

3 Grundlagen der Reflexionsspektroskopie

Da grundlegende theoretische Kenntnisse zur Wechselwirkung zwischen elektromagnetischer Strahlung und planetarer Oberflächen essentiell für die Interpretation der spektralen Signaturen sind, wird zunächst ein Überblick über die wichtigsten Grundlagen der Spektroskopie gegeben.

Fernerkundliche Arbeitsmethoden, die der qualitativen und quantitativen Untersuchung der Zusammensetzung einer planetaren Oberfläche dienen, basieren auf der Messung reflektierter, emittierter und absorbierter elektromagnetischer Strahlung. Jedoch erfassen sie jeweils nur Teilbereiche des elektromagnetischen Spektrums, was in erster Linie durch die Empfindlichkeiten der verwendeten Aufnahmesysteme (Detektoren) bedingt ist. Die Untersuchung der spektralen Eigenschaften von Mineralen und Gesteinen konzentriert sich vor allem auf die Spektralbereiche des sichtbaren (0,4 bis 0,8µm) und des infraroten Lichts (IR, 0,8µm bis 1mm). Im Bereich des IR ist vor allem der reflektierte Anteil zwischen 0,8 und 3µm von Interesse (Gaffey et al., 1993). Er gehört zusammen mit dem sichtbaren Licht in den Anwendungsbereich der Reflexionsspektroskopie. Detaillierte Diskussionen zur Reflexionsspektroskopie und deren Anwendung in der Fernerkundung finden sich bei Hunt (1980), Nasau (1980) und Burns (1970).

Die Reflexionsspektroskopie basiert im Wesentlichen auf der Messung des Reflexionsgrades R einer planetaren Oberfläche. Es handelt sich hierbei um einen dimensionslosen Wert zwischen 0 und 1, der das Verhältnis des reflektierten (I) zum einfallenden Strahlungsfluss (F) in Abhängigkeit der Wellenlänge (λ) und der Beobachtungsgeometrie (=beidseitig gerichtete Reflexion) angibt (Hapke, 1981). Mathematisch lässt sich der Reflexionsgrad wie folgt beschreiben:

$$R(i, e, \alpha, \lambda) = \frac{I(i, e, \alpha, \lambda)}{\pi * F(i, \lambda)} \quad (3.1)$$

mit i = Einfallswinkel, e = Ausfallswinkel und α = Phasenwinkel. In Abbildung 3.1 ist die allgemeine Geometrie zur Beschreibung eines Reflexionsvorganges schematisch dargestellt.

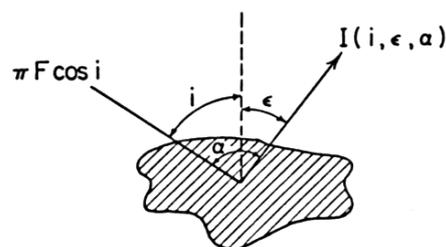


Abb. 3.1: Schematische Darstellung der Beobachtungsgeometrie während eines Reflexionsvorganges (Beschreibung im Text).

Die Identifizierung von Mineralen basiert im Spektralbereich zwischen UV und NIR auf mineralenspezifischen spektralen Signaturen, den Absorptionsbanden. Diese werden durch unterschiedliche Mechanismen in Atomen, Molekülen und Kristallen verursacht. Sie bestimmen hauptsächlich die Wellenlängenpositionen der Absorptionsbanden, welche ein Hauptkriterium zur Bestimmung der strukturellen und chemischen Charakteristik der meisten Minerale ist. Diese Mechanismen werden in folgende Hauptkategorien unterteilt:

- Elektronenübergänge und
- Molekülschwingungen.

Elektronenübergänge basieren auf der Anregung von Elektronen der Übergangs- bzw. Nebengruppenelementen und Lanthanoiden innerhalb der Kristallstrukturen von Mineralen. Schwingungen werden dagegen auf Anregungen periodischer Bewegungen von Komponenten in einem Molekül zurückgeführt. Die folgende Beschreibung dieser Mechanismen folgt im Wesentlichen den Arbeiten von *Pieters & Engert* (1993) und *Hapke* (1981), *Hunt* (1980) und *Burns* (1970).

3.1 Elektronenübergänge

Die spektralen Signaturen der meisten gesteinsbildenden Minerale im sichtbaren und nahen Infrarot lassen sich auf Übergangselemente innerhalb der Kristallstrukturen zurückführen. Mehr als die Hälfte des Periodensystems der chemischen Elemente besteht aus solchen Übergangselementen oder –metallen. Zu ihnen gehören unter anderem die Elemente Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni und Cu, die für geochemische Fragestellungen in der Fernerkundung von besonderer Bedeutung sind, da sie in einem Kristallgitter von Silikaten die Tetraeder- und Oktaederlücken besetzen und dort auch Mg^{2+} und Al^{3+} Ionen ersetzen können. Diese zeichnen sich durch eine Elektronenkonfiguration mit unvollständig besetzten d- oder f-Orbitalen aus. Ausführliche Diskussionen von Elektronenübergängen finden sich bei *Jaumann* (1989) und *Hiesinger* (1999). Die spektralen Signaturen von Mineralen, die Übergangsmetalle enthalten, resultieren aus drei Arten von Elektronenübergängen:

- Kristallfeldübergänge zwischen den d- oder f-Orbitalen eines Atoms,
- Metall-Metall-Ladungsübergänge zwischen unmittelbar benachbarten Atomen in einem Kristallgitter und
- Sauerstoff-Metall-Ladungsübergänge zwischen unmittelbar benachbarten Atomen.

Kristallfeldübergänge

Die Kristallfeldtheorie (*Bethe*, 1929) beschreibt die Wechselwirkungen der Elektronen der orbitalen Energieniveaus von Übergangsmetallen und Lanthanoiden mit deren chemischer Umgebung. Durch die Wechselwirkungen negativ geladener Anionen oder dipolarer Gruppen (Liganden) mit einem positiv geladenen Übergangsmetallion werden Elektronenübergänge in den äußeren Orbitalen des Übergangsmetallions angeregt. Diese Anregungen sind bestimmt vom Typ, der Position und der Symmetrie der umgebenden Liganden (*Burns*, 1980).

Ladungsübergänge

Von Ladungsübergängen spricht man, wenn bei den Elektronenübergängen die beteiligten Ionen nicht wie im Falle der Kristallfeldübergänge klar voneinander getrennt sind und es zu einer Überlappung der Orbitale benachbarter Ionen kommt. Die speziellen räumlichen und symmetriebedingten Eigenschaften von Metall- und Ligandorbitalen werden in der Molekülorbitaltheorie berücksichtigt (*Mortimer*, 1983).

Bei den Metall-Metall-Ladungsübergängen unterscheidet man zwischen homo- und heteronuklearen Übergängen. Homonukleare Elektronenübergänge erfolgen zwischen Kationen desselben chemischen Elements, wie zum Beispiel zwischen Fe^{2+} und Fe^{3+} . Heteronukleare Elektronenübergänge erfolgen zwischen Kationen verschiedener Elemente zum Beispiel zwischen Fe^{2+} und Ti^{4+} . Sauerstoff-Metall-Ladungsübergänge zwischen benachbarten Sauerstoffliganden und dem zentralen Übergangsmetallion führen zu Absorptionsbanden im ultravioletten Spektralbereich, die sich aber bis in den sichtbaren Spektralbereich erstrecken können. Mit steigendem Druck und steigender Temperatur wandern diese

Absorptionsbanden zunehmend in den sichtbaren Teil des elektromagnetischen Spektrums (Rotverschiebung) (Goetz, 1989).

3.2 Molekülschwingungen

Im Spektralbereich des NIR und des IR werden Absorptionsbanden vor allem durch Schwingungen in Molekülen wie zum Beispiel H₂O und CO₂ hervorgerufen. Den einfachsten Fall bilden Schwingungen, die in einem isolierten Molekül, wie zum Beispiel in der Gasphase planetarer Atmosphären, auftreten. Detaillierte Diskussionen finden sich bei Colthup *et al.* (1964), Harris & Bertolucci (1978), Herzberg (1945, 1950), Wheatley (1968), Wilson *et al.* (1955). Molekulare Schwingungen basieren auf Bewegungen, bei denen sich:

- die Bindungslängen zwischen den Atomen (engl. *stretching mode*) oder
- der Bindungswinkel innerhalb eines Moleküls periodisch mit der Schwingungsfrequenz ν ändern (engl.: *bending mode*) oder
- sich das gesamte Molekül als Einheit um seinen Schwerpunkt bewegt.

Unter Annahme einer harmonischen Schwingung, welche durch eine Sinus- oder Kosinusfunktion (z.B. Pendelschwingung) darstellbar ist, gilt:

$$E_\nu = \left(\mathcal{G}_i + \frac{1}{2}\right) h \nu_i \quad (3.2)$$

mit E_ν = Energieniveau, ν_i = Quantenzustand, h = Plancksches Wirkungsquantum und ν_i = Schwingungsfrequenz.

Bei Normalschwingungen bewegen sich alle Atome des Moleküls mit gleicher Frequenz und gleicher Phase, sie gehen also gleichzeitig durch die Gleichgewichtslage und durch die Lage maximaler Amplitude. Die maximalen Amplituden sind für die verschiedenen Atome verschieden groß. Ein Molekül mit N Massepunkten (Atomen) hat $3N$ Freiheitsgrade, da jeder Massepunkt drei Raumkoordinaten besitzt, die für die N Massenpunkte unabhängig voneinander sind. Die Freiheitsgrade entfallen auf Verschiebungen bzw. Translationen in x -, y - und z -Richtung und drei weitere auf Rotationen. Die Anzahl der Schwingungsgrade ist $n=3N-6$ bzw. $n=3N-5$ für lineare Moleküle wie CO₂ (alle Atome liegen in einer Ebene), da es bei diesen keinen Rotationsfreiheitsgrad in Richtung der Molekülachse gibt. Die Gesamtbewegung eines schwingenden Moleküls kann also durch eine Überlagerung von $3N-6$ bzw. $3N-5$ Normalschwingungen dargestellt werden. Man unterscheidet nach der Schwingungsform:

- Valenzschwingungen, bei denen sich nur die Bindungslängen ändern,
- Ebene Deformationsschwingungen, bei denen sich die Bindungswinkel ändern, wobei die Abstände zwischen den Atomen konstant bleiben,
- Deformationsschwingungen aus der Ebene, wo ein Atom durch eine von mindestens 3 Nachbaratomen gebildete Ebene schwingt und
- Torsions- oder Rotationsschwingungen, wo sich der Winkel zwischen zwei Ebenen, die eine Bindung gemeinsam haben, verändert.

Man unterscheidet diese Schwingungsformen weiterhin nach ihrem Symmetrieverhalten:

- Symmetrische Schwingungen, bei denen die Symmetrie des Moleküls beim Schwingungsvorgang erhalten bleibt und

- Antisymmetrische Schwingungen bei denen sich während des Schwingungsvorganges die Symmetrie des Moleküls ändert.

Absorptionsbanden entstehen, wenn durch Absorption eines Lichtquants mit der Energie E (vgl. Gl.3.2) eine Grundschiwingung angeregt wird und das Molekül vom Schwingungszustand ν_0 in den Schwingungszustand ν_1 übergeht (Abb. 3.2). Anregungen in Quantenzustände mit $\nu > 1$ führen zu Oberschwingungen, deren Anregungswahrscheinlichkeiten und Intensitäten wesentlich geringer sind und deren Frequenzen ein ganzzahliges Vielfaches der Frequenz der Grundschiwingung beträgt. Kombinationen von Grund- und Oberschwingungen treten auf, wenn ein Übergang vom Grundzustand zu der Summe von Quantenzuständen von zwei oder mehr Grund- oder Oberschwingungen auftritt. Nicht jede Normalschiwingung führt zu einer Absorptionsbande bzw. ist in dem entsprechenden Spektralbereich „aktiv“. Eine Schwingung ist nur dann aktiv, wenn sich im Verlauf der Schwingung nicht nur die Ladungsverteilung im Molekül sondern auch das Dipolmoment des Moleküls periodisch ändert. Wird das Dipolmoment im Molekül geändert, kann das Molekül mit einfallender elektromagnetischer Strahlung wechselwirken und Photonen mit einer Frequenz, die der Frequenz (Schwingungsdauer) der Schwingung ν_i im Molekül entspricht, absorbieren (Abb. 3.2). Die Frequenz der Schwingungen im Molekül wird von unterschiedlichen Faktoren bestimmt. Zu diesen zählen vor allem:

- die Wertigkeit der Kationen und Anionen,
- die Massen der Atome,
- die Bindungsstärken (Stärke der kovalenten Bindung bzw. Atombindung),
- die Bindungslängen im Molekül sowie
- die Art bzw. Symmetrieeigenschaften der Schwingungen und
- die Zustandsform (Phase) des Moleküls (Kap. 3.1.3).

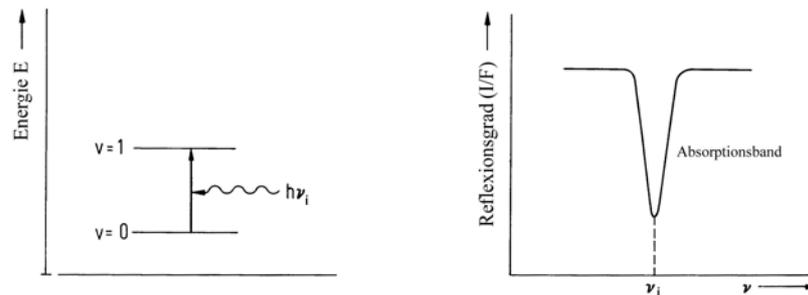


Abb. 3.2: Anregung einer Absorptionsbande im IR. (Erklärung im Text) (nach: Riedel, 1994).

Im Allgemeinen treten Veränderungen der Bindungslängen verglichen mit denen der Bindungswinkel bei kürzeren Wellenlängen bzw. höheren Frequenzen auf. Veränderungen der Bindungslängen und Bindungswinkel von symmetrischen Schwingungen treten im Vergleich zu denen der antisymmetrischen Schwingungen bei geringeren Frequenzen auf. Die Frequenzen der Grundschiwingungen liegen vorwiegend im infraroten Spektralbereich mit Wellenlängen größer als $3\mu\text{m}$ (ν : $4000 - 500\text{ cm}^{-1}$). Jedoch treten deren Oberschwingungen und Kombinationen der Grund- und Oberschwingungen bevorzugt im NIR zwischen 1 bis $3\mu\text{m}$ ($\nu > 4000\text{ cm}^{-1}$ bis VIS) auf.

Im Falle molekularer Schwingungen, die im UV ($\nu > 25000\text{ cm}^{-1}$) und im Spektralbereich des sichtbaren Lichts aktiv sind, sind deren resultierende Absorptionen in der Regel stark gesättigt. Diese spektrale Region wird somit eher von Elektronenübergängen dominiert. Ausnahmen bilden jedoch Moleküle die im IR inaktiv oder nur schwach ausgebildet sind, wie zum Beispiel im Falle von O_2 . Schwingungen in Wellenlängenbereichen kleiner als $1\mu\text{m}$ sind oft zu schwach um identifiziert und

von den in diesem Bereich dominierenden Elektronenübergängen überlagert zu werden. Dagegen sind die meisten Grundsicherungen, die im Wellenlängenbereich größer als $3\mu\text{m}$ zu finden sind, wiederum stark gesättigt.

3.3 Physikalische Parameter

Das Reflexionsvermögen einer planetaren Oberfläche wird neben der chemischen Zusammensetzung und der Mineralogie ebenso von physikalischen Parametern beeinflusst. Eine eingehende Diskussion der Wechselwirkung zwischen elektromagnetischer Strahlung und planetaren Oberflächen in Abhängigkeit der physikalischen Eigenschaften findet sich bei *Hapke* (1963, 1981, 1984, 1986) und *Hapke & Wells* (1981). Zu den Parametern, welche eine direkte Auswirkung auf das Reflexionsvermögen von Mineralen haben, zählen:

- Partikelgröße und Partikelform,
- Porosität (Packungsdichte),
- Temperatur,
- Druck,
- Kristallphasen,
- Spektrale Mischungen und
- Beobachtungsgeometrie.

Partikelgröße

Der Reflexionsgrad einer Oberfläche steht in direktem Zusammenhang mit den Streuprozesseigenschaften der Partikel und ihrer Abhängigkeit von der Wellenlänge. Der Einfluss der Partikelgröße auf die Reflexion äußert sich vor allem durch den wellenlängenabhängigen Verlust durch Streuprozesse. Der Reflexionsgrad und die Intensität der Absorptionsbanden im Spektrum eines bestimmten Minerals sind neben dem Absorptionskoeffizienten der einzelnen Materialien abhängig von der Distanz, die das Licht im Mineral bzw. im einzelnen Partikel zurücklegt. Das Gesetz von Beer beschreibt die Dämpfung des Lichts in einem Material:

$$I = I_0 e^{-kx} \quad (3.3)$$

wobei I_0 die initiale Strahldichte und k den Absorptionskoeffizient bezeichnet. x steht für die Distanz bzw. optische Weglänge des Lichts im Material. Die optische Weglänge ist wiederum direkt abhängig von der Größe der Partikel und deren Streueigenschaften. Größenunterschiede der Partikel besitzen zwar keinen Einfluss auf die Wellenlängenposition von Absorptionsbanden im UV, V und NIR, jedoch beeinflusst die Partikelgröße eines Minerals sowohl dessen Reflexionsgrad als auch die Intensität der Absorptionsbanden. Nimmt die Partikelgröße im Material ab, steigt die Anzahl der Partikeloberflächen und die Streuung des einfallenden Lichts an den Partikelgrenzen. Somit verringert sich die mittlere optische Weglänge des Lichts und das Reflexionsvermögen des Materials steigt. Die Intensität einzelner Absorptionsbanden nimmt ab (*Adams & Filice*, 1967; *Pieters*, 1977; *King et al.*, 1981; *Singer & Blake*, 1983).

Porosität

Die Porosität eines Materials beeinflusst sowohl dessen photometrisches Verhalten (*Hapke*, 1986) als auch auf den Reflexionsgrad und die Intensität der Absorptionen. Die Porosität ist definiert durch das

Vorhandensein von Hohlräumen (= Poren) zwischen den einzelnen Partikeln in einem Material (Rösler, H. J., 1983).

Generell gilt, dass der Reflexionsgrad bei abnehmender Packungsdichte, das heißt steigender Porosität, zunimmt und die Absorptionen an Intensität abnehmen (Clark, 1981 a). Dies steht in direktem Zusammenhang mit der steigenden Anzahl an Poren in der Kristallstruktur, an denen keine Absorption des Lichts erfolgt, sondern eher Streueffekte verstärkt werden. Die optische Weglänge und somit die Intensität der Absorption nehmen ab. Der Einfluss der Packungsdichte ist besonders in transparenten Materialien stark ausgeprägt und weniger in stark absorbierenden opaken Materialien.

Temperatur, Druck und Zustandsform

Besonders in Wellenlängenbereichen größer als $1\mu\text{m}$ sind die spektralen Signaturen gesteinsbildender Minerale von thermalen Effekten abhängig (Sung et al., 1977; Singer & Roush, 1985). Die spezifischen Effekte der Temperatur auf die Reflexionseigenschaften variieren von Mineral zu Mineral (Parkin & Burns, 1980). Sie sind vor allem beim Vergleichen von Mineralspektren mit einem signifikanten Temperaturgradienten bedeutsam, wie zum Beispiel im Falle des Vergleichs von Reflexionsspektren planetarer Oberflächen im äußeren Sonnensystem mit Laborspektren, die unter irdischen Bedingungen gemessen wurden (Nash & Fanale, 1977; Parkin & Burns, 1980; Roush & Singer, 1986, 1987; Singer & Roush, 1985).

Im Allgemeinen verbreitern sich die Absorptionsbanden bei steigender Temperatur nach ihrer langwelligen Seite. Dies gilt sowohl für Absorptionen, die von Elektronenübergängen verursacht wurden als auch für molekulare Schwingungen. Bei abnehmender Temperatur verringert sich dagegen die Breite der einzelnen Absorptionsbanden. Spektren, welche bei niedrigen Temperaturen gewonnen wurden, werden daher oft genutzt, um sich gegenseitig überlappende Absorptionsbanden in Spektren aufzulösen (Hellwege et al., 1970; Schröder et al., 1962; siehe Kap. 3,2). Nach Singer & Roush (1985) und Roush & Singer (1986) bleiben die Wellenlängenpositionen von Absorptionsbanden nahe $1\mu\text{m}$ relativ stabil. Absorptionen bei größeren Wellenlängen verschieben sich dagegen mit zunehmender Temperatur geringfügig.

Veränderungen der Druck- und Temperaturbedingungen resultieren oft in einer Phasenumwandlung zwischen unterschiedlichen Zustandsformen (gasförmig, flüssig, fest) (Adams et al., 1979). Umwandlungen sind jedoch auch innerhalb der festen Zustandsform der Minerale bekannt (Rösler, 1983). Die Minerale gehen in eine neue kristalline polymorphe Modifikation (kubisch, hexagonal etc., siehe Kap. 3.2) über. Diese Veränderung der Kristallstruktur bestimmt die Anordnung der Atome und Moleküle in einem Mineral und führt daher ebenfalls zu einer veränderten Reflexionscharakteristik. Sie beeinflussen sowohl die Wellenlängenposition als auch die Intensität der Absorptionsbanden. Hierzu gehören auch Prozesse, die zur Zerstörung der Kristallstruktur (Amorphisierung) führen. Amorphe Minerale sind charakterisiert durch die regellose Verteilung der einzelnen Atome, so dass alle ihre Eigenschaften einschließlich der Form isotrop, das heißt richtungsunabhängig, sind (Rösler, 1983).

Mineralmischungen

In der planetaren Fernerkundung repräsentieren die detektierten Spektren im Wesentlichen keine reinen Substanzen, sondern spektrale Mischungen. Zwei unterschiedliche Arten von Mischungen sind in der Spektroskopie bekannt. Der einfachste Fall liegt vor wenn die einzelnen Komponenten makroskopisch räumlich voneinander getrennt als reine Substanzen abgelagert sind (engl.: *discrete*, *areal* oder *linear mixing*) und nur bedingt durch die räumliche Auflösung der Instrumente in einem Pixel vermischt sind. Das Spektrum der Mischung repräsentiert die einander additiv überlagerten

Einzelspektren und entspricht der linearen gewichteten Summe der Spektren der Einzelkomponenten je nach ihrem relativen Anteil an der Mischung (*Pieters & Englert, 1993*). Diese Bedingungen werden für Messungen in relativ großen räumlichen Maßstab angenommen.

Oft sind die einzelnen Komponenten jedoch bereits auf molekularer bzw. mikroskopischer Ebene miteinander vermischt (engl.: *intimate mixture*). Der Einfluss der einzelnen Komponenten auf das Spektrum der Mischung ist nicht mehr proportional zu deren relativen Anteil (*Pieters & Englert, 1993*).

Beobachtungsgeometrie

Letztendlich besitzt auch die Beobachtungsgeometrie Einfluss auf das Reflexionsvermögen. Jede Aufnahme ist charakterisiert durch eine unterschiedliche Geometrie zwischen Sonnenstand, beobachteter Oberfläche und Detektor (Einfallswinkel, Ausfallswinkel, Phasenwinkel, siehe Abb. 3.1). Der Einfallswinkel und der Ausfallswinkel können, je nach lokaler Zeit auf der Oberfläche und der Aufnahmeplattform, stark variieren.

Der Reflexionsgrad einer Oberfläche ist neben den chemisch-mineralogischen und physikalischen Eigenschaften vor allem vom jeweiligen Phasenwinkel abhängig. Mit steigendem Phasenwinkel sinkt das Reflexionsvermögen. Benutzt die mit einem Partikel in der Tiefe z des Materials wechselwirkende und anschließend reflektierte Strahlung den gleichen Weg wie die einfallende Strahlung (Phasenwinkel=0°), so erreicht die Reflexion ein Maximum. Dieses Maximum ist als Oppositionseffekt bekannt. Ist der Phasenwinkel ungleich Null, ist der Reflexionsgrad einer Fläche geringer, da das Licht durch gegenseitige Abschattungseffekte benachbarter Partikel exponential geschwächt wird (*Hapke, 1981*). Im Gegensatz zum Reflexionsgrad ist die Intensität einer Absorptionsbande vom Phasenwinkel relativ unabhängig und ändert sich erst mit sehr großen Phasenwinkeln (*Pieters, 1983*).

Wie sich der Reflexionsgrad mit dem Phasenwinkel ändert, hängt von den verschiedenen physikalischen Eigenschaften der Oberflächenkomponenten ab. Dies bezieht sich vor allem auf die Rauigkeit der planetaren Oberfläche, welche durch die Topographie, dem Mikrorelief und die Porosität und daher auch wieder durch die Partikelgröße definiert ist. Die Beobachtungsgeometrie ist damit eine Funktion der oben beschriebenen physikalischen Oberflächenstruktur.

Etliche empirische Modelle wurden auf der Basis von Laboruntersuchungen entwickelt, welche die Veränderungen des Reflexionsgrades in Abhängigkeit der chemischen Zusammensetzung, der physikalischen Eigenschaften der Einzelkomponenten in einer spektralen Mischung und der Beobachtungsgeometrie, speziell des Phasenwinkels beschreiben. Diese Modelle dienen zum einen photometrische Effekte in fernerkundlichen Bilddaten zu korrigieren (siehe Kap.4). Sie ermöglichen jedoch auch die Massenanteile der einzelnen Komponenten in einer spektralen Mischung quantitativ zu bestimmen. Das bisher fortschrittlichste Modell von *Hapke (1981)* (siehe Kap. 4) erlaubt die quantitative Bestimmung der relativen Anteile der Einzelkomponenten in einer mikroskopischen Mischung mit Genauigkeiten von ungefähr fünf Prozent, wenn deren chemische und physikalische Eigenschaften bekannt sind (*Clark & Roush, 1982; Mustard & Pieters, 1987, 1989*).