

## Synlig/nær-infrarød spektroskopi til hurtig og billig bestemmelse af de jordegenskaber som kontrollerer udvaskning af forureningsstoffer til grundvandet

Tænk hvis vi på bare to minutter kan måle jordens bestanddele samt de kemiske og fysiske egenskaber, der styrer hvorvidt forureningsstoffer ender i grundvandet? Tænk hvis vi ved at sende lys på jordprøven og måle lysets tilbagekast (et spektroskopisk BEEP) kan erstatte en masse dyre og tidskrævende laboratorieforsøg? Det kan vi.

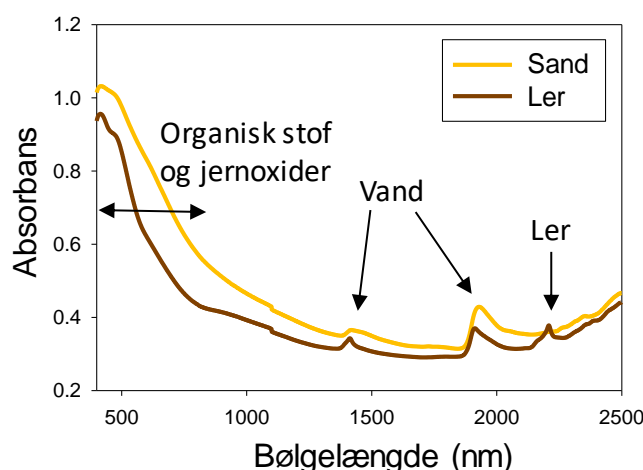
Drikkevandskvaliteten i Danmark er i verdensklasse, men hvert år findes pesticider i en stor del af de danske drikkevandsboringer (Thorling et al., 2015). Derfor er det nødvendigt at have et detaljeret kendskab til jordens filterevne over for de forurenende stoffer, hvis vi også i fremtiden vil nyde godt af drikkevand, som sendes næsten ubehandlet fra undergrunden til vores vandhaner. Det kan tage flere årtier før det regnvand, der falder på markerne i dag pumpes ud i vores vandhaner. I mellemtiden passerer vandet igennem jorden, der fungerer som et filter der renses vores drikkevand. Hvis der udledes en større mængde pesticider og næringsstoffer til markerne, end der kan nedbrydes eller tilbageholdes i jorden, når vandet passerer igennem, kan disse stoffer ende i grundvandet. Derfor er det vigtigt, at vi tager ansvar for de kommende generationer og passer på vores grundvand ved at undlade at overskride jordens filterevne over for forureningsstoffer. Denne filterevne er bl.a. styret af en række basale og funktionelle jordegenskaber, som kan variere betydeligt både indenfor og imellem marker.

En af de styrende faktorer for om pesticider ender i grundvandet eller drænrør, er først og fremmest vandtransporten igennem jorden, da forureningsstoffer ofte transporteres sammen med regnvandet. Jordens bestanddele og struktur er afgørende for om regnvandet infiltrerer jævnt og ensartet med god mulighed for at frafiltrere forureningsstoffer, eller om en del af vandet passerer hurtigt igennem med ringe mulighed for at blive renses. Jord er sammensat af en mineralsk fraktion samt en organisk fraktion (organisk stof), som bl.a. består af delvist nedbrudt plantemateriale. Den mineralske fraktion kan karakteriseres ved en **partikelstørrelsesfordeling**, som angiver de relative mængder af ler-, silt- og sandpartikler, også kaldet jordens tekstur. Jorde med højt lerindhold har ofte lange intakte regnormegange eller revner, som kan fungere som motorveje for vandtransport, hvorimod jorde med højt sandindhold ofte er karakteriserede ved, at regnvandet infiltrerer jævnt og ensartet. Det organiske stof har en vigtig funktion, idét det binder sig til lerpartikler og derved fungerer som limen, der fastholder de mineralske partikler i en stabil struktur. Det er påvist, at organisk stof har en begrænset kapacitet til at stabilisere lerpartikler i jorden. Hvis denne kapacitet overskrides, kan jordens funktioner forværres, idét lerpartikler, der ikke er bundet sammen af organisk stof, kan blive skyllet ud med det forbipasserende regnvand (de Jonge et al., 2009). Derfor er **forholdet imellem ler og organisk stof** vigtigt for jordens stabilitet og filteregenskaber. Nogle jorde er **vandafvisende**, hvilket skyldes et indhold af hydrofob (vandskyende) organisk stof. I hydrofobe jorde infiltrerer regnvandet ikke, når det lander på jordoverfladen. I stedet ophobes vandet i lavninger eller strømmer af til nærliggende vandløb (de Jonge et al., 1999). Når regnvandet ophobes i lavninger vil trykket fra vandet over jorden på et tidspunkt overstige jordens evne til at tilbageholde det ophobede vand, hvorved vandet strømmer igennem jorden med høj hastighed i et ujævnt mønster, der ligner fingre på en hånd. Derved kan vandafvisning accelerere transporten af vand og forureningsstoffer ned mod grundvandet.

Graden af vandafvisning varierer med jordens vandindhold og karakteriseres ved en kurve hvor graden af vandafvisning først stiger og derefter falder som følge af stigende vandindhold. Der findes et kritisk vandindhold i jorden, over hvilket vandafvisning ikke længere forekommer. Dette vandindhold er praktisk at kende, da vandafvisning kan undgås ved, at landmanden holder vandindholdet over dette kritiske niveau.

Imens regnvandet passerer ned igennem jorden, kan forureningsstofferne nedbrydes ved kemiske eller mikrobiologiske processer. Det kan således forhindres, at forureningsstoffer ender i grundvandet hvis de nedbrydes helt. Ydermere har jorden en evne til at binde eller ”adsorbere” forureningsstoffer. Det er bestanddele som ler, silt og organisk stof, der har et stort reaktivt overfladeareal som forureningsstofferne kan binde sig til. Eksempelvis har blot 10 gram ler et overfladeareal svarende til en fodboldbane, hvilket er helt fantastisk at tænke på. De kemiske egenskaber for et givent stof styrer hvorvidt det har størst affinitet for (lyst til) at binde sig til enten ler eller organisk stof. En given jords evne til at adsorbere pesticider afhænger derved af dens sammensætning, og denne evne kan angives ved en **sorptionskoefficient**.

Det er dyrt og tidskrævende, hvis alle de nævnte jordegenskaber skal måles ved konventionelle laboratorieforsøg for at vurdere en risiko over for udvaskning af forurening. Synlig/nær-infrarød spektroskopi (vis-NIRS) kan anvendes som en alternativ analysemetode til bestemmelse af adskillige jordegenskaber ud fra et enkelt spektrum. Jordens bestanddele har indflydelse på formen af spektret, da forskellige molekyler som indgår i bl.a. organisk stof, ler, metal oxider samt vand absorberer lys ved karakteristiske bølgelængder (Stenberg et al., 2010). Der er for eksempel en tydelig forskel på de to spektre for hhv. en sandet og leret jordprøve som anvist i Figur 1. For lerjords-prøven er toppen fra ler samt de to toppe for vand mere veldefinerede. Dette er fordi, en leret jordprøve holder bedre på vandet end en sandet jordprøve.



Figur 1. Vis-NIR-spektrum af hhv. en sandet og leret jordprøve.

Varigheden for analysen er to minutter inklusiv prøveforberedelse, hvilket gør denne metode fordelagtig til bestemmelse af en bred vifte af jordegenskaber, der er styrende for udvaskning af forureningskomponenter. Klargøring af jordprøverne inkluderer kun lufttørring samt sigtning, så jordpartikler større end 2 mm frasorteres inden analysen. Selve analysen udføres ved at 50 gram løs

jord tilføres en kop med glasvindue i bunden. Derefter indsættes koppen i et spektrometer, og der trykkes på en enkelt knap, hvorefter analysen påbegyndes (Figur 2) (Hermansen et al., 2017).



Figur 2. Vis-NIR spektrometer samt beholder til jordprøven med glasvindue.

Under selve analysen belyses jordprøven nedefra igennem glasvinduet med lys af varierende bølgelængder. Spektrometret måler mængden af lys, der reflekteres fra jordprøven. Disse værdier konverteres til mængden af absorberet lys, og derved dannes et vis-NIR-spektrum. Måleproceduren er så simpel, at alle kan betjene spektrometret, og der kan måles op til 100 jordprøver på en normal arbejdsdag. Efter måling af vis-NIR-spektre samt jordparametre kan der bygges en matematisk model. Når den matematiske model er udarbejdet, kan denne bruges i fremtiden til at bestemme en ønsket jordparameter ud fra et spektrum. Derved er det ikke længere nødvendigt at måle denne jordparameter på konventionel vis.

Det er allerede undersøgt, at vis-NIRS kan anvendes til at bestemme basale jordparametre som f.eks. tekstur samt organisk stof (Stenberg et al., 2010). Metoden anvendes endda allerede kommercielt til bestemmelse af flere jordegenskaber. Inden dette PhD studie var der dog nogle styrende funktionelle jordegenskaber for jordens strukturdannelse, vandtransport og binding af forureningsstoffer, som endnu ikke var forsøgt prædikeret ved anvendelse af vis-NIRS. Disse inkluderede:

- 1) Partikelstørrelsesfordelingen for jordens mineralfraktion
- 2) Forholdet imellem indhold af ler og indhold af organisk stof
- 3) Sorptionskoefficienten for pesticidet glyphosat (aktiv-stoffet i Round Up)
- 4) Vandafvisningskurven

Vores forsøg viste, at de fire udvalgte jordegenskaber kunne prædikteres ud fra et enkelt vis-NIR-spektrum. Det var muligt at anvende vis-NIRS til at prædiktere disse jordegenskaber, da vis-NIR-spektrene indeholder informationer omkring nogle af jordens bestanddele, som samtidig er styrende for disse funktionelle egenskaber. Denne kobling er vigtig for at forstå potentialet i denne teknologi. I princippet kan man yderligere prædiktere funktionelle jordegenskaber som hastigheden hvormed vand transporteres (Katuwal et al., 2018), eller hvor godt jorden holder på vandet (Pittaki-Chrysodonta et al., 2018). Det kræver blot at der er en sammenhæng imellem disse funktionelle jordegenskaber og nogle af de bestanddele i jorden, som samtidig påvirker formen af vis-NIR-spektrene. Det vil sige, at for hver matematisk prædiktionsmodel der udarbejdes, tilføjer vi en jordparameter, der kan udledes fra det samme spektrum. Dette har et stort potentiale for at forbedre risikovurderinger for udvaskning af forureningsstoffer til grundvandet, da de styrende egenskaber i

jorden kan bestemmes hurtigere og billigere ved anvendelse af vis-NIRS sammenlignet med konventionelle laboratorieforsøg.

### Referenceliste

- de Jonge, L.W., Jacobsen, O.H., Moldrup, P., 1999. Soil water repellency: Effects of water content, temperature, and particle size. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 63, 437-442. <http://dx.doi.org/10.2136/sssaj1999.03615995006300030003x>.
- de Jonge, L.W., Moldrup, P., Schjonning, P., 2009. Soil infrastructure, interfaces & translocation processes in inner space ('soil-it-is'): Towards a road map for the constraints and crossroads of soil architecture and biophysical processes. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 13(8), 1485-1502. <http://dx.doi.org/10.5194/hess-13-1485-2009>.
- Hermansen, C., Knadel, M., Moldrup, P., Greve, M.H., Karup, D., de Jonge, L.W., 2017. Complete soil texture is accurately predicted by visible near-infrared spectroscopy. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 81(4), 758-769. <http://dx.doi.org/10.2136/sssaj2017.02.0066>.
- Katuwal, S., Knadel, M., Moldrup, P., Norgaard, T., Greve, M.H., de Jonge, L.W., 2018. Visible-near-infrared spectroscopy can predict mass transport of dissolved chemicals through intact soil. *Sci. Rep.* 8. <http://dx.doi.org/10.1038/s41598-018-29306-9>.
- Pittaki-Chrysodonta, Z., Moldrup, P., Knadel, M., Iversen, B.V., Hermansen, C., Greve, M.H., de Jonge, L.W., 2018. Predicting the Campbell soil water retention function: Comparing visible-near-infrared spectroscopy with classical pedotransfer function. *Vadose Zone J.* 17(1). <http://dx.doi.org/10.2136/vzj2017.09.0169>.
- Stenberg, B., Viscarra Rossel, R.A., Mouazen, A.M., Wetterlind, J., 2010. Visible and near infrared spectroscopy in soil science. *Adv. Agron.* 107, 163-512.
- Thorling, L., Ernstsén, V., Hansen, B., Johnsen, A.R., Larsen, F., Mielby, S., Troldborg, L., 2015. Grundvand. Status og udvikling 1989 - 2014.