# GEMAS – Extended dataset: Datenbeschreibung

## 1. Einleitung

Das „GEMAS - Extended Dataset“ ist als Serie von Excel-Arbeitsmappen (*.xlsx) oder als Serie von CSV-Dateien verfügbar. Es umfasst die Daten von 2213 Ap-Proben und 2130 Gr-Proben und damit auch die im Gebiet der Ostukraine entnommenen Proben. Es besteht aus den folgenden Dateien und Arbeitsblättern:

(a) für die Ap-Proben

| XLSX-Datei | Arbeitsblatt | CSV-Datei | Inhalt |
|---|---|---|---|
| 11 GEMAS Ap - Ident | GEMAS Ap – Ident | 11 GEMAS Ap - Ident | Kennung, Ortsangabe (Koordinaten), Informationen zum Probenmaterial, weitere Informationen zum Probenahmepunkt [1] |
| 12 GEMAS Ap - AR | Ap AR PDL | 12a GEMAS Ap - AR PDL | Analysendaten: Königswasseraufschluss (AR), ICP-AES/ICP-MS, praktische Bestimmungsgrenze (PDL) [2] |
| | Ap AR LDL ACME | 12b GEMAS Ap - AR LDL ACME | Analysendaten: Königswasseraufschluss (AR), ICP-AES/ICP-MS, “offizielle” Bestimmungsgrenze des Labors ACME (LDL) [2] |
| | DL's | 12c GEMAS Ap - AR DL's | Bestimmungsgrenzen für den Königswasseraufschluss (AR), ICP-AES/ICP-MS [2] |
| 13 GEMAS Ap - XRF | Ap WD-XRF | 13a GEMAS Ap - WD-XRF | Analysendaten: Totalgehalt, WD-XRF [3] |
| | Ap WD-XRF Oxides | 13b GEMAS Ap - WD-XRF Oxides | Analysendaten: Totalgehalt, WD-XRF, Oxide der Hauptkomponenten ($SiO_2$, $TiO_2$, …; L.O.I.) [3] |
| | Ap ED-XRF | 13c GEMAS Ap - ED-XRF | Analysendaten: Totalgehalt, ED-XRF [3] |
| | DL's WD-XRF | 13d GEMAS Ap - WD-XRF DL's | Bestimmungsgrenzen WD-XRF [3] |
| | DL's ED-XRF | 13e GEMAS Ap - ED-XRF DL's | Bestimmungsgrenzen ED-XRF [3] |
| 14 GEMAS Ap - MMI | Ap MMI | 14a GEMAS Ap - MMI | Analysendaten: MMI® Extraktion, ICP-MS [4] |
| | DL's | 14b GEMAS Ap - MMI DL's | Bestimmungsgrenzen für MMI® Extraktion, ICP-MS [4] |
| 15 GEMAS Ap - Other data | Ap pH-CEC-C-N-S-χ-CIA | 15a GEMAS Ap - pH-CEC-C-N-S-χ-CIA | Ergänzende Analysendaten und Indizes: pH, CEC, C, N, S, χ, CIA [5] |
| | Ap Pb isotope ratios | 15b GEMAS Ap - Pb isotope ratios | Pb Isotopenverhältnisse [5] |
| | Ap PSD | 15c GEMAS Ap - PSD | PSD (Korngrößenverteilung) [5] |
| | Ap Kd values | 15d GEMAS Ap - Kd values | Kd-Werte für ausgewählte Elemente [5] |
| | Ap PNEC & RCR | 15e GEMAS Ap - PNEC & RCR | PNEC und RCR für ausgewählte Elemente [5] |
| | DL's | 15f GEMAS Ap - Other data DL's | Bestimmungsgrenzen für CEC, C, N, S [5] |

[1] siehe Kapitel 2.2, [2] siehe Kapitel 2.3, [3] siehe Kapitel 0, [4] siehe Kapitel 2.5, [5] siehe Kapitel 2.6.

# GEMAS – Extended dataset: Datenbeschreibung

(b) für die Gr-Proben

| XLSX-File | Worksheet | CSV-File | Content |
|---|---|---|---|
| 21 GEMAS Gr - Ident | GEMAS Gr – Ident | 21 GEMAS Gr - Ident | Kennung, Ortsangabe (Koordinaten), Informationen zum Probenmaterial, weitere Informationen zum Probenahmepunkt [1] |
| 22 GEMAS Gr - AR | Gr AR PDL | 22a GEMAS Gr - AR PDL | Analysendaten: Königswasseraufschluss (AR), ICP-AES/ICP-MS, praktische Bestimmungsgrenze (PDL) [2] |
| | Gr AR LDL ACME | 22b GEMAS Gr - AR LDL ACME | Analysendaten: Königswasseraufschluss (AR), ICP-AES/ICP-MS, “offizielle” Bestimmungsgrenze des Labors ACME (LDL) [2] |
| | DL's | 22c GEMAS Gr - AR DL's | Bestimmungsgrenzen für den Königswasseraufschluss (AR), ICP-AES/ICP-MS [2] |
| 23 GEMAS Gr - XRF | Gr WD-XRF | 23a GEMAS Gr - WD-XRF | Analysendaten: Totalgehalt, WD-XRF [3] |
| | Gr WD-XRF Oxides | 23b GEMAS Gr - WD-XRF Oxides | Analysendaten: Totalgehalt, WD-XRF, Oxide der Hauptkomponenten ($SiO_2$, $TiO_2$, …; L.O.I.) [3] |
| | DL's WD-XRF | 23c GEMAS Gr - WD-XRF DL's | Bestimmungsgrenzen WD-XRF [3] |
| 25 GEMAS Gr - Other data | Gr pH-CEC-C-N-S-χ-CIA | 25a GEMAS Gr - pH-CEC-C-N-S-χ-CIA | Ergänzende Analysendaten und Indizes: pH, CEC, C, S, CIA [4] |
| | Gr Pb isotope ratios | 25b GEMAS Gr - Pb isotope ratios | Pb Isotopenverhältnisse [5] |
| | Gr PSD | 25c GEMAS Gr - PSD | PSD (Korngrößenverteilung) [5] |
| | Gr Kd values | 25d GEMAS Gr - Kd values | Kd-Werte für ausgewählte Elemente [5] |
| | Gr PNEC & RCR | 25e GEMAS Gr - PNEC & RCR | PNEC und RCR für ausgewählte Elemente [5] |
| | DL's | 25f GEMAS Gr - Other data DL's | Bestimmungsgrenzen für CEC, C, S [4] |

[1] siehe Kapitel 2.2, [2] siehe Kapitel 2.3, [3] siehe Kapitel 0, [4] siehe Kapitel 2.6.

## 2. Beschreibung der Dateistrukturen und Dateiinhalte

### 2.1. Allgemeine Hinweise

Die Strukturen und Inhalte der Dateien für die Proben Ap und Gr sind identisch. Daher werden sie gemeinsam beschrieben. Nicht alle Parameter, die für die Ap-Proben analysiert oder bestimmt wurden, wurden auch für die Gr-Proben analysiert oder bestimmt. Daher entfallen bei den Gr-Proben einige Arbeitsblätter bzw. Dateien oder Parameter.

### 2.2. GEMAS – Ident

#### 2.2.1. Allgemeines

Die XLSX-Dateien „11 GEMAS Ap – Ident“ und „21 GEMAS Gr – Ident“ bzw. die zugehörigen CSV-Dateien (vgl. Tabellen in Kapitel 1) enthalten die Kennungen der Proben des GEMAS-Projektes, Lageangaben zu den Probenahmepunkten (Koordinaten), Informationen zum Probenmaterial und weiterführende Informationen zu den Probenahmepunkten.

#### 2.2.2. Spalte „ID“

Jede Probe des GEMAS-Projekts ist über ihre ID eindeutig identifizierbar. Sie wurde bei der Randomisierung der Proben vergeben (siehe Kapitel 6.3.1 in Demetriades et al., 2014). Die Ap-Proben haben IDs zwischen 3001 und 5585, die Gr-Proben zwischen 1 und 2464. Die ID ermöglicht die Verknüpfung der zu einer Probe gehörenden Daten aus den verschiedenen Arbeitsblättern oder Dateien.

#### 2.2.3. Spalte „Country“

Der Ländercode in der Spalte „Country“ gibt an, in welchem Land die Probe entnommen wurde.

| Code in der Spalte „Country“ | Land | Code in der Spalte „Country“ | Land |
|---|---|---|---|
| AUS | Österreich | GER | Deutschland |
| BEL | Belgien | HEL | Griechenland |
| BOS | Bosnien und Herzegowina | HUN | Ungarn |
| BUL | Bulgarien | IRL | Irland |
| CRO | Kroatien | ITA | Italien |
| CYP | Zypern | LAV | Lettland |
| CZR | Tschechien | LIT | Litauen |
| DEN | Dänemark | LUX | Luxembourg |
| EST | Estland | MON | Montenegro |
| FIN | Finnland | NEL | Niederlande |
| FRA | Frankreich | NOR | Norwegen |
| FOM | F.Y.R.O.M., heute Nordmazedonien | POL | Polen |

| Code in der Spalte „Country“ | Land | Code in der Spalte „Country“ | Land |
|---|---|---|---|
| PTG | Portugal | SRB | Serbien |
| SKA | Slowakei | SIL | Schweiz |
| SLO | Slowenien | UKR | Ukraine |
| SPA | Spanien | UNK | Vereinigtes Königreich |
| SWE | Schweden | | |

### 2.2.4. Spalte „Country-ID“

Die Spalte „Country-ID“ enthält die fortlaufende Nummer der Probe innerhalb des in der Spalte „Country“ angegebenen Landes. Die Nummern wurden für die Ap- und Gr-Proben getrennt vergeben und sind nicht randomisiert.

### 2.2.5. Spalte „Type“

Die Spalte „Type“ gibt Auskunft über das Probenmaterial. Für Ackerbodenproben enthält die Spalte den Wert „Ap“, für Weidelandbodenproben den Wert „Gr“. Weitere Details zu den Probenmaterialien sind in Reimann (2014) zu finden.

### 2.2.6. Spalte „Type2“

Die Verteilungsmuster vieler der analysierten Parameter zeigen, dass es große geochemische Unterschiede zwischen den Proben aus Nord- und Südeuropa gibt. Daher wurden zusätzlich zur Gesamtstatistik separate Statistiken für die Proben aus Nord- und Südeuropa erstellt (Filzmoser et al., 2014). Die Spalte „Type2“ gibt zusätzlich zu den Informationen über das Probenmaterial (Informationen aus Spalte „Type“) die Zuordnung der Proben zu Nord- („N“) oder Südeuropa („S“) an

### 2.2.7. Spalten „X_Coo“ und „Y_Coo“

Die Spalten „X_Coo“ und „Y_Coo“ geben die Lage des Probenahmepunktes in Dezimalgrad an. Die Angaben beziehen sich auf das Koordinatensystem EPSG:4326 (WGS84 - World Geodetic System 1984). „X_Coo“ enthält den Längengrad, „Y_Coo“ den Breitengrad.

### 2.2.8. Spalten „X_LAEA“ und „Y_LAEA“

Für die Erstellung der geochemischen Karten, insbesondere für die Gitterberechnung mittels Kriging, war die Transformation der Ellipsoidkoordinaten (Spalten „X_Coo“ und „Y_Coo“) in kartesische Koordinaten notwendig. Das Zielkoordinatensystem der Transformation war EPSG:3035 (ETRS89 - extended/LAEA Europe). Dieses Koordinatensystem wird in Europa häufig für statistische Darstellungen und andere Zwecke verwendet, bei denen eine flächentreue Abbildung erforderlich ist. Die Spalten „X_LAEA“ (Rechtswert) und „Y_LAEA“ (Hochwert) enthalten die transformierten Koordinaten.

### 2.2.9. Spalte „Altitude“

Die Spalte „Altitude“ gibt die Höhe des Probenahmepunktes in Metern über dem Meeresspiegel an.

### 2.2.10. Spalte „APS_1960-1990“

Die Spalte „APS_1960-1990“ (APS: Annual Precipitation Sum) enthält die mittleren Jahresniederschläge im Bereich des jeweiligen Probenahmepunktes in den Jahren 1960-1990. Sie wurden auf Basis der WorldClim-Datenbank Version 1.4 (WorldClim.org, 2005) ermittelt. Die in dieser Datenbank enthaltenen Klimaflächen (Gitter aus räumlich interpolierten Klimadaten) haben eine räumliche Auflösung von 30 Bogensekunden. Dies entspricht am Äquator in etwa einer Fläche von 0,86 $km^2$, an allen anderen Orten weniger. Sie wird häufig als „1 km Auflösung“ bezeichnet. Eine detaillierte Beschreibung der Methoden, die zur Zusammenstellung und Interpolation der Klimadaten verwendet wurden, ist in Hijmans et al. (2005) zu finden. Um die Daten in der Spalte „APS_1960-1990“ zu generieren, wurden die Probenahmepunkte unter Verwendung von ESRI ArcGIS (Methode „Extract values to points“ der Spatial Analyst Tools) mit der bioklimatischen Variable $BIO_{12}$ (Jahresniederschlag) der WorldClim-Datenbank (UCDAVIS, 2005b) verschnitten.

### 2.2.11. Spalte „AMT_1960-1990“

Die Spalte „AMT_1960-1990“ (AMT: Annual Mean Temperature) enthält die Jahresmitteltemperaturen im Bereich des jeweiligen Probenahmepunktes in den Jahren 1960-1990. Sie wurden ebenfalls auf Basis der WorldClim-Datenbank Version 1.4 (WorldClim.org, 2005, siehe Kapitel 2.2.10) ermittelt. Um die Daten in der Spalte „AMT_1960-1990“ zu generieren, wurden die Probepunkte unter Verwendung von ESRI ArcGIS (Methode „Extract values to points“ der Spatial Analyst Tools) mit der bioklimatischen Variable $BIO_1$ (Annual Mean Temperature) der WorldClim-Datenbank (UCDAVIS, 2005a) verschnitten.

### 2.2.12. Spalte „APS_1970-2000“

Die Spalte „APS_1970-2000“ (APS: Annual Precipitation Sum) enthält die mittleren Jahresniederschläge im Bereich des jeweiligen Probenahmepunktes in den Jahren 1970-2000. Sie wurden auf Basis der WorldClim-Datenbank Version 2.1 (WorldClim.org, 2020) ermittelt. Wie bereits in der WorldClim-Datenbank Version 1.4 haben die in der WorldClim-Datenbank Version 2.1 enthaltenen Klimaflächen (Gitter aus räumlich interpolierten Klimadaten) eine räumliche Auflösung von 30 Bogensekunden. Dies entspricht am Äquator einer Fläche von etwa 0,86 $km^2$, an allen anderen Orten weniger. Sie wird häufig als „1 km Auflösung“ bezeichnet. Eine detaillierte Beschreibung der Methoden, die zur Zusammenstellung und Interpolation der Klimadaten verwendet wurden, finden man in Fick & Hijmans (2017). Um

die Daten in der Spalte „APS_1970-2000“ zu generieren, wurden die Probenahmepunkte unter Verwendung von ESRI ArcGIS (Methode „Extract values to points“ der Spatial Analyst Tools) mit der bioklimatischen Variable $BIO_{12}$ (Jahresniederschlag) der WorldClim-Datenbank (UCDAVIS, 2020) verschnitten.

Es wird darauf hingewiesen, dass nur ein nicht quantifizierbarer Anteil der Veränderungen der Klimadaten für die Jahre 1970-2000 im Vergleich zu denen für die Jahre 1960-1990 auf die Auswirkungen des globalen Klimawandels zurückgeführt werden kann. Einen weitaus größeren Einfluss auf die Berechnungsergebnisse haben wahrscheinlich die umfassendere Datenbasis, verbesserte Berechnungs- und Interpolationsmethoden und die Integration von satellitengestützten Daten, entweder als Kovariaten oder als unabhängige Spline-Variablen.

### 2.2.13. Spalte „AMT_1970-2000“

Die Spalte „AMT_1970-2000“ (AMT: Annual Mean Temperature) enthält die Jahresmitteltemperaturen im Bereich des jeweiligen Probenahmepunktes in den Jahren 1970-2000. Sie wurden ebenfalls auf Basis der WorldClim-Datenbank Version 2.1 (WorldClim.org, 2020, siehe Kapitel 2.2.12) ermittelt. Um die Daten in der Spalte „AMT_1970-2000“ zu generieren, wurden die Probenahmepunkte unter Verwendung von ESRI ArcGIS (Methode „Extract values to points“ der Spatial Analyst Tools) mit der bioklimatischen Variable $BIO_1$ (Annual Mean Temperature) der WorldClim-Datenbank (UCDAVIS, 2020) verschnitten.

Man beachte die Ausführungen zu den Veränderungen der Klimadaten für die Jahre 1970-2000 im Vergleich zu denen für die Jahre 1960-1990 in Kapitel 2.2.12.

### 2.2.14. Spalte „Climate“

Die Spalte „Climate“ enthält Informationen über die Klimazone, in der sich der Probenahmepunkt befindet. Die Bestimmung der Klimazone erfolgte GIS-basiert durch Verschneidung der Probenahmepunkte mit der Karte der Klimazonen nach Baritz et al. (2005) (siehe Abbildung 10.11 in Birke et al., 2014a). Man beachte auch die Anmerkungen zur GIS-basierten Attributierung in Kapitel 2.2.24.

| Code in Spalte „Climate“ | Klimazone |
|---|---|
| SpBo | subpolares bis boreales Klima |
| BoTe | boreales bis gemäßigtes Klima |
| Temp | gemäßigtes Klima |
| Medi | mediterranes Klima |

### 2.2.15. Spalte „Soiltype“

Das Merkmal „Soiltyp“ (Bodenart) wurde aus den Ergebnissen der Untersuchung der Korngrößenverteilung (normierte Werte, siehe Kapitel 2.6.1) abgeleitet. Die Klassifikation basiert auf der Einteilung der Bodenarten, die bei der österreichischen Bodenkartierung (BFW) angewendet wird.

| Code in Spalte „Soiltype“ | Bodenart | Sand | Schluff | Ton |
|---|---|---|---|---|
| | | % | % | % |
| S | Sand | 65 - 100 | 0 - 30 | 0 - 10 |
| zS | schluffiger Sand | 40 - 70 | 30 - 55 | 0 - 5 |
| lS | lehmiger Sand | 30 - 80 | 10 - 55 | 5 - 15 |
| sZ | sandiger Schluff | 10 - 45 | 55 - 75 | 0 - 15 |
| Z | Schluff | 0 - 25 | 75 - 100 | 0 - 25 |
| tS | toniger Sand | 65 - 90 | 0 - 10 | 10 - 25 |
| sL | sandiger Lehm | 20 - 75 | 10 - 55 | 15 - 25 |
| lZ | lehmiger Schluff | 0 - 30 | 55 - 75 | 15 - 25 |
| sT | sandiger Ton | 50 - 75 | 0 - 10 | 25 - 40 |
| L | Lehm | 5 - 65 | 10 - 55 | 25 - 40 |
| zL | schluffiger Lehm | 0 - 20 | 55 - 75 | 25 - 45 |
| lT | lehmiger Ton | 0 - 60 | 0 - 55 | 40 - 50 |
| T | Ton | 0 - 50 | 0 - 50 | 50 - 100 |

### 2.2.16. Spalte „Soilclass“

Das Merkmal „Soilclass“ (Bodenschwere) basiert ebenfalls auf einer Klassifizierung, die für die österreichische Bodenkartierung (BFW) verwendet wird. Die Bodenschwere leitet sich aus der Bodenart ab.

| Code in Spalte „Soilclass“ | Bodenschwere | Assoziierte Bodenarten |
|---|---|---|
| ll | sehr leicht | Sand, schluffiger Sand (S, zS) |
| l | leicht | lehmiger Sand, sandiger Schluff, Schluff (lS, sZ, Z) |
| m | mittelschwer | toniger Sand, sandiger Lehm, lehmiger Schluff (tS, sL, lZ) |
| s | schwer | sandiger Ton, Lehm, schluffiger Lehm (sT, L, zL) |
| ss | sehr schwer | lehmiger Ton, Ton (lT, T) |

### 2.2.17. Spalte „CGSG“

Das Merkmal „CGSG“ (Chemical and Geological Soil Groups - Chemisch-geologische Bodengruppen) wurde durch die Verknüpfung von Informationen aus lithologischen Karten und Karten der Bodenausgangsgesteine mit den Ergebnissen der geochemischen Untersuchungen der Bodenproben des GEMAS-Projekts erzeugt. Eine genauere Beschreibung des Verfahrens findet man in Birke et al. (2014a). Dieses Merkmal wurde nur für die Ap-Proben bestimmt.

| Code in Spalte „CGSG“ | Chemisch-geologische Bodengruppe |
|---|---|
| alk | Alkaligesteine |
| chalk | kalkhaltige Gesteine |
| green | Grünstein |
| loess | Löß |
| org | organische Böden |
| other | Andere |
| granite | saure Plutonite |
| prec | Präkambrische Gesteine |
| quartz | quarzreiche Böden |
| schist | Schiefer |

### 2.2.18. Spalte „Litho“

Die Spalte „Litho“ enthält Informationen über die Lithologie in der Umgebung des jeweiligen Probenahmepunktes. Die Bestimmung der Lithologie erfolgte GIS-basiert durch Verschneidung der Probenahmepunkte mit der digitalen Karte der Lithologie der Kontinentalflächen nach Dürr et al. (2005) (siehe Abb. 10.5 in Birke et al., 2014a). Man beachte auch die Anmerkungen zur GIS-basierten Attributierung in Kapitel 2.2.24.

| Code in Spalte „Litho“ | Lithologie |
|---|---|
| Pa | saure Plutonite |
| Pb | mafische bis ultramafische Plutonite |
| Va | saure Vulkanite |
| Vb | mafische Vulkanite |
| Pr | Präkambrische Gesteine |
| Mt | Metamorphite |
| Cl | Gesteine mit komplexer Lithologie |
| Ss | silikatische Sedimentite |
| Sm | Sedimentite (gemischt) |
| Sc | karbonatische Sedimentite |
| Su | nicht oder schwach konsolidierte Sedimente |
| Ad | alluviale Ablagerungen, Auensedimente |
| Lo | Löß |
| Ds | Dünen und Flugsand |
| Ep | Evaporite |
| Wb | Binnengewässer |
| Ig | Eis und Gletscher |

### 2.2.19. Spalte „PM_Hart“

Die Spalte „PM_Hart“ enthält Informationen über die im Bereich des jeweiligen Probenahmepunktes auftretende Gruppe der Bodenausgangsgesteine. Die Bestimmung der Gruppe der Bodenausgangsgesteine erfolgte GIS-basiert durch Verschneidung der Probenpunkte mit der Karte der Gruppen der Bodenausgangsgesteine nach Hartwich et al. (2005) (siehe Abbildung 10.6 in Birke et al., 2014a). Man beachte die Anmerkungen zur GIS-basierten Attribution in Kapitel 2.2.24.

| Code in Spalte „PM_Hart“ | Gruppe der Bodenausgangsgesteine |
|---|---|
| quart | quartäre marine Ablagerungen |
| quart(u) | quartäre marine Ablagerungen (ungegliedert) auf magmatischen und metamorphen Gesteinen |
| fluv | fluviale Ablagerungen |
| morain | Moränenablagerungen |
| glacfluv | glazifluviatile Ablagerungen |
| glaclac | glazilakustrine Ablagerungen |
| eol | äolische Sande |
| loess | Löß |
| peat | Torf |
| tertsed | tertiäre Sedimentgesteine (ungegliedert) |
| tertmol | tertiäre Molasse |
| mesotert | mesozoische, teilweise tertiäre Gesteine (ungegliedert) |
| mesocalc | mesozoische kalkhaltige Sedimentgesteine |
| flysch | Flysch (ungegliedert), vergesellschaftet mit tertiären und mesozoischen Sedimentgesteinen |
| paleo | paläozoische, teilweise mesozoische und tertiäre Sedimentgesteine (ungegliedert), oft vergesellschaftet mit eruptiven und metamorphen Gesteinen |
| volc | vulkanische Gesteine |
| ignmet | magmatische und metamorphe Gesteine (ungegliedert), teilweise vergesellschaftet mit Sedimentgesteinen |

### 2.2.20. Spalte „PM_Guen“

Die Spalte „PM_Guen“ enthält Informationen über das/die Bodenausgangsgestein(e) im Bereich des jeweiligen Probenahmepunktes. Die Bestimmung des/der Bodenausgangsgestein(e) erfolgte GIS-basiert durch Verschneidung der Probenahmepunkte mit der Karte des Bodenausgangsgesteine nach Günther et al. (2013) (siehe Abbildung 10.7 in Birke et al., 2014a). Man beachte die Anmerkungen zur GIS-basierten Attributierung in Kapitel 2.2.24.

| Code in Spalte „PM_Guen“ | Bodenausgangsgestein |
|---|---|
| all/coll | Alluvium/Kolluvium |
| glacioflu | glazifluviatiles Bildungen |
| calc | kalkhaltige Gesteine |
| marl | Mergel |
| clayed | tonige Bildungen |
| sandy | sandig Bildungen |
| san/fly/mo | Sandstein/Flysch/Molasse |
| loa/sil | lehmige und schluffige Bildungen |
| detri | detritische Bildungen |
| crys | kristalline Gesteine |
| schists | Schiefer |
| volc | vulkanische Gesteine |
| oth/org | andere oder organische Bildungen |

### 2.2.21. Spalte „EcoRegio“

Die Spalte „EcoRegio“ enthält Informationen über die ökologische Region, in der sich der Probenahmepunkt befindet. Die Bestimmung der ökologischen Region erfolgte GIS-basiert durch Verschneidung der Probenahmepunkte mit der Karte der ökologischen Regionen Europas (DMEER; EEA, 2003) (siehe Abbildung 10.13 in Birke et al., 2014a). Man beachte die Anmerkungen zur GIS-basierten Attributierung in Kapitel 2.2.24.

| Code in Spalte „EcoRegio“ | Ökologische Region |
|---|---|
| 1 | Tundra der Kola-Halbinsel |
| 2 | Skandinavischer Bergbirkenwald und skandinavisches Grasland |
| 3 | Skandinavische und russische Taiga |
| 4 | Caledonische Nadelwälder |
| 5 | Skandinavische Küstennadelwälder |
| 6 | Iberische Nadelwälder |
| 7 | Bergnadelwälder der Karpaten |
| 8 | Nadel- und Mischwälder der Alpen |
| 9 | Nadel- und Mischwälder der Pyrenäen |
| 10 | Sarmatische Mischwälder |
| 11 | Baltische Mischwälder |
| 12 | Mitteleuropäische Mischwälder |
| 13 | Kantabrische Mischwälder |
| 14 | Pannonische Mischwälder |
| 15 | Mischwälder des Balkans |
| 16 | Mischwälder der Poebene |
| 17 | Nordatlantische feuchte Mischwälder |
| 18 | Nordwestiberische Bergwälder |
| 19 | Bergmischwälder der südlichen Apenninen |
| 20 | Bergmischwälder der Dinariden |

| Code in Spalte „EcoRegio“ | Ökologische Region |
|---|---|
| 21 | Bergmischwälder des Pindos |
| 22 | Bergmischwälder der Rhodopen |
| 23 | Nordatlantische gemäßigte Region |
| 24 | Südatlantische gemäßigte Region |
| 25 | Keltische Laubwälder |
| 26 | Westeuropäische Laubwälder |
| 27 | Englische Flachlandbuchenwälder |
| 28 | Korsische Berglaub- und Bergmischwälder |
| 29 | Illyrische sommergrüne Wälder |
| 30 | Sommergrüne Wälder des Schwarzen Meeres und des Kaukasus |
| 31 | Sommergrüne Bergwälder der Apenninen |
| 32 | Iberische Hartlaub- und halbimmergrüne Wälder |
| 33 | Italienische Hartlaub- und halbimmergrüne Wälder |
| 34 | Südwestiberische mediterrane Hartlaub- und Mischwälder |
| 35 | Tyrrhenisch-adriatische Hartlaub- und Mischwälder |
| 36 | Ägäische und westtürkische Hartlaub- und Mischwälder |
| 37 | Südostiberische Busch- und Waldlandschaften |
| 38 | Submediterrane Waldgebiete der Krim |
| 39 | Nordostspanische und südfranzösische Mittelmeerregion |
| 40 | Mediterrane Wälder Zyperns |
| 41 | Mediterrane Wälder Kretas |
| 42 | Osteuropäische Waldsteppe |
| 43 | Pontische Steppe |

### 2.2.22. Spalte „PD_2005“

Im ursprünglichen GEMAS-Projekt wurden für die Darstellung der Bevölkerungsdichte die vom Center for International Earth Science Information Network im Jahr 2005 veröffentlichten Bevölkerungsdichte-Raster (Gridded Population of the World Version 3 (GPWv3); CIESIN, 2005) verwendet (siehe Abb. 10.14. in Birke et al., 2014a). Diese Raster zeigen die Bevölkerungsdichte für das Jahr 2000 mit einer Auflösung von 2,5 Bogenminuten. Auffällig ist, dass in diesem Datensatz für bestimmte Teilgebiete, z.B. für mehrere der ehemaligen jugoslawischen Republiken, kaum verlässliche Daten vorhanden sind. Auch die Datenverfügbarkeit für Deutschland und das Vereinigte Königreich sowie weitere Gebiete ist nicht zufriedenstellend.

Daher wurden für die digitale Bereitstellung von Zusatzinformationen zur Unterstützung bei der Interpretation der geochemischen Karten zusätzlich auch aktuellere Datenquellen verwendet. Die Version 4 Revision 11 der Bevölkerungsdichte-Raster (Gridded Population of the World Version 4 Revision 11 (GPWv4.11); CIESIN, 2018) enthält Angaben zur Bevölkerungsdichte für die Jahre 2000, 2005, 2010, 2015 und 2020 mit einer räumlichen Auflösung von 30 Bogensekunden. Dies entspricht etwa 0,86 $km^2$

am Äquator, an allen anderen Orten weniger. Sie wird häufig als „1 km Auflösung“ bezeichnet. Die Qualität der Daten des GPWv4.11 für das Jahr 2005 ist im Vergleich zu den Daten des GPWv3 für das Jahr 2000 deutlich verbessert. Dies gilt für einige Balkanländer, aber auch für Deutschland, das Vereinigte Königreich und weitere Gebiete.

Für die Bereitstellung der Daten in Spalte „PD_2005“ wurden die Probenahmepunkte mit dem Bevölkerungsdichteraster für das Jahr 2005 (GPWv4.11) unter Verwendung von ESRI ArcGIS (Methode "Extract values to points" der Spatial Analyst Tools) verschnitten.

### 2.2.23. Spalte „PD_2020“

Die Daten zur Bevölkerungsdichte im Jahr 2020 in der Spalte „PD_2020“ basieren auf dem Bevölkerungsdichteraster für dieses Jahr, das ebenfalls in der Datensammlung Gridded Population of the World Version 4 Revision 11 (GPWv4.11) enthalten ist; CIESIN, 2018; siehe Kapitel 2.2.22). Für die Bereitstellung der Daten in Spalte „PD_2020“ wurden die Probenahmepunkte mit Hilfe von ESRI ArcGIS (Methode "Extract values to points" der Spatial Analyst Tools) mit dem Bevölkerungsdichteraster verschnitten.

### 2.2.24. Anmerkungen zu GIS-basierten Attributierung

Die GIS-basierte Datenerhebung durch Verschneidung der Probenahmepunkte mit Polygonkarten ist prinzipbedingt fehleranfällig. Bei den Polygonkarten, die zur Verschneidung der Probenahmepunkte des GEMAS-Projektes verwendet wurden, handelt es sich meist um kleinmaßstäbige Karten im kontinentalen (europäischen) Maßstab (z.B. 1:5 000 000). Daher ist die Lage der Polygongrenzen, verglichen mit der Genauigkeit der Lagebestimmung der Probenahmepunkte, mit einer hohen Unsicherheit behaftet. Des Weiteren erfolgt die lagebezogene Zuordnung der Probepunkte zu den Flächen immer exakt zu der Fläche, in der entsprechende Probenahmepunkt gemäß seinen Lagekoordinaten liegt. Das führt im Zusammenhang mit der beschriebenen Lageungenauigkeit der Flächengrenzen zwangsläufig zu einer gewissen Anzahl an Fehlzuordnungen, insbesondere bei der Lage des Probepunktes im Grenzbereich zwischen zwei oder mehreren Flächen. Des Weiteren lässt sich mit dieser Methode die gleichzeitige geochemische Beeinflussung aus zwei oder mehreren aneinandergrenzenden Flächen (z.B. durch aneinandergrenzende Bodenausgangsgesteine) nicht erfassen. Insofern ist die in den Merkmalen angegebene Zuordnung mit einer gewissen Unsicherheit behaftet und darf nicht als absolut richtig angesehen werden, sondern nur als allgemeine Orientierung für statistische Auswertungen im europäischen Maßstab.

## 2.3. GEMAS – AR

### 2.3.1. Eine Analytik – zwei Datensätze

Der Datensatz GEMAS – AR enthält die Analysenergebnisse für die mittels Königswasseraufschluss aus den GEMAS Proben extrahierbaren Elementgehalte für 53 chemische Elemente. Diese Analysenergebnisse sind in den XLSX-Dateien „12 GEMAS Ap – AR“ und „22 GEMAS Gr – AR“ bzw. den zugehörigen CSV-Dateien (vgl. Tabellen in Kapitel 1) enthalten. Detaillierte Informationen zum Aufschlussverfahren und zu den verwendeten Analysenmethoden (ICP-AES: Atomemissionsspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma, ICP-MS: Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma) findet man in Birke et al. (2014b). Die Analysenergebnisse der Königswasseraufschlüsse sind sowohl für die Ap- als auch für die Gr-Proben verfügbar. Aufschlüsse und Analytik erfolgten in den Acme Analytical Laboratories (Vancouver) Ltd. in Kanada.

Die XLSX-Dateien enthalten jeweils zwei Datenblätter mit den Analysenergebnissen der Königswasseraufschlüsse der GEMAS-Proben. Die Datenblätter „Ap AR PDL“ bzw. „Gr AR PDL“ beinhalten die Analysenergebnisse unter Berücksichtigung der „Praktischen Nachweisgrenze“ (PDL). Die Datenblätter „Ap AR LDL ACME“ bzw. „Gr AR LDL ACME“ enthalten die gleichen Analysenergebnisse, jedoch unter Berücksichtigung der „offiziellen“ unteren Nachweisgrenze (LDL) des Labors AcmeLabs Vancouver. Die beschriebenen Daten sind ebenfalls als CSV-Dateien verfügbar (vgl. Tabellen in Kapitel 1). Eine nähere Beschreibung der Grundlagen und Unterschiede von PDL und LDL gibt Demetriades et al. (2014).

Der Grund für die Bereitstellung der Analysenergebnisse unter Berücksichtigung von zwei unterschiedlichen Nachweisgrenzen besteht darin, dass für die Ermittlung und Anwendung der PDL die Analysendaten ohne jegliche Rundung und ohne Streichung von Ergebnissen unterhalb der vom Labor vorgegebenen Nachweisgrenze (LDL) vorliegen müssen. Auch Messwerte im negativen Bereich müssen dafür erfasst und dokumentiert werden (Demetriades et al., 2014). Diese Voraussetzung ist für die Daten aus der Ostukraine (ID’s 2358-2464 und 5481-5585), die zu einem späteren Zeitpunkt als die anderen GEMAS-Proben analysiert wurden, nicht gegeben. Diese wurden durch das Laboratorium AcmeLabs Vancouver gerundet und unter Berücksichtigung der LDL übergeben. Daher gibt es in den Analyseergebnissen unter Berücksichtigung der PDL (Datenblätter „Ap AR PDL“ oder „Gr AR PDL“ bzw. entsprechende CSV-Dateien, vgl. Tabellen in Kapitel 1) einen Bruch zwischen den Daten aus dem Hauptteil des Untersuchungsgebiets und den Daten aus der Ostukraine. Dies betrifft jedoch nur die Parameter, bei denen die PDL kleiner ist als die LDL. Außerdem tritt der Bruch nur in den Proben aus der Ostukraine auf, in denen für einen oder mehrere Parameter Gehalte unterhalb der LDL beobachtet wurden.

In den Analysenergebnissen der Königswasseraufschlüsse der GEMAS-Proben unter Berücksichtigung der „offiziellen“ unteren Nachweisgrenze (LDL) des Labors AcmeLabs Vancouver (Datenblätter „Ap AR LDL ACME“ bzw. „Gr AR LDL ACME“ in den XLSX-Dateien bzw. entsprechende CSV-Dateien, vgl. Tabellen in Kapitel 1) ist dieser Bruch nicht vorhanden, da für alle Proben die LDL als einheitliche Nachweisgrenze (LDL) angewendet wurde. Dies führt jedoch unter bestimmten Bedingungen bei Proben, die nicht in der Ostukraine entnommen wurden, zu einer Verringerung der Auflösung der Daten im Gehaltsbereich zwischen PDL und LDL.

Bei der Verwendung der Daten ist daher bei Parametern mit einer Abweichung der PDL von der LDL und einem gehäuften Auftreten von Gehalten in dem Bereich zwischen PDL und LDL abzuwägen, ob die detaillierte Darstellung des Gehaltsbereiches zwischen PDL und LDL im Großteil des Untersuchungsgebietes wichtiger ist als die korrekte Darstellung der Daten in den unteren Gehaltsbereichen in der Ostukraine.

### 2.3.2. Nachweisgrenzen und Fehlstellen

Das Datenblatt „DL's” bzw. die entsprechende CSV-Datei (vgl. Tabellen in Kapitel 1) enthalten eine Auflistung der Nachweisgrenzen der einzelnen Parameter. Dabei wird einerseits die „offizielle“ unteren Nachweisgrenze des Labors AcmeLabs Vancouver (LDL), andererseits die praktische Nachweisgrenze (PDL) angegeben. Wie bereits erwähnt ist eine nähere Beschreibung der Grundlagen und Unterschiede von PDL und LDL in Demetriades et al. (2014) zu finden. In den Datensätzen werden Analysenergebnisse unter der jeweiligen Nachweisgrenze mit „–DL“ angegeben, wobei für DL der jeweilig gültige Zahlenwert eingetragen ist.

Fehlstellen in den Datensätzen sind durch ein leeres Feld markiert, es gibt keine gesonderten Wert zur Verschlüsselung der Fehlstellen.

## 2.4. GEMAS – XRF

### 2.4.1. WD-XRF (Wellenlängendispersive Röntgenfluoreszenzanalyse)

Die Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA) ist die bevorzugte Methode, wenn die Gesamtelementkonzentrationen in einer Probe bestimmt werden sollen. Die Untersuchung der Proben des GEMAS-Projektes erfolgte mittels wellenlängendispersive Röntgenfluoreszenzanalyse (WD-XRF) in den Laboratorien der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe Hannover, Deutschland. Eine nähere Beschreibung des Analysenverfahrens findet man in Birke et al. (2014b). Analysiert wurden die Gehalte von 41 Elementen.

Die Analysenergebnisse der wellenlängendispersive Röntgenfluoreszenzanalyse sind sowohl für die Ap- als auch für die Gr-Proben verfügbar. Sie sind in den XLSX-Dateien „13 GEMAS Ap – XRF“ und „23 GEMAS Gr – XRF“ bzw. in den entsprechenden CSV-Dateien enthalten (vgl. Tabellen in Kapitel 1). Die Konzentrationen der Hauptkomponenten sind (Si, Ti, Al, Fe, Mn, Mg, Ca, Na, K, P, S, Cl, F) in Gewichts-% angegeben, wobei die Elemente mit Ausnahme von Cl und F durch ihre Oxide ($SiO_2$, $TiO_2$, $Al_2O_3$, $Fe_2O_3$, MnO, MgO, CaO, $Na_2O$, $K_2O$, $P_2O_5$, $SO_3$) repräsentiert werden. Zusätzlich wird der Glühverlustes (L.O.I.) angegeben, ebenfalls in Gewichts-%. Diese Daten sind in den Tabellenblättern „Ap WD-XRF Oxides“ und „Gr WD-XRF Oxides“ bzw. in den entsprechenden CSV-Dateien (vgl. Tabellen in Kapitel 1) zu finden. Die Gehalte aller anderen Element sind in mg/kg angegeben und können den Datenblättern „Ap WD-XRF“ und „Gr-WD-XRF“ bzw. in den entsprechenden CSV-Dateien (vgl. Tabellen in Kapitel 1) entnommen werden. Zur besseren Vergleichbarkeit wurden die Oxidgehalte der Hauptkomponenten in Elementgehalte umgerechnet und ebenfalls in diese Tabellenblätter aufgenommen. Hier erfolgt deren Angabe in mg/kg.

### 2.4.2. ED-XRF (Energiedispersive Röntgenfluoreszenzanalyse)

Nach Veröffentlichung der Ergebnisse des GEMAS-Projektes (Reimann et al., 2014a; Reimann et al., 2014b; u.a.) wurden weitere analytische Untersuchungen des Probenmaterials durchgeführt. Unter anderem wurden die Ap-Proben in den Laboratorien der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe Hannover (Deutschland) einer energiedispersiven Röntgenfluoresenzanalyse (ED-XRF) unterzogen. Neben einer verbesserten Nachweisgrenze für einige Elemente konnten damit in den Ap-Proben zusätzlich die Konzentrationen der Elemente Brom und Jod bestimmt werden. Die Analysenergebnisse sind in der XLSX-Datei „13 GEMAS Ap – XRF“ im Datenblatt „Ap ED-XRF“ bzw. in der entsprechenden CSV-Datei (vgl. Tabellen in Kapitel 1) dokumentiert. Die Angabe der Gehalte erfolgt in mg/kg.

### 2.4.3. Nachweisgrenzen und Fehlstellen

Die Datenblätter „DL's WD-XRF” und „DL's ED-XRF” bzw. die entsprechenden CSV-Dateien (vgl. Tabellen in Kapitel 1) enthalten eine Auflistung der Nachweisgrenzen der einzelnen Parameter in den entsprechenden Analysenverfahren. In den Datensätzen werden Analysenergebnisse unter der jeweiligen Nachweisgrenze mit „–DL“ angegeben, wobei für DL der jeweilig gültige Zahlenwert eingetragen ist.

Fehlstellen in den Datensätzen sind durch ein leeres Feld markiert, es gibt keine gesonderten Wert zur Verschlüsselung der Fehlstellen.

## 2.5. GEMAS – MMI

Um die umweltverfügbare Elementfraktion zu erfassen, wurde an den Ap-Proben des GEMAS-Projektes Mobile Metal Ions (MMI®)-Aufschlüsse durchgeführt. Die Aufschlüsse wurden auf 47 Elemente untersucht. Detaillierte Informationen zum Aufschlussverfahren und zu den verwendeten Analysenmethoden (ICP-OES: Optische Emissionsspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma, ICP-MS: Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma) findet man in Birke et al. (2014b). Aufschlüsse und Analytik erfolgten durch SGS Minerals Services in Kanada. Die Analysenergebnisse sind in der XLSX-Datei „GEMAS Ap – MMI“ im Datenblatt „Ap MMI“ bzw. in der entsprechenden CSV-Datei (vgl. Tabellen in Kapitel 1) dokumentiert. Die Angabe der Gehalte erfolgt in mg/kg.

Das Datenblatt „DL's” bzw. die entsprechende CSV-Datei (vgl. Tabellen in Kapitel 1) enthält eine Auflistung der Nachweisgrenzen der einzelnen Parameter. Im Datensatz werden Analysenergebnisse unter der jeweiligen Nachweisgrenze mit „–DL“ angegeben, wobei für DL der jeweilig gültige Zahlenwert eingetragen ist.

Fehlstellen sind im Datensatz durch ein leeres Feld markiert, es gibt keine gesonderten Wert zur Verschlüsselung der Fehlstellen.

## 2.6. GEMAS – Other data

### 2.6.1. Allgemeines

Neben den Multielementanalysen der Totalgehalte sowie verschiedener Aufschlüsse der GEMAS-Proben (siehe Kapitel 2.3 - 2.5) wurden in den Proben auch die Konzentrationen einiger weiterer Elemente sowie Bodeneigenschaften und -parameter untersucht. Außerdem wurden einige Koeffizienten und Indizes berechnet. Die Ergebnisse dieser Analysen und Auswertungen sind in den XLSX-Dateien „15 GEMAS Ap – Other data“ und „25 GEMAS Gr – Other data“ bzw. den zugehörigen CSV-Dateien (vgl. Tabellen in Kapitel 1) enthalten.

### 2.6.2. Datenblatt „pH-CEC-C-N-S-χ-CIA”

#### 2.6.2.1. pH-Werte (pH_$CaCl_2$)

Die pH-Werte der Bodenproben wurden in 0,01 M $CaCl_2$-Lösung gemessen. Die Messungen wurden durch den Norwegischen Geologischen Dienst (NGU) durchgeführt. Eine genaue Beschreibung des Messverfahrens gibt Birke et al. (2014b). Messwerte für den pH-Wert liegen für die Ap- und Gr-Proben vor. An den Proben aus der Ostukraine wurden keine pH-Werte gemessen.

#### 2.6.2.2. Effektive Kationenaustauschkapazität (CEC)

Die effektive Kationenaustauschkapazität (eCEC) wurde an den Proben des GEMAS-Projektes nach der Silber-Thiourea-Methode gemessen. Die Messungen wurden im Laboratorium des Slowakischen Staatlichen Geologischen Institutes (SGIDS) durchgeführt. Eine genaue Beschreibung des Messverfahrens ist Birke et al. (2014b) und Anhang 7 von Reimann et al. (2011) zu entnehmen. Messwerte für die effektive Kationenaustauschkapazität liegen für die Ap- und Gr-Proben vor. Die Angabe erfolgt in Milliäquivalent Wasserstoff pro 100 g (meq/100 g). An den Proben aus der Ostukraine erfolgte keine Messung der effektiven Kationenaustauschkapazität.

#### 2.6.2.3. Gesamtkohlenstoffgehalt (TC, NGU)

Der Gesamtkohlenstoffgehalt (TC) wurde in den Proben des GEMAS-Projektes mit einem Schwefel/Kohlenstoff-Analysator der SC-444 der Firma LECO bestimmt. Die Messungen wurden im Laboratorium des Norwegischen Geologischen Dienst (NGU) durchgeführt. Eine Beschreibung des Messverfahrens ist Birke et al. (2014b) zu entnehmen. Messwerte für den Gesamtkohlenstoffgehalt liegen für die Ap- und Gr-Proben vor. Die Angabe erfolgt in Gewichts-%.

#### 2.6.2.4. Gesamter organischer Kohlenstoff (TOC)

Der Gesamtgehalt an organischem Kohlenstoff (TOC) wurde in den Proben des GEMAS-Projektes mit der Methode nach ISO 10694:1995 „Bestimmung von organischem Kohlenstoff und Gesamtkohlenstoff nach trockener Verbrennung (Elementaranalyse)“ ermittelt. Die Messungen wurden durch die FUGRO Consult Gmbh, heute KIWA Control GmbH mit einem Kohlenstoff/Schwefel-Analysator (ELTRA Helios) durchgeführt. Eine Beschreibung des Messverfahrens ist Birke et al. (2014b) zu entnehmen. Messwerte für gesamten organischen Kohlenstoff liegen für die Ap- und Gr-Proben vor. Die Angabe erfolgt in Gewichts-%.

#### 2.6.2.5. Gesamtschwefel (TS, NGU)

Der Gesamtschwefelgehalt (TS) wurde in den Proben des GEMAS-Projektes mit einem Schwefel/Kohlenstoff-Analysator SC-444 der Firma LECO bestimmt. Die Messungen wurden im Laboratorium des Norwegischen Geologischen Dienst (NGU) durchgeführt. Eine Beschreibung des Messverfahrens ist Birke et al. (2014b) zu entnehmen. Messwerte für den Gesamtschwefelgehalt liegen für die Ap- und Gr-Proben vor. Die Angabe erfolgt in Gewichts-%.

#### 2.6.2.6. Gesamtkohlenstoff (TC, TU BA FG)

Für die Ap-Proben wurde der Gesamtkohlenstoffgehalt nochmals durch das Labor der Technischen Universität Bergakademie Freiberg bestimmt. Ziel dieser Wiederholungsanalyse war eine genauere Bestimmung der Gehalte mit einer geringeren unteren Nachweisgrenze. Eine Beschreibung des Messverfahrens findet man in Matschullat et al. (2018). Die Angabe erfolgt in Gewichts-%. Für die Proben aus der Ostukraine liegen keine Analysenergebnisse vor.

#### 2.6.2.7. Gesamtstickstoff (TN, TU BA FG)

Für die Ap-Proben wurde durch das Labor der Technischen Universität Bergakademie Freiberg ebenfalls der Gesamtstickstoffgehalt bestimmt. Eine Beschreibung des Messverfahrens findet man in Matschullat et al. (2018). Die Angabe erfolgt in Gewichts-%. Für die Proben aus der Ostukraine liegen keine Analysenergebnisse vor.

#### 2.6.2.8. Gesamtschwefel (TS, TU BA FG)

Für die Ap-Proben wurde der Gesamtschwefelgehalt nochmals durch das Labor der Technischen Universität Bergakademie Freiberg bestimmt. Ziel dieser Wiederholungsanalyse war eine genauere Bestimmung der Gehalte mit einer geringeren unteren Nachweisgrenze. Eine Beschreibung des Messverfahrens findet man in Matschullat et al. (2018). Die Angabe erfolgt in Gewichts-%. Für die Proben aus der Ostukraine liegen keine Analysenergebnisse vor.

#### 2.6.2.9. Suszeptibilität ($\chi$)

An den Ap-Proben wurde die gewichtsnormierte magnetische Suszeptibilität mit einem Suszeptibilitätsmessgerät SI2B der Firma Sapphire instruments mit einer internen Spulenfrequenz von etwa 19,2 kHz gemessen. Eine Beschreibung des Messverfahrens ist Birke et al. (2014b) zu entnehmen. Die Messungen wurden durch den Norwegischen Geologischen Dienst (NGU) durchgeführt. Die Angabe der Suszeptibilität erfolgt in $10^{-6}$ $m^3/kg$. Für die Proben aus der Ostukraine liegen keine Messergebnisse vor.

#### 2.6.2.10. Index der chemischen Veränderung (CIA)

Für alle Proben des GEMAS-Projektes (Ap- und Gr-Proben) wurde der CIA (Chemical Index of Alteration = Index der chemischen Veränderung) nach Nesbitt & Young (1982) berechnet. Grundlage der Berechnung bilden die mit der wellenlängendispersiven Röntgenfluoreszenzanalyse (WD-RFA, vgl. Kapitel 2.4.1) ermittelten Totalgehalte. Eine nähere Beschreibung des Berechnungsverfahrens findet man bei Nesbitt & Young (1982) sowie im Kapitel 11.2 von Reimann et al. (2014a).

### 2.6.3. Datenblatt „Ap Pb isotope ratios“ (Bleiisotopenverhältnisse)

Die Messungen der Pb-Isotopenverhältnisse wurden mit einem hochauflösenden Sektorfeld-Massenspektrometer mit induktiv gekoppeltem Plasma (HR-ICP-MS) durchgeführt. Die Messungen erfolgten durch den Norwegischen Geologischen Dienst (NGU). Eine Beschreibung des Messverfahrens ist Birke et al. (2014b) zu entnehmen. Bestimmt wurden die Isotopenverhältnisse $^{206}Pb/^{207}Pb$, $^{206}Pb/^{208}Pb$ und $^{207}Pb/^{208}Pb$. Die Messungen erfolgten ausschließlich an den Ap-Proben (einschließlich der Proben aus der Ostukraine) und an den Gr-Proben aus der Ostukraine.

### 2.6.4. Datenblatt „Ap PSD“ (Korngrößenverteilung)

Die Bestimmung der Korngrößenverteilung (PSD – particle size distribution) in den Bodenproben war eine „special story“. Eine detaillierte Beschreibung des verwendeten Verfahrens und der aufgetretenen Probleme findet man in Birke et al. (2014b). Die Ermittlung der Korngrößenverteilung erfolgte schließlich auf der Grundlage der am CSIRO Land and Water Adelaide, Australien gemessenen Mittelinfrarotspektren (MIR) der Bodenproben und eines auf der Basis von Sedigraph-Messungen entwickelten Vorhersagemodells für die europäischen Böden. Zu beachten ist, dass die Vorhersage der Anteile an Ton, Schluff und Sand auf der Grundlage der MIR-Spektren auf drei verschiedenen Modellen basiert. Daher beträgt die Summe der drei Fraktionen nicht immer 100 %. Die unveränderten Vorhersagedaten der drei Fraktionen sind in den Spalten „Sand“, „Silt“ und „Clay“ enthalten. Die gleichnamigen Spalten mit dem Zusatz „(norm)“ enthalten die auf 100 % normierten Werte. Die Korngrößenverteilung wurde sowohl für die Ap- als auch die Gr-Proben ermittelt. Für die Proben aus der Ostukraine liegen keine Daten vor.

### 2.6.5. Datenblatt „Ap Kd values“

Der Verteilungskoeffizient zwischen fester und gelöster Phase ($K_d$-Wert) hat wesentlichen Einfluss auf die Mobilität und Bioverfügbarkeit von Metallen in Böden. Nähere Informationen zu Bestimmung und Bedeutung findet man in Janik et al. (2014). Im Rahmen des GEMAS-Projektes wurden $K_d$-Werte für 10 Metalle sowohl in den Ap- als auch in den Gr-Proben ermittelt. Für die Proben aus der Ostukraine liegen keine Daten vor.

### 2.6.6. Datenblatt „Ap PNEC & RCR“

Der PNEC (predicted no effect concentration) und das RCR (risk characterisation ratio) wurden im Rahmen des GEMAS Projektes für die Metalle Kobalt (Co), Kupfer (Cu) und Molybdän (Mo) sowohl in den Ap- als auch Gr-Proben bestimmt. Das Verfahren zur Bestimmung der beiden Größen sowie eine Diskussion der Ergebnisse findet man in Oorts & Schoeters (2014). Für die Proben aus der Ostukraine liegen keine Daten vor.

### 2.6.7. Datenblatt „DL’s“

Das Datenblatt „DL's” bzw. die entsprechende CSV-Datei (vgl. Tabellen in Kapitel 1) enthält eine Auflistung der Nachweisgrenzen der einzelnen Parameter. In den Datensätzen werden Analysenergebnisse unter der jeweiligen Nachweisgrenze mit „–DL“ angegeben, wobei für DL der jeweilig gültige Zahlenwert eingetragen ist.

Fehlstellen in den Datensätzen sind durch ein leeres Feld markiert, es gibt keine gesonderten Wert zur Verschlüsselung der Fehlstellen.

### References

Baritz, R., Fuchs, M., Hartwich, R., Krug, D. & Richter, S. (2005): Soil Regions of the European Union and Adjacent Countries 1 : 5 000 000 (Version 2.0) - Europaweite thematische Karten und Datensätze. European Soil Bureau Network: 122.

BFW (Bundesforschungs- und Ausbildungszentrum für Wald, Naturgefahren und Landschaft): Einführung in die bodenkundlichen Grundlagen. https://geo.bfw.ac.at/boden/downloads/Einfuehrung_Bodenkartierung.pdf (last accessed 2021-04-06).

Birke, M., Rauch, U. & Reimann, C. (2014a): Supporting Information for Interpretation of Geochemical Maps. In: Reimann, C., Birke, M., Demetriades, A., Filzmoser, P. & O'Connor, P. (eds.): Chemistry of Europe's Agricultural Soils, Part A: Methodology and Interpretation of the GEMAS Data Set. (Geologisches Jahrbuch). B102: 93-102; Stuttgart (Schweizerbart Science Publishers).

Birke, M., Reimann, C. & Fabian, K. (2014b): Analytical Methods Used in the GEMAS Project. In: Reimann, C., Birke, M., Demetriades, A., Filzmoser, P. & O'Connor, P. (eds.): Chemistry of Europe's Agricultural Soils, Part A: Methodology and Interpretation of the GEMAS Data Set. (Geologisches Jahrbuch). B102: 41-46; Stuttgart (Schweizerbart Science Publishers).

CIESIN (Center for International Earth Science Information Network) (2018): Documentation for the Gridded Population of the World, Version 4 (GPWv4), Revision 11 Data Sets. Palisades NY: NASA Socioeconomic Data and Applications Center (SEDAC). https://doi.org/10.7927/H45Q4T5F. (downloaded: 2020-06-07).

CIESIN (Center for International Earth Science Information Network), CIAT (Centro Internacional de Agricultura Tropical) (2005): Gridded Population of the World Version 3 (GPWv3): Population Density Grids. Socioeconomic Data and Applications Center (SEDAC), Columbia University, Palisades, NY. http://sedac.ciesin.columbia.edu/gpw. (downloaded: 2012-01-08).

Demetriades, A., Reimann, C. & Filzmoser, P. (2014): Evaluation of GEMAS Project Quality Control Results. In: Reimann, C., Birke, M., Demetriades, A., Filzmoser, P. & O'Connor, P. (eds.): Chemistry of Europe's Agricultural Soils, Part A: Methodology and Interpretation of the GEMAS Data Set. (Geologisches Jahrbuch). B102: 47-60; Stuttgart (Schweizerbart Science Publishers).

Dürr, H.H., Meybeck, M. & Dürr, S.H. (2005): Lithologic composition of the Earth's continental surfaces derived from a new digital map emphasizing riverine material transfer. Global Biogeochemical Cycles, 19, 4: 1-22. DOI: https://doi.org/10.1029/2005GB002515.

EEA (European Environmental Agency, 2003): Digital map of European ecological regions (DMEER). http://www.eea.europa.eu/data-and-maps/data/ds_resolveuid/A770EED0-74AA-4007-8DA5-19B2834E0F5E. (downloaded: 2013-01-15, last accessed: 2021-04-29).

Fick, S.E. & Hijmans, R.J. (2017): WorldClim 2: new 1-km spatial resolution climate surfaces for global land areas. International Journal of Climatology, 37, 12: 4302-4315. DOI: https://doi.org/10.1002/joc.5086.

Filzmoser, P, Reimann, C. & Birke. M. (2014): Univariate Data Analysis and Mapping. In: Reimann, C., Birke, M., Demetriades, A., Filzmoser, P. & O'Connor, P. (eds.): Chemistry of Europe's Agricultural Soils, Part A: Methodology and Interpretation of the GEMAS Data Set. (Geologisches Jahrbuch). B102: 67-81; Stuttgart (Schweizerbart Science Publishers).

Günther, A., Eeckhaut, M., Reichenbach, P., Hervás, J., Malet, J.-P., Foster, C. & Guzzetti, F. (2013): New Developments in Harmonized Landslide Susceptibility Mapping over Europe in the Framework of the European Soil Thematic Strategy. (In: Margottini, C., Canuti, P. & Sassa, K. (Eds.): Landslide Science and Practice: Volume 1: Landslide Inventory and Susceptibility and Hazard Zoning). 297-301; Berlin, Heidelberg (Springer). DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-642-31325-7_39.

Hartwich, R., Baritz, R., Fuchs, M., Krug, D. & Thiele, S. (2005): Soil Regions Map of the European Union and Adjacent Countries 1:5.000.000 (Version 2.0) – Associations of dominant parent material, EU catalogue number S.P.I.05.134. European Soil Bureau Research. European Soil Bureau Research Reports: 122; Luxembourg.

Hijmans, R.J., Cameron, S.E., Parra, J.L., Jones, P.G. & Jarvis, A. (2005): Very high resolution interpolated climate surfaces for global land areas. International Journal of Climatology, 25, 15: 1965-1978. DOI: https://doi.org/10.1002/joc.1276.

Janik, L.J., Forrester, S., Kirby, J.K., McLaughlin, M.J., Soriano-Disla, J.M. & Reimann, C. (2014): Prediction of Metal and Matalloid Partitioning Coefficients (Kd) in Soil Using Mid-Infrared Diffuse Reflectance Spectroscopy. In: Reimann, C., Birke, M., Demetriades, A., Filzmoser, P. & O'Connor, P. (Eds.): Chemistry of Europe’s Agricultural Soils. Part B: General Background Information and Further Analysis of the GEMAS Data Set). Geologisches Jahrbuch Reihe B: Regionale Geologie Ausland und Angewandte Geowissenschaften, B 103: 183-188; Stuttgart (Schweizerbart Science Publishers).

Matschullat, J., Reimann, C., Birke, M. & Carvalho, D. (2018): GEMAS: CNS concentrations and C/N ratios in European agricultural soil. Science of the Total Environment, 627: 975-984. DOI: https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.01.214.

Nesbitt, H.W. & Young, G.M. (1982): Early Proterozoic climates and plate motions inferred from major element chemistry of lutites. Nature, 299, 5885: 715-717. DOI: https://doi.org/10.1038/299715a0.

Oorts, K. & Schoeters, I. (2014): Use of Monitoring Data for Risk Assessment of Metals in Soil under the European REACH Regulation. In: Reimann, C., Birke, M., Demetriades, A., Filzmoser, P. & O'Connor, P. (Eds.): Chemistry of Europe's Agricultural Soils. Part B: General Background Information and Further Analysis of the GEMAS Data Set). Geologisches Jahrbuch Reihe B: Regionale Geologie Ausland und Angewandte Geowissenschaften, B 103: 189-202; Stuttgart (Schweizerbart Science Publishers).

Reimann, C. (2014): Sample Material, Site Selection and Sampling. In: Reimann, C., Birke, M., Demetriades, A., Filzmoser, P. & O'Connor, P. (eds.): Chemistry of Europe's Agricultural Soils, Part A: Methodology and Interpretation of the GEMAS Data Set. (Geologisches Jahrbuch). B102: 31-36; Stuttgart (Schweizerbart Science Publishers).

Reimann, C., Birke, M., Demetriades, A., Filzmoser, P. & O'Connor, P. (eds.) (2014a): Chemistry of Europe's Agricultural Soils, Part A: Methodology and Interpretation of the GEMAS Data Set. (Geologisches Jahrbuch). B102: 523; Stuttgart (Schweizerbart Science Publishers).

Reimann, C., Birke, M., Demetriades, A., Filzmoser, P. & O'Connor, P. (eds.) (2014b): Chemistry of Europe's Agricultural Soils, Part B: General Background Information and Further Analysis of the GEMAS Data Set. (Geologisches Jahrbuch). Vol. B 103: 352; Stuttgart (Schweizerbart Science Publishers).

Reimann, C., Demetriades, A., Eggen, O.A., Filzmoser, P. & EuroGeoSurveys Geochemistry Working Group (2011): The EuroGeoSurveys geochemical mapping of agricultural and grazing land soils project (GEMAS) – Evaluation of quality control results of total C and S, total organic carbon (TOC), cation exchange capacity (CEC), XRF, pH, and particle size distribution (PSD) analysis. NGU Report 2011.043. Geological Survey of Norway: 92; Trondheim. http://www.ngu.no/upload/publikasjoner/rapporter/2011/2011_043.pdf (letzter Zugriff: 16.07.2021).

UCDAVIS (University of California, Davis campus, 2020): https://biogeo.ucdavis.edu/data/worldclim/v2.1/base/wc2.1_30s_bio.zip. (Download: 07.04.2021, letzter Zugriff: 07.04.2021).

UCDAVIS (University of California, Davis campus, 2005a): https://biogeo.ucdavis.edu/data/climate/worldclim/1_4/grid/cur/bio1-9_30s_bil.zip. (Download: 23.10.2012, letzter Zugriff: 26.05.2021).

UCDAVIS (University of California, Davis campus, 2005b): https://biogeo.ucdavis.edu/data/climate/worldclim/1_4/grid/cur/bio10-19_30s_bil.zip. (Download: 23.10.2012, letzter Zugriff: 26.05.2021).

WorldClim.org (2020): WorldClim 2.1 climate data for 1970-2000. https://worldclim.org/data/worldclim21.html. (downloaded: 2021-04-07, last accessed 2021-07-04).

WorldClim.org (2005): WorldClim 1.4 historical climate conditions for 1960-1990. https://www.worldclim.org/data/v1.4/worldclim14.html. (downloaded: 2012-10-23, last accessed: 2021-04-07).