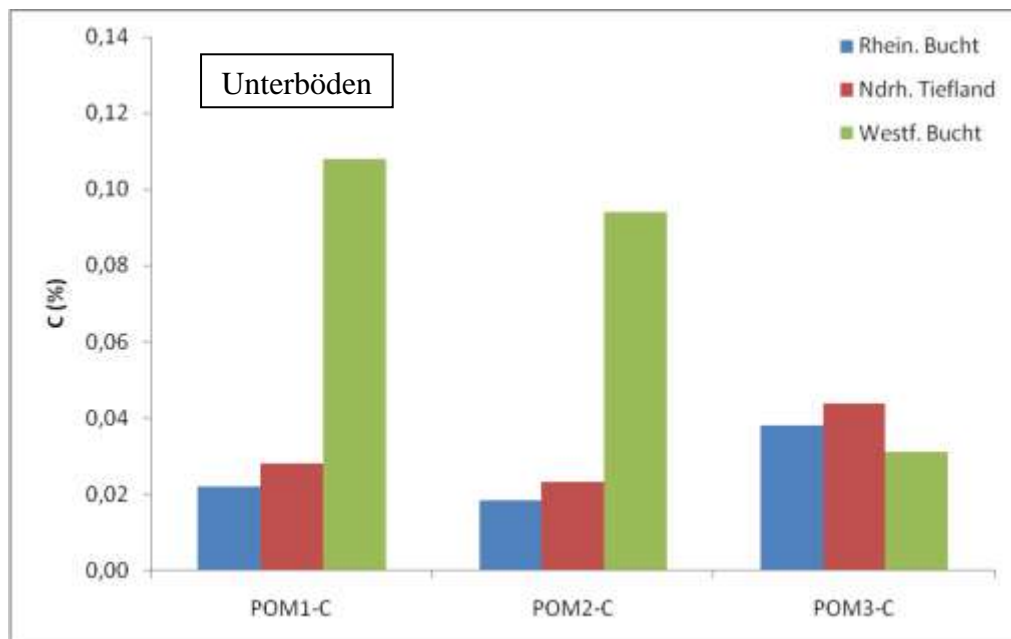


Abb. 8: Mittlere POM-C-Gehalte (g C/100 g Boden) der verschiedenen Größenfraktionen der partikulären organischen Substanz in Unterbodenproben von Ackerböden aus verschiedenen Regionen in NRW (POM1-C: 2000-250 µm; POM2-C: 250-53 µm; POM3-C: 53-20 µm)

In den Regionen RB und NT ergibt eine Aufsummierung der POM-C-Anteile am gesamten organischen Kohlenstoff des Unterbodens 16 bzw. 21 % und damit einen niedrigeren Anteil als im Oberboden ($\bar{\varnothing}$ 25 %). Wenn die aufsummierten POM-C-Gehalte im Oberboden als Referenz gleich 100 % gesetzt werden, finden sich im Unterboden prozentuale Anteile von 27 (RB) und 31 % (NT), d.h., im Unterboden gehen die POM-C-Gehalte auf etwa ein Viertel bis ein Drittel zurück.

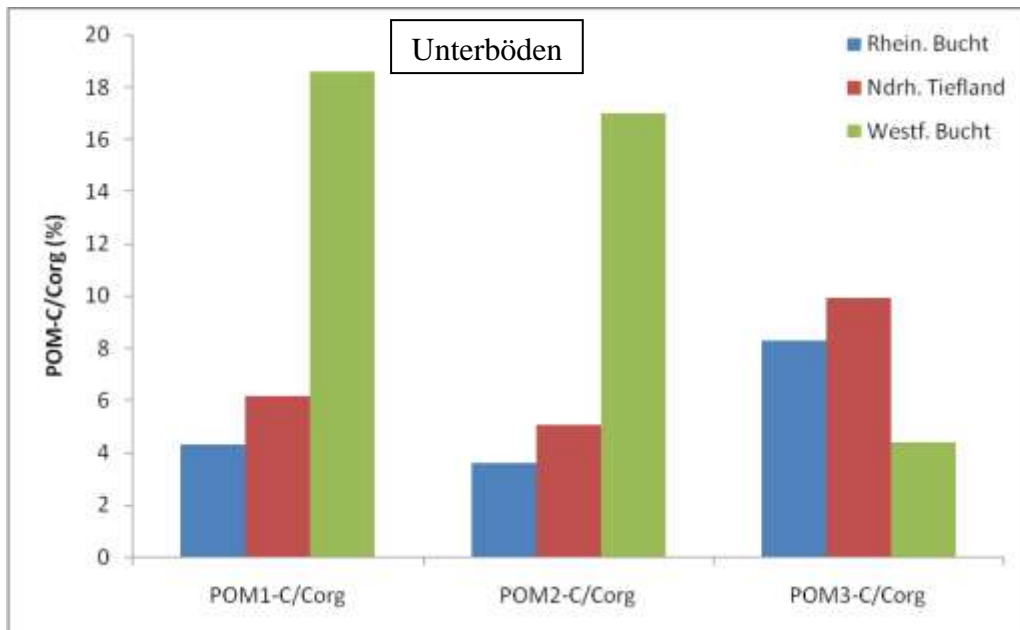


Abb. 9: Mittlere prozentuale Anteile des partikulären organischen Kohlenstoffs am gesamten organischen Kohlenstoff (Corg) in Unterbodenproben von Ackerböden aus verschiedenen Regionen in NRW (POM1-C: 2000-250 µm; POM2-C: 250-53 µm; POM3-C: 53-20 µm)

Die Proben aus der WB ergeben wiederum ein abweichendes Bild. Die POM1-C- und POM2-C-Gehalte im Unterboden erreichen hier 52 bzw. 45 % der Oberbodenwerte; nur bei POM3-C fällt der Gehalt – ähnlich wie in den Regionen RB und NT – auf etwa ein Viertel der POM3-Gehalte zurück, wie man sie im Oberboden findet. Noch drastischer wird das divergente Verhalten von POM-C1 und POM2-C in den Unterböden aus der WB sichtbar, wenn die POM-C-Anteile an Corg betrachtet werden (Abb. 6 und 8, Tab. 1 und 2). Diese erreichen mit 18,6 und 17,0 Prozentpunkten sehr viel höhere Anteile als im Oberboden. Damit sind die labileren POM-Fractionen in der WB entgegen der Erwartung (s. o.) im Unterboden anteilig besonders stark vertreten. Diese höheren POM-Gehalte im Unterboden könnten auf höhere Einträge durch Wurzelstreu bzw. bessere konservierende Bedingungen für die C-Speicherung im Unterboden (s.o.) zurückführbar sein. Dennoch ist das Ergebnis bemerkenswert, da

in der Westfälischen Bucht stärker als in den anderen Regionen durch Güllegaben ein besonders großer Teil des Kohlenstoffs *von oben* eingetragen wird, während in den beiden anderen Regionen ein größerer Anteil des neugebildeten Streukohlenstoffs *in situ* aus abgestorbenen Pflanzenwurzeln hervorgeht. Da vergleichbare Untersuchungen nicht bekannt sind, erscheint es den Autoren als sehr spannend, die spezifische Dynamik der partikulären organischen Substanz unter den besonderen Boden- und Managementbedingungen in der Westfälischen Bucht über die Zeit weiter zu verfolgen.

4.2 Ableitung von Corg- und POM-C-Gehalten aus MIR-Spektren

4.2.1 Corg-Ableitung aus MIR-Spektren

Für künftige Monitoringstudien ist es hilfreich, schnelle Screeningverfahren zur genauen Erfassung verschiedener Bodenkennwerte einzusetzen. Wie in der Einleitung ausgeführt, erarbeiteten wir hierzu Kalibrationsmodelle für die MIR-Spektroskopie. In einem ersten Ansatz wurde für die Gesamtgehalte an organischem Kohlenstoff ein Kalibrationsmodell erstellt. Dabei wurden die Proben aus dem Ap-Horizont und aus dem Unterboden gemeinsam verrechnet. Wie aus Abb. 10 ersichtlich ist, konnte eine sehr gute Anpassung realisiert werden ($R^2 = 0,96$).

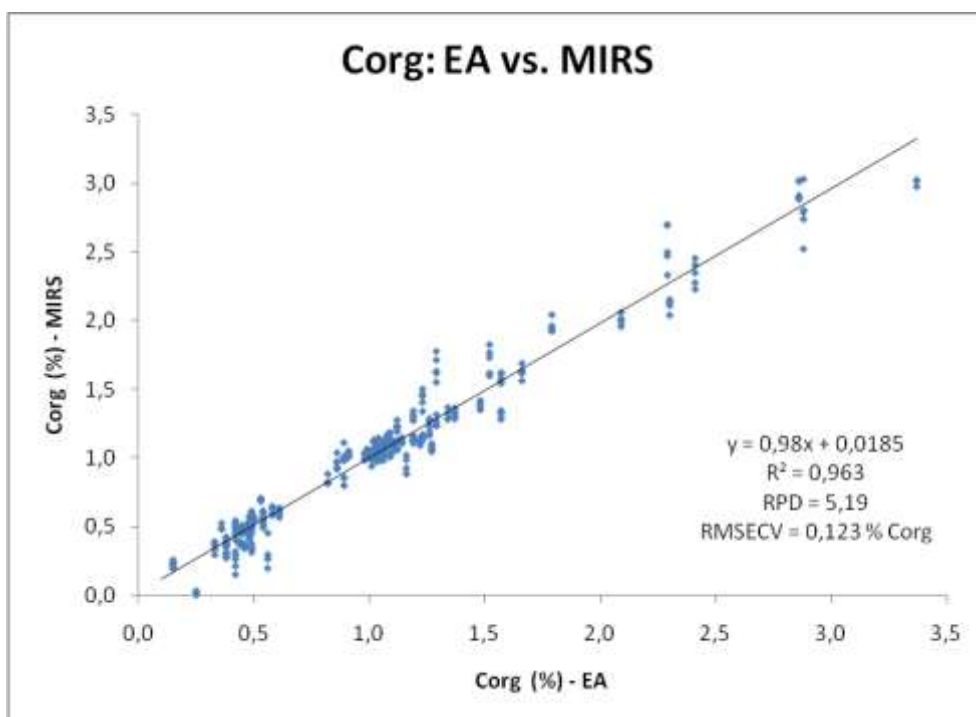


Abb. 10: Beziehung zwischen den Corg-Gehalten, die mittels Elementaranalyse bestimmt wurden (EA), und Corg-Gehalten, die über MIR-Spektroskopie ermittelt wurden. Basis: Bodenproben des Intensivprogramms.

Ein mittlerer Vorhersagefehler (RMSECV, root mean square error of cross validation) von 0,123 % Corg belegt, dass die Güte der MIR-Werte mit der Präzision der Elementaranalyse vergleichbar ist. Der RPD-Wert (ratio of performance to deviation; Quotient aus Standardabweichung der Referenzwerte und mittlerem Vorhersagefehler der MIR-Vorhersagewerte) von 5,19 spricht für eine exzellente Qualität des Modells. In der entsprechenden Fachliteratur (z. B. Chang und Laird, 2002) wird üblicherweise bei $RPD > 2$ von einer genauen („accurate“) Vorhersage gesprochen, während $RPD < 1,4$ eine ungenügende Vorhersage kennzeichnen. RPD-Werte zwischen 1,4 und 2 bilden einen Übergangsbereich.

Wenn alle Proben des Intensiv- und Extensivprogramms gemeinsam für eine Kalibration herangezogen werden, ergibt sich ein Modell ähnlicher Qualität ($R^2 = 0,950$; $RMSECV = 0,119$; $RPD = 4,46$). Dieses erweiterte Modell kann die Corg-Gehalte der Proben des Extensivprogramms allerdings besser vorhersagen als das Modell, das nur auf den Proben des Intensivprogramms basiert (s. Tab. 8 im Anhang).

4.2.2 POM-Ableitung aus MIR-Spektren

Im Vergleich zum Gesamtgehalt an organischem Kohlenstoff ist die Ableitung von POM-Kennwerten aus MIR-Spektren deutlich anspruchsvoller, weil hierbei der Versuch unternommen wird, aus dem MIR-Spektrum und damit der chemischen Signatur einer nicht fraktionierten Bodenprobe (< 2 mm gesiebt und gemahlen; s. Kap. 3) auf die Kohlenstoffverteilung in verschiedenen physikalisch isolierten, operational definierten POM-Größen zu schließen. *Operational* bedeutet hierbei, dass durch Siebung in Kombination mit Ultraschalldispersion drei Größenfraktionen gewonnen werden, die jeweils zu wechselnden Anteilen aus mineralischer und organischer Substanz bestehen. Die C-Elementaranalyse der abgeseibten Fraktionen gibt dann Aufschluss über den C-Gehalt in den Größenfraktionen. Aus diesen Analysenwerten lassen sich verschiedene POM-Kennwerte ableiten, die unterschiedliche Dimensionen haben und die sich mit unterschiedlicher Qualität aus MIR-Spektren ableiten lassen:

- (1) **C in POM1 (2, 3)**: C-Gehalt in einer POM-Größenfraktion. Dieser Wert gibt an, wie viel Kohlenstoff in der entsprechenden Größenfraktion gespeichert wird. Dimension: % bzw. g C / 100 g POM-Größenfraktion. Der C-Gehalt in einer POM-Fraktion kann deutlich unter wie auch über dem Corg-Gehalt des Gesamtbodens liegen (s. Tab. 3).

- (2) **POM1 (2, 3)-C**: C-Menge in einer POM-Größenfraktion, bezogen auf den Gesamtboden. Dimension: % bzw. g C in einer Größenfraktion / 100 g Boden. Dieser Wert liegt immer unterhalb des Corg-Gehaltes des Gesamtbodens; z.B. beträgt der POM1-C-Gehalt im Mittel aller Oberbodenproben 0,13 % (Gesamtboden: 1,43 %; s. Tab. 1)
- (3) **POM1 (2, 3)-C / Corg**: C-Menge in einer Größenfraktion, bezogen auf den gesamten organischen Kohlenstoff in einer Probe. Dimension: % bzw. g POM-C / 100 g Corg. Der größte Anteil des organischen Kohlenstoffs liegt in nicht partikulärer Form vor; im Mittel beträgt der für die drei Fraktionen aufsummierte POM-C-Anteil an Corg etwa 25 % (s. Tab. 1).

Tab. 3: Statistische Parameter der mittels MIRS-PLSR ermittelten Vorhersagemodelle für 90 Ober- und Unterbodenproben des Intensivprogramms. Die Vorhersagen betreffen den Gesamtgehalt an organischen Kohlenstoff (Corg), den C-Gehalt in den drei POM-Größenfraktionen (C in POM1 -2-3), die C-Menge in einer POM-Größenfraktion, bezogen auf den Gesamtboden (POM1-2-3-C) sowie die C-Menge in einer Größenfraktion, bezogen auf den gesamten organischen Kohlenstoff in einer Probe (POM1-2-3-C/Corg)

		Min	Max	Mittelwert	R ²	RPD [§]	RMSECV [§]
Corg	(%)	0,10	3,37	0,98	0,96	5,2	0,12
C in POM1	(%)	< 0,10	15,2	1,31	0,53	1,5	0,29
C in POM2	(%)	< 0,10	1,91	0,37	0,67	1,8	0,13
C in POM3	(%)	< 0,10	8,73	1,04	0,89	2,95	0,48
POM1-C	(%)	< 0,01	0,51	0,09	0,78	2,1	0,033
POM2-C	(%)	< 0,01	0,41	0,08	0,9	3,1	0,024
POM3-C	(%)	< 0,01	0,32	0,08	0,81	2	0,027
POM1-C/Corg	(%)	1,6	61,8	9,9	0,46	1,4	2,64
POM2-C/Corg	(%)	2,0	31,8	8,1	0,72	1,9	2,14
POM3-C/Corg	(%)	2,5	26,5	9,0	0,81	2,3	1,30

§ ratio of performance to deviation; § root mean square error of cross validation

Wir haben für alle drei aufgeführten „Zielgrößen“ Kalibrationsmodelle optimiert. In Tab. 3 sind die wichtigsten Parameter der jeweiligen Modelle aufgeführt. Gemessen am erreichten Bestimmtheitsmaß (R²) konnten im Mittel der drei POM-Fraktionen die besten Modelle für die Zielgröße „POM-C“ (C-Gehalt einer POM-Fraktion bezogen

auf den Gesamtboden) erreicht werden. Die Beziehung zwischen den durch Elementaranalyse und MIRS-PLSR bestimmten POM-C-Gehalten ist in Abb. 11 dargestellt. Die Güte der Anpassung steigt in der Reihenfolge POM1-C ($R^2 = 0,78$) < POM3-C ($R^2 = 0,81$) < POM2-C ($R^2 = 0,90$). Für alle drei POM-C-Fractionen kann mit RPD-Werten ≥ 2 eine genaue und akzeptable MIRS-basierte Abschätzung konstatiert werden.

Da der POM-C-Gehalt im Gesamtboden signifikant mit den gesamten C-Gehalten korreliert (Abb. 7), und gesamt-C über MIRS sehr gut vorhergesagt werden kann, ist die Existenz o.g. Korrelationen zunächst nicht überraschend. Dennoch muss hier hervorgehoben werden, dass die mittels MIRS erreichten Vorhersagemaße ($R^2 > 0,78$) sehr viel besser sind, als sich dies über die Korrelationen zwischen POM1,2-C und Corg ($R^2 < 0,61$) erwartet werden konnte. Und POM3-C korrelierte überhaupt nicht mit Corg (Abb. 7), lässt sich aber dennoch über MIRS exzellent schätzen. Das schnelle Screening der Bodeneigenschaften über MIRS scheint also in der Tat auch für diese Untersuchungsstandorte sehr lohnend.

Für die C-Gehalte in den POM-Größenfraktionen (C in POM1-2-3) konnten für die beiden gröberen Fraktionen (POM1 + 2) nur ungenügende Modelle entwickelt werden (Tab. 3). Für „C in POM1“ häufen sich die Beobachtungen im relativ engen Gehaltsbereich $> 0 - 1$ % und streuen dabei relativ weit; die Steigung der berechneten Regressionsgeraden ist mit 0,57 zu flach und das Bestimmtheitsmaß ($R^2 = 0,53$) ist unbefriedigend (Abb. 12). Bei „C in POM2“ ist die Verteilung der Beobachtungen gleichmäßiger und auch die Güte der Anpassung ist gegenüber „C in POM1“ verbessert ($R^2 = 0,67$). Dennoch ist diese Kalibration nicht ausreichend, um MIR-basiert den C-Gehalt in der POM2-Fraktion adäquat zu bestimmen. Lediglich bei „C in POM3“ erreicht das Kalibrationsmodell eine Qualität, die eine Nutzung von MIR-Spektren möglich macht. Das Bestimmtheitsmaß ($R^2 = 0,89$), der mittlere Vorhersagefehler (0,48 %) sowie ein RPD-Wert von 2,95 können als sehr zufriedenstellend für die Modellbildung charakterisiert werden.

Die niedrigsten Bestimmtheitsmaße ergaben sich bei der Abschätzung der POM-C-Anteile am gesamten organischen Kohlenstoff (POM1-2-3-C / Corg; s. Tab. 3). Lediglich für den POM3-C-Anteil liefert das Modell mit $R^2 = 0,81$ und einem RPD-Wert von 2,3 akzeptable Resultate.

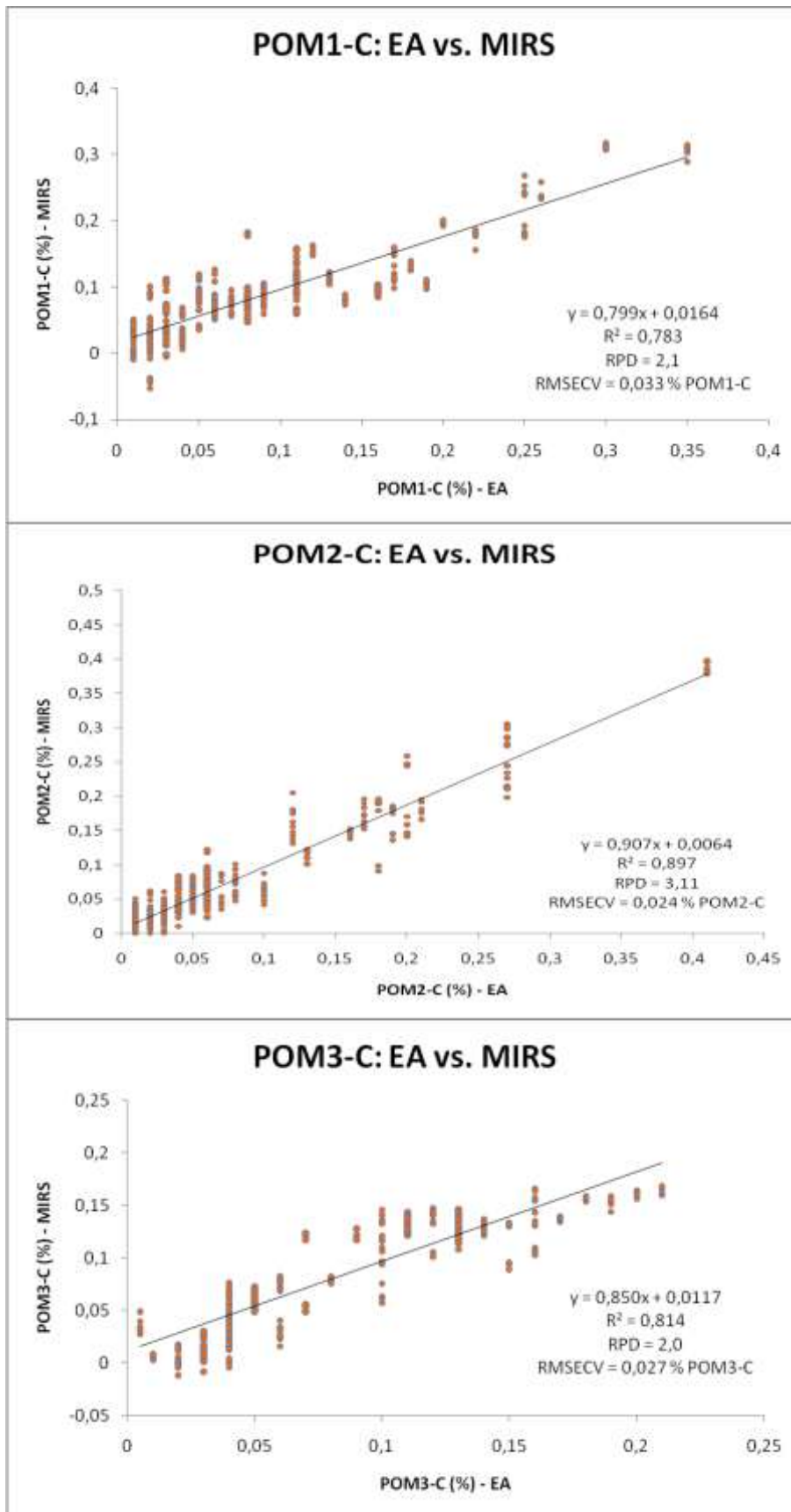


Abb. 11: Beziehung zwischen den POM-C-Gehalten, die mittels konventioneller physikalischer Fraktionierung und Elementaranalyse bestimmt wurden (EA), und POM-C-Gehalten, die über MIR-Spektroskopie ermittelt wurden

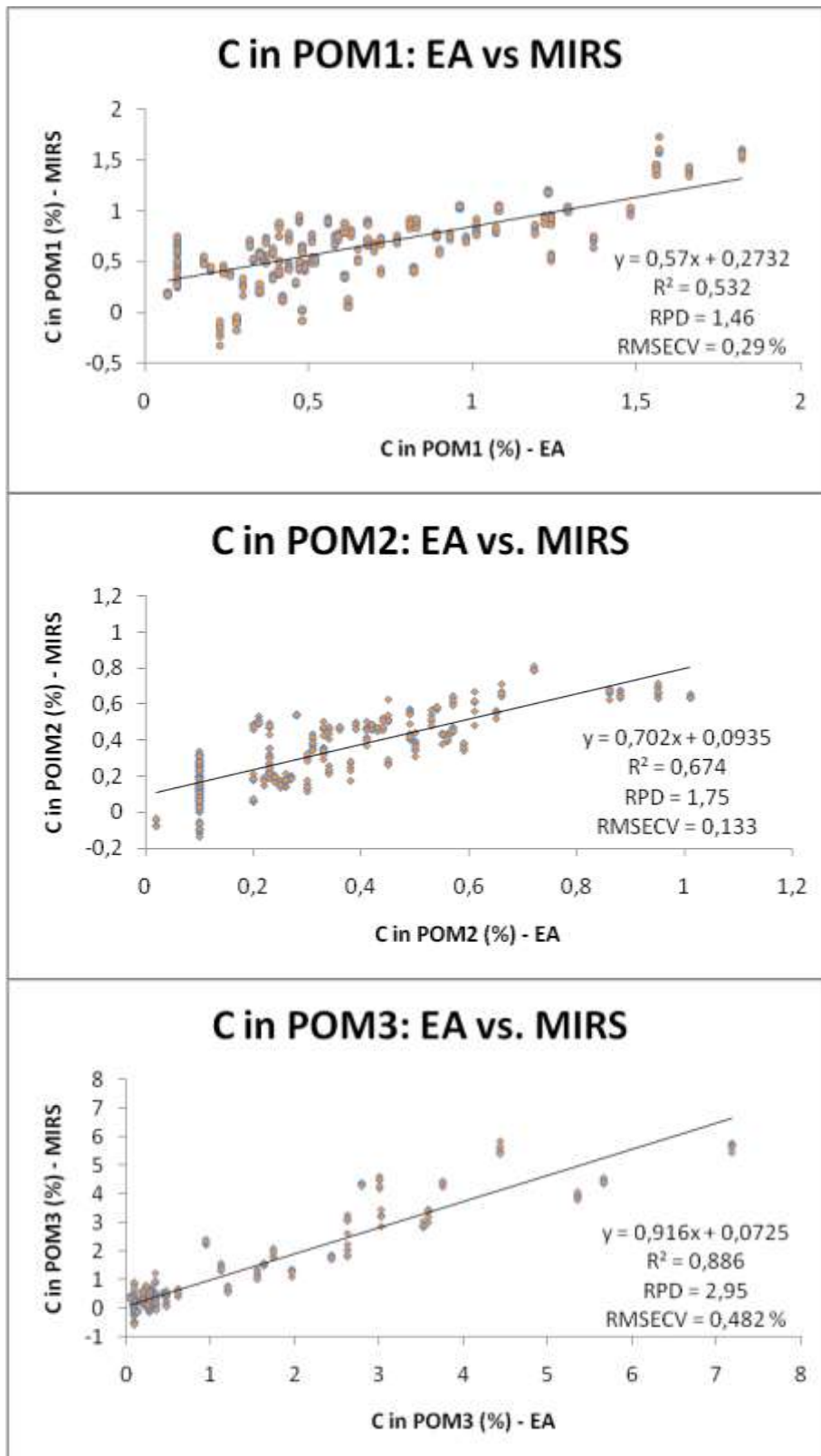


Abb. 12: Beziehung zwischen den C-Gehalten in drei POM-Fractionen, die mittels konventioneller physikalischer Fraktionierung und Elementaranalyse bestimmt wurden (EA), und Gehalten, die über MIR-Spektroskopie ermittelt wurden

Die Qualität der Modelle zur Abschätzung von POM-Kennwerten ist damit insgesamt als sehr heterogen einzustufen. Dabei sind sowohl für die verschiedenen Zielgrößen

als auch für die verschiedenen POM-Größenfraktionen innerhalb einer Zielgröße deutliche Differenzen in der Güte der Modelle erkennbar. Die hier beobachtete Variabilität ist allerdings nicht zufällig und – zumindest zu einem größeren Anteil – nachvollziehbar.

Die MIR-Spektroskopie nutzt die Anregung von Energiezuständen in anorganischen oder organischen Molekülen oder funktionellen Gruppen (z.B. CH-, OH- und NH-Gruppen). Diese Parameter müssen im Probenet variieren, damit überhaupt Vorhersagen möglich sind. Die Güte jeder MIRS-Anpassung ist somit u.a. von der Streubreite der Beobachtungen und ihrer (un-)gleichmäßigen Verteilung, von der Qualität der konventionell ermittelten Referenzwerte sowie von der Größe der POM-Fraktion abhängig. Wenn also eine gute Corg-Abschätzung aus MIR-Spektren gelingt, beruht das nicht auf einer Messung des chemischen Elements C (wie bei der Elementaranalyse), sondern auf einer Quantifizierung der Variation von Molekülen oder Molekülgruppen, die C enthalten (z.B. C-H, C=C, C-O-H, COOH). Auch in vielen anderen NIR/MIR-Untersuchungen wird darauf hingewiesen, dass eine größere Spannbreite vom Messwerten die Modellbildung fördert (z.B. Gomez et al., 2008).

In einem PLSR-Modell werden in der Regel etliche (oft > 5) funktionelle Gruppen simultan erfasst. Wenn die chemische Zusammensetzung der organischen Substanz im Kalibrierset ähnlich wie in unbekanntem Proben ist, gelingt eine gute C-Schätzung. Deshalb konnten wir in vorangegangenen Untersuchungen mit einem einzigen Kalibrationsmodell den Corg-Gehalt von Schwarzerdeproben aus der ganzen Welt sehr gut vorhersagen (Bornemann et al., 2008). In einem derzeit laufenden Forschungsprojekt gelang es, für 130 Bodenproben von einer einzigen, allerdings sehr heterogenen Ackerfläche neben Corg auch POM1-C, POM2-C und POM3-C mit akzeptabler Genauigkeit via MIRS-PLSR zu bestimmen (Bornemann et al., 2010). Dieses war möglich, weil die chemische Zusammensetzung der organischen Substanz in den drei Fraktionen deutlich differierte und das MIR-Spektrometer diese unterschiedliche chemische Signatur erfassen konnte. Für das POM1-Modell waren lignin- und celluloseartige Signale prägend. Im POM2-Modell waren die für Polysaccharide typischen spektralen Bande von geringerer Bedeutung und funktionelle Gruppen ihrer Abbauprodukte waren dominant. Die spektrale Signatur von POM3-C verwies auf mikrobielle Abbau- und Umbauprodukte der primären Streustoffe. Wichtig für diese gelungene Differenzierung war nach Aussage von Bornemann et al. (2010) (1) die

Herkunft der Proben von einer einzigen Ackerfläche, was einen qualitativ einheitlichen Streueintrag bedingte, und (2) eine große Spannweite an POM-C-Gehalten, die durch die große texturale Heterogenität der Fläche (z.B. Steingehalt von < 5 - > 50 %) ausgelöst wurde.

Im Probenset des Humusmonitoringprogramms kamen Flächen zusammen, bei denen – anders als bei Bornemann et al. (2010) - die Herkunft des Streueintrags stark variierte. Vor diesem Hintergrund war nicht auszuschließen, dass je nach Bewirtschaftung und Humuspflge (Fruchtfolge, \pm Stroheinarbeitung, \pm organische Düngung mit Gülle, Kompost etc.) die chemische Zusammensetzung der POM-Fractionen stärker differieren würde; dieses würde entsprechend eine Ableitung von POM-Kennwerten aus der MIR-Signatur behindern. Entgegen unserer Befürchtung konnten wir dennoch für POM1-C und POM2-C sehr gute Modelle bilden, die in Bezug auf Bestimmtheitsmaß und RPD-Wert nahezu identisch mit den Resultaten von Bornemann et al. (2010) sind. Lediglich bei POM3-C, das bei Bornemann et al. (2010) die besten Resultate lieferte ($R^2 = 0,96$, RPD = 4,8), ist in der vorliegenden Studie das Modell immer noch gut, allerdings qualitativ nicht ganz so exzellent wie für die anderen POM-Fractionen ($R^2 = 0,81$, RPD = 2,0). Ein Grund für die Differenzen könnte sein, dass die Spannbreite der POM3-C-Gehalte bei Bornemann et al. (2010) wesentlich größer war (0,15 – 6,26 %) als in dieser Studie (0,01 – 0,32 %); bei POM1-C und POM2-C sind diese Unterschiede deutlich kleiner. In Tab. 7 (Anhang) sind die mittels konventioneller Fraktionierung und Elementaranalyse ermittelten POM-C-Gehalte und die mittels MIRS-PLSR vorhergesagten Werte für die Bodenproben des Intensivprogramms gegenübergestellt.

Zur Charakterisierung der unterschiedlichen chemischen Signaturen verschiedener POM-Fractionen verwendeten Bornemann et al. (2010) unter anderem die *loading weights* der ersten latenten Variablen des MIR-Kalibrationsmodells. Bei einer graphischen Darstellung der *loading weights* (s. Abb. 13) bedeuten Ausschläge der Kurve, dass die dazugehörigen Wellenlängen für das Kalibrationsmodell von besonderer Bedeutung sind. Um die Aussagekraft der lokalen Kalibration (eine einzelne Testfläche in Jülich-Selhausen) zu überprüfen, wurde bei Bornemann et al. (2010) das Probenkollektiv um 25 Oberbodenproben aus dem Humusmonitoringprogramm erweitert („erweiterter Testset“ der Studie von Bornemann et al., 2010). In Abb. 13 sind die Ergebnisse graphisch dargestellt. Bei allen drei POM-C-Fractionen sind die Wellen-

längen (hier als Kehrwert (= Wellenzahl) dargestellt), die für bestimmte C-Gruppen charakteristisch sind, beim lokalen und beim erweiterten Testset in sehr ähnlicher Weise durch Peaks geprägt. Hieraus lässt sich ableiten, dass die unterschiedliche chemische Signatur der drei POM-Fractionen auch für die untersuchten Proben des Humusmonitorings Gültigkeit hat. Unterschiedliche *loading weights* der jeweiligen lokalen und erweiterten Testsets betreffen vor allem die Wellenzahlen < 800 und $3600 - 3800 \text{ cm}^{-1}$, was darauf hindeutet, dass Variationen der Mineralgarnitur in den Proben des Humusmonitorings die Vorhersagequalität zusätzlich beeinflussen.

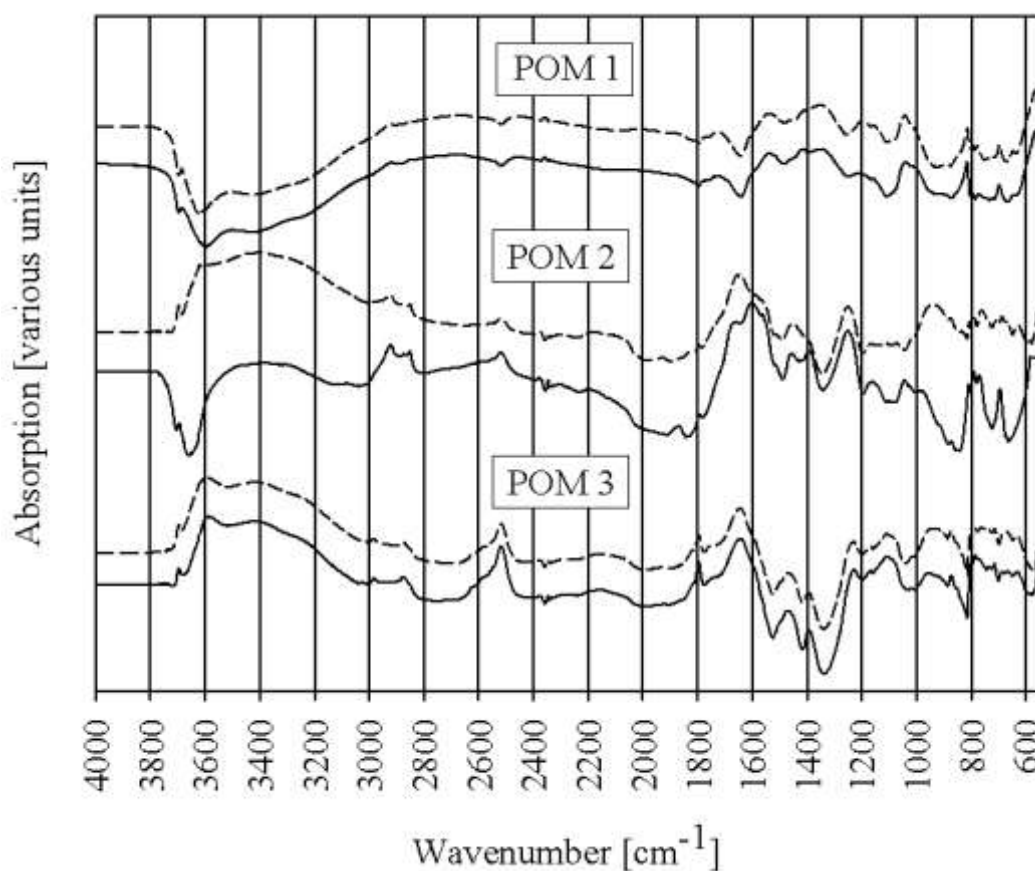


Abb. 13: *Loading weights* (Gewichte) der ersten latenten Variablen der PLSR-Modelle für die Abschätzung der POM1-, POM2- und POM3-C-Gehalte in (a) Bodenproben einer Ackerfläche aus Jülich-Selhausen (durchgezogene Linien) und (b) den Bodenproben aus Jülich-Selhausen unter Hinzunahme von 25 Bodenproben aus dem Humusmonitoringprogramm (gestrichelte Linien) (Quelle: Bornemann et al., 2010)

Insgesamt bleibt festzuhalten, dass für die zentrale Zielgröße „POM-C“ bei allen drei Fraktionen akzeptable Kalibrierungsmodelle erstellt werden konnten. Inwieweit diese Kalibrationsmodelle geeignet sind, für andere Bodenprobenkollektive die POM-C-Gehalte adäquat abzuschätzen, wird im nachfolgenden Abschnitt diskutiert.

4.2.3 POM-C-Vorhersage für Bodenproben des Extensivprogramms

Die mittels der 90 Bodenproben des Intensivprogramms erstellten Kalibrationsmodelle (s. Kap. 4.2.2) wurden genutzt, um für die 155 Bodenproben des Extensivprogramms die Gehalte an POM1-C, POM2-C und POM3-C vorherzusagen. Die Eignung der vorliegenden Modelle wurde durch die Berechnung der sogenannten Mahalanobisdistanz (MD) überprüft. Die MD ist definiert als die Differenz aus dem Spektrum einer unbekannt Probe und dem Mittelwert aller Spektren des Kalibrationsdatensatzes (Conzen, 2005). Es wird also berechnet, wie gut das neue Spektrum zu den Spektren der Kalibration passt.

Trotz der guten Qualitätsparameter der zugrundeliegenden Modelle (siehe oben) gelang es nicht, für alle Proben des Extensivprogramms eine befriedigende POM-C-Abschätzung zu realisieren; d.h. je nach Modell wurde für eine unterschiedliche Zahl an Proben der kritische MD-Wert überschritten. In Tab. 9 (Anhang) sind für alle 155 Bodenproben die Schätzwerte für POM1-2-3-C aufgeführt. Ausreißer sind markiert. Der Auflistung ist zu entnehmen, dass bei POM1-C in 44 von 155 Fällen, bei POM2-C in 50 Fällen und bei POM3-C sogar in 76 Fällen der MD-Wert einen Ausreißer anzeigt. Wie weit der MIRS-basierte Schätzwert tatsächlich von den konventionell ermittelten POM-C-Gehalten abweichen kann, wird anhand der 15 Bodenproben des Extensivprogramms deutlich, die zusätzlich zu den Proben des Intensivprogramms konventionell fraktioniert wurden (Tab. 4). Die Zahlen verdeutlichen, dass die MIRS-Vorhersage das generelle Niveau der Gehalte im Mittel recht gut trifft, dass aber insbesondere bei niedrigen POM-C-Gehalten die Abweichungen z.T. extrem groß sind.

Diese teilweise unbefriedigende Abschätzung ist u.a. darauf zurückzuführen, dass der Stoffbestand der Proben des Extensivprogramms z.T. deutlich vom Kollektiv des Intensivprogramms abweicht. Um zu überprüfen, ob sich die Vorhersage durch eine Erweiterung des Kalibrationssets verbessert, wurden neue Modelle berechnet, denen neben den 90 Proben des Intensivprogramms 15 weitere Proben des Extensivprogramms zugrundelagen. Die Qualität der optimierten Modelle (Bestimmtheitsmaße, RPD, RMSECV) wurde durch die zusätzlichen Bodenproben nur unwesentlich beeinflusst (Tab. 5).

Tab. 4: Ergebnisse der konventionellen POM-Fraktionierung („Referenz“) im Vergleich mit Schätzwerten auf der Basis (a) einer Kalibration mit den Bodenproben des Intensivprogramms (MIRS-1) und (b) einer Kalibration mit den Bodenproben des Intensivprogramms plus 15 Bodenproben des Extensivprogramms (MIRS-2)

BoBo-Nr.	GD-Nr.	POM1-C %			POM2-C %		POM3-C %	
		Referenz	MIRS-1	MIRS-2	Referenz	MIRS-1	Referenz	MIRS-1
14118	14665	0,158	0,116	0,125	0,071	0,150	0,079	0,092
14126	14673	0,089	0,042	0,057	0,033	0,100	0,097	0,088
14166	14713	0,822	0,868	0,806	0,279	-0,018	0,371	0,010
14167	14714	0,278	0,492	0,422	0,226	0,259	0,263	0,087
14184	14731	0,045	0,113	0,139	0,039	0,136	0,084	0,033
14218	14765	0,385	0,272	0,203	0,074	0,257	0,228	0,187
14220	14767	0,172	0,263	0,198	0,236	0,327	0,127	0,160
14223	14770	0,069	0,063	0,061	0,016	0,089	0,054	0,137
14225	14772	0,058	0,047	0,091	0,047	0,101	0,118	0,080
14230	14777	0,142	0,065	0,112	0,081	0,116	0,160	0,044
14250	14797	0,087	0,105	0,050	0,085	0,057	0,076	0,165
14252	14799	0,158	0,111	0,133	0,111	-0,007	0,296	0,121
14254	14801	0,058	0,101	0,071	0,035	0,020	0,106	0,158
14258	14805	0,049	0,122	0,096	0,085	0,004	0,167	0,100
14261	14808	0,522	0,450	0,511	0,080	0,183	0,234	0,103

Tab. 5: Statistische Parameter der mittels MIRS-PLSR ermittelten Vorhersagemodelle auf der Basis von 90 Ober- und Unterbodenproben des Intensivprogramms plus 15 Proben des Extensivprogramms. Die Vorhersagen betreffen die C-Menge in einer POM-Größenfraktion, bezogen auf den Gesamtboden (POM1-2-3-C)

		R ²	RPD	RMSECV
POM1-C	(%)	0,83	2,42	0,044
POM2-C	(%)	0,83	2,39	0,027
POM3-C	(%)	0,8	2,25	0,028

Das neue Modell für POM1-C diente dazu, eine weitere Vorhersage der Gehalte in den Proben des Extensivprogramms zu erstellen. Wie Tab. 10 (im Anhang) zu entnehmen ist, konnte durch den erweiterten Kalibrationsset die Zahl an Ausreißern von 44 auf 34 reduziert werden, was eine gewisse Verbesserung des Modells andeutet. Ein Vergleich der beiden Schätzwerte mit konventionell ermittelten Fraktionierungsdaten für 15 Proben des Extensivprogramms bestätigt diese Tendenz (Tab. 4). Die Schätzwerte auf Basis des erweiterten Probensets (in Tab. 4 „MIRS-2“) weichen in der Mehrzahl der Fälle weniger vom Referenzwert ab als die Schätzwerte der ersten Kalibration.

Aus den dargestellten Ergebnissen lässt sich folgern:

- Für die Bodenproben des Intensivprogramms lassen sich aus den MIR-Spektren Modelle ableiten, die eine akzeptable Abschätzung von POM-Kennwerten (insbes. POM-C) erlauben.
- Die Kalibrationsmodelle auf der Basis von Proben des Intensivprogramms sind dennoch nicht geeignet, für alle Proben des Extensivprogramms die POM-C-Gehalte adäquat vorherzusagen.
- Eine Erweiterung des Kalibrationssets durch 15 Proben des Extensivprogramms verbessert die Vorhersage. Die Qualität bleibt dabei dennoch unbefriedigend. Um ein Kalibrationsmodell zu erstellen, müssten vermutlich als Minimum alle bisherigen Ausreißer des Extensivprogramms fraktioniert werden und in ein erweitertes Kalibrationsmodell mit einbezogen werden.

4.3 Ableitung von BC-Gehalten aus MIR-Spektren

Für die Abschätzung der Gehalte an Black Carbon in Proben des Monitoringprogrammes war vorgesehen, vorhandene Kalibrationsmodelle zu nutzen. Diesen Modellen liegen Untersuchungen mit Böden unterschiedlicher Nutzung (Acker, Steppe, Wald) und unterschiedlicher regionaler Herkunft (Argentinien, China, Russland, USA, Deutschland) zugrunde. Der Stoffbestand dieser Böden variiert in weiten Grenzen. Nähere Informationen sind bei Bornemann et al. (2008) zu finden.

Drei Modelle, die bei den Untersuchungen von Bornemann et al. (2008) die besten Anpassungen für die BC-Messung ergaben, wurden getestet:

Modell 1: Ackerböden aus Deutschland

Modell 2: alle Ackerböden

Modell 3: alle Böden

Keines der drei Modelle war geeignet, für alle Proben des Intensiv- und Extensivprogramms eine befriedigende BC-Abschätzung zu realisieren; d.h. je nach Modell wurde für eine unterschiedliche Zahl an Proben der kritische MD-Wert überschritten. Modell 1 ergab die schlechteste Schätzung, obwohl hier der regionale Bezug am ehesten gegeben war. Bei den Modellen 2 und 3 waren die errechneten BC-Gehalte sehr ähnlich und sehr hoch signifikant korreliert ($R^2 = 0,89$). Aufgrund der niedrigeren MD-Werte bei Modell 3 wurde dieses schließlich verwendet.

In den Tabellen 11 und 12 sind die mit Modell 3 berechneten BC-Gehalte der Proben aus dem Intensiv- und Extensivprogramm aufgeführt. Unsichere Resultate (MD-Werte überschritten) sind mit einem Sternchen gekennzeichnet. Bei den Böden des Intensivprogramms (Tab. 11) fällt auf, dass ausschließlich Proben aus der Westfälischen Bucht (GD-Archiv-Nr. 14644 – 14658) als unsicher einzustufen sind. Wie bereits oben erwähnt, sind die WB-Böden im Vergleich zu den Böden aus den anderen Regionen wesentlich humusreicher und unterliegen teilweise anderen pedogenetischen Prozessen; auch die POM-Zusammensetzung weicht bei den WB-Böden deutlich ab. Die differierende Qualität und Quantität der organischen Substanz in den Böden dieser Region bedingt eine entsprechend sich ändernde chemische Signatur im MIR-Spektrum. Dieses wiederum führt zu erhöhten MD-Werten, die die Qualität der BC-Abschätzung zunächst einmal in Frage stellen. Wie (un-)genau die BC-Werte der humusreichen Böden aus der Westfälischen Bucht sind, kann nur mit konventionellen BC-Analysen geklärt werden.

Wie bei den Gesamtgehalten an organischem Kohlenstoff und bei den POM-Gehalten ist auch bei den BC-Werten eine regionale Differenzierung erkennbar. Im Niederrheinischen Tiefland (NT) und in der Rheinischen Bucht (RB) ist mit 33 bzw. 32 g BC kg⁻¹ Corg ein fast identischer Teil des organischen Kohlenstoffs dem Black Carbon zuzuordnen. In der Westfälischen Bucht (WB) ist der BC-Anteil mit 59 g BC kg⁻¹ Corg nahezu verdoppelt. Dieser Befund ist ungewöhnlich. BC-Untersuchungen an Proben eines Dauerdüngungsversuches in Meckenheim bei Bonn zeigen, dass erhöhte Gaben an Stallmist, Kompost und Klärschlamm die Corg-Gehalte ansteigen lassen, wobei der BC-Anteil an Corg allerdings sinkt (Wedde, 2009). Da die BC-Werte der humusreichen WB-Böden mit Unsicherheiten behaftet sind, kann dieser Problematik erst nach einer Überprüfung mit der Referenzmethode sinnvoll nachgegangen werden.

5 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

In einer vom (damaligen) Landesumweltamt NRW (jetzt: LANUV) beauftragten Studie war für den größten Teil von NRW – Ausnahme: Münsterland - in den letzten 20 Jahren eine deutliche Abnahme der Humusgehalte von Ackerböden sichtbar geworden (Preger et al., 2006). Die zugrundeliegende Auswertung von FIS StoBo-Daten war jedoch in der zeitlichen und räumlichen Auflösung sehr heterogen. Das 2009 begonnene Humusmonitoringprogramm von Ackerböden in Nordrhein-Westfalen sieht eine regelmäßige Beprobung repräsentativer Flächen an exakt den gleichen Stellen vor und wird deshalb eine geeignete Datengrundlage bieten, um die derzeit ablaufenden Veränderungen des Humusstatus von Ackerböden zu detektieren.

Zum Start des Programms wurde im Rahmen eines Intensiv- (45 Standorte, 2 Tiefen) und eines Extensivprogramms (155 Standorte, nur Oberboden) eine erste Zustandserhebung durchgeführt. INRES-Bodenwissenschaften hatte in einem Teilprojekt zum einen die Aufgabe, mittels eines physikalischen Fraktionierungsverfahrens an 105 Proben (90 Intensiv-, 15 Extensivprogramm) verschiedene Fraktionen der partikulären organischen Substanz (POM) zu quantifizieren. Zum anderen sollte der Versuch unternommen werden, aus MIR-Spektren dieser Proben mittels multivariater Statistik (PLSR) ein Kalibrationsmodell zur Ableitung von POM-Fraktionen zu erstellen. Daneben sollten die Gehalte der Proben an schwarzem Kohlenstoff (Black Carbon, BC) mit Hilfe eines vorhandenen Kalibrationsmodells abgeleitet werden.

In ähnlicher Weise wie die Gesamtgehalte an organischen Kohlenstoff weisen auch die drei untersuchten POM-Fraktionen (POM1: 2000-250 μm , POM2: 250-53 μm , POM3: 53-20 μm) eine deutliche regionale Differenzierung auf. In den lößgeprägten Regionen NT und RB sind sowohl die POM-Gehalte als auch die Anteile an Corg im Oberboden mit ca. 25 % nahezu gleich. Die Anteile sinken in der Reihenfolge POM3-C > POM1-C > POM2-C. In den sandigen, humusreichen Böden der WB sind die (labileren) POM1- und POM2-Fraktionen gegenüber NT und RB stark erhöht. Der Gehalt an POM3-C ist dagegen mit 0,12 % niedriger als in den anderen Regionen (\emptyset 0,14 %). Wir vermuten, dass die POM3-Fraktion in der WB mit Kohlenstoff gesättigt ist.

Im Unterboden gehen die POM-C-Gehalte in den Regionen NT und RB auf ein Viertel bis ein Drittel zurück. In den Unterböden der WB sind – trotz des vorrangigen C-

Eintrags von oben - die labileren POM1- und POM-2-Fractionen anteilig besonders stark vertreten.

Die Ableitung von POM-C-Gehalten aus MIR-Spektren war insofern erfolgreich, als Kalibrationsmodelle berechnet werden konnten, die den in der Fachliteratur üblichen Qualitätskriterien (Bestimmtheitsmaße, RPD, RMSECV) entsprachen. Dennoch gelang es nicht, mit den durchaus sehr guten Kalibrationsmodellen des Intensivprogramms die POM-C-Gehalte für die Bodenproben des Extensivprogramms adäquat vorherzusagen. Obwohl eine Erweiterung des Kalibrationssets durch 15 Proben des Extensivprogramms die Vorhersage verbesserte, blieb die Qualität unbefriedigend.

Für die Abschätzung von BC-Anteilen an Corg wurden drei vorhandene Kalibrationsmodelle verwendet, deren Eignung über die Mahalanobisdistanz (MD) geprüft wurde. Ein Modell mit Böden unterschiedlicher Herkunft und unterschiedlicher Nutzung ist am besten geeignet; dennoch werden bei den Proben des Intensivprogramms nur für die Böden aus NT und RB valide BC-Anteile (im Mittel 77 g BC / kg Corg) berechnet. Eine Überprüfung der MIRS-basierten BC-Werte über Referenzanalysen ist – entgegen unserer ursprünglichen Erwartung – nicht verzichtbar.

6 Ausblick

Für die Zukunft des Humusmonitoringprogrammes sind auf der Basis der hier vorgestellten Ergebnisse folgende Punkte beachtenswert:

- Die gelungene Fraktionierung der partikulären organischen Substanz in drei Größenstufen erbrachte regional- und bodenspezifische Ergebnisse, welche die Vermutung nahelegen, dass auch Klimaänderungen auf Böden in unterschiedlichen Regionen sich andersartig auswirken können. Potenziell dürften die Standorte der WB am stärksten von künftigen Humusverlusten betroffen sein, wobei diese Verluste auch auf dem höchsten Niveau beginnen. Aussagen zur zeitlichen Dynamik können mit dieser einmaligen Beprobung natürlich nicht getroffen werden. Für die Zukunft des Humusmonitoringprogramms ist es deshalb unverzichtbar, die regionale und zeitliche Dynamik unterschiedlich labiler POM-Fraktionen auch langfristig weiter zu verfolgen.
- In der Westfälischen Bucht sind die Humusgehalte gegenüber den anderen Regionen deutlich erhöht. Inwieweit das höhere Niveau ein Erbe bodenbildender Prozesse (Podsolierung und Vergleyung unter Wald mit Versauerung und Humusakkumulation) und/oder spezifischer Bewirtschaftungsformen wie Plaggenwirtschaft ist, oder primär auf den erhöhten rezenten Einsatz organischer Dünger zurückzuführen ist, bleibt derzeit unklar. Weiterführende humuschemische Untersuchungen, insbesondere auch zur potenziellen Zersetzbarkeit des Humuskörpers, könnten hier Aufschluss geben.
- Wir vermuten, dass die POM3-Fraktion in den Ackerböden der WB mit Kohlenstoff übersättigt ist und als Konsequenz die C-Mengen in den labileren Fraktionen überproportional angestiegen sind. Dieses Phänomen verdient in der Zukunft wegen seiner Bedeutung für die C-Sequestration eine genauere Betrachtung. Wenn der in POM1 und POM2 angereicherte Kohlenstoff sehr jung ist, z.B. aus der organischen Düngung der letzten Dekaden stammt, kann er bei Nutzungsänderungen entsprechend schnell zu einer CO₂-Quelle werden.
- Der Unterboden trägt wesentlich zur Funktion der Böden als C-Speicher bei. In den Böden der WB sind dabei wiederum die labilen POM-Fraktionen 1 und 2 besonders angereichert. Auch diese überraschende Beobachtung verdient im Zuge des Monitoringprogramms ein besonderes Augenmerk, denn gerade über Klimaef-

fekte auf Unterböden ist bis heute nur sehr wenig bekannt. Auf der anderen Seite weiß man, dass die organische Substanz des Unterbodens zumindest potenziell rasch zersetzt werden kann (Fontaine et al., 2007).

- Eine schnelle und sichere Ableitung von POM-C- und BC-Gehalten aus MIR-Spektren für die Bodenproben des Extensivprogramms konnte (noch) nicht realisiert werden. Ein akzeptables MIRS-PLSR-Modell für die POM-C-Vorhersage lässt sich wahrscheinlich nur erstellen, wenn mit einer wesentlich größeren Zahl an Proben des Extensivprogramms eine konventionelle POM-Fraktionierung durchgeführt wird. Auch für die BC-Abschätzung sind konventionelle Referenzanalysen in größerer Zahl erforderlich. Das jetzt vorliegende Ergebnis bedeutet zunächst, dass zumindest mit dem vorhandenen Kalibrationsset auch in Folgejahren die MIRS-PLSR nicht die konventionelle POM-Fraktionierung und BC-Analyse ersetzen kann. Offen ist, ob sich ein spezielles Kalibrationsset auch für die Proben des Extensivprogrammes erstellen ließe.
- In der einfachen POM-Fraktionierung werden die Aggregate zerstört. Das Verfahren sagt deshalb wenig darüber aus, ob sich POM z.B. innerhalb (OPOM) oder zwischen Aggregaten (FPOM) befindet, wo es unterschiedlichem physikalischen Schutz gegenüber Abbauprozessen ausgesetzt ist. Es wäre deshalb durchaus spannend, dieser Lokalisierung des POM im Rahmen sog. FPOM/OPOM-Fraktionierungen genauer nachzugehen (z.B. Golchin et al., 1994; Six et al., 2000). Diese Methode wird auch in Deutschland derzeit als DIN-Verfahren für Humusanalysen diskutiert (Haedicke, mündl. Mitteilung). Wir sind jedoch skeptisch, dass sich dieses Verfahren auch für ein Monitoringprogramm eignet, da (i) zur Probenahme ungestörte Aggregatproben entnommen werden müssen, und (ii) sich die Stabilität der Aggregate und damit vermutlich auch die Verteilung von POM auf die Aggregatfraktionen mit der Witterung und der Dauer der Probenlagerung ändern müsste. Bevor eine solche alternative Methode auch für ein Monitoringprogramm empfohlen werden kann, erscheint es uns zwingend, zunächst zu erforschen, wie empfindlich sich die FPOM/OPOM-Ausbeuten mit unterschiedlicher Witterung bei der Probenahme (z.B. auch im saisonalen Verlauf) sowie mit unterschiedlicher Dauer der Probenlagerung gegenüber den POM1- bis POM3-Ausbeuten verändern.

7 Literaturquellen

- Amelung, W., Zech, W. (1999): Minimisation of organic matter disruption during particle-size fractionation of grassland epipedons. *Geoderma* 92, 73-85.
- Bornemann, L., Welp, G., Brodowski, S., Rodionov, A., Amelung, W. (2008): Rapid assessment of black carbon in soil organic matter using mid-infrared spectroscopy. *Organic Geochemistry* 39, 1537–1544.
- Bornemann, L., Welp, G. Amelung, W. (2010): Particulate organic matter at field scale – rapid acquisition using mid–infrared spectroscopy. *Soil Sci. Soc. Amer. J.* 74, 1147-1156.
- Chang, C.W., Laird, D.A., (2002): Near-infrared reflectance spectroscopic analysis of soil C and N. *Soil Science* 167, 110-116.
- Christensen, B.T. (1992): Physical fractionation of soil and organic matter in primary particle size and density separates. *Advances in Soil Science* 20, 1-90.
- Conzen, J.-P. (2005): *Multivariate Kalibration*. Bruker Optik GmbH, 98 S.
- Fontaine, S., Barot, S., Barré, P., Bdioui, N., Mary, B., Rumpel, C. (2007): Stability of organic carbon in deep soil layers controlled by fresh carbon supply. *Nature* 450, 277-280.
- Golchin, A., Oades, J.M., Clarke, P., Skjemstad, J.O., (1994): Study of free and occluded particulate organic matter in soils by solid state ¹³C CP-MAS NMR spectroscopy and scanning electron microscopy. *Austr. J. Soil Res.* 32, 285-309.
- Gomez, C., Viscarra Rossel, R.A., McBratney, A.B. (2008): Soil organic carbon prediction by hyperspectral remote sensing and field vis-NIR spectroscopy: An Australian case study. *Geoderma* 146, 403-411.
- ISO10694 (1995): Soil quality – determination of organic and total carbon after dry combustion (elemental analysis).
- Koelbl, A., Leifeld, J., Koegel-Knabner, I. (2005): A comparison of two methods for the isolation of free and occluded particulate organic matter. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science* 168, 660-667.
- Martens, H., Naes, T. (1989): *Multivariate Calibration*, Wiley, Chichester.

- Pätzold, S., Mertens, F.M., Bornemann, L., Koleczek, B., Franke, J., Feilhauer, H., Welp, G. (2008): Soil Heterogeneity at the Field Scale: a Challenge for Precision Crop Protection. *Precis. Agric.* 9, 367-390.
- Six, J., Paustian, K., Elliott, E.T., Combrink, C. (2000): Soil structure and organic matter: I. Distribution of aggregate-size classes and aggregate-associated carbon. *Soil Sci. Soc. Amer. J.* 64, 681-689.
- Skjemstad, J.O., Spouncer, L.R., Cowie, B., Swift, R.S., 2004. Calibration of the Rothamsted organic carbon turnover model (RothC ver.26.3), using measurable soil organic carbon pools. *Australian Journal of Soil Research* 42,79-88.
- Wedde, Ch. (2009): Zeitliche Entwicklung von C- und N-Gehalt im Boden in Abhängigkeit von Art und Höhe der organischen Düngung. Diplomarbeit. INRES-Pflanzenernährung, Universität Bonn, 68 S.
- Wessolek, G., Schmitt, A. (2005): Der IST-Zustand des organischen Kohlenstoffes in landwirtschaftlich genutzten Böden. In: Wessolek, G., M. Kaupenjohann, P. Dominik, K. Ilg, A. Schmitt, J. Zeitz, F. Gahre, E. Schulz, R. Ellerbrock: Ermittlung von Optimalgehalten an organischer Substanz landwirtschaftlich genutzter Böden nach § 17 (2) Nr. 7 BBodSchG., Ufoplan 202 71 263, Umweltbundesamt, 112 - 131.
- Zerger, C., Haas, H. (2003): Ökologischer Landbau und Agrarstruktur in Nordrhein-Westfalen. Atlas und Analyse. Verlag Dr. Köster, Berlin.
- Zimmermann, M., Leifeld, J., Schmidt, M.W.I., Smith, P., Fuhrer, J., (2007): Measured soil organic matter fractions can be related to pools in the RothC model. *European Journal of Soil Science* 58, 658-667.

8 Anhang

Tab. 6a: Ergebnisse der konventionellen POM-Fraktionierung (C in POM: g C in 100 g POM-Fraktion bzw. %; POM-C: g C in einer POM-Größenfraktion pro 100 g Boden bzw. %)

BoBo-Nr.	GD-Nr.	Corg %	C in Pom1 %	C in Pom2 %	C in Pom3 %	POM1-C %	POM2-C %	POM3-C %
14022	14614/1	0,985	0,44	0,41	0,23	0,062	0,042	0,109
14023	14614/2	0,485	0,44	0,22	0,1	0,040	0,024	0,045
14024	14615/1	1,09	0,93	0,49	0,22	0,107	0,054	0,110
14025	14615/2	0,48	0,47	0,23	0,1	0,030	0,026	0,047
14026	14616/1	1,035	0,72	0,57	0,27	0,079	0,058	0,139
14027	14616/2	0,535	0,37	0,34	0,1	0,028	0,039	0,047
14028	14617/1	1,01	0,68	0,49	0,25	0,083	0,053	0,128
14029	14617/2	0,48	0,49	0,26	0,1	0,036	0,032	0,047
14030	14618/1	1,04	0,63	0,42	0,26	0,075	0,046	0,132
14031	14618/2	0,38	0,26	0,1	0,1	0,019	0,013	0,040
14032	14619/1	1,34	0,77	0,65	0,35	0,131	0,075	0,160
14033	14619/2	0,54	0,2	0,23	0,1	0,023	0,029	0,040
14034	14620/1	1,09	0,7	0,56	0,28	0,072	0,055	0,151
14035	14620/2	0,42	0,72	0,25	0,1	0,038	0,028	0,048
14036	14621/1	1,265	1,79	0,78	0,23	0,085	0,062	0,126
14037	14621/2	0,25	0,35	0,1	0,1	0,020	0,015	0,043
14038	14622/1	1,255	0,81	0,43	0,24	0,087	0,059	0,117
14039	14622/2	0,605	0,24	0,1	0,1	0,019	0,016	0,042
14040	14623/1	1,12	1,19	0,39	0,24	0,091	0,057	0,127
14041	14623/2	0,38	0,41	0,1	0,1	0,017	0,018	0,041
14042	14624/1	1,285	1,24	0,54	0,34	0,169	0,079	0,162
14043	14624/2	0,575	0,65	0,1	0,1	0,035	0,016	0,043
14044	14625/1	1,075	1,22	0,36	0,2	0,055	0,049	0,115
14045	14625/2	0,45	0,51	0,1	0,1	0,021	0,020	0,043
14046	14626/1	1,06	0,39	0,55	0,35	0,070	0,063	0,169
14047	14626/2	0,435	0,46	0,1	0,1	0,040	0,013	0,045
14048	14627/1	1,565	2,1	1,18	0,45	0,316	0,180	0,200
14049	14627/2	0,475	0,82	0,27	0,1	0,046	0,042	0,042
14050	14628/1	0,98	0,37	0,23	0,3	0,055	0,040	0,135
14051	14628/2	0,42	0,1	0,1	0,1	0,007	0,016	0,044
14052	14629/1	1,14	15,16	1,32	0,33	0,157	0,079	0,211
14053	14629/2	0,435	6,76	0,1	0,1	0,043	0,014	0,040
14054	14630/1	1,025	5,09	0,95	0,29	0,076	0,054	0,200
14055	14630/2	0,325	1,24	0,1	0,1	0,013	0,014	0,042
14056	14631/1	1,11	7,62	1,01	0,29	0,086	0,059	0,191
14057	14631/2	0,475	4,6	0,1	0,1	0,021	0,013	0,042
14058	14632/1	1,22	10,73	1,91	0,48	0,157	0,103	0,323

14059	14632/2	0,38	4,34	0,26	0,1	0,029	0,027	0,042
14060	14633/1	1,03	4,8	1,12	0,26	0,094	0,068	0,134
14061	14633/2	0,36	1,08	0,1	0,1	0,018	0,014	0,042
14064	14635/1	1,065	1,56	0,95	0,2	0,070	0,050	0,097
14065	14635/2	0,38	0,41	0,1	0,1	0,016	0,011	0,035
14066	14636/1	1,06	3,31	0,86	0,25	0,086	0,045	0,127
14067	14636/2	0,455	0,56	0,1	0,1	0,007	0,012	0,037
14068	14637/1	1,06	1,82	0,72	0,2	0,066	0,055	0,109
14069	14637/2	0,5	1,23	0,2	0,1	0,026	0,024	0,044
14070	14638/1	0,9055	1,66	0,66	0,27	0,051	0,047	0,147
14071	14638/2	0,485	0,47	0,23	0,1	0,010	0,018	0,044
14074	14640/1	1,12	0,58	0,34	0,28	0,056	0,043	0,099
14075	14640/2	0,48	0,1	0,1	0,1	0,009	0,010	0,034
14076	14641/1	1,225	1,37	0,59	0,36	0,106	0,064	0,138
14077	14641/2	0,485	0,48	0,1	0,1	0,023	0,010	0,036
14078	14642/1	1,475	1,01	0,53	0,35	0,060	0,056	0,105
14079	14642/2	0,89	0,9	0,45	0,1	0,059	0,049	0,027
14080	14643/1	1,09	0,68	0,21	0,25	0,083	0,037	0,067
14081	14643/2	0,53	0,1	0,1	0,1	0,011	0,017	0,025
14084	14645/1	2,855	0,98	0,38	3,03	0,254	0,198	0,157
14085	14645/2	1,02	0,28	0,1	0,62	0,070	0,050	0,039
14086	14646/1	1,515	0,36	0,3	1,75	0,140	0,125	0,082
14087	14646/2	0,1	0,1	0,1	0,2	0,062	0,031	0,005
14088	14647/1	3,37	0,96	0,5	4,44	0,304	0,270	0,161
14089	14647/2	1,29	1,61	0,31	2,63	0,508	0,192	0,043
14090	14648/1	1,16	0,39	0,2	1,21	0,106	0,097	0,076
14091	14648/2	0,49	0,1	0,1	0,48	0,028	0,055	0,022
14092	14649/1	1,79	0,59	0,57	8,73	0,196	0,336	0,147
14093	14649/2	0,415	0,3	0,23	3,01	0,186	0,084	0,015
14094	14650/1	2,875	1,48	0,61	7,19	0,354	0,407	0,179
14095	14650/2	0,56	0,23	0,24	2,63	0,060	0,168	0,030
14096	14651/1	1,185	0,61	0,33	0,95	0,110	0,205	0,109
14097	14651/2	0,855	0,1	0,1	0,35	0,020	0,059	0,040
14098	14652/1	2,405	1,01	0,33	3,76	0,364	0,172	0,112
14099	14652/2	1,57	0,52	0,24	2,44	0,181	0,130	0,067
14100	14653/1	2,29	0,83	0,45	7,31	0,260	0,271	0,122
14101	14653/2	0,28	0,1	0,1	1,97	0,031	0,066	0,020
14102	14654/1	1	0,48	0,1	1,56	0,132	0,058	0,063
14103	14654/2	0,215	0,1	0,1	0,39	0,037	0,054	0,010
14104	14655/1	2,21	0,62	0,5	3,58	0,198	0,266	0,137
14105	14655/2	2,09	0,42	0,2	1,64	0,111	0,115	0,056
14106	14656/1	1,66	0,61	0,3	1,13	0,118	0,180	0,108
14107	14656/2	0,15	0,1	0,1	0,1	0,042	0,048	0,004
14108	14657/1	1,23	0,51	0,41	5,67	0,224	0,205	0,087
14109	14657/2	0,89	0,35	0,33	3,59	0,165	0,160	0,034
14110	14658/1	2,295	0,89	0,44	5,36	0,254	0,272	0,111
14111	14658/2	1,015	0,33	0,31	3,53	0,109	0,190	0,060

18444	18121/1	1,365	1,57	0,88	0,26	0,051	0,057	0,129
18445	18121/2	0,82	1,29	0,5	0,14	0,031	0,028	0,058
18446	18122/1	1,19	1,07	0,28	0,24	0,062	0,029	0,103
18447	18122/2	0,4	0,18	0,1	0,05	0,008	0,009	0,021
18448	18123/1	2,43	0,32	0,12	2,8	0,080	0,071	0,122
18449	18123/2	0,28	0,07	0,02	0,28	0,014	0,014	0,014

Extensivprogramm

BoBo-Nr.	GD-Nr.	Corg	C in Pom1	C in Pom2	C in Pom3	POM1-C	POM2-C	POM3-C
		%	%	%	%	%	%	%
14118	14665	2	1,14	0,38	0,2	0,158	0,071	0,079
14126	14673	0,82	0,66	0,1	0,32	0,089	0,033	0,097
14166	14713	3,1	4,8	4,76	7,33	0,822	0,279	0,371
14167	14714	2,5	3,43	1,12	1,78	0,278	0,226	0,263
14184	14731	1,4	0,2	0,1	0,95	0,045	0,039	0,084
14218	14765	3,4	2,83	0,1	6,91	0,385	0,074	0,228
14220	14767	2,7	0,7	0,4	2,26	0,172	0,236	0,127
14223	14770	1	6,53	0,4	0,1	0,069	0,016	0,054
14225	14772	1,7	2,48	1,04	0,29	0,058	0,047	0,118
14230	14777	2,3	1,99	1,1	0,44	0,142	0,081	0,160
14250	14797	0,91	0,24	0,25	0,49	0,087	0,085	0,076
14252	14799	2,3	2,44	1,99	1	0,158	0,111	0,296
14254	14801	1,2	0,96	0,1	0,33	0,058	0,035	0,106
14258	14805	1,7	2,1	0,49	0,5	0,049	0,085	0,167
14261	14808	2,3	10,52	2,63	0,84	0,522	0,080	0,234

Tab. 6b: Ergebnisse der konventionellen POM-Fraktionierung (POM-C/TOC: Anteil der POM-C-Menge in einer Größenfraktion bezogen auf den gesamten organischen Kohlenstoff; TOC = total organic carbon)

BoBo-Nr.	GD-Nr.	POM1-C/TOC	POM2-C/TOC	POM3-C/TOC
		%	%	%
14022	14614/1	6,2	4,2	11,0
14023	14614/2	8,3	4,9	9,2
14024	14615/1	9,8	5,0	10,1
14025	14615/2	6,2	5,5	9,8
14026	14616/1	7,7	5,6	13,4
14027	14616/2	5,2	7,3	8,8
14028	14617/1	8,2	5,2	12,6
14029	14617/2	7,6	6,7	9,8
14030	14618/1	7,3	4,4	12,7
14031	14618/2	4,9	3,4	10,6
14032	14619/1	9,8	5,6	11,9
14033	14619/2	4,3	5,3	7,4
14034	14620/1	6,6	5,0	13,9
14035	14620/2	9,1	6,7	11,4

14036	14621/1	6,7	4,9	10,0
14037	14621/2	7,9	5,9	17,3
14038	14622/1	6,9	4,7	9,3
14039	14622/2	3,1	2,7	6,9
14040	14623/1	8,1	5,1	11,4
14041	14623/2	4,6	4,7	10,7
14042	14624/1	13,1	6,1	12,6
14043	14624/2	6,1	2,8	7,4
14044	14625/1	5,1	4,5	10,7
14045	14625/2	4,8	4,3	9,5
14046	14626/1	6,6	6,0	15,9
14047	14626/2	9,1	2,9	10,4
14048	14627/1	20,2	11,5	12,8
14049	14627/2	9,6	8,9	8,9
14050	14628/1	5,6	4,0	13,8
14051	14628/2	1,6	3,8	10,5
14052	14629/1	13,7	7,0	18,5
14053	14629/2	9,8	3,2	9,2
14054	14630/1	7,4	5,2	19,5
14055	14630/2	3,9	4,3	13,0
14056	14631/1	7,8	5,3	17,2
14057	14631/2	4,5	2,7	8,9
14058	14632/1	12,9	8,5	26,5
14059	14632/2	7,6	7,1	11,1
14060	14633/1	9,2	6,6	13,0
14061	14633/2	5,0	3,9	11,6
14064	14635/1	6,5	4,7	9,1
14065	14635/2	4,3	3,0	9,2
14066	14636/1	8,1	4,3	12,0
14067	14636/2	1,6	2,7	8,1
14068	14637/1	6,2	5,2	10,3
14069	14637/2	5,2	4,8	8,8
14070	14638/1	5,6	5,2	16,2
14071	14638/2	2,1	3,7	9,1
14074	14640/1	5,0	3,9	8,8
14075	14640/2	1,9	2,0	7,1
14076	14641/1	8,7	5,2	11,3
14077	14641/2	4,7	2,1	7,4
14078	14642/1	4,1	3,8	7,1
14079	14642/2	6,6	5,5	3,0
14080	14643/1	7,6	3,4	6,2
14081	14643/2	2,1	3,1	4,8
14084	14645/1	8,9	6,9	5,5
14085	14645/2	6,9	4,9	3,8
14086	14646/1	9,2	8,2	5,4
14087	14646/2	61,8	30,8	4,6
14088	14647/1	9,0	8,0	4,8

14089	14647/2	39,4	14,9	3,3
14090	14648/1	9,2	8,3	6,5
14091	14648/2	5,7	11,1	4,6
14092	14649/1	11,0	18,8	8,2
14093	14649/2	44,7	20,3	3,6
14094	14650/1	12,3	14,2	6,2
14095	14650/2	10,8	30,0	5,3
14096	14651/1	9,2	17,3	9,2
14097	14651/2	2,3	6,9	4,6
14098	14652/1	15,1	7,1	4,7
14099	14652/2	11,5	8,3	4,2
14100	14653/1	11,4	11,8	5,3
14101	14653/2	11,1	23,5	7,3
14102	14654/1	13,2	5,8	6,3
14103	14654/2	17,2	25,1	4,8
14104	14655/1	9,0	12,1	6,2
14105	14655/2	5,3	5,5	2,7
14106	14656/1	7,1	10,9	6,5
14107	14656/2	27,8	31,8	2,5
14108	14657/1	18,2	16,7	7,1
14109	14657/2	18,6	18,0	3,8
14110	14658/1	11,1	11,8	4,8
14111	14658/2	10,7	18,7	5,9
18444	18121/1	3,76	4,16	9,43
18445	18121/2	3,80	3,43	7,11
18446	18122/1	5,22	2,47	8,65
18447	18122/2	2,07	2,18	5,22
18448	18123/1	3,31	2,92	5,01
18449	18123/2	5,02	4,93	4,87

Extensivprogramm

BoBo-Nr.	GD-Nr.	POM1-C/TOC	POM2-C/TOC	POM3-C/TOC
		%	%	%
14118	14665	7,9	3,5	3,9
14126	14673	10,8	4,1	11,8
14166	14713	26,5	9,0	12,0
14167	14714	11,1	9,0	10,5
14184	14731	3,2	2,8	6,0
14218	14765	11,3	2,2	6,7
14220	14767	6,4	8,7	4,7
14223	14770	6,9	1,6	5,4
14225	14772	3,4	2,7	6,9
14230	14777	6,2	3,5	7,0
14250	14797	9,6	9,4	8,4
14252	14799	6,9	4,8	12,9
14254	14801	4,8	2,9	8,8
14258	14805	2,9	5,0	9,8
14261	14808	22,7	3,5	10,2

Tab. 7a: Vergleich der mittels Elementaranalyse gemessenen (Corg - EA) und der mittels MIRS-PLSR abgeschätzten Gehalte an Corg (Corg – MIRS) in Bodenproben des Intensivprogramms. Basis für Kalibration: Bodenproben des Intensivprogramms (N = 90). Nicht berücksichtigte Ausreißer-Proben: BoBo-Nr.: 14103, 14104, 14048, 14098, 14089.

BoBo-Nr.	GD-Nr.	Corg - EA	Corg - MIRS	Abweichung
		%	%	%
14022	14614/1	0,99	1,04	-0,05
14023	14614/2	0,49	0,50	-0,01
14024	14615/1	1,09	1,08	0,01
14025	14615/2	0,48	0,54	-0,06
14026	14616/1	1,04	1,02	0,02
14027	14616/2	0,54	0,57	-0,03
14028	14617/1	1,01	0,99	0,02
14029	14617/2	0,48	0,47	0,01
14030	14618/1	1,04	1,08	-0,04
14031	14618/2	0,38	0,37	0,01
14032	14619/1	1,34	1,31	0,03
14033	14619/2	0,54	0,56	-0,02
14034	14620/1	1,09	1,02	0,07
14035	14620/2	0,42	0,45	-0,03
14036	14621/1	1,27	1,08	0,19
14037	14621/2	0,25	0,01	0,24
14038	14622/1	1,26	1,23	0,03
14039	14622/2	0,61	0,61	0,00
14040	14623/1	1,12	1,08	0,04
14041	14623/2	0,38	0,31	0,07
14042	14624/1	1,29	1,26	0,03
14043	14624/2	0,58	0,62	-0,04
14044	14625/1	1,08	1,13	-0,05
14045	14625/2	0,45	0,48	-0,03
14046	14626/1	1,06	1,02	0,04
14047	14626/2	0,44	0,47	-0,03
14048	14627/1	1,57	1,31	0,26
14049	14627/2	0,48	0,47	0,01
14050	14628/1	0,98	1,02	-0,04
14051	14628/2	0,42	0,52	-0,10
14052	14629/1	1,14	1,12	0,02
14053	14629/2	0,44	0,38	0,06
14054	14630/1	1,03	1,05	-0,02
14055	14630/2	0,33	0,35	-0,02
14056	14631/1	1,11	1,10	0,01
14057	14631/2	0,48	0,43	0,05
14058	14632/1	1,22	1,12	0,10
14059	14632/2	0,38	0,38	0,00
14060	14633/1	1,03	1,01	0,02
14061	14633/2	0,36	0,49	-0,13

14064	14635/1	1,07	1,12	-0,05
14065	14635/2	0,38	0,40	-0,02
14066	14636/1	1,06	1,03	0,03
14067	14636/2	0,46	0,36	0,10
14068	14637/1	1,06	1,09	-0,03
14069	14637/2	0,5	0,56	-0,06
14070	14638/1	0,91	1,03	-0,12
14071	14638/2	0,49	0,58	-0,09
14074	14640/1	1,12	1,23	-0,11
14075	14640/2	0,48	0,52	-0,04
14076	14641/1	1,23	1,15	0,08
14077	14641/2	0,49	0,52	-0,03
14078	14642/1	1,48	1,39	0,09
14079	14642/2	0,89	1,00	-0,11
14080	14643/1	1,09	1,15	-0,06
14081	14643/2	0,53	0,69	-0,16
14084	14645/1	2,86	2,94	-0,08
14085	14645/2	1,02	1,08	-0,06
14086	14646/1	1,52	1,71	-0,19
14087	14646/2	0,1	-0,02	0,12
14088	14647/1	3,37	3,01	0,36
14089	14647/2	1,29	1,66	-0,37
14090	14648/1	1,16	0,94	0,22
14091	14648/2	0,49	0,34	0,15
14092	14649/1	1,79	1,96	-0,17
14093	14649/2	0,42	0,25	0,17
14094	14650/1	2,88	2,78	0,10
14095	14650/2	0,56	0,30	0,26
14096	14651/1	1,19	1,30	-0,11
14097	14651/2	0,86	0,97	-0,11
14098	14652/1	2,41	2,34	0,07
14099	14652/2	1,57	1,58	-0,01
14100	14653/1	2,29	2,54	-0,25
14105	14655/2	2,09	2,01	0,08
14106	14656/1	1,66	1,63	0,03
14107	14656/2	0,15	0,23	-0,08
14108	14657/1	1,23	1,43	-0,20
14109	14657/2	0,89	0,89	0,00
14110	14658/1	2,3	2,11	0,19
14111	14658/2	1,02	1,11	-0,09
18444	18121/1	1,37	1,32	0,05
18445	18121/2	0,82	0,83	-0,01
18446	18122/1	1,19	1,14	0,05
18447	18122/2	0,4	0,47	-0,07
18448	18123/1	2,43	2,15	0,28
18449	18123/2	0,28	0,36	-0,08

Tab. 7b: Vergleich der mittels Elementaranalyse gemessenen (POM1-C EA) und der mittels MIRS-PLSR abgeschätzten Gehalte an POM1-C (POM1-C MIRS) in Bodenproben des Intensivprogramms. Basis für Kalibration: Bodenproben des Intensivprogramms (N = 90)

BoBo-Nr.	GD-Nr.	POM1-C EA	POM1-C MIRS	Differenz
		%	%	%
14022	14614/1	0,060	0,082	-0,022
14023	14614/2	0,040	0,025	0,015
14024	14615/1	0,110	0,093	0,017
14025	14615/2	0,030	0,031	-0,001
14026	14616/1	0,080	0,083	-0,003
14027	14616/2	0,030	0,031	-0,001
14028	14617/1	0,080	0,082	-0,002
14029	14617/2	0,040	0,022	0,019
14030	14618/1	0,080	0,079	0,001
14031	14618/2	0,020	0,019	0,001
14032	14619/1	0,130	0,109	0,021
14033	14619/2	0,020	0,043	-0,023
14034	14620/1	0,070	0,075	-0,005
14035	14620/2	0,040	0,014	0,026
14036	14621/1	0,080	0,051	0,029
14037	14621/2	0,020	-0,043	0,063
14038	14622/1	0,090	0,100	-0,010
14039	14622/2	0,020	0,036	-0,016
14040	14623/1	0,090	0,083	0,007
14041	14623/2	0,020	0,001	0,019
14042	14624/1	0,170	0,111	0,059
14043	14624/2	0,040	0,027	0,013
14044	14625/1	0,050	0,082	-0,032
14045	14625/2	0,020	0,023	-0,003
14046	14626/1	0,070	0,076	-0,006
14047	14626/2	0,040	0,021	0,019
14049	14627/2	0,050	0,038	0,012
14050	14628/1	0,050	0,092	-0,042
14051	14628/2	0,010	0,030	-0,020
14052	14629/1	0,160	0,100	0,060
14053	14629/2	0,040	0,023	0,017
14054	14630/1	0,080	0,096	-0,016
14055	14630/2	0,010	0,035	-0,025
14056	14631/1	0,090	0,091	-0,001
14057	14631/2	0,020	0,029	-0,009
14058	14632/1	0,160	0,091	0,069
14059	14632/2	0,030	0,007	0,023
14060	14633/1	0,090	0,071	0,019
14061	14633/2	0,020	0,018	0,002
14064	14635/1	0,070	0,085	-0,015

14065	14635/2	0,020	0,031	-0,011
14066	14636/1	0,090	0,079	0,011
14067	14636/2	0,010	0,027	-0,017
14068	14637/1	0,070	0,078	-0,008
14069	14637/2	0,030	0,037	-0,007
14070	14638/1	0,050	0,070	-0,020
14071	14638/2	0,010	0,042	-0,032
14074	14640/1	0,060	0,064	-0,004
14075	14640/2	0,010	0,002	0,008
14076	14641/1	0,110	0,067	0,043
14077	14641/2	0,020	0,015	0,005
14078	14642/1	0,060	0,117	-0,057
14079	14642/2	0,060	0,078	-0,018
14080	14643/1	0,080	0,064	0,016
14081	14643/2	0,010	-0,003	0,013
14084	14645/1	0,250	0,249	0,001
14085	14645/2	0,070	0,073	-0,003
14086	14646/1	0,140	0,081	0,059
14087	14646/2	0,060	0,067	-0,007
14088	14647/1	0,300	0,313	-0,013
14090	14648/1	0,110	0,112	-0,002
14091	14648/2	0,030	0,069	-0,039
14092	14649/1	0,200	0,198	0,002
14093	14649/2	0,190	0,105	0,085
14094	14650/1	0,350	0,306	0,044
14095	14650/2	0,060	0,079	-0,019
14096	14651/1	0,110	0,130	-0,020
14097	14651/2	0,020	0,091	-0,071
14099	14652/2	0,180	0,131	0,049
14100	14653/1	0,260	0,241	0,019
14101	14653/2	0,030	0,106	-0,076
14102	14654/1	0,130	0,120	0,010
14105	14655/2	0,110	0,154	-0,044
14106	14656/1	0,120	0,157	-0,037
14107	14656/2	0,040	0,062	-0,022
14108	14657/1	0,220	0,177	0,043
14109	14657/2	0,170	0,151	0,019
14110	14658/1	0,250	0,183	0,067
14111	14658/2	0,110	0,117	-0,007
18444	18121/1	0,050	0,110	-0,060
18445	18121/2	0,030	0,066	-0,036
18446	18122/1	0,060	0,059	0,001
18447	18122/2	0,010	0,011	-0,001
18448	18123/1	0,080	0,180	-0,100
18449	18123/2	0,010	0,044	-0,035

Tab. 7c: Vergleich der mittels Elementaranalyse gemessenen (POM2-C EA) und der mittels MIRS-PLSR abgeschätzten Gehalte an POM2-C (POM2-C MIRS) in Bodenproben des Intensivprogramms. Basis für Kalibration: Bodenproben des Intensivprogramms (N = 90). Nicht berücksichtigte Ausreißerproben: BoBo-Nr.: 14048, 14092, 14101, 14103, 14104, 18448.

BoBo-Nr.	GD-Nr.	POM2-C EA	POM2-C MIRS	Differenz
14022	14614/1	0,04	0,066	-0,026
14023	14614/2	0,02	0,034	-0,014
14024	14615/1	0,05	0,070	-0,020
14025	14615/2	0,03	0,031	-0,001
14026	14616/1	0,06	0,064	-0,004
14027	14616/2	0,04	0,026	0,014
14028	14617/1	0,05	0,059	-0,009
14029	14617/2	0,03	0,031	-0,001
14030	14618/1	0,05	0,062	-0,012
14031	14618/2	0,01	0,027	-0,017
14032	14619/1	0,07	0,084	-0,014
14033	14619/2	0,03	0,035	-0,005
14034	14620/1	0,05	0,050	0,000
14035	14620/2	0,03	0,002	0,028
14036	14621/1	0,06	0,050	0,010
14037	14621/2	0,01	-0,008	0,018
14038	14622/1	0,06	0,087	-0,027
14039	14622/2	0,02	0,058	-0,038
14040	14623/1	0,06	0,067	-0,007
14041	14623/2	0,02	0,007	0,013
14042	14624/1	0,08	0,054	0,026
14043	14624/2	0,02	0,027	-0,007
14044	14625/1	0,05	0,047	0,003
14045	14625/2	0,02	0,021	-0,001
14046	14626/1	0,06	0,078	-0,018
14047	14626/2	0,01	0,042	-0,032
14049	14627/2	0,04	0,039	0,001
14050	14628/1	0,04	0,080	-0,040
14051	14628/2	0,02	0,035	-0,014
14052	14629/1	0,08	0,067	0,012
14053	14629/2	0,01	0,017	-0,007
14054	14630/1	0,05	0,073	-0,023
14055	14630/2	0,01	0,022	-0,012
14056	14631/1	0,06	0,052	0,008
14057	14631/2	0,01	0,007	0,003
14058	14632/1	0,1	0,053	0,047
14059	14632/2	0,03	0,001	0,029
14060	14633/1	0,07	0,046	0,024
14061	14633/2	0,01	0,014	-0,004
14064	14635/1	0,05	0,051	-0,001
14065	14635/2	0,01	0,037	-0,027

14066	14636/1	0,05	0,054	-0,004
14067	14636/2	0,01	0,013	-0,003
14068	14637/1	0,06	0,058	0,003
14069	14637/2	0,02	0,023	-0,003
14070	14638/1	0,05	0,056	-0,006
14071	14638/2	0,02	0,034	-0,014
14074	14640/1	0,04	0,051	-0,011
14075	14640/2	0,01	-0,009	0,019
14076	14641/1	0,06	0,055	0,005
14077	14641/2	0,01	0,008	0,002
14078	14642/1	0,06	0,042	0,018
14079	14642/2	0,05	0,059	-0,009
14080	14643/1	0,04	0,042	-0,002
14081	14643/2	0,02	0,016	0,004
14084	14645/1	0,2	0,248	-0,048
14085	14645/2	0,05	0,078	-0,028
14086	14646/1	0,12	0,181	-0,061
14087	14646/2	0,03	0,038	-0,008
14088	14647/1	0,27	0,290	-0,020
14089	14647/2	0,19	0,181	0,009
14090	14648/1	0,1	0,071	0,029
14091	14648/2	0,05	0,044	0,006
14093	14649/2	0,08	0,091	-0,010
14094	14650/1	0,41	0,388	0,022
14095	14650/2	0,17	0,158	0,012
14096	14651/1	0,2	0,153	0,047
14097	14651/2	0,06	0,105	-0,045
14098	14652/1	0,17	0,183	-0,013
14099	14652/2	0,13	0,111	0,019
14100	14653/1	0,27	0,245	0,026
14102	14654/1	0,06	0,065	-0,005
14105	14655/2	0,12	0,143	-0,023
14106	14656/1	0,18	0,189	-0,009
14107	14656/2	0,05	0,038	0,012
14108	14657/1	0,21	0,182	0,028
14109	14657/2	0,16	0,147	0,013
14110	14658/1	0,27	0,209	0,061
14111	14658/2	0,19	0,142	0,048
18444	18121/1	0,06	0,036	0,024
18445	18121/2	0,03	0,015	0,015
18446	18122/1	0,03	0,046	-0,016
18447	18122/2	0,01	-0,020	0,030
18449	18123/2	0,01	0,001	0,009

Tab. 7d: Vergleich der mittels Elementaranalyse gemessenen (POM3-C EA) und der mittels MIRS-PLSR abgeschätzten Gehalte an POM3-C (POM3-C MIRS) in Bodenproben des Intensivprogramms. Basis für Kalibration: Bodenproben des Intensivprogramms (N = 90). Nicht berücksichtigte Ausreißerproben: BoBo-Nr.: 14058, 14084, 14101, 14103, 14104, 14109.

BoBo-Nr.	GD-Nr.	POM3-C EA	POM3-C MIRS	Differenz
14022	14614/1	0,11	0,129	-0,019
14023	14614/2	0,04	0,053	-0,013
14024	14615/1	0,11	0,139	-0,029
14025	14615/2	0,05	0,063	-0,013
14026	14616/1	0,14	0,129	0,011
14027	14616/2	0,05	0,068	-0,018
14028	14617/1	0,13	0,134	-0,004
14029	14617/2	0,05	0,051	-0,001
14030	14618/1	0,13	0,127	0,003
14031	14618/2	0,04	0,039	0,001
14032	14619/1	0,16	0,159	0,001
14033	14619/2	0,04	0,070	-0,030
14034	14620/1	0,15	0,132	0,018
14035	14620/2	0,05	0,056	-0,006
14036	14621/1	0,13	0,119	0,011
14037	14621/2	0,04	0,001	0,039
14038	14622/1	0,12	0,104	0,016
14039	14622/2	0,04	0,022	0,018
14040	14623/1	0,13	0,137	-0,007
14041	14623/2	0,04	0,036	0,004
14042	14624/1	0,16	0,137	0,023
14043	14624/2	0,04	0,047	-0,007
14044	14625/1	0,11	0,127	-0,017
14045	14625/2	0,04	0,050	-0,010
14046	14626/1	0,17	0,137	0,033
14047	14626/2	0,05	0,063	-0,013
14048	14627/1	0,20	0,162	0,038
14049	14627/2	0,04	0,053	-0,013
14050	14628/1	0,14	0,132	0,008
14051	14628/2	0,04	0,063	-0,023
14052	14629/1	0,21	0,163	0,047
14053	14629/2	0,04	0,055	-0,015
14054	14630/1	0,20	0,161	0,039
14055	14630/2	0,04	0,051	-0,011
14056	14631/1	0,19	0,153	0,037
14057	14631/2	0,04	0,049	-0,009
14059	14632/2	0,04	0,030	0,010
14060	14633/1	0,13	0,145	-0,015
14061	14633/2	0,04	0,053	-0,013
14064	14635/1	0,10	0,138	-0,038
14065	14635/2	0,04	0,020	0,020

14066	14636/1	0,13	0,116	0,014
14067	14636/2	0,04	0,016	0,024
14068	14637/1	0,11	0,135	-0,025
14069	14637/2	0,04	0,066	-0,026
14070	14638/1	0,15	0,132	0,019
14071	14638/2	0,04	0,048	-0,008
14074	14640/1	0,10	0,114	-0,014
14075	14640/2	0,03	0,015	0,015
14076	14641/1	0,14	0,123	0,017
14077	14641/2	0,04	0,047	-0,007
14078	14642/1	0,10	0,063	0,037
14079	14642/2	0,03	0,010	0,020
14080	14643/1	0,07	0,122	-0,052
14081	14643/2	0,03	0,027	0,003
14085	14645/2	0,04	0,030	0,010
14086	14646/1	0,08	0,080	0,000
14087	14646/2	0,01	0,041	-0,041
14088	14647/1	0,16	0,106	0,054
14089	14647/2	0,04	0,067	-0,027
14090	14648/1	0,08	0,078	0,002
14091	14648/2	0,02	0,002	0,018
14092	14649/1	0,15	0,094	0,056
14093	14649/2	0,02	-0,004	0,024
14094	14650/1	0,18	0,156	0,024
14095	14650/2	0,03	0,001	0,029
14096	14651/1	0,11	0,133	-0,023
14097	14651/2	0,04	0,051	-0,011
14098	14652/1	0,11	0,131	-0,021
14099	14652/2	0,07	0,053	0,017
14100	14653/1	0,12	0,140	-0,020
14102	14654/1	0,06	0,023	0,037
14105	14655/2	0,06	0,071	-0,011
14106	14656/1	0,11	0,125	-0,015
14107	14656/2	0,01	0,031	-0,031
14108	14657/1	0,09	0,123	-0,033
14110	14658/1	0,11	0,126	-0,016
14111	14658/2	0,06	0,035	0,025
18444	18121/1	0,13	0,137	-0,007
18445	18121/2	0,06	0,081	-0,021
18446	18122/1	0,10	0,095	0,005
18447	18122/2	0,02	0,015	0,005
18448	18123/1	0,12	0,144	-0,024
18449	18123/2	0,01	0,006	0,004

Tab. 8: Vergleich der mittels Elementaranalyse gemessenen (Corg EA) und der mittels MIRS-PLSR abgeschätzten Gehalte an Corg (Corg MIRS) in Bodenproben des Extensivprogramms. Basis für Kalibration: Bodenproben des Intensivprogramms (N = 90; MIRS-1) sowie Bodenproben des Intensiv- und Extensivprogramms (N = 245; MIRS-2); Ar = Ausreißer.

BoBo-Nr.	GD-Nr.	Corg EA	Corg MIRS-1	Ar	Corg MIRS-2	Ar
		%	%		%	
14112	14659	1,6	1,68		1,64	
14113	14660	1,4	1,44		1,32	
14114	14661	1,1	1,24		1,16	
14115	14662	1,3	1,51		1,41	
14116	14663	1,2	1,28		1,23	
14117	14664	1,2	1,32		1,31	
14118	14665	2	2,03		1,94	
14119	14666	1,6	1,69		1,60	
14120	14667	1,2	1,43		1,23	
14121	14668	0,86	1,07		0,94	
14122	14669	0,97	1,11		1,00	
14123	14670	1,2	1,27		1,14	
14124	14671	1,1	1,25		1,04	
14125	14672	0,83	1,3		1,06	
14126	14673	0,82	1		0,89	
14127	14674	0,81	1,08		0,99	
14128	14675	1,1	1,34		1,13	
14129	14676	1,1	1,42		1,20	
14130	14677	1,2	1,23		1,00	
14131	14678	1,2	1,65		1,34	
14132	14679	1,1	1,26		1,06	
14133	14680	1,2	1,49		1,22	
14134	14681	1,2	1,48		1,20	
14135	14682	2,2	2,61	x	2,33	
14136	14683	1,2	1,42		1,14	
14137	14684	1,9	2		1,84	
14138	14685	1	1,27		1,12	
14139	14686	1,2	1,4		1,20	
14140	14687	1,1	1,36		1,12	
14141	14688	1,1	1,27		1,12	
14142	14689	0,87	0,91		0,89	
14143	14690	0,93	1,12		1,02	
14144	14691	1,1	1,05		0,97	
14145	14692	0,82	2,22	x	0,87	
14146	14693	0,9	1,09	x	0,95	
14147	14694	1,6	1,89		1,80	
14148	14695	1,6	1,91		1,76	
14149	14696	2	2,29		2,08	
14150	14697	1,7	2,12		1,96	
14151	14698	2,1	2,32		2,20	

14152	14699	2,3	2,16	x	2,31	x
14153	14700	1,7	1,81	x	1,76	
14154	14701	1,3	1,31		1,23	
14155	14702	1,2	1,33		1,23	
14156	14703	0,95	0,91		0,94	
14157	14704	1,2	1,25		1,24	
14158	14705	0,93	1,08		1,07	
14159	14706	1,9	2,85	x	2,06	x
14160	14707	1,9	1,91	x	1,81	
14161	14708	2	2,11	x	1,99	
14162	14709	2,1	2,6	x	1,93	
14163	14710	1,7	2,79	x	1,66	
14164	14711	3,2	6,69	x	2,49	x
14165	14712	1,6	1,71		1,56	
14166	14713	3,1	4,8	x	2,52	x
14167	14714	2,5	3,83	x	2,62	x
14168	14715	1,3	1,6		1,37	
14169	14716	1,2	1,46		1,27	
14170	14717	1,2	1,38		1,27	
14171	14718	1,3	1,35		1,31	
14172	14719	1,5	1,3		1,30	
14173	14720	1,3	1,44		1,27	
14174	14721	1,6	1,6	x	1,51	
14175	14722	1,8	1,81	x	1,70	
14176	14723	1,8	1,79	x	1,71	
14177	14724	1,3	1,16		1,26	
14178	14725	1,3	1,38		1,35	
14179	14726	1,1	1,36		1,18	
14180	14727	1,5	1,49		1,59	
14181	14728	1,7	1,32	x	1,88	x
14182	14729	1,2	0,98		1,16	
14183	14730	2,2	1,89	x	2,15	x
14184	14731	1,4	1,33		1,44	
14185	14732	1,5	1,12	x	1,45	x
14186	14733	1,5	1,32	x	1,60	
14187	14734	1,3	0,89	x	1,19	x
14188	14735	1,3	0,98	x	1,27	x
14189	14736	1,1	1,31		1,11	
14190	14737	0,73	1,03		0,83	
14191	14738	1,7	1,95		1,72	
14192	14739	1,9	2,11		1,93	
14193	14740	1,8	2,09	x	1,85	
14194	14741	1,9	2,1		1,87	
14195	14742	1,7	4,71	x	1,74	x
14196	14743	1,2	1,33		1,10	
14197	14744	1,4	1,62		1,44	
14198	14745	1,2	1,38		1,17	

14199	14746	1,4	1,71		1,35	
14200	14747	1,4	1,42		1,39	
14201	14748	1,2	1,86	x	1,19	
14202	14749	1,1	1,39		1,22	
14203	14750	1	1,25		1,05	
14204	14751	1,7	1,91		1,77	
14205	14752	2,2	2,18		2,09	
14206	14753	1,7	1,85		1,64	
14207	14754	1,8	1,81		1,71	
14208	14755	1,7	3,06	x	1,66	
14209	14756	1,7	1,87		1,65	
14210	14757	1,7	1,79		1,73	
14211	14758	1,3	1,44		1,39	
14212	14759	1,2	1,17		1,15	
14213	14760	1,8	1,69		1,71	
14214	14761	1,5	1,51		1,55	
14215	14762	0,88	1,07		0,98	
14216	14763	1,3	1,39		1,19	x
14217	14764	1,2	1,42		1,31	
14218	14765	3,4	2,9	x	2,72	x
14219	14766	2	2,19		2,00	
14220	14767	2,7	2,71	x	2,55	x
14221	14768	2,6	2,75	x	2,43	x
14222	14769	1,1	1,23		1,14	
14223	14770	1	1,07		1,02	
14224	14771	2,1	2,19	x	1,99	
14225	14772	1,7	1,62	x	1,65	
14226	14773	1,2	1,28		1,28	
14227	14774	1,5	1,4	x	1,45	
14228	14775	1,2	1,06		1,03	
14229	14776	1,5	1,41		1,24	
14230	14777	2,3	2,24	x	2,13	x
14231	14778	1,6	1,79		1,63	
14232	14779	1,7	1,66	x	1,66	x
14233	14780	1,2	1,23		1,21	
14234	14781	2	1,78	x	2,05	x
14235	14782	1,6	1,55	x	1,65	
14236	14783	1,6	1,55		1,59	
14237	14784	2	2,48	x	2,11	
14238	14785	1	1,2		1,06	
14239	14786	1,5	1,74		1,52	
14240	14787	1,2	1,37		1,33	
14241	14788	1,2	1,39		1,27	
14242	14789	1,3	1,55		1,32	
14243	14790	1	1,34		1,09	
14244	14791	1,1	1,25		1,09	
14245	14792	1	1,36		1,03	

14246	14793	1,3	1,57	x	1,23	
14247	14794	1,3	1,4	x	1,27	
14248	14795	1,6	1,77	x	1,80	
14249	14796	0,88	1,07		0,92	
14250	14797	0,91	1,1		0,99	
14251	14798	1,2	1,44	x	1,19	
14252	14799	2,3	2,38	x	1,98	x
14253	14800	1,4	1,49		1,45	
14254	14801	1,2	1,3		1,29	
14255	14802	1,1	1,09		0,97	
14256	14803	1,1	1,34		1,28	
14257	14804	1,1	1,28		1,18	
14258	14805	1,7	1,65	x	1,73	
14259	14806	1,2	1,5		1,32	
14260	14807	1,1	1,23	x	1,18	
14261	14808	2,3	3,35	x	2,17	x
14262	14809	1,2	1,31		1,24	
14263	14810	1,6	1,6	x	1,56	x
14264	14811	1,3	1,24	x	2,00	x
14265	14812	1	3,02	x	1,13	x
14266	14813	1,2	1,42		1,37	

Tab. 9: Mittels MIRS-PLSR abgeschätzte Gehalte an POM1-C, POM2-C und POM3-C in Bodenproben des Extensivprogramms . Basis für Kalibration: Bodenproben des Intensivprogramms (N = 90) (POM-C: g C in einer POM-Größenfraktion pro 100 g Boden)

BoBo-Nr.	GD-Archiv-Nr.	POM1-C	Ausreißer	POM2-C	Ausreißer	POM3-C	Ausreißer
14112	14659	0,074		0,097		0,125	
14113	14660	0,078		0,070		0,135	
14114	14661	0,052		0,097		0,108	
14115	14662	0,089		0,057		0,144	
14116	14663	0,050		0,065		0,101	
14117	14664	0,078		0,061		0,134	
14118	14665	0,116		0,150		0,092	x
14119	14666	0,110		0,102		0,103	
14120	14667	0,138		0,133		0,145	
14121	14668	0,105		0,082		0,142	x
14122	14669	0,082		0,110		0,090	
14123	14670	0,100		0,074		0,138	x
14124	14671	0,065		0,089		0,145	
14125	14672	0,095		0,078		0,167	x
14126	14673	0,042		0,100		0,088	
14127	14674	0,052		0,073		0,111	
14128	14675	0,055		0,112		0,082	
14129	14676	0,063		0,071		0,120	

14130	14677	0,052		0,088		0,103	
14131	14678	0,100		0,065		0,157	
14132	14679	0,063		0,082		0,107	
14133	14680	0,097		0,120		0,180	
14134	14681	0,086		0,103		0,169	x
14135	14682	0,202		0,169		0,147	
14136	14683	0,094		0,105		0,167	x
14137	14684	0,149	x	0,102		0,166	
14138	14685	0,092		0,075	x	0,167	x
14139	14686	0,073		0,069		0,168	x
14140	14687	0,095		0,123		0,137	
14141	14688	0,105		0,103		0,216	x
14142	14689	0,054		0,062		0,117	
14143	14690	0,084		0,061		0,185	
14144	14691	0,059		0,065		0,156	
14145	14692	0,229	x	0,073	x	0,220	x
14146	14693	0,116		0,054		0,160	x
14147	14694	0,141	x	0,091	x	0,138	
14148	14695	0,153		0,177		0,110	
14149	14696	0,180		0,151		0,145	
14150	14697	0,170		0,216		0,124	
14151	14698	0,188		0,168		0,144	
14152	14699	0,096	x	0,185	x	0,085	x
14153	14700	0,101		0,137		0,136	x
14154	14701	0,132		0,106		0,106	x
14155	14702	0,141		0,087		0,149	x
14156	14703	0,064		0,090		0,077	
14157	14704	0,112		0,083		0,131	
14158	14705	0,072		0,083		0,109	
14159	14706	0,403	x	0,167	x	0,039	x
14160	14707	0,177	x	0,129	x	0,029	x
14161	14708	0,196	x	0,153	x	0,089	x
14162	14709	0,258	x	0,201	x	0,082	x
14163	14710	0,386	x	0,188	x	0,050	x
14164	14711	1,143	x	-0,454	x	0,230	x
14165	14712	0,148		0,117		0,127	
14166	14713	0,868	x	-0,018	x	0,010	x
14167	14714	0,492	x	0,259	x	0,087	x
14168	14715	0,137		0,121		0,122	
14169	14716	0,146		0,165		0,091	
14170	14717	0,106		0,060		0,147	
14171	14718	0,121		0,063		0,148	
14172	14719	0,091		0,089		0,143	
14173	14720	0,120		0,101		0,157	
14174	14721	0,140	x	0,161	x	0,129	x
14175	14722	0,171		0,178	x	0,172	
14176	14723	0,137	x	0,176	x	0,017	x

14177	14724	0,068		0,082		0,116	
14178	14725	0,106		0,071		0,158	
14179	14726	0,065		0,083		0,116	
14180	14727	0,094		0,087		0,136	
14181	14728	0,160	x	0,034	x	-0,050	x
14182	14729	0,076		0,057	x	0,092	x
14183	14730	-0,023	x	0,185	x	0,095	x
14184	14731	0,113		0,136	x	0,033	x
14185	14732	0,078		0,006	x	-0,019	x
14186	14733	0,116	x	0,055	x	-0,008	x
14187	14734	0,077		-0,023	x	-0,036	x
14188	14735	0,089	x	-0,013	x	-0,088	x
14189	14736	0,117		0,118		0,127	x
14190	14737	0,081		0,089		0,142	x
14191	14738	0,121		0,116		0,165	
14192	14739	0,127		0,098		0,152	
14193	14740	0,079	x	0,172		0,076	x
14194	14741	0,130		0,175		0,146	x
14195	14742	0,659	x	0,135	x	0,170	x
14196	14743	0,071		0,072		0,103	x
14197	14744	0,138		0,103		0,112	
14198	14745	0,092		0,095		0,152	
14199	14746	0,107		0,125		0,146	
14200	14747	0,107		0,131	x	0,072	x
14201	14748	0,119	x	0,164	x	0,136	x
14202	14749	0,089		0,075		0,137	
14203	14750	0,033		0,072		0,129	
14204	14751	0,115		0,123		0,101	x
14205	14752	0,104	x	0,153		0,102	x
14206	14753	0,087	x	0,137		0,097	
14207	14754	0,098		0,075		0,169	x
14208	14755	0,337	x	0,298	x	0,118	x
14209	14756	0,128		0,164		0,094	
14210	14757	0,135		0,104		0,152	
14211	14758	0,119		0,092		0,131	
14212	14759	0,040		0,074		0,108	
14213	14760	0,091		0,095		0,143	x
14214	14761	0,077		0,115	x	0,129	x
14215	14762	0,096		0,080		0,221	x
14216	14763	0,124		0,182		0,079	x
14217	14764	0,114		0,167		0,123	
14218	14765	0,272	x	0,257	x	0,187	
14219	14766	0,149	x	0,130	x	0,155	x
14220	14767	0,263		0,327	x	0,160	x
14221	14768	0,245		0,265	x	0,172	
14222	14769	0,064		0,065		0,136	
14223	14770	0,063		0,089		0,137	

14224	14771	0,108	x	0,141	x	0,069	
14225	14772	0,047	x	0,101		0,080	
14226	14773	0,045	x	0,067		0,095	
14227	14774	0,082	x	0,020	x	0,056	x
14228	14775	0,027	x	0,020		-0,044	x
14229	14776	0,117		0,041	x	0,055	x
14230	14777	0,065	x	0,116		0,044	
14231	14778	0,085	x	0,048		0,088	
14232	14779	0,045	x	0,001	x	0,033	x
14233	14780	0,054		0,042		0,082	
14234	14781	0,105	x	-0,016	x	0,016	x
14235	14782	0,081	x	0,014	x	0,045	x
14236	14783	0,074	x	0,055		0,066	
14237	14784	0,232		0,240		0,112	
14238	14785	0,094		0,099		0,049	
14239	14786	0,133		0,115		0,088	
14240	14787	0,101		0,083		0,100	x
14241	14788	0,094		0,070		0,090	x
14242	14789	0,112		0,057		0,123	x
14243	14790	0,130		0,128	x	0,114	x
14244	14791	0,074		0,080		0,108	x
14245	14792	0,069		0,074	x	0,123	x
14246	14793	0,121		0,179	x	0,079	x
14247	14794	0,089		0,103	x	0,103	x
14248	14795	0,163	x	0,111		0,126	x
14249	14796	0,092		0,080		0,126	x
14250	14797	0,105		0,057	x	0,165	
14251	14798	0,108	x	0,109	x	0,156	
14252	14799	0,111	x	-0,007	x	0,121	x
14253	14800	0,071		0,057		0,078	
14254	14801	0,101		0,020		0,158	
14255	14802	0,091		0,032		0,147	x
14256	14803	0,091		0,035		0,168	
14257	14804	0,092		0,047		0,131	
14258	14805	0,122		0,004	x	0,100	x
14259	14806	0,098		0,055		0,174	
14260	14807	0,091		0,043		0,148	x
14261	14808	0,450	x	0,183	x	0,103	x
14262	14809	0,064		0,022		0,124	
14263	14810	0,138	x	-0,166	x	0,100	x
14264	14811	0,208	x	0,072	x	0,101	x
14265	14812	0,599	x	-0,452	x	0,047	x
14266	14813	0,120		0,082		0,122	x

Tab. 10: Mittels MIRS-PLSR abgeschätzte Gehalte an POM1-C in Bodenproben des Extensivprogramms. Basis für Kalibration der Schätzwerte in Spalte 3: Bodenproben des Intensivprogramms (N = 90); Basis für Kalibration der Schätzwerte in Spalte 5: Bodenproben des Intensivprogramms (N = 90) plus 15 Bodenproben des Extensivprogramms. Letzte Spalte: Ergebnisse einer konventionellen physikalischen POM-Fraktionierung und C-Elementaranalyse („ground truth“) (POM-C: g C in einer POM-Größenfraktion pro 100 g Boden)

BoBo-Nr.	GD-Archiv-Nr.	POM1-C Kal_intensiv	Ausreißer	POM1-C Kal_intens+ext	Ausreißer	POM1-C ground truth
14112	14659	0,074		0,079		
14113	14660	0,078		0,076		
14114	14661	0,052		0,055		
14115	14662	0,089		0,084		
14116	14663	0,050		0,070		
14117	14664	0,078		0,080		
14118	14665	0,116		0,125		0,158
14119	14666	0,110		0,125		
14120	14667	0,138		0,107		
14121	14668	0,105		0,083		
14122	14669	0,082		0,098		
14123	14670	0,100		0,095		
14124	14671	0,065		0,064		
14125	14672	0,095		0,094		
14126	14673	0,042		0,057		0,089
14127	14674	0,052		0,061		
14128	14675	0,055		0,077		
14129	14676	0,063		0,048		
14130	14677	0,052		0,067		
14131	14678	0,100		0,091		
14132	14679	0,063		0,060		
14133	14680	0,097		0,083		
14134	14681	0,086		0,079		
14135	14682	0,202		0,166	x	
14136	14683	0,094		0,095		
14137	14684	0,149	x	0,111		
14138	14685	0,092		0,068		
14139	14686	0,073		0,074		
14140	14687	0,095		0,098		
14141	14688	0,105		0,071		
14142	14689	0,054		0,033		
14143	14690	0,084		0,043		
14144	14691	0,059		0,047		
14145	14692	0,229	x	0,215		
14146	14693	0,116		0,071		
14147	14694	0,141	x	0,123	x	

14148	14695	0,153		0,158		
14149	14696	0,180		0,172	x	
14150	14697	0,170		0,163		
14151	14698	0,188		0,169	x	
14152	14699	0,096	x	0,146		
14153	14700	0,101		0,106		
14154	14701	0,132		0,092	x	
14155	14702	0,141		0,079		
14156	14703	0,064		0,051		
14157	14704	0,112		0,068		
14158	14705	0,072		0,065		
14159	14706	0,403	x	0,304		
14160	14707	0,177	x	0,172		
14161	14708	0,196	x	0,159		
14162	14709	0,258	x	0,233		
14163	14710	0,386	x	0,292		
14164	14711	1,143	x	1,478	x	
14165	14712	0,148		0,123		
14166	14713	0,868	x	0,806	x	0,822
14167	14714	0,492	x	0,422	x	0,278
14168	14715	0,137		0,140		
14169	14716	0,146		0,140		
14170	14717	0,106		0,065		
14171	14718	0,121		0,059		
14172	14719	0,091		0,088		
14173	14720	0,120		0,115		
14174	14721	0,140	x	0,129		
14175	14722	0,171		0,151		
14176	14723	0,137	x	0,161		
14177	14724	0,068		0,048		
14178	14725	0,106		0,079		
14179	14726	0,065		0,116		
14180	14727	0,094		0,081		
14181	14728	0,160	x	0,204	x	
14182	14729	0,076		0,107	x	
14183	14730	-0,023	x	0,191		
14184	14731	0,113		0,139	x	0,045
14185	14732	0,078		0,167	x	
14186	14733	0,116	x	0,175	x	
14187	14734	0,077		0,140	x	
14188	14735	0,089	x	0,208	x	
14189	14736	0,117		0,126		
14190	14737	0,081		0,106		
14191	14738	0,121		0,136		
14192	14739	0,127		0,151		
14193	14740	0,079	x	0,133		
14194	14741	0,130		0,146		

14195	14742	0,659	x	0,591	x	
14196	14743	0,071		0,030	x	
14197	14744	0,138		0,103		
14198	14745	0,092		0,106		
14199	14746	0,107		0,082		
14200	14747	0,107		0,089		
14201	14748	0,119	x	0,183		
14202	14749	0,089		0,097		
14203	14750	0,033		0,072		
14204	14751	0,115		0,154		
14205	14752	0,104	x	0,157		
14206	14753	0,087	x	0,135		
14207	14754	0,098		0,089	x	
14208	14755	0,337	x	0,305		
14209	14756	0,128		0,142		
14210	14757	0,135		0,115		
14211	14758	0,119		0,076		
14212	14759	0,040		0,041		
14213	14760	0,091		0,097		
14214	14761	0,077		0,060		
14215	14762	0,096		0,049		
14216	14763	0,124		0,108		
14217	14764	0,114		0,124		
14218	14765	0,272	x	0,203	x	0,385
14219	14766	0,149	x	0,170	x	
14220	14767	0,263		0,198		0,172
14221	14768	0,245		0,195	x	
14222	14769	0,064		0,055		
14223	14770	0,063		0,061		0,069
14224	14771	0,108	x	0,151		
14225	14772	0,047	x	0,091		0,058
14226	14773	0,045	x	0,081		
14227	14774	0,082	x	0,089		
14228	14775	0,027	x	0,063		
14229	14776	0,117		0,114		
14230	14777	0,065	x	0,112		0,142
14231	14778	0,085	x	0,110		
14232	14779	0,045	x	0,134	x	
14233	14780	0,054		0,073		
14234	14781	0,105	x	0,218	x	
14235	14782	0,081	x	0,167	x	
14236	14783	0,074	x	0,107		
14237	14784	0,232		0,180		
14238	14785	0,094		0,124		
14239	14786	0,133		0,155	x	
14240	14787	0,101		0,064		
14241	14788	0,094		0,083		

14242	14789	0,112		0,075		
14243	14790	0,130		0,121		
14244	14791	0,074		0,084		
14245	14792	0,069		0,108		
14246	14793	0,121		0,238		
14247	14794	0,089		0,133		
14248	14795	0,163	x	0,154	x	
14249	14796	0,092		0,074		
14250	14797	0,105		0,050		0,087
14251	14798	0,108	x	0,064		
14252	14799	0,111	x	0,133	x	0,158
14253	14800	0,071		0,059		
14254	14801	0,101		0,071		0,058
14255	14802	0,091		0,055		
14256	14803	0,091		0,060		
14257	14804	0,092		0,064		
14258	14805	0,122		0,096	x	0,049
14259	14806	0,098		0,093		
14260	14807	0,091		0,098	x	
14261	14808	0,450	x	0,511	x	0,522
14262	14809	0,064		0,052		
14263	14810	0,138	x	0,151	x	
14264	14811	0,208	x	0,221	x	
14265	14812	0,599	x	0,278	x	
14266	14813	0,120		0,110	x	

Tab. 11: Mittels MIRS-PLSR abgeschätzte Gehalte an Black Carbon (g BC / kg Corg) in Bodenproben des Intensivprogramms

BoBo-Nr	GD-Archiv-Nr.	GD-Proben-Nr.	LUFA-Nr.	BC (g BC / kg Corg)	Ausreißer
14022	14614	14614/1	09-198284	67	
14023		14614/2		96	
14024	14615	14615/1	09-198285	62	
14025		14615/2		103	
14026	14616	14616/1	09-198286	62	
14027		14616/2		98	
14028	14617	14617/1	09-198287	70	
14029		14617/2		100	
14030	14618	14618/1	09-198276	75	
14031		14618/2		121	
14032	14619	14619/1	09-198277	62	
14033		14619/2		105	
14034	14620	14620/1	09-198278	39	

14035		14620/2		95
14036	14621	14621/1	09-198245	46
14037		14621/2		98
14038	14622	14622/1	09-198288	49
14039		14622/2		85
14040	14623	14623/1	09-198244	35
14041		14623/2		81
14042	14624	14624/1	09-198266	51
14043		14624/2		87
14044	14625	14625/1	09-198267	44
14045		14625/2		89
14046	14626	14626/1	09-198268	39
14047		14626/2		90
14048	14627	14627/1	09-198269	50
14049		14627/2		94
14050	14628	14628/1	09-198270	56
14051		14628/2		105
14052	14629	14629/1	09-198271	58
14053		14629/2		99
14054	14630	14630/1	09-198272	44
14055		14630/2		87
14056	14631	14631/1	09-198273	54
14057		14631/2		101
14058	14632	14632/1	09-198274	50
14059		14632/2		98
14060	14633	14633/1	09-198275	54
14061		14633/2		110
14062	14634	14634/1	09-198251	95
14063		14634/2		118
14064	14635	14635/1	09-198252	48
14065		14635/2		101
14066	14636	14636/1	09-198253	63
14067		14636/2		98
14068	14637	14637/1	09-198254	59
14069		14637/2		84
14070	14638	14638/1	09-198255	42
14071		14638/2		80
14072	14639	14639/1	09-198256	49

14073		14639/2		109	
14074	14640	14640/1	09-198257	31	
14075		14640/2		79	
14076	14641	14641/1	09-198258	40	
14077		14641/2		79	
14078	14642	14642/1	09-198259	56	
14079		14642/2		75	
14080	14643	14643/1	09-198260	53	
14081		14643/2		nn	
14082	14644	14644/1	09-198279	150	x
14083		14644/2		167	x
14084	14645	14645/1	09-198280	87	x
14085		14645/2		134	x
14086	14646	14646/1	09-198281	88	x
14087		14646/2		219	x
14088	14647	14647/1	09-198282	134	x
14089		14647/2		183	x
14090	14648	14648/1	09-198246	78	x
14091		14648/2		151	x
14092	14649	14649/1	09-198261	133	x
14093		14649/2		231	x
14094	14650	14650/1	09-198247	127	x
14095		14650/2		150	x
14096	14651	14651/1	09-198262	55	x
14097		14651/2		140	x
14098	14652	14652/1	09-198263	98	x
14099		14652/2		146	x
14100	14653	14653/1	09-198283	78	x
14101		14653/2		42	x
14102	14654	14654/1	09-198264	191	x
14103		14654/2		87	x
14104	14655	14655/1	09-198265	161	x
14105		14655/2		139	x
14106	14656	14656/1	09-198248	89	x
14107		14656/2		210	x
14108	14657	14657/1	09-198249	110	x
14109		14657/2		162	x
14110	14658	14658/1	09-198250	98	x

14111

14658/2

153

x

Tab. 12: Mittels MIRS-PLSR abgeschätzte Gehalte an Black Carbon (g BC / kg Corg) in Bodenproben des Extensivprogramms

BoBo-Nr.	GD-Archiv-Nr.	LUFA-Nr.	BC (g BC /kg Corg)	Ausreißer
14112	14659	09-198043	18	x
14113	14660	09-198044	47	x
14114	14661	09-198045	28	x
14115	14662	09-198046	54	x
14116	14663	09-198047	30	x
14117	14664	09-198048	48	x
14118	14665	09-198049	28	x
14119	14666	09-198050	45	x
14120	14667	09-198051	61	x
14121	14668	09-198052	88	x
14122	14669	09-198053	58	x
14123	14670	09-198054	76	x
14124	14671	09-198055	32	x
14125	14672	09-198056	67	x
14126	14673	09-198057	37	
14127	14674	09-198058	33	x
14128	14675	09-198059	36	x
14129	14676	09-198060	71	x
14130	14677	09-198061	45	x
14131	14678	09-198062	48	x
14132	14679	09-198063	37	x
14133	14680	09-198140	45	x
14134	14681	09-198141	55	x
14135	14682	09-198142	55	x
14136	14683	09-198143	78	x
14137	14684	09-198144	77	x
14138	14685	09-198145	98	x
14139	14686	09-198146	98	x
14140	14687	09-198147	67	x
14141	14688	09-198148	95	x
14142	14689	09-198149	46	

14143	14690	09-198150	55	x
14144	14691	09-198151	28	x
14145	14692	09-198152	98	x
14146	14693	09-198153	59	x
14147	14694	09-198064	126	x
14148	14695	09-198065	96	x
14149	14696	09-198066	89	x
14150	14697	09-198067	79	x
14151	14698	09-198068	89	x
14152	14699	09-198069	73	
14153	14700	09-198070	78	
14154	14701	09-198071	73	x
14155	14702	09-198072	76	x
14156	14703	09-198073	37	
14157	14704	09-198074	39	
14158	14705	09-198075	38	x
14159	14706	09-198076	34	x
14160	14707	09-198077	28	
14161	14708	09-198078	31	
14162	14709	09-198079	28	
14163	14710	09-198080	23	
14164	14711	09-198081	157	x
14165	14712	09-198082	16	x
14166	14713	09-198083	117	x
14167	14714	09-198084	66	
14168	14715	09-198085	82	x
14169	14716	09-198086	83	x
14170	14717	09-198154	29	x
14171	14718	09-198155	29	x
14172	14719	09-198156	33	x
14173	14720	09-198087	36	x
14174	14721	09-198088	45	x
14175	14722	09-198089	32	x
14176	14723	09-198090	75	
14177	14724	09-198157	24	x
14178	14725	09-198091	24	x
14179	14726	09-198158	28	x
14180	14727	09-198159	11	x

14181	14728	09-198160	68	x
14182	14729	09-198161	68	x
14183	14730	09-198092	82	
14184	14731	09-198093	57	x
14185	14732	09-198094	69	x
14186	14733	09-198162	57	x
14187	14734	09-198163	68	x
14188	14735	09-198164	72	x
14189	14736	09-198095	61	x
14190	14737	09-198096	99	x
14191	14738	09-198165	28	x
14192	14739	09-198166	34	x
14193	14740	09-198097	26	x
14194	14741	09-198098	37	x
14195	14742	09-198099	89	
14196	14743	09-198100	47	x
14197	14744	09-198167	44	
14198	14745	09-198101	83	x
14199	14746	09-198102	45	x
14200	14747	09-198103	38	
14201	14748	09-198168	55	x
14202	14749	09-198104	74	x
14203	14750	09-198169	13	x
14204	14751	09-198170	72	x
14205	14752	09-198171	55	x
14206	14753	09-198172	88	x
14207	14754	09-198173	60	x
14208	14755	09-198174	53	x
14209	14756	09-198175	120	x
14210	14757	09-198176	83	x
14211	14758	09-198177	80	x
14212	14759	09-198105	21	x
14213	14760	09-198106	31	x
14214	14761	09-198107	18	x
14215	14762	09-198108	92	x
14216	14763	09-198109	69	x
14217	14764	09-198110	69	
14218	14765	09-198111	115	x

14219	14766	09-198112	99	x
14220	14767	09-198113	115	x
14221	14768	09-198114	139	x
14222	14769	09-198178	25	x
14223	14770	09-198179	33	x
14224	14771	09-198180	69	
14225	14772	09-198181	50	
14226	14773	09-198182	37	
14227	14774	09-198183	82	
14228	14775	09-198184	75	
14229	14776	09-198185	57	x
14230	14777	09-198186	32	
14231	14778	09-198187	23	x
14232	14779	09-198188	141	x
14233	14780	09-198115	14	x
14234	14781	09-198189	61	x
14235	14782	09-198190	53	x
14236	14783	09-198116	12	x
14237	14784	09-198117	101	x
14238	14785	09-198118	108	x
14239	14786	09-198119	103	x
14240	14787	09-198120	22	
14241	14788	09-198121	20	
14242	14789	09-198122	19	
14243	14790	09-198123	41	
14244	14791	09-198124	27	
14245	14792	09-198125	32	
14246	14793	09-198126	74	
14247	14794	09-198127	41	
14248	14795	09-198128	65	
14249	14796	09-198129	63	x
14250	14797	09-198130	97	x
14251	14798	09-198131	80	x
14252	14799	09-198191	2	x
14253	14800	09-198192	41	x
14254	14801	09-198193	24	x
14255	14802	09-198194	45	x
14256	14803	09-198195	22	x

14257	14804	09-198196	54	
14258	14805	09-198197	56	x
14259	14806	09-198198	12	x
14260	14807	09-198199	31	x
14261	14808	09-198200	123	
14262	14809	09-198201	22	x
14263	14810	09-198202	95	
14264	14811	09-198203	89	
14265	14812	09-198204	142	x
14266	14813	09-198205	65	