

Translator

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

Institut für Physik

Fachgebiet: Theoretische Physik

Betreuer: Prof. Dr. Oliver Kühn

M.Sc. Lorenz Friedrich Dettmann
(e-mail: lorenz.dettmann@uni-rostock.de)

Grobkörnige Modellierung von Wechselwirkungen zwischen Schadstoffen und organischer Bodensubstanz

Organische Bodensubstanz (SOM) ist eine komplexe Mischung natürlicher Materialien, die eine zentrale Rolle für die Bodenfunktion spielt. Ihre strukturelle Vielfalt erschwert jedoch die Charakterisierung und das Verständnis der molekularen Wechselwirkungen mit Schadstoffen und Nanoplastik.

In dieser Arbeit wurde ein grobkörniger Modellierungsansatz entwickelt, der auf dem Vienna Soil Organic Matter Modeler 2 basiert. Durch die Zusammenfassung mehrerer Atome zu größeren Partikeln werden vereinfachte molekulare Darstellungen und deutlich schnellere Simulationen ermöglicht. Mit diesem Ansatz konnten verschiedene SOM-Zusammensetzungen modelliert und ihre Wechselwirkungen mit Schadstoffen und Nanoplastik unter unterschiedlichen pH-Bedingungen untersucht werden.

Die Methode erlaubt Simulationen im Mikrosekundenbereich und liefert Einblicke in großräumige SOM-Dynamiken sowie in die Fixierung von Schadstoffen innerhalb von SOM-Matrizen. Insgesamt stellt der entwickelte Ansatz ein effizientes und übertragbares Framework zur Untersuchung von SOM-Schadstoff-Wechselwirkungen auf molekularer Ebene dar.