

**Miljøstyrelsen**

MILJØMINISTERIET

Miljøstyrelsen J. NR.

3043-0α

- 8 JULI 1988

BREV NR.: 2 BILAG:

# **Frigivelse og transport af dampformige komponenter fra jord forurennet med tjære m.m.**

**Forprojekt**

**Litteraturgennemgang**

**Juni 1988**

**Projektgruppen:**

Laboratoriet for teknisk hygiejne, DtH  
Institut for Kemiteknik, DtH  
Kemisk-analytisk laboratorium, TI  
Rambøll & Hannemann  
COWIconsult

MILJØSTYRELSEN  
BIBLIOTEKET  
Strandgade 29  
1401 København K

## INDHOLD

	Side
1. INDLEDNING	1
2. DEN GENERELLE PROBLEMSTILLING	3
3. FASEFORDELING	8
3.1 Fasefordeling af enkeltstoffer	9
3.2 Fugacitetsparametre	12
3.3 Fasefordeling af blandinger	14
4. GASFASE-TRANSPORT I JORD	15
4.1 Modellering af gasmigration fra lossepladser	16
4.2 Diffusionskoefficienter	16
5. FORDAMPNINGSMODELLER	19
5.1 Fordampning fra jordoverfladen og/eller toplaget	19
5.2 Fordampning fra et overdækket kemikaliedepot	24
6. FORDAMPNING FRA VANDOVERFLADER	31
7. MODELFORSG OG FELTMÅLINGER	33
7.1 Modelforsøg	33
7.2 Feltnmålinger	36
8. SAMMENFATNING	38
9. LITTERATURLISTE	39

## BILAG

Bilag 1: Symbolfortegnelse

## 1. INDLEDNING

I de senere år har det i en række tilfælde, hvor man har ønsket at anvende tidligere industrigrunde - herunder de gamle gasværksgrunde - til boligbebyggelse, kontorbyggeri eller lignende, vist sig, at grundene var forurenede med en række kemikalier, herunder ofte kulbrinter og phenoler, som bl.a. indgår som komponenter i tjære.

Nogle af disse forurenede grunde er også blevet undersøgt som led i de undersøgelsesrækker, der er igangsat med ikrafttrædelsen af lov om kemikalieaffaldsdepoter.

I forbindelse med ønsket om at bebygge grundene igen er der bl.a. behov for vurderinger af hvilke dampformige påvirkninger, der kan forekomme f.eks. i kælderrum og på udendørsarealer, som følge af jordforureningen.

Sådanne vurderinger kræver kendskab til, hvorledes de enkelte stoffer samt blandinger af disse opfører sig i jordmiljøet; hvilke faktorer der har betydning for hvorledes stofferne fordeler sig mellem henholdsvis jord-, vand- og luftfasen, samt hvorledes den videre transport og omsætning foregår i de enkelte faser.

Med hensyn til transport i gasfasen og de faktorer, som influerer denne, foreligger der kun i begrænset omfang sammenhængende beskrivelser, som inddrager alle relevante elementer. Om de enkelte delprocesser og/eller -faktorer foreligger der nogen viden, selvom denne ikke altid er tilstrækkelig i denne sammenhæng.

En sammenfatning og videreudvikling af viden på området er således ønskelig.

For at få belyst dette nærmere, iværksatte Miljøstyrelsen i august 1986 et forprojekt med følgende formål:

- at specificere videnniveauet på det beskrevne felt via dels en oversigtlig gennemgang af foreliggende litteratur, dels kontakt til besøg på 2-3 udenlandske institutioner, der arbejder på området.
- at præcisere problemstillingen med henblik på opstilling af et program for et undersøgelsesprojekt, omfattende et egentligt litteraturstudium, eksperimentelle undersøgelser og modellering
- at etablere et samarbejde med en anden europæisk institution samt fastlægge arbejdsdelingen med denne institution
- at formulere en ansøgning om EF-støtte til delvis finansiering af projektet samt ansøgning om supplerende dansk finansiering.

Nærværende rapport har til formål at sammenfatte den i det første afsnit omtalte litteraturgennemgang.

## 2. DEN GENERELLE PROBLEMSTILLING

En jordforurening kan opstå via spild (vedvarende eller ved uheld), ved udsivning fra lossepladser, ved utætte tanke og rørledninger. Er jorden først forurenede, kan de forurenende stoffer spredes på følgende måder:

- via nedsivning til grundvandet
- via spredning i og med grundvandsstrømmen
- via gasfasetransport i den umættede zone
- via fordampning fra jordoverfladen eller evt. fra vandoverflader
- via spredning i atmosfæren.

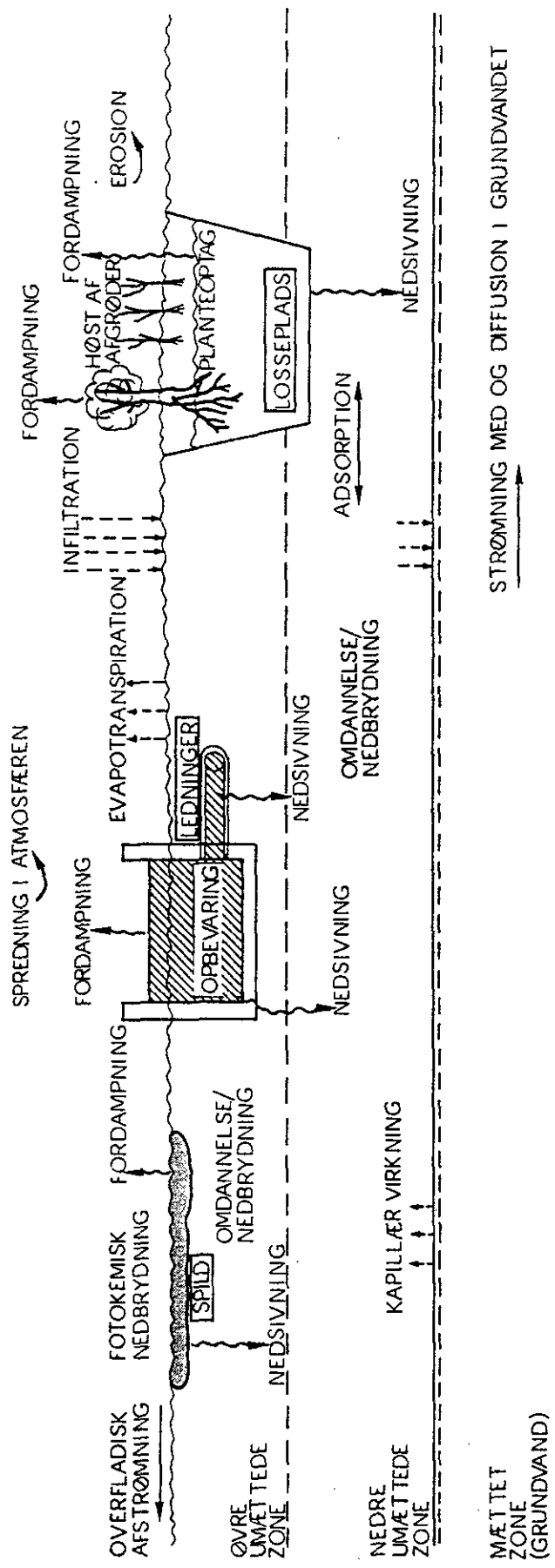
De forurenende stoffer kan endvidere:

- adsorberes til jordpartiklerne (reversibelt eller irreversibelt)
- omdannes kemisk
- omdannes biologisk
- omdannes fotokemisk
- optages i planter og dyr (herunder mennesker).

Omdannelsen af de forurenende stoffer kan føre til dannelse af andre stoffer, som også kan være uønskede i miljøet.

Der er således mange muligheder for spredning og omsætning af en jordforurening. I nærværende rapport ses der væsentligst på spredning i dampform samt hvilke af de øvrige mekanismer, der kan have indflydelse på dette.

Inden der går i detaljer med disse forhold, skal der kort ses på, hvad det er for problemer som de dampformige påvirkninger kan give anledning til, generelt og når det drejer sig om tjærestoffer.



Figur 2.1 - Jordforureninger og deres transportveje

Dampafgivelse fra forurenede jord kan bl.a. give anledning til følgende problemer (bl.a. /35/):

- lugt (selv over store afstande)
- misfarvning af jorden
- væksthæmning
- eksplosion og brande
- sundhedsskadelige effekter på dyr og mennesker.

Tjære indeholder bl.a. de i tabel 2.1 angivne enkeltkomponenter i lidt varierende blanding (i figuren er angivet et eksempel). Derudover består tjæren for 50-70% af vedkommende af beg, d.v.s. især højerekogende polyaromatiske og heterocykliske forbindelser og "carbon black".

Tabel 2.1 - Enkeltkomponenter i tjæren

	Z (vægt)
Benzen	0,1
Toluen	0,2
Xylener	0,4
Phenol	1,2
Cresoler	2,4
Xylenoler	3,4
Napththalen	4,8
2-methylnapththalen	0,9
1-methylnapththalen	0,5
Dimethylnapththalen	<0,1
Acenaphthylen	<0,1
Dibenzofuran	<0,1
Fluoren	1,5
Phenanthren	4,0
Anthracen	1,0
Fluoranthren	0,8
Pyren	2,0
Benz(a)anthracen	<0,1
Chrysen	0,7
Benzfluoranthener	<0,1
Benz(e)pyren	0,4
Benz(a)pyren	0,7
Perylen	<0,1
Indeno (1,2,3-cd)pyren	<0,1
Benzo(ghi)perylene	<0,1

I /35/ er der nævnt eksempler på jordforureningsager, hvor en række af de lette komponenter i tjæren har givet anledning til gener af de ovennævnte arter, se tabel 2.2.

Tabel 2.2 - Skadevirkninger registreret ved jordforurening med lettere tjærekomponenter

	Benzen	Toluen	Xylener	Phenoler	Naphthalen
Lugt*	X	X	X	X	X
Misfarvning af jord	X	X	X	X	X
Væksthæmning	X	X	X	X	X
Ekspllosion og brande	X				
Sundhedseffekter	X	X	X	X	X

\* samt tjære i almindelighed.

I tabel 2.3 er sundhedsskadelige effekter, lugtgrænser samt den arbejdsmiljømæssige grænseværdi for de samme stoffer angivet. De tungere kulbrinter er alle mistænkt for at være kræftfremkaldende. Dampene fra den betragtede type af jordforurening har således et væsentligt potentiale med hensyn til miljømæssige gener.



Tabel 2.3 - Sundhedsskadelige effekter af lettere tjærekomponenter

	Benzen	Toluen	Xylener	Phenoler	Naphthalen
<u>Sundhedseffekter</u>					
Øjenirritation	X	X	X	X	X
Luftvejsirritation	X	X	X	X	X
Eksen	X	X	X	X	
Ætsning				X*4	
Hovedpine	X	X	X	X	X
Kvalme	X	X	X	X	X
Svimmelhed	X	X	X	X	
Muskelsvækkelse				X	
Nervelammelser				X	
Bedøvende	X	X	X	X	
Sanseforstyrrelser				X	X
Blodforandringer	X				X
Lever- og nyreskader				X	X
Cocarcinogen				X	
Carcinogen	X				
Lugtgrænse,* ppm	1	0,2	0,005	0,05-5**	0,03
Arbejdstilsynets Grænseværdi, ppm	5	75	50	5***	10

\* lugtgrænser er individuelle og kan variere en del

\*\* phenol: 0,05 ppm, cresoler og xylener: 5 ppm

\*\*\* gælder for hver phenoltype for sig.

\*4 ved høje koncentrationer

### 3. FASEFORDELING

Som udgangspunkt for en vurdering af de strømme fra en jordforurening, der kan give anledning til gasformige påvirkninger, er det nødvendigt at vide noget om, hvor stor en del af forureningen, der er tilbøjelig til at befinde sig på gasform. Dette vil bl.a. for de enkelte stoffer, der indgår i jordforureningen, afhænge af:

- damptryk, molvægt, opløselighed, adsorption, kemisk reaktivitet, bionedbrydelighed samt den aktuelle koncentration og blandingen af stoffer.

Endvidere vil det for den pågældende jordmatrice afhænge af:

- kornstørrelsesfordeling, porøsitet, vandindhold, lagdeling samt indhold af organisk materiale.

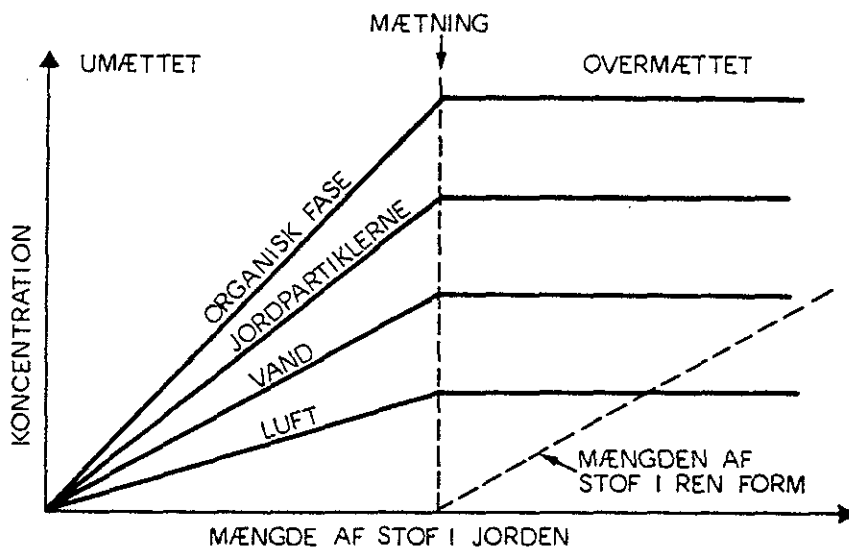
Endelig vil påvirkningen fra de resulterende dampafgivelser afhænge af bl.a.:

- temperaturforhold, barometertryk, vindhastighed, overfladeruhed, støvdannelse.

Jorden i sig selv kan opfattes som bestående af 4 faser:

- jordpartiklerne (sand, ler o.s.v.)
- den organiske fase (humus o.s.v.)
- porevand
- poreluft.

En typisk fordeling mellem disse faser vil i volumenprocent være 65%, 5%, 10%, 20% /50/. Introduceres et kemikalium i dette miljø, vil det fordele sig mellem de forskellige faser som vist i figur 3.1 afhængigt af fordelingskoefficienterne mellem de enkelte faser samt af den totale koncentration af kemikaliet i jordmiljøet.



Figur 3.1 - Fasefordeling af et stof i jorden /50/

Efterhånden som kemikaliekoncentrationen stiger, vil man nå et mætningspunkt, hvor alle faser samtidigt afviser at indeholde mere af stoffet. Tilføres yderligere stof, vil det udgøre en separat "kemikaliefase", som kan presse noget af vandet eller luften væk. Et kemikalium vil opføre sig forskelligt, afhængigt af om miljøet er umættet, mættet eller overmættet.

### 3.1 Fasefordeling af enkeltstoffer

En række forskellige forskergrupper har arbejdet med fasefordelingsbegrebet ("partitioning"), se bl.a. /12/, /43/, /58/, /59/ og /96/, men det er især en canadisk forskergruppe omkring Donald Mackay ved University of Toronto, som har udviklet begrebet og dets anvendelse meget langt /48/, /50/, /53/, /54/, /55/, /56/ og /57/.

Mackay anvender fugacitetsbegrebet, når ligevægt og transport mellem faser skal beskrives. Fugacitet,  $f$ , defineres som et kemisk stofs tendens til at undslippe en given fase og måles i trykenheder. Når tendensen til at undslippe er lige stor fra to faser A og B, er stoffet i ligevægt i de to faser,  $f_A = f_B$ . Ved lave koncentrationer er fugacitet proportional med koncentrationen,  $C$ :  $C = Z \times f$ , hvor  $Z$  er en fugacitetskapacitetskonstant.  $Z$  vil for hver fase afhænge af temperatur, tryk og det pågældende stof.

For en given fugacitet vil koncentrationen  $C$  være lav, hvis  $Z$  er lav, og der vil således kun behøves en lav stofmængde for at medføre en tendens til at undslippe den pågældende fase. Stoffer vil således ophobes i faser hvor  $Z$  er stor, altså hvor høje koncentrationer kan opnås uden at medføre en høj fugacitet.

I den rene kemikaliefase vil fugaciteten almindeligvis være tilnærmelsesvist lig stoffets damptryk,  $P^\circ$ . Hvis stoffets molrumfang er lig  $V$  ( $\text{m}^3/\text{mol}$ ), er  $Z = C/f = 1/(P^\circ \times V)$ .

I dampfasen eller atmosfæren er fugaciteten som regel lig partialtrykket,  $p$ , hvorfor  $Z = C/f = n/(V \times p) = 1/(R \times T)$ , hvor  $n$  er mol,  $V$  er volumen,  $R$  er gaskonstanten og  $T$  er temperaturen i  $^\circ\text{K}$ . I dampfasen er  $Z$  således uafhængigt af det specifikke stof, og almindeligvis lig med ca.  $40 \text{ mol}/\text{m}^3 \times \text{atm}$ .

I væskefasen er partialtrykket  $p$  (eller fugaciteten) som regel lig  $H \times C$ , hvor  $H$  = Henry's lov konstanten.  $Z$  er således lig  $1/H$ .  $H$  kan beregnes som forholdet mellem stoffets damptryk,  $P^\circ$ , og opløselighed,  $S$ .

I den fase, som er adsorberet til jordpartiklerne, kan  $Z$  beregnes som  $10^{-6} K_D \times C/H$ , hvor  $K_D$  er adsorptionskoefficienten eller forholdet mellem adsorberet stof og stof i væskefasen, og  $C$  er koncentrationen af adsorberet stof målt i  $g/m^3$ . Mackay et al udtrykker også  $Z$  via vand-oktanolforholdet  $K_{ow}$  på følgende måde:  $Z = 0,411 \times \lambda \times K_{ow} \times \rho/H$ , hvor  $\lambda$  er jordmaterialets indhold af organisk kulstof angivet som fraktion og  $\rho$  er jordens massefylde i  $kg/l$ .

I det følgende er en række sammenhænge mellem  $K_D$  og  $K_{ow}$  beskrevet.

Da adsorption til jordmediet primært sker via adsorption til det organiske materiale i jorden, kan forskellig adsorption i forskellige jorde principielt reduceres til at afhænge af jordens indhold af organisk stof,  $\lambda$ . Man kan således definere et stofs adsorptionskoefficient i forhold til organisk kulstof,  $K_{oc}$ .

$$K_{oc} = K_D/\lambda.$$

Da der ofte ikke foreligger adsorptionsdata, benyttes forskellige empiriske regressionsligninger for forholdet mellem  $K_{oc}$  og vand-oktanolforholdet,  $K_{ow}$ , opløseligheden,  $S$ , eller andre parametre.

I tabel 3.1 er angivet nogle eksempler på regressionsligninger afprøvet på bl.a. aromatiske kulbrinter.

Tabel 3.1 - Regressionsligninger til estimering af  $K_{oc}$

Ligning	Antal stoffer	$r^2$	Ref.
$\log K_{oc} = 0,937 \log K_{ow} - 0,006$	19	0,95	/47/
$\log K_{oc} = 1,00 \log K_{ow} - 0,21$	10	1,00	/40/
$\log K_{oc} = -0,54 \log S + 0,44$	10	0,94	/40/

### 3.2 Fugacitetsparametre

For at beregne fasefordelingen af et stof i jorden, er det således nødvendigt at have viden om:

- stoffets damptryk
- opløselighed
- stoffets vand-oktanol forhold

samt temperaturen og den pågældende jords massefylde, vandindhold og indhold af organisk kulstof.

Disse informationer foreligger ikke nødvendigvis for alle stoffer i standardopslagsværkerne, /76/, /91/, /93/, /94/ o.s.v. For de her betragtede stoffer foreligger en del oplysninger bl.a. i forbindelse med diverse eksperimentelle undersøgelser af stoffernes adfærd i miljøet, se f.eks. /3/, /42/, /47/, /82/. Endvidere er der udviklet en række metoder til estimering af diverse miljørelevante koefficienter m.m., f.eks. /3/, /47/, /49/, /95/.

Sammenfattes data fra disse referencer kan opstilles de i tabel 3.2 angivne data for de i tabel 2.1 angivne tjærekomponenter.

Tabel 3.2 - Diverse miljørelevante konstanter for tjærekomponenter

	Po mm Hg	S mg/l	Log K <sub>ow</sub>	Molvægt g/mol	
Benzen		95	1780	2,13	78
Toluen		28	515	2,69	92
m-Xylen		8,3	35	3,20	106
o-Xylen		6,5	175	3,12	106
p-Xylen		8,7	185	3,15	106
Phenol		0,2	82000	1,48	94
m-Cresol		0,08	26000	1,97	108
o-Cresol		0,24	25000	1,97	108
p-Cresol		0,1	17000	1,94	108
Xylenoler**		0,2*	4200	2,35	122
Naphthalen		0,23	32	3,37	128
1-methylnaphthalen		0,07	28	3,87	142
2-methylnaphthalen		0,05*	25	3,86	142
Dimethylnaphthalener***		0,03*	8	4,42	156
Acenaphthylen		0,004*	3,94	4,07	152
Dibenzofuran		0,002*	8	4,17	168
Fluoren		0,0006*	1,9	4,18	166
Phenanthren		0,0002	1,2	4,57	178
Anthracen		1,0x10 <sup>-5</sup> *	0,08	4,45	178
Fluoranthren		0,007*	0,24	5,22	202
Pyren		9,3x10 <sup>-5</sup> *	0,15	5,09	202
Benz(a)anthracen		1,6x10 <sup>-5</sup>	0,012	5,91	228
Chrysen		1,1x10 <sup>-6</sup> *	0,002	5,91	228
Benzfluoranthener		2x10 <sup>-7</sup> *		252	
Benz(e)pyren		2,6x10 <sup>-7</sup> *	0,004	6,50	252
Benz(a)pyren		7,3x10 <sup>-7</sup>	0,004	6,04	252
Perylen		1,6x10 <sup>-5</sup> *	0,0003	5,91	252
Indeno(1,2,3-ed)pyren			0,0008	7,01	266
Benz(ghi)perylene		1,4x10 <sup>-8</sup>	0,0003	7,23	276

hvor: P<sup>o</sup> = damptryk ved 25°C i mm Hg.

S = opløselighed i vand ved 25°C i mg/l.

K<sub>ow</sub> = vand-oktanol forholdet.

\* Estimeret værdi

\*\* Data gælder 3,5-xylenol.

\*\*\* Data gælder 1,3-dimethylnaphthalen.

### 3.3 Fasefordeling af blandinger

De her beskrevne fasefordelingsberegninger er kun gældende for ét stof ad gangen. Normalt vil stofferne jo forekomme i blandinger, som påvirker hinandens adfærd og endvidere i visse tilfælde også kan reagere kemisk med hinanden.

Til at behandle fasefordelingen af blandinger er en udvikling af modeller undervejs, se bl.a. /30/.

Det bærende princip i disse modeller er igen, at fugaciteten i alle faser skal være lige stor for at faserne er i ligevægt:

$$(y_i \gamma_i f_i^\circ)_j = (x_i \phi_i f_i^\circ)_k$$

hvor  $y_i$  og  $x_i$  er molfraktionen af komponent  $i$  i henholdsvis fase  $j$  og  $k$ , hvor  $\gamma_i$  og  $\phi_i$  er aktivitetskoefficienter og  $f_i^\circ$  er fugaciteten af den rene komponent ved samme temperatur, tryk og fase som gældende for blandingen.

I disse beregninger indgår således aktivitetskoefficienterne, som enten kan bestemmes eksperimentelt eller estimeres. I princippet vil aktiviteten f.eks. kunne bestemmes via en headspace-analyse.

Et af de mest udviklede systemer til estimation af aktivitetskoefficienter er UNIFAC (= UNIQUAC Functional group Activity Coefficients, hvor UNIQUAC = Universal Quasi Chemical). UNIFAC er udviklet af forskere på Danmarks tekniske Højskole og universitetet i Dortmund og er principielt beskrevet i /23/.

Systemet kan både behandle væskeblandinger, ligevægtsfordelinger mellem damp- og væskefase samt mellem fast og væskefase. De enkelte funktioner er beskrevet i en lang række artikler, se f.eks. /24/, /25/, /26/, /27/ og /67/.



#### 4. GASFASE-TRANSPORT I JORD

Stoffer, der befinder sig i gasfasen, kan bevæge sig gennem jorden i horizontal og vertikal retning ved konvektiv og/eller diffusiv transport.

Den konvektive transport er forårsaget af trykforskelle, og den konvektive gasflux pr. tidsenhed kan beskrives ved:

$$J_K(t) = - \quad / \quad x \, dp/dx$$

hvor

$J_K$  = den konvektive flux  
 = jordens permeabilitet  
 = gassens viskositet

$dp/dx$  = trykgradienten.

Hvor det drejer sig om en jordforurening, vil trykforskelle kunne opstå som følge af en gasdannelse p.g.a. biologisk omdannelse af organisk stof, f.eks. i en losseplads. Det vil her sjældent være det betragtede forurenede stof, som er involveret i gasdannelsen, men stoffet vil blive ført med af den konvektive gastransport forårsaget af gasdannelsen og det overtryk, der dermed skabes i lossepladsen.

Den diffusive transport skyldes molekylernes egenbevægelse og er således forårsaget af koncentrationsforskelle. Den diffusive gasflux pr. tidsenhed kan beskrives ved Fick's lov:

$$J_D(t) = - D_J \times dC/dx$$

hvor

$J_D$  = den diffusive flux  
 $D_J$  = stoffets diffusionskoefficient i jord  
 $dC/dx$  = koncentrationsgradienten.

I tilfælde, hvor der ikke sker en gasdannelse i tilknytning til jordforureningen, vil det være den diffusive transport, som er den dominerende. Dette er den almindeligst betragtede situation, og man ser i disse tilfælde helt bort fra den konvektive transport.

#### 4.1 Modellering af gasmigration fra lossepladser

Der findes en række modeller, som beskriver gasmigration fra lossepladser, se f.eks. /22/, /61/, /62/ og /63/. Disse modeller inddrager principielt både konvektiv og diffusiv gastransport, men som oftest foretages der i de enkelte beregningstilfælde simplifikationer, således at kun den ene type af gastransport betragtes for ikke at komplicere modellen så meget, at beregningen i praksis er umulig.

Formålet med modellerne er typisk at kunne vurdere horizontal udbredelse af gas fra en losseplads eller koncentrations- og trykforholdenes udvikling i selve lossepladsen.

Beregningerne betragter ofte indflydelsen på gasudbredelsen af forskellig permeabilitet af top, bund og sider af lossepladsen, samt betydningen af at foretage indgreb, f.eks. i form af forskellige former for udluftningssystemer i og omkring lossepladsen.

#### 4.2 Diffusionskoefficienter

I beregningen af den diffusive gasflux indgår stoffets diffusionskoefficient i jord. Denne afhænger ud over af det enkelte stof eller blandingen af disse, af jordens porøsitet, vandindhold,  $\theta$ , og tortuositet,  $\tau$ , hvor tortuositeten er et udtryk for form og størrelse af porerne.

Der er opstillet mange forskellige udtryk for sammenhængen mellem diffusionskoefficient i jord,  $D_J$ , og stoffets diffusionskoefficient i luft. De fleste af disse udtryk kan principielt bringes på følgende form:

$$D_J = D_L \times a \times (\varepsilon - b \times \theta)^c / (d \times \varepsilon^e \times \tau^f + g).$$

I tabel 4.1 er opstillet en oversigt over de indgående konstanter i en række forskellige formler for  $D_J$  samt referenceangivelse.

Tabel 4.1 -Konstanter i forskellige formeludtryk for  $D_J$  som funktion af  $D_L$ ,

$$D_J = D_L \times a \times (\varepsilon - b \times \theta)^c / (d \times \varepsilon^e \times \tau^f + g)$$

Reference	a	b	c	d	e	f	g
/46/	0,66	0	1	1	0	0	0
/73/	1	0	1	1	0	1	0
/80/,/89/	1	0	4/3	1	0	0	0
/5/,/20/,/36/	1	1	10/3	1	2	0	0
/32/*	4	1	3,4	1	0	0	0
	0,65	1	2,0	1	0	0	0
	0,2	1	1,3	1	0	0	0
/86/	1	0	1	$\sqrt{3}$	0	0	0
/74/**	1	0	1,5	1	0	0	0
	1	0	2,1	1	0	0	0
/4/	1,04	1	2,02	1	0	0	0
/69/	2	0	1	-1	1	0	3
	1	0	2	1	0	0	0
	1	0	1,5	1	0	0	0
	9	0	1	13	0	0	0
	1	0	1	2	0	0	0
	1	0	2	3	0	0	0

\* afhængig af jordstrukturen.

\*\* sand:  $c = 1,5$ ; topjord:  $c = 2,1$ .

I /5/ inkorporeres endvidere en faktor,  $\beta$ , der skal tage højde for hvor stor en del af stoffet, der adsorberes på jordpartiklerne og opløses i porevandet. defineres på følgende måde.

$$\beta = \varepsilon - \theta + \frac{\theta}{H} + \frac{\rho \times K_{oc} \times \lambda}{H}$$

hvor

$K_{oc}$  = stoffets adsorptionskoefficient i forhold til  
 $\lambda$  organisk kulstof

= andelen af organisk kulstof i selve jordmat-  
 erialet

$H$  = Henry's lovkonstanten.

For  $D_r$  haves i alt følgende udtryk:

$$D_r = D_L \times (\epsilon - \theta)^{10/3} / (\beta \times \epsilon^2)$$

## 5. FORDAMPNINGSMODELLER

Der findes en række modeller, som beskriver fordampning af stof fra jordoverfladen p.g.a. "forurening" af jorden med et eller flere stoffer. Disse modeller kan groft taget deles op i 2 grupper afhængigt af, hvad det er for en problemstilling, de beskriver:

- fordampning fra jordoverfladen eller fra det øverste top lag
- fordampning fra et afdækket kemikaliedepot (eller tilsvarende).

### 5.1 Fordampning fra jordoverfladen og/eller top-laget

I /90/ beskrives en række metoder til beregning af fordampning fra jord. Metoderne arbejder enten kun med fordampning fra selve jordoverfladen eller fordampning fra et jordlag, som fra top til bund har samme initalkoncentration af det fordampende stof. Ingen af modellerne opererer med blandinger af stof.

Af disse modeller er de mest interessante dels et modelsystem udarbejdet af Mayer, Letty og Farmer bestående af 5 modeller. De 5 modeller er alle baseret på Fick's lov og altså en forudsætning om, at der kun sker diffusion af stoffet. Forskellene ligger i grænsebetingelserne, idet:

- Model I, II og III antager koncentrationen 0 lige over jordoverfladen p.g.a. vind.
- Model II er en forenkling af Model I gældende for store jordlagstykkelser eller små diffusionskoefficienter.
- Model III tillader i modsætning til de 2 andre modeller diffusion af stoffet ud ad bunden af jordsøjlen.
- Model IV opererer med varierende koncentration af stoffet lige over jordoverfladen.

- Model V antager eksistensen af et stagnant luftlag lige over jordoverfladen, f.eks. p.g.a. afgrøder på arealet.

I de to mest forenklede modeller, II og III, kan fluxen fra jordoverfladen beregnes ved hjælp af de 2 følgende formler:

$$\text{II: } J(t) = C_{J_0} \times \sqrt{D_J / \pi} \times t$$

hvor

$J(t)$  = gasfluxen fra overfladen til tiden  $t$

$C_{J_0}$  = initialkoncentrationen (ens i hele laget)

$D_J$  = stoffets diffusionskoefficient i jordfluxen

$$\text{III: } J(t) = \frac{D_J \times C_{J_0}}{\sqrt{\pi \times D_J \times t}} (1 - e^{-h^2 / 4D_J \times t})$$

som ovenfor samt

$h$  = tykkelsen af det jordlag, hvori stoffer er indarbejdet.

Jury, Spencer og Farmer, /36/, /37/, /38/ og /39/, har udviklet en model, som ligeledes betragter et overfladenært jordlag med ensartet initialkoncentration. I deres model arbejdes dels med fasefordeling af stoffet, dels med diffusion i gasfasen, diffusion i vandfasen samt konvektiv transport i vandfasen, og dels med 1.ordens nedbrydning af stoffet. Af andre forudsætninger kan nævnes:

- eksistensen af et tyndt stagnant luftlag lige over jordoverfladen
- konstant vandhastighed- uendelig tykkelse af ensartet jord under det forurenede lag
- fordampning af vand fra jordoverfladen.

På baggrund af de nævnte forudsætninger kan fluxen af stof ved jordoverfladen til tiden  $t$  (regnet fra det tidspunkt, hvor stoffet tilføres jorden) beregnes ved hjælp af følgende formel:

$$\begin{aligned}
 J(t) = & C_{J_0} \times \exp(-\mu \times t) \\
 & (v_E \left( \operatorname{erf} \left( \frac{v_E \times t}{\sqrt{4D_E \times t}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{h + v_E \times t}{\sqrt{4D_E \times t}} \right) \right)) \\
 & + (2 H_E + v_E) \times \exp(H_E \times (H_E + v_E) \times t / D_E) \\
 & \times \left( \exp(H_E \times h / D_E) \times \operatorname{erf} \left( \frac{h + (2H_E + v_E) \times t}{\sqrt{4D_E \times t}} \right) \right. \\
 & \left. - \operatorname{erf} \left( \frac{(2H_E + v_E) \times t}{\sqrt{4D_E \times t}} \right) \right)
 \end{aligned}$$

hvor

- $J(t)$  = gasfluxen fra overfladen til tiden  $t$ ,  
 $g/m^3 \times \text{dag}$
- $C_{J_0}$  = initialkoncentrationen (ens i hele laget),  
 $g/m^3$
- $\mu$  = nedbrydningshastigheden, pr. dag
- $v_E$  = stoffets effektive konvektive hastighed i  
 væskefasen =  $v/R_v$ ,  $m/\text{dag}$
- $D_E$  = den effektive diffusionskoefficient  
 $(D_J/R_G) + (D_v/R_v) = (H \times D_J + D_v)/R_v$ ,  
 $m^2/\text{dag}$
- $h$  = lagtykkelsen af det lag, hvori stoffet er  
 indarbejdet,  $m$
- $H_E$  =  $s/R_G$
- $R_G$  = fordelingskoefficienten for gasfasen =  
 $\alpha \times K_D/H + \alpha \times H +$
- $v$  = den konstante væskehastighed (opadrettet,  
 nedadrettet eller nul),  $m/\text{dag}$
- $R_v$  = fordelingskoefficienten for væskefasen =  
 $\alpha \times K_D + \theta + \alpha \times H$
- $D_J$  = stoffets diffusionskoefficient i jord-  
 luften,  $m^2/\text{dag}$
- $D_v$  = stoffets diffusionskoefficient i jord-  
 væsken,  $m^2/\text{dag}$
- $\rho$  = jordens massefylde,  $kg/m^3$
- $\theta$  = jordens vandindhold (volumen %)
- $\alpha$  = jordens luftindhold (volumen %)
- $K_D$  = stoffets adsorptionskoefficient i den  
 pågældende jord
- $H$  = Henry's lovkonstanten for det pågældende  
 stof

- $K_D$  = adsorptionskoefficienten (hældningen på adsorptionsisotermer under forudsætning af lineær adsorption)  
 $s$  =  $D_o/\delta$   
 $D_L$  = stoffets diffusionskoefficient i luft,  $m^2/dag$   
 $\delta$  = tykkelsen af det stagnante luftlag lige over jordoverfladen, m

$\delta$  kan under forudsætning af  
 - at koncentrationen af stoffet over det stagnante luftlag relativt set kan sættes til nul  
 - at der er mættet vanddamp ved jordoverfladen  
 beregnes ved hjælp af følgende formel:

$$\delta = D_L^{vd} \times v_{vd} \times (1-RF) / (2e \times \rho_v)$$

hvor

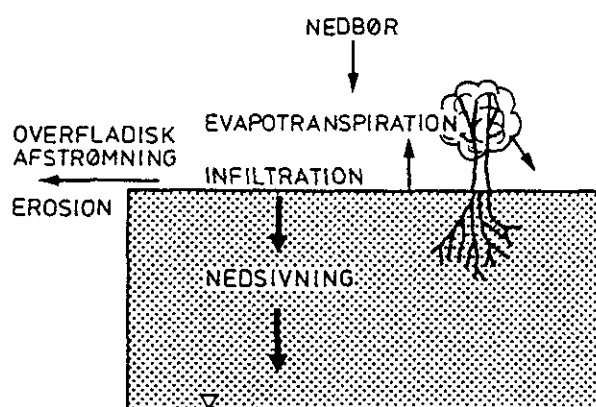
- $D_L^{vd}$  = diffusionskoefficienten for vanddamp i luft,  $m^2/dag$   
 $\rho_{vd}$  = massefylden af umættet vanddamp,  $g/m^3$   
 $RF$  = den relative luftfugtighed  
 $e$  = vandets fordampningshastighed, evaporationen,  $m/dag$   
 $\rho_v$  = vandets massefylde,  $g/m^3$

Modeller af den ovenfor beskrevne art vil principielt kunne anvendes på overfladenære jordforureninger af begrænset vertikal udstrækning, f.eks. forårsaget af spild.

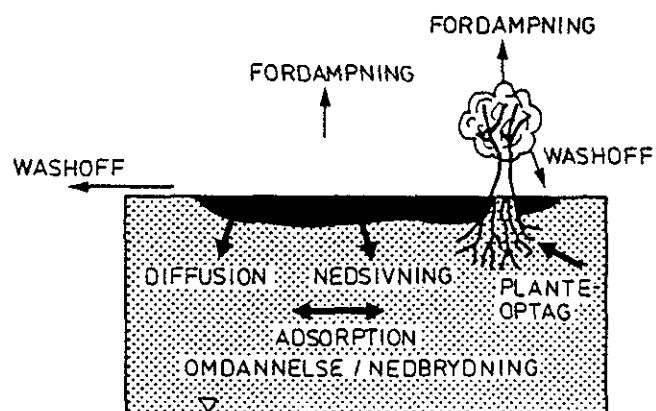
Brown og Silvers /8/ beskriver en computermodel, POSSM, som modellerer kemikaliespild, den tidsmæssige udvikling i stofkoncentrationen på spilstedet samt stoffjernelse via fordampning, nedsivning og overfladisk afstrømning, se figur 5.1.



### HYDROLOGISKE PROCESSER



### FYSISK / KEMISKE PROCESSER



Figur 5.1 - Hydrologiske og fysisk/kemiske processer simuleret for kemikaliespild af POSSM- modellen  
/8/

Modellen løser i princippet følgende partielle differentialligning:

$$\frac{d(C_K \times (\theta + K_D \times \quad + \alpha \times H))}{dt}$$

$$= D_V \times \frac{d^2(C_K \times \theta)}{dy^2} + D_J \times \frac{d^2(C_K \times \alpha \times H)}{dy^2} - \frac{d(C_K \times \theta \times v_V)}{dy}$$

$$- C_K \times (\mu \times (\theta + \quad \times K_D + \alpha \times H))$$

$$- J_A - J_P - J_O - J_E + J_S + J_B$$

hvor

$C_w$  = koncentrationen i den våde "kemikaliefase", g/cm<sup>3</sup>

$J_A$  = fordampning, g/cm<sup>2</sup> x dag

$J_P$  = planteoptag, g/cm<sup>2</sup> x dag

$J_O$  = overfladisk afstrømning af væske, g/cm<sup>2</sup> x dag

$J_E$  = overfladisk afstrømning af jord, g/cm<sup>2</sup> x dag

$J_S$  = kemikaliemængde tilført p.g.a. spild, g/cm<sup>2</sup> x dag

$J_B$  = kemikaliemængde tilført p.g.a. "vask" af planter, g/cm x dag

$J_A$  estimeres via et udtryk opstillet af Mackay og Matsugu /52/, se også afsnit 5.2.

Modellen opererer med opstillingen af en daglig vandbalance og ovenstående ligning løses ligeledes i pr. dag.

Til modellen kan kobles andre modeller, som beregner spredning og koncentrationer i luft og grundvand samt påvirkede recipienter på baggrund af den beregnede flux til det pågældende medium.

## 5.2 Fordampning fra et afdækket kemikaliedepot

Modeller, der beskriver denne problemstilling er især udviklet af Farmer et al, se f.eks. /19/, /20/ og /21/ og Thibodeaux et al, se f.eks. /86/ og /89/.

Farmer et al har arbejdet med problemer omkring deponering af hexaklorbenzen-affald og hvilken betydning for fordampningen fra dette affald, arten og tykkelsen af et evt. afdækningslag har. Farmer anvender også her Fick's lov til at beskrive gasfase transporten gennem afdækningslaget og forudsætter således også, at diffusionen er den dominerende proces. Under stationære forhold kan gasfluxen derfor udtrykkes ved:

$$J_J = -D_J \times (C_{JL} - C_J) / L$$

hvor

$J_J$  = gasfluxen til jordoverfladen

$D_J$  = stoffets diffusionskoefficient i jordluften

$C_{JL}$  = koncentrationen af det fordampende stof ved jordoverfladen

$C_J$  = koncentrationen af det fordampende stof i bunden af jordlaget

$L$  = tykkelsen af jordlaget.

På grundlag af denne formel samt udtryk for  $D_J$  (se tabel 4.1) beregnes dels den resulterende gasflux, dels den nødvendige lagtykkelse for at nedsætte  $C_{JL}$  til en valgt acceptabel værdi. Ved beregningen af  $J_J$  sættes  $C_{JL}$  i første omfang lig 0, da  $C_{JL}$  som oftest vil være størrelsesordener mindre end  $C_J$ .

Shen /80/ benytter i princippet det samme udtryk for flux gennem et afdækningslag, men med et lidt andet udtryk for  $D_J$ .

Thibodeaux /86/ anvender ligeledes Fick's lov og stationære tilstande til at beskrive den diffusive transport i jordfasen:

$$J_J = \frac{D_J}{L} \times (C_{JL} - C_J)$$

samt følgende udtryk for sammenhængen mellem  $D_J$  og  $D_L$ :

$$D_J = D_L \times \varepsilon / \tau$$

hvor sættes til  $\sqrt{3}$ .

I sin model opererer Thibodeaux tillige med et fluxled, der beskriver fluxen fra selve jordoverfladen til de højereliggende luftlag:

$$J_L = k_L \times (C_{JL} - C_{Lo})$$

hvor

$k_L$  = en massetransportkoefficient i overgangslaget

$C_{Lo}$  = koncentrationen af det fordampende stof et stykke væk fra jordoverfladen.

Princippet i indførelsen af dette led er hentet fra to-film gastransportmodellen, som ofte anvendes ved betragtning af fordampning fra vandoverflader (se kap. 6).

Der er opstillet forskellige udtryk til estimering af  $k_L$ , og Thibodeaux anvender ét opstillet af Mackay og Matsugu /52/:

$$k_L: 0,0292 \times v_L^{0.78} \times b^{-0.11} \times Sc^{-0.67}$$

hvor

$v_L$  = vindhastigheden i 10 m's højde

$b$  = kildens længde målt i vindens retning

$Sc$  = Schmidt's tal for det pågældende stof i gasform.

Alt i alt kan fluxen fra forureningen i jorden til luften således beskrives ved:

$$J = J_J + J_L = k_T \times (C_J - C_{Lo})$$

hvor

$$\frac{1}{k_T} = \frac{1}{k_J} + \frac{1}{k_L}$$

$$\text{og } k_J = D_L \times \epsilon / L \times \tau .$$

Tykkelsen,  $\delta$ , af det diffusive overgangslag lige over jordoverfladen kan beregnes som:

$$\delta = 26 \times \nu / v_x \times Sc^{1/3}$$

hvor

$\nu$  = luftens viskositet

$v_x$  = friktionshastigheden.

Såfremt der er tale om deponering i en losseplads, hvor der foregår en gasproduktion, som vil medføre en konvektiv gasstrøm til jordoverfladen, vil der også skulle indgå et konvektivt led. Gastransporten i afdækningslaget kan i denne situation bestemmes via:

$$D_J \times \frac{d^2 C_{Lo}}{dy^2} - v_G \times \frac{dC_{Lo}}{dy} = 0$$

hvor  $v_G$  er den gennemsnitlige gashastighed i jordporerne.

Løses denne ligning m.h.t.  $C_{Lo}$  og følgende grænsebetingelser:

$$y = 0: C = C_J$$

$$y = L: C = C_{JL}$$

fås

$$C_{Lo} = C_J - (C_J - C_{JL}) \times \frac{1 - \exp(y \times v_G / D_J)}{1 - \exp(L \times v_G / D_J)}$$

Gasfluxen bliver lig med:

$$J = v_G \times \frac{C_J - C_{JL}}{\exp(L \times v_G / D_J) - 1} + v_G \times C_J$$

I /89/ udvider Thibodeaux et al denne model til også at betragte betydningen af variationer i barometertrykket og gasgenereringshastigheden. I samme artikel ser Thibodeaux endvidere på betydningen af årstidsvariationer i jordlagets porøsitet som følge af varierende vandindhold samt frost. Det påvises, at stort vandindhold eller frost kan reducere diffusionskoefficient til i størrelsesordenen 1/10 i forhold til  $D_J$  for tørt vejr.

ten Berge /4/ anvender dels en fasefordelingsmodel efter Mackay's principper til at opstille en ligevægtsfordeling af stoffet mellem den del af stoffet, som adsorberes, den del af stoffet som befinder sig i jordvæsken (den nedsivende nedbør) og den del, som befinder sig på gasform.

Med hensyn til den gasformige transport af denne del af forureningen til jordoverfladen anvender han også en forenklet Fick's lov beregning med følgende udtryk for  $D_J$  som funktion af  $D_L$ :

$$D_J = 1,04 \times (\epsilon - \theta)^{2.02} \times D_L.$$

I den samme artikel beskrives også en model til beregning af spredningen af den opløste del af stoffet med grundvandet.

Saathoff og Schecker /74/ anvender ligeledes en Fick's lov model til at beregne gasfluxen fra et forurenede område til jordoverfladen, men ser tillige på betydningen af genopløseligheden i nedsivende nedbør. For den totale flux til overfladen opstilles følgende udtryk:

$$J = J_J - J_v$$

hvor  $J_v$  er den nedadrettede konvektive flux p.g.a. genopløsning i nedbøren.

$$J_v = C_x \times v/2 \times H$$

hvor

$$C_x = \text{gennemsnitskoncentrationen i jordlaget} = (C_J - C_{JL})/2$$

$v$  = infiltrationshastigheden

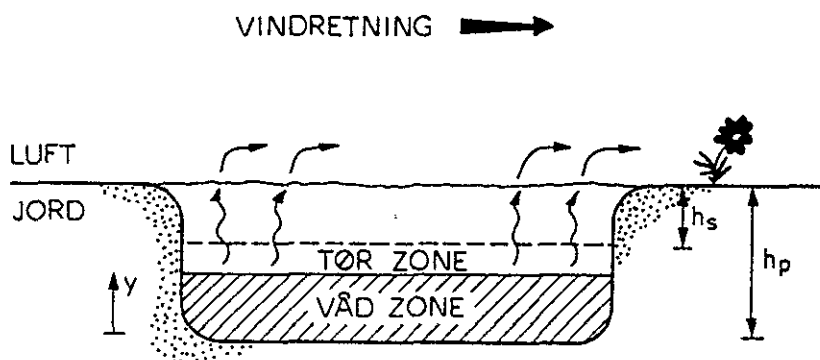
$H$  = Henry's lov konstanten.

$J$  kan således skrives:

$$J = C_J \times \left( \frac{D_J}{L} - \frac{v}{2H} \right)$$

I denne artikel beregnes også spredningen af forureningen i luften efter fordampning til jordoverfladen. Hertil bruges en almindelig Gauss model.

Thibodeaux har også opstillet en model til beregning af fordampning fra "landfarming"-anlæg eller kemikaliespild. Det antages her, at forureningen findes i en dybde fra  $h_m$  til  $h_p$  under jordoverfladen, se figur 5.2. Ved nye spild vil  $h_m$  være lig 0.



Figur 5.2 - Diffusion og fordampning fra et forurennet jordlag

Med tiden vil der ske en fordampning fra det "våde" forurenede område, og "fronten" vil bevæge sig ned af.

Thibodeaux opstiller følgende udtryk for fluxen gennem den "våd/tørre"-grænseflade.

$$J = D_J \times C_{JG} / (h_m^2 + 2D_J + A \times (h_p - h_m) \times C_{JG} / M)^2$$

hvor

$C_{JG}$  = koncentrationen i poreluften på den tørre side af grænsefladen

$A$  = arealet hvorpå forureningen er spredt

$M$  = den totale mængde af forurennet stof tilført.

$C_{JG}$  kan beregnes til:

$$C_{JG} = \frac{H}{D_J \times z_F} \times C_{KO} \left( 1 + H \times \left( \frac{D_K \times O_F \times y \times (h_p - y)}{D_J \times z_F} \right) \right)$$

hvor

- $H$  = Henry' lov konstanten  
 $z_F$  = diffusionslængden gennem laget af forurenende stof, f.eks. olie, som enten ligger som små klumper i jorden eller danner en film omkring jordpartiklerne  
 $D_K$  = diffusionskoefficient i det "våde" forurenede område  
 $o_F$  = arealet af kontaktfladen mellem forurening og poreluften  
 $y$  = variabel, se figur 5.2  
 $C_{K0}$  = initialkoncentrationen af stoffet.

Hvis forureningen antages at findes i form af klumper, er

$$z_F = d_p/2$$

$$o_F = 2,7 \times d_p$$

hvor  $d_p$  er diameteren af jordpartiklerne.

Hvis forureningen antages at findes som en film omkring jordpartiklerne, er

$$z_F = d_p \times \psi_p \times /6 \times \rho_F$$

$$o_F = 6/d_p$$

hvor

- $\rho_p$  = vægtfylden af jordpartiklerne  
 $\psi$  = andelen af forurening der findes som film  
 $\rho_F$  = vægtfylden af forureningern.

I gennemsnit i den tid, hvor fordampningen sker, vil

$$C_{J0} = \frac{H}{1 + H \times \left( \frac{6D_J \times z_F}{D_K \times o_F \times (h_p^2 + h_p \times h_s - 2h_s^2)} \right)} \times C_{K0}$$

Den tid,  $t_d$ , som det tager for stoffet at fordampe kan beregnes til:

$$t_d = (h_p + h_s) \times M/2 \times D_J \times A \times C_{J0}.$$



## 6. FORDAMPNING FRA VANDOVERFLADER

Nogle af de i kapitel 5 omtalte fordampningsmodeller anvender en modifikation af to-film gastransportsmodellen for massetransport gennem en grænseflade. Denne model er opstillet til at beskrive fordampning af stoffer fra en vandoverflade. For bedre at belyse denne model samt dens anvendelsespotentialer i forbindelse med fordampning fra en forurening i jord, hvor forureningen ofte kan være på væskeform, vil den kort blive præsenteret her tillige med et par udtryk til estimation af masseoverførselskonstanterne i enkeltlagene.

To-film gastransportsmodellen antager, at gasfasen (luften) og vandfasen væk fra grænsefladen er fuldstændigt opblandede med ensartet koncentration, og at der mellem de to faser findes to tynde lag (film) af henholdsvis luft og vand, se figur 6.1. Stoftransporten gennem de to film antages at ske via diffusion.

Fluxen gennem grænsefladen kan således skrives

$$J = k_T \times (C_V - C_L) = k_T \times (C_V - p/H)$$

hvor

$k_T$  = den totale masseoverførselskonstant

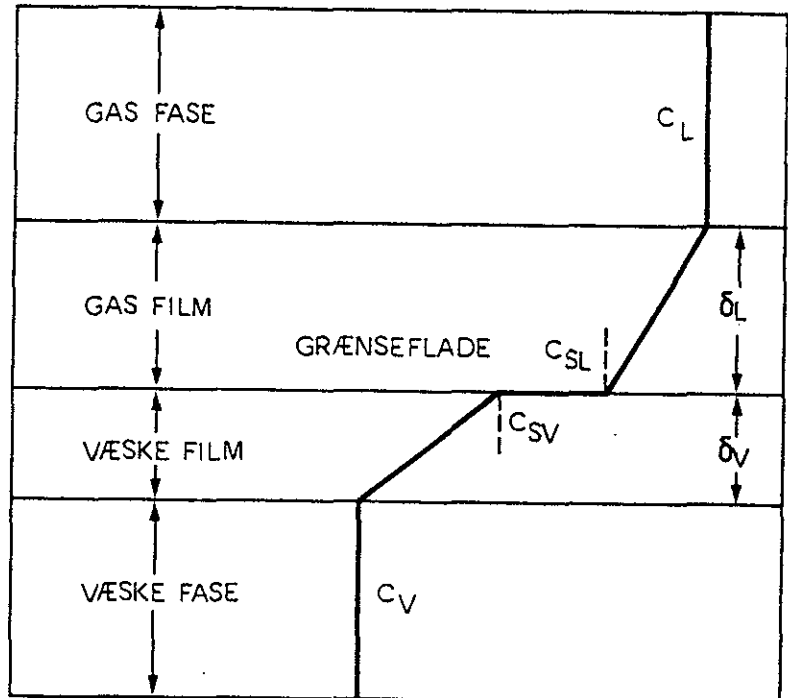
$p$  = partialtrykket af det pågældende stof i luften

$$\text{og } \frac{1}{k_T} = \frac{1}{k_V} + \frac{1}{k_L}$$

hvor

$k_V$  = masseoverførselskonstanten i vandet

$k_L$  = masseoverførselskonstanten i luften



Figur 6.1 - Skematisk fremstilling af to-film gas-transportmodellen /29/

Det i afsnit 5.2 omtalte udtryk fundet af Mackay og Matsugu til estimation af  $k_L$ , synes at være et af de mest benyttede.

$k_V$  kan bl.a. estimeres ud fra:

$$k_V = 5,78 \times (1,024)^{t-20} \times v_V^{0,67} \times L_V^{-0,85} \times D_V/D_{V0}$$

hvor

$t$  = temperatur

$v_V$  = vindhastigheden

$L_V$  = vanddybden

$D_V$  = stoffets diffusionskoefficient i vand

$D_{V0}$  = ilts diffusionskoefficient i vand.

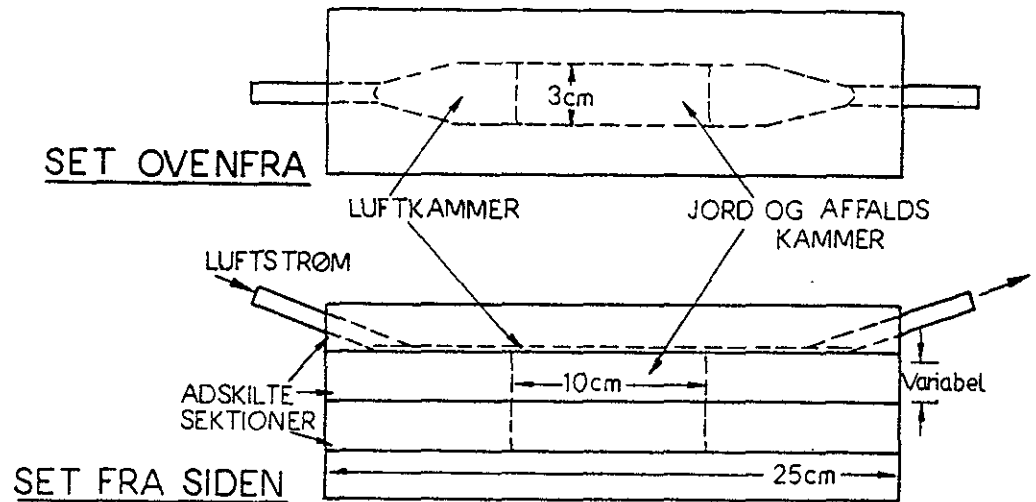
## 7. MODELFORSG OG FELTMÅLINGER

I de foregående afsnit er beskrevet forskellige typer af teoretiske modeller til beregning af gasformige emissioner fra forureninger i jord. Verifikation af disse modeller i modelforsøg samt via feltmålinger findes kun i begrænset omfang. Fordampning fra udsprøjtede/nedpløjede pesticider er forsøgsmæssigt undersøgt i en del tilfælde, se f.eks. /75/, /77/ og /78/ og vil ikke blive nærmere omtalt her.

### 7.1 Modelforsøg

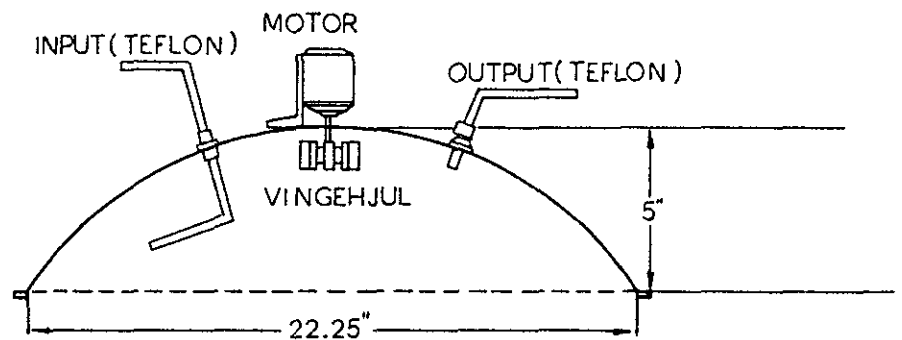
Farmer et al /19/, /20/ og /21/ har i forbindelse med deres opstilling af en model til beskrivelse af fordampning fra et jordoverdækket hexaklorbenzen-depot foretaget en del forsøgsmæssige målinger. Til dette formål anvendtes et plexiglaskammer, hvor varierende lag af HCB og jord kunne indbygges, se figur 7.1.

Fordampningen blev målt via indblæsning af vandmættet luft i kammeret over jordlaget og opsamling af det fordampede HCB i hexylenglycol. Et af resultaterne af forsøgene var fastlæggelse af diffusionskoefficientens afhængighed af jordens massefylde og vandindhold.



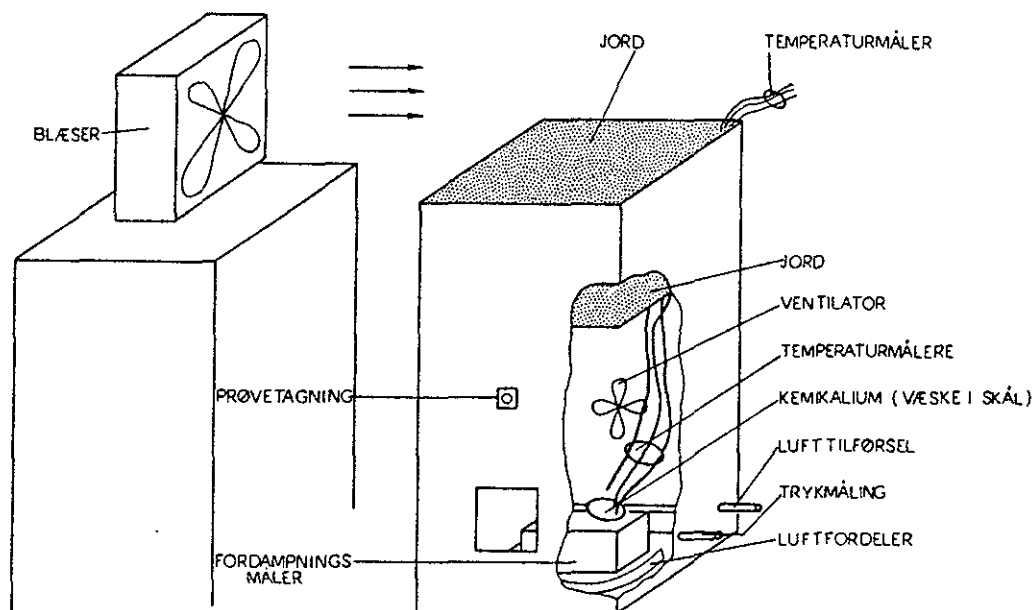
Figur 7.1 - Forsøgskammer anvendt af Farmer et al /20/.

Dupont /15/ arbejder med verifikation af Thibodeaux's "landfarming"-model /87/ og anvender et instrument udviklet for USEPA af Radian Corporation (se figur 7.2) til feltmålinger, men anvender det i første omgang til måling i laboratorieskala.



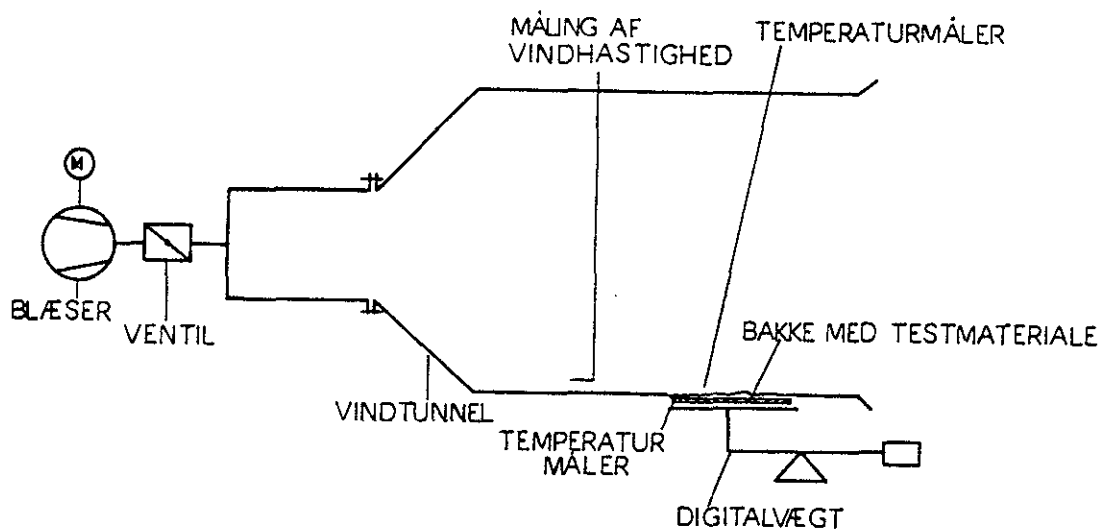
Figur 7.2 - Skematisk diagram af Radian "Surface Isolation Flux Chamber" /15/.

Thibodeaux /88/ opbygger en "lossepladssimulator" til arbejdet med verifikation af sine lossepladsmodeller, /86/ og /89/, se figur 7.3. I /87/ er beskrevet en del indkøringsvanskeligheder med at få simulatoren til at give plausible resultater.



Figur 7.3 - "Lossepladssimulator" udviklet af Thibodeaux, /88/

Saathof og Schecker /74/ arbejder med måling i en vindtunnel for bl.a. at vurdere betydningen for fordampningen af tykkelsen af det forurenede lag (der arbejdes med meget tynde lag), af jordpartikeldiameteren og af vindhastigheden. Forsøgsopstillingen er vist skematisk i figur 7.4.



Figur 7.4 - Forsøgsopstilling anvendt af Saathof og Schecker /74/

## 7.2 Feltnmålinger

Balfour et al /2/ beskriver forsøg på verifikation af forskellige emissionsmodeller via feltnmålinger. Ved målingerne anvendtes det i /15/ beskrevne måleudstyr (se figur 7.2) samt "koncentrationsprofilteknik". Målet med undersøgelserne var at vurdere/verificere emissioner fra henholdsvis opbevaringsbassiner, "landfarming", tromlelager samt lukkede og aktive lossepladser. I /2/ er der dog kun beskrevet verifikation af emission fra opbevaringsbassiner. Det er tillige nævnt, at modellering af emission fra lossepladser blev opgivet. Verifikationen for opbevaringsbassinerne viser, at estimationerne statistisk set er større end måleresultater fra "koncentrationsprofilteknikken" og mindre end måleresultater med Radian-måleapparatet.

Nadeau /65/ beskriver et feltnmåleudstyr til måling af gasformige forureningskomponenter i de øvre jordlag, men angiver ikke sammenligninger med beregnede værdier.

COWIconsult har udført målinger af dampe fra jordforureninger i en række tilfælde. Her måles de dampformige koncentrationer af stofferne i jorden, dels via head-space analyser på udtagne jordprøver (analyserne er udført af Teknologisk Institut), hvilket angiver en maximal luftkoncentration i jorden af stofferne, dels via målinger i borehuller (1 m's dybde), i gravede huller ( m's dybde) og under husfundamenter (ca. 5 cm over jordoverfladen). Koncentrationerne er dels målt gennem opsugning på kulrør og efterfølgende gaskromatografi, dels med et direkte visende instrument, MIRAN 104, der måler ved infrarød spektroskopi.

Sammenligningen af de målte koncentrationer og koncentrationer estimeret ved hjælp af en model, der svarer til Farmer's, viser at estimerterne overvurderer koncentrationerne med flere størrelsesordere.

## 8. SAMMENFATNING

Af den gennemgåede litteratur kan følgende konkluderes med hensyn til det foreliggende videnniveau:

- Der foreligger rimelige modeller til beskrivelse af enkeltstoffers fordeling mellem de forskellige faser i jordmiljøet. En begrænsning på disse modellers anvendelse vil i en del tilfælde foreligge grundet manglende viden om stoffernes miljømæssige egenskaber. Estimationer af disse vil dog ofte kunne foretages.
- Der foreligger kun begrænsede tiltag med hensyn til beskrivelse af blandingers fasefordeling, især når disse blandinger omfatter mere end to stoffer.
- Der findes en del modeller til beskrivelse af fordampning fra overfladenære forureninger især i tynde lag. Disse modeller er især udviklet til at beskrive fordampning af pesticider.
- Der er en modeludvikling igang med hensyn til beskrivelse af jordoverdækkede forureninger forårsaget af forskellige omstændigheder, men modelværktøjet er endnu meget forenklet.
- Verifikation af modellerne i laboratorieskala er endnu kun foretaget i meget begrænset omfang, og der synes at være en del metodeproblemer.
- Feltnmålinger af dampafgivelser fra jordforureninger er også endnu i udviklingsstadiet. Afvigelser mellem estimerede værdier og feltnmålinger beror formentlig væsentligst på modellernes utilstrækkelighed; men også måleusikkerheder og metodeproblemer ved feltnmålingerne kan spille ind og er ikke vurderet i noget væsentligt omfang.

Alt i alt synes der at være behov for metodeudvikling både med hensyn til estimationsmodeller og laboratorie- og feltmæssig afprøvning samt en del yderligere eksakt viden om stoffernes adfærd som såden og enkeltstoffers specifikke parametre.



## 9. LITTERATURLISTE

- /1/ Arnold, J.H.: Studies in Diffusion: III. Unsteady-State Vaporization and Absorption, American Institute of Chemical Engineers. Transactions, New York, N.Y., USA, 1944.
- /2/ Balfour, W.D., et al: Field Verification of Air Emission Models for Hazardous Waste Disposal Facilities, in: Land Disposal of Hazardous Waste, Proceedings of the Tenth Annual Research Symposium, Municipal Environmental Research Laboratory, USEPA, Cincinnati, Ohio, USA, EPA- 600/9-84-007, April 1984.
- /3/ Banerjee, S.; Yalkowsky, S.H.; Valvani, S.C.: Water Solubility and Octanol Water Partition Coefficients of Organics. Limitations of the Solubility -Partition Coefficient Correlation, Environmental Science and Technology, Vol-14, no. 10, p. 1227-1229, (1980).
- /4/ ten Berge, W.: Soil Contamination with Volatile Organic Chemicals and the Estimation of Impact on Human Health, in: Assink, J.W.; van den Brink, W.J. (eds.): Contaminated Soil, First International TNO Conference on Contaminated Soil, 11-15 November, 1985, Utrecht, The Netherlands, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1986.
- /5/ Bomberger, D.C., et al: Environmental Fate and Transport at the Terrestrial - Atmospheric Interface, in: Swann, R.L., Eschenroeder, A. (eds.): Fate of Chemicals in the Environment, ACS Symposium Series, no. 225, (1983).

- /6/ Bonozountas, M.: Soil and Groundwater Fate Modelling, in: Swann, R.L., Eschenroeder, A. (eds): Fate of Chemicals in the Environment, ACS Symposium Series, no. 225, (1983).
- /7/ Borzilov, V.A.; Klepikova, N.V.; Mulkey, L.A.; Novitsby, M.A.: Modelling Pesticide Volatilization and Subsequent Transport in Air, Preprint Extended Abstract, Conference of Division of Environmental Chemistry, American Chemical Society, Miami, Florida, USA, April 28 - May 5, 1985.
- /8/ Brown, S.M.; Silvers, A: Chemical Spill Exposure Assessment, Risk Analysis, Vol. 6, no. 3, pp. 291-299, 1986.
- /9/ Burkhard, L.P.; Andren, A.W.; Armstrong, D.E.: Estimation of Vapor Pressures for Polychlorinated Biphenyls: A Comparison of Eleven Predictive Methods, Environmental Science and Technology, Vol. 19, no. 6, pp. 500-507, (1985).
- /10/ Campbell, J.R.; Luthy, R.G.: Prediction of Aromatic Solute Partition Coefficients Using the UNIFAC Group Contribution Model, Preprint Extended Abstract, Conference of the Division of Environmental Chemistry, American Chemical Society, Miami, Florida, USA, April 28 - May 5, 1985.
- /11/ Chiou, C.T.; Freed, V.H.; Schmedding, D.W.; Kohnert, R.L.: Partition Coefficient and Bioaccumulation of Selected Organic Chemicals, Environmental Science and Technology, Vol. 11, no. 5, pp. 475-478, (1977).
- /12/ Cohen, Y.; Ryan, P.A.: Environmental Distribution of Aerosol-Bound Pollutants, Preprint Extended Abstract, Conference of the Division of Environmental Chemistry, American Chemical Society, Miami, Florida, USA, April 28 - May 5, 1985.

- /13/ D'Ottavio, T.W.; Dietz, R.N.: Radon Transport into a Detached One-Story House with a Basement, Discussions, Atmospheric Environment, Vol. 20, no. 5, pp. 1065-1069, (1986).
- /14/ Drivas, P.J.: Calculation of Evaporative Emissions from Multicomponent Liquid Spills, Environmental Science and Technology, Vol. 16, no. 10, pp. 726-728, (1982).
- /15/ Dupont, R.R.: Laboratory Evaluation of an Air Emission Release Rate Model for Hazardous Waste Land Treatment Facilities, Preprint Extended Abstract, Conference of the Division of Environmental Chemistry, American Chemical Society, Miami, Florida, USA, April 28 - May 5, 1985.
- /16/ Elshayal, I.M.; Lu, B.C.-Y.: Prediction of Vapor-Liquid Equilibria by Means of a Modified Clausius Equation of State, Canadian Journal of Chemical Engineering, Vol. 51, no. 2, pp. 76-81, (1973).
- /17/ Evans, J.W.; Song, S.: Gas-Solid Reactions: The Viscous Flow Term (Non-Equimolar Fluxes), Canadian Journal of Chemical Engineering, Vol. 51, no. 10, pp. 616-617, (1973).
- /18/ Farmer W.J.; Igue, K.; Spencer, W.F.; Martin, J.P.: Volatility of Organochlorine Insecticides from Soil: 1. Effect of Concentration, Temperature, Air Flow Rate and Vapor Pressure, Proceedings of Soil Science Society of America, vol. 36, pp. 443-447, (1972).
- /19/ Farmer, W.J.; Yang, M.S.; Letey, J.; Spencer, W.F.: Problems Associated with the Land Disposal of an Organic Industrial Hazardous Waste Containing HCB, in: Fuller, W.H. (ed.): Residual Management by Land Disposal. Proceedings of the Hazardous Waste Research Symposium, Municipal Environmental Research Laboratory, USEPA, Cincinnati, Ohio, USA, EPA-600/ 9-76-015, July 1976.

- /20/ Farmer, W.J.; Yang, M.S.; Letey, J.; Spencer, W.F.: Land Disposal of Hexachlorobenzene Wastes. Controlling Vapor Movement in Soil, Municipal Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, USEPA, Cincinnati, Ohio, USA. EPA-600/2-80-119, August 1980.
- /21/ Farmer, W.J.; Yang, M.S.; Letey, J.; Spencer, W.F.; Roulier, M.H.: Land Disposal of Hexachlorobenzene Wastes: Controlling Vapor Movement in Soils, in: Schultz, D.W. (ed.): Land Disposal of Hazardous Wastes, Municipal Environmental Research Laboratory, USEPA, Cincinnati, Ohio, USA, EPA-600/9-78-016, August 1978.
- /22/ Findikakis, A.N.; Leckie, J.O.: Numerical Simulation of Gas Flow in Sanitary Landfills, Journal of the Environmental, Engineering Division, Proceedings of ASCE, Vol. 165, no. EE5, pp. 927-945, (1979).
- /23/ Fredenslund, Aa.; Gmehling, J.; Rasmussen, P.: Vapor-Liquid Equilibrium using UNIFAC, Elsevier, Amsterdam, 1977.
- /24/ Fredenslund, Aa.; Michelsen, M.L.; Sørensen, J.M.: Liquid-Liquid Equilibrium Calculations using Activity Coefficients Models, 2nd International Conference on Phase Equilibria and Fluid Properties in the Chemical Industry, Berlin (West), 17-21 Marts, 1980.
- /25/ Fredenslund, Aa.; Rasmussen, P.: From UNIFAC to SUPERFAC - and back?, Fluid Phase Equilibria, Vol. 24, pp. 115-150, (1985).
- /26/ Gmehling, J.G.; Andersen, T.F.; Prausnitz, J.M.: Solid-Liquid Equilibria using UNIFAC, Ind. Eng. Chem. Fundam., Vol. 17, no. 4, pp. 269-273, (1978).

- /27/ Gmehling, J.G.; Rasmussen, P.; Fredenslund, Aa.: Vapor-Liquid Equilibria by UNIFAC Group-Contribution. Revision and Extension. 2, Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 21, no. 1, pp. 118-127, (1982).
- /28/ Gmehling, J.; Schwaitzer, U.: Berechnung von Expositionen beim Umgang mit lösemittelhaltigen Zubereitungen, Schriftenreihe der Bundesanstalt für Arbeitsschutz, Forschungsbericht nr. 382, Dortmund, BRD, 1984.
- /29/ Gowda, T.P.H.; Lock, J.D.: Volatilization Rates of Organic Chemicals of Public Health Concern, Journal of Environmental Engineering, Vol. 111, no. 6, pp. 755-776, (1985).
- /30/ Groves, F.R.; Reible, D.D.; Thibodeaux, L.J.: Estimation of Physical and Chemical Properties of Waste Organic Mixtures Associated with Land Pollution, Preprint Extended Abstract, Conference of the Division of Environmental Chemistry, American Chemical Society, Miami, Florida, USA, April 28 -May 5, 1985.
- /31/ Halappa Gowda, T.P.; Lock, J.D.: Volatilization Rates of Organic Chemicals of Public Health Concern, Journal of Environmental Engineering, Vol. 111, no. 6, pp. 755-776, (1985).
- /32/ Hoeks, J.; Rijtema, P.E.: Milieuaspecten bij transport via ondergrondse pijpleidingen, Tijdschrift voor Vervoerswetenschap, Vol. 18, no. 2, pp. 157-179 (1982).
- /33/ Hwang, S.T.: Toxic Emissions from Land Disposal Facilities, Environmental Progress, vol. 1, no. 1, pp. 46-52, (1982).
- /34/ Hwang, S.T.; Thibodeaux, L.J.: Measuring Volatile Chemical Emission Rates from Large Waste Disposal Facilities, Environmental Progress, Vol. 2, no. 2, pp. 81-86, (1983).

- /35/ James, S.C.; Kinman, R.N.; Nutini, D.L.: Toxic and Flammable Gases, in: Smith, M.A. (ed.): Contaminated Land, Reclamation and Treatment, NATO Series on the Challenges of Modern Society, Vol. 8, Plenum Press, New York, 1985.
- /36/ Jury, W.A.; Spencer, W.F.; Farmer, W.J.: Behavior Assessment Model for Trace Organics in Soil: I. Model Description, Journal of Environmental Quality, Vol. 12, no. 4 pp. 558-564, (1983).
- /37/ Jury, W.A.; Spencer, W.F.; Farmer, W.J.: Behavior Assessment Model for Trace Organics in Soil: II. Chemical Classification and Parameter Sensitivity, Journal of Environmental Quality, Vol. 13, no. 4 pp. 567-572, (1984).
- /38/ Jury, W.A.; Spencer, W.F.; Farmer, W.J.: Behavior Assessment Model for Trace Organics in soil: III. Application of Screening Model, Journal of Environmental Quality, Vol. 13, no. 4, pp. 573-579, (1984).
- /39/ Jury, W.A.; Spencer, W.F.; Farmer, W.J.: Behavior Assessment Model for Trace Organics in Soil: IV. Review of Experimental Evidence, Journal of Environmental Quality, Vol. 13, no. 4, pp. 580-586, (1984).
- /40/ Karickhoff, S.W.; Brown, D.S.; Scott, T.A.: Sorption of Hydrophobic Pollutants on Natural Sediments, Water Resources, vol. 13, pp. 241-248, (1979).
- /41/ Kinman, R.N.; Nutini, D.L.: Production, Migration and Hazards Associated with Toxic and Flammable Gases at Uncontrolled Hazardous Waste Sites, in: Land Disposal of Hazardous Waste, Proceedings of the Tenth Annual Research Symposium, Municipal Environmental Research Laboratory, USEPA, Cincinnati, Ohio, USA, EPA-600/9-84-007, April 1984.

- /42/ Klöpffer, W.; Kaufmann, G.; Rippen, G.; Poremski, H.-J.: A Laboratory Method for Testing the Volatility from Aqueous Solution: First Results and Comparison with Theory, Ecotoxicology and Environmental Safety, Vol. 6, pp. 545-559, (1982).
- /43/ Klöpffer, W.; Rippen, G.; Frische, R.: Physico-chemical Properties as Useful Tools for Predicting the Environmental Fate of Organic Chemicals, Ecotoxicology and Environmental Safety, Vol. 6, pp. 294-301, (1982).
- /44/ Leinonen, P.J.; Mackay, D.: The Multicomponent Solubility of Hydrocarbons in Water, Canadian Journal of Chemical Engineering, vol. 51, no. 4, pp. 230-233, (1973).
- /45/ Loch, J.P.G.; Kool, H.J.; Lagas, P. Verheul, J.H.A.M: Removal and Retention of Volatile Chlorinated Hydrocarbons in the Soil's Unsaturated Zone, in: Assink, J.W.; van den Brink, W.J. (eds.): Contaminated Soil, First International TNO Conference on Contaminated Soil, 11-15 November, 1985, Utrecht, The Netherlands, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1986.
- /46/ Lutton, R.J.; Regan, G.L.; Jones, L.W.: Design and Construction of Covers for Solid Waste Landfills, Municipal Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, USEPA, Cincinnati, Ohio, USA, EPA-600/2-79-165, August 1979.
- /47/ Lyman, W.J.; Reehl, W.F.; Rosenblatt, D.H. (eds.): Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Environmental Behavior of Organic Compounds, McGraw-Hill, New York, 1982.
- /48/ Mackay, D.: Finding Fugacity Feasible, Environmental Science & Technology, Vol. 13, no. 10, pp. 1218-1223, (1979).

- /49/ Mackay, D.; Bobra, A.; Chan, D.W.; Shiu, W.Y.: Vapor Pressure Correlations for Low-Volatility Environmental Chemicals, Environmental Science and Technology, Vol. 16, no. 10, pp. 645-649, (1982).
- /50/ Mackay, D.; Hoag, G.E.: A Perspective on the Behaviour of Chemicals Spilled in Soil, Spill Technology Newsletter, pp. 53-71, June 1986.
- /51/ Mackay, D.; Leinonen, P.J.: Rate of Evaporation of Low-Solubility Contaminants from Water Bodies to Atmosphere, Environmental Science and Technology, Vol. 9, no. 13, pp. 1178-1180, (1975).
- /52/ Mackay, D.; Matsugu, R.S.: Evaporation Rates of Liquid Hydrocarbon Spills on Land and Water, Canadian Journal of Chemical Engineering, Vol. 51, no. 8, pp. 434-439, (1973).
- /53/ Mackay, D.; Patterson, S.: Calculating Fugacity, Environmental Science & Technology, Vol. 15, no. 9, pp. 1006-1014, (1981).
- /54/ Mackay, D.; Patterson, S.: Fugacity Revisited, Environmental Science & Technology, Vol. 16, no. 12, 654A-660A, (1982).
- /55/ Mackay, D.; Patterson, S., Cheung, B.: A Model for Evaluating the Behaviour of Environmental Chemicals, Preprint Extended Abstract, Conference of the Division of Environmental Chemistry, American Chemical Society, Miami, Florida, USA, April 28 -May 5, 1985.
- /56/ Mackay, D.; Patterson, S.; Cheung, B.; Brock Neely, W.: Evaluating the Environmental Behaviour of Chemicals with a Level III Fugacity Model, Chemosphere, Vol. 14, no. 3/4, pp. 335-374, (1985).



- /57/ Mackay, D.; Paterson, S.; Joy, M.: Application of Fugacity Models to the Estimation of Chemical Distribution and Persistence in the Environment, in Swann, R.L., Eschenroeder, A. (eds.): Fate of Chemicals in the Environment, ACS Symposium Series, no. 225, (1983).
- /58/ McCall, P.J.; Laskowski, D.A.; Swann, R.L.; Dishburger, H.J.: Estimation of Environmental Partitioning of Organic Chemicals in Model Ecosystems, Residue Review, Vol. 85, pp. 231-244, (1983).
- /59/ McCall, P.J.; Swann, R.L.; Laskowski, D.A.: Partition Models for Equilibrium Distribution of Chemicals in Environmental Compartments, in Swann, R.L., Eschenroeder, A. (eds.): Fate of Chemicals in the Environment, ACS Symposium Series, no. 225, (1983).
- /60/ Means, J.C.; Wood, S.G.; Hassett, J.J.; Banwart, W.L.: Sorption of Polynuclear Aromatic Hydrocarbons by Sediments and Soils, Environmental Science and Technology, Vol. 14, no. 12, pp. 1524-1528, (1980).
- /61/ Mohsen, M.F.; Farquhar, G.J.; Kouwen, N.: Gas Migration and Vent Design at Landfill Sites, Water, Air and Soil Pollution, Vol. 13, pp. 79-97, (1980).
- /62/ Moore, C.A.: Theoretical Approach to Gas Movement through Soils, in: Genetelli, E.J.; Cirello, J. (eds.): Gas and Leachate from Landfills. Formation, Collection, and Treatment, Municipal Environmental Research Laboratory, USEPA, Cincinnati, Ohio, USA, EPA-600/9-76-004, March 1976.
- /63/ Moore, C.A.; Rai, I.S.; Lynch, J.: Computer Design of Landfill Methane Migration Control, Journal of the Environmental Engineering Division, Proceedings of ASCE, Vol. 108, no. EE1, pp. 89-106, (1982).

- /64/ Mukherjee, A.: Estimation of Isobaric Vapor-Liquid Equilibrium Data for Binary Systems, Canadian Journal of Chemical Engineering, vol. 51, no. 6, pp. 386-389, (1973).
- /65/ Nadeau, R.J.; Lafora, J.P.: Measuring Soil Vapors for Defining Subsurface Contaminant Plumes, in: Assink, J.W.; van den Brink, W.J. (eds.): Contaminated Soil, First International TNO Conference on Contaminated Soil, 11-15 November, 1985, Utrecht, The Netherlands, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1986.
- /66/ Nash, R.G.: Estimating Pesticide Dissipation from Soil Surfaces when Loss is Primarily by Volatilization, Preprint Extended Abstract, Conference of the Division of Environmental Chemistry, American Chemical Society, Miami, Florida, USA, April 28 - May 5, 1985.
- /67/ Olsen, E.; Andersen, P.M.: Substitution: En metode til at overholde arbejdsmiljølovens krav til luftkvaliteten, Dansk Kemi, no. 5, pp. 146-153, (1986).
- /68/ Pellizzari, E.D.: Analysis for Organic Vapor Emissions near Industrial and Chemical Waste Disposal Sites, Environmental Science and Technology, Vol. 16, no. 11, pp. 781-785, (1982).
- /69/ Probst, K.; Wohlfahrt, K.: Empirische Abschätzung effektiver Diffusionskoeffizienten in porösen Systemen, Chem.-Ing.-Tech., Vol. 51, no. 7, pp. 737-739, (1979).
- /70/ Rathbun, R.E.; Tai, D.Y.: Volatilization of Alkylbenzenes from Water, Preprint Extended Abstract, Conference of the Division of Environmental Chemistry, American Chemical Society, Miami, Florida, USA, April 28 - May 5, 1985.
- /71/ Rathbun, R.E.; Tai, D.Y.: Volatilization of Ketones, Chemosphere, Vol. 13, no. 9, pp. 1009-1023, (1984).

- /72/ Rettenberger, G.: Gesichtspunkte bei der Planung von Anlagen zur Kontrolle des Gashaushaltes und Vorgehensweise, Müll und Abfall, Vol. 13, no. 12, pp. 351-359, (1981).
- /73/ Ruddy, E.N.; Buyanovsky, G.A.; Marrero, T.R.: A Model of Carbon Dioxide Distribution and Movement about the Air-Soil Interface, Preprint Extended Abstract, Conference of the Division of Environmental Chemistry, American Chemical Society, Miami, Florida, USA, April 28 - May 5, 1985.
- /74/ Saathof, G.; Schecker, H.-G.: Chemical Exchange Rates between Soil and Air, in: Assink, J.W.; van den Brink, W.J. (eds.): Contaminated Soil, First International TNO Conference on Contaminated Soil, 11-15 November, 1985, Utrecht, The Netherlands, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1986.
- /75/ Sanders, P.F.; Seiber, J.N.: A Chamber for Measuring Volatilization of Pesticides from Model Soil and Water Disposal Systems, Chemosphere, Vol. 12, no. 7/8, pp. 999-1012, (1983).
- /76/ Sax, N.I.: Dangerous Properties of Industrial Materials, 5th ed., Van Nostrand Reinhold Company, New York, 1979.
- /77/ Scheunert, I., et al: Fate of Chemicals in Plant-Soil Systems: Comparison of Laboratory Test Data with Results of Open Air Long-Term Experiments, Ecotoxicology and Environmental Safety, Vol. 7, pp. 390-399, (1983).
- /78/ Scheunert, I.; Korte, F.: Comparative Laboratory and Outdoor Studies on the Behaviour of  $^{14}\text{C}$ -labelled Chlorinated Benzenes in Soil, in: Assink, J.W.; van den Brink, W.J. (eds.): Contaminated Soil, First International TNO Conference on Contaminated Soil, 11-15 November, 1985, Utrecht, The Netherlands, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1986.

- /79/ Schwarzenbach, R.P.; Westall, J.; Transport of Nonpolar Organic Compounds from Surface Water to Groundwater. Laboratory Sorption Studies, Environmental Science and Technology, Vol. 15, no. 11, pp. 1360-1367, (1981).
- /80/ Shen, T.T.: Air Quality Assessment for Land Disposal of Industrial Wastes, Environmental Management, vol. 6, no. 4, pp. 297-305, (1982).
- /81/ Shen, T.T.: Estimation of Organic Compound Emission from Waste Lagoons, Journal of the Air Pollution Control Association, vol. 32, no. 1, pp. 70-82, (1982).
- /82/ Smith, J.H.; Bomberger, Jr., D.C.; Haynes, D.L.: Volatilization Rates of Intermediate and Low Volatility Chemicals from Water, Chemosphere, vol. 10, no. 3, pp. 281-289, (1981).
- /83/ Spencer, W.F.; Farmer, W.J.; Jury, W.A.: Review: Behavior of Organic Chemicals at Soil, Air, Water Interfaces as Related to Predicting the Transport and Volatilization of Organic Pollutants, Environmental Toxicology and Chemistry, Vol. 1, pp. 17-26, (1982).
- /84/ Spencer, W.F.; Jury, W.A.; Farmer, W.J.: Movement of Pesticides and Other Trace Organics across the Soil-Air Interface, Preprint Extended Abstract, Conference of the Division of Environmental Chemistry, American Chemical Society, Miami, Florida, USA, April 28 - May 5, 1985.
- /85/ Swann, R.L., et al: A Rapid Method for the Estimation of the Environmental Parameters Octanol/Water Partition Coefficient, Soil Sorption Constant, Water to Air Ratio, and Water Solubility, Residue Review, Vol. 85, pp. 17-28, (1983).
- /86/ Thibodeaux, L.J.: Estimating the Air Emissions of Chemicals from Hazardous Waste Landfills, Journal of Hazardous Materials, no. 4, pp.

- 235-244, (1981).
- /87/ Thibodeaux, L.J.; Hwang, S.T.: Landfarming of Petroleum Wastes - Modeling The Air Emission Problem, Environmental Progress, Vol. 1, no. 1, pp. 42-46, (1982).
- /88/ Thibodeaux, L.J.; Springer, C.; Hildebrand, G.: Air Emissions of a Volatile Organic Chemicals from Landfills: A Pilot-Scale Study, in: Land Disposal of Hazardous Waste, Proceedings of the Tenth Annual Research Symposium, Municipal Environmental Research Laboratory, USEPA Cincinnati, Ohio, USA, EPA-600/9-84-007, April 1984.
- /89/ Thibodeaux, L.J.; Springer, C.; Riley, L.M.: Models of Mechanisms for the Vapor Phase Emission of Hazardous Chemicals from Landfills, Journal of Hazardous Materials, no. 7, pp. 63-74, (1982).
- /90/ Thomas, R.G.: Volatilization from Soil in: Lyman, W.J.; Reehl, W.F.; Rosenblatt, D.H. (eds): Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Environmental Behavior of Organic Compounds, McGraw-Hill, New York, N.Y. 1982.
- /91/ Verschueren, K.: Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, Van Nostrand Reinhold Co., New York, N.Y., 1977.
- /92/ Walters, R.W., Luthy, R.G.: Equilibrium Adsorption of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons from Water onto Activated Carbon, Environmental Science and Technology, vol. 18, no. 6, pp. 395-403, (1984).
- /93/ Weast, R.C.; Astle, M.J. (eds.): Handbook of Chemistry and Physics, 60th ed., CRC Press, Inc., West Palm Beach, Florida, 1979.
- /94/ Windholz, M. (ed.): The Merck Index, 10th ed., Merck & Co., Inc., Rahway, New Jersey, 1983.

- /95/ Yalkowsky, S.H.; Valvani, S.C.; Mackay, D.: Estimation of the Aqueous Solubility of Some Aromatic Compounds, Residue Review, vol. 85, pp. 43-55, (1983).
- /96/ Yoshida, K.; Shigeoka, T.; Yamauchi, F.: Non-Steady-State Equilibrium Model for the Preliminary Prediction of the Fate of Chemicals in the Environment, Ecotoxicology and Environmental Safety, Vol. 7, pp. 179-190, (1983).
- /97/ Yoshida, K.; Shigeoka, T.; Yamauchi, F.: Relationship between Molar Refraction and n-Octanol/Water Partition Coefficients, Ecotoxicology and Environmental Safety, vol. 7, pp. 558-565, (1983).

## SYMBOLLISTE

- A = arealet af det forurenede område
- b = forureningskildens længde målt i vindretningen
- C = koncentration
- $C_J$  = koncentrationen af det fordampende stof i bunden af det afdækkende jordlag
- $C_{JG}$  = koncentrationen i poreluften på den tørre side af fordampningsfladen i jorden
- $C_{JL}$  = koncentrationen af det fordampende stof ved jordoverfladen
- $C_{Jo}$  = initialkoncentrationen af et stof i jorden
- $C_K$  = koncentrationen af et stof i den våde kemikaliefase
- $C_{Ko}$  = initialkoncentrationen af stoffet i forureningsmatricen, f.eks. olien
- $C_{Lo}$  = koncentrationen af det fordampende stof et stykke væk fra jordoverfladen (baggrunds-koncentrationen i luften)
- $C_v$  = koncentrationen af stoffet i vandfasen
- $D_J$  = stoffets diffusionskoefficient i jord
- $D_K$  = stoffets diffusionskoefficient i det våde, forurenede område
- $D_L$  = stoffets diffusionskoefficient i luften vd  
 $D_L$  = vanddamps diffusionskoefficient i luft
- $D_v$  = stoffets diffusionskoefficient i porevandet eller i vand generelt

- $d_p$  = jordpartiklernes diameter
- $e$  = vandets fordampningshastighed, evaporationen
- $f_A$  = fugaciteten i fase A
- $H$  = Henry's lov konstanten
- $h$  = tykkelsen af det jordlag, hvori stoffet er indarbejdet
- $J_A$  = fordampning af et stof, flux
- $J_B$  = kemikaliemængde tilført p.g.a. "vask" af planter, flux
- $J_D$  = diffusiv flux
- $J_E$  = overfladisk afstrømning via jordpartikler, flux
- $J_J$  = gasfluxen igennem et jordlag
- $J_K$  = konvektiv flux
- $J_O$  = overfladisk afstrømning via væske, flux
- $J_P$  = planteoptag, flux
- $J_S$  = kemikaliemængde tilført p.g.a. spild, flux
- $K_D$  = adsorptionskoefficienten
- $K_{oc}$  = adsorptionskoefficienten over for det organiske kulstof i jorden
- $K_{ow}$  = vand-oktanolforholdet
- $k_J$  = massetransportkoefficienten i jordlaget
- $k_L$  = massetransportkoefficienten i luften
- $k_T$  = den totale masseoverførselskonstant
- $k_v$  = massetransportkoefficienten i vandfasen



- L = tykkelsen af jordlaget
- $L_v$  = vanddybden
- M = den totale mængde af forurenede stof tilført
- n = antal mol
- $O_F$  = arealet af kontaktfladen mellem forurening og poreluften
- $P_0$  = damptryk
- p = partialtryk af et stof
- R = gaskonstanten
- $R_G$  = fordelingskoefficienten for gasfasen
- $R_v$  = fordelingskoefficienten for væskefasen
- $R_F$  = den relative luftfugtigheden
- S = opløselighed
- $S_c$  = Schmidt's tal for det pågældende stof i gasform
- T = temperatur i °K
- t. = tiden
- $t_c$  = temperatur i °C
- $t_D$  = tiden det tager en stofmængde at fordampe
- V = molrumfang
- $v_E$  = stoffets resulterende konvektive hastighed i væskefasen
- $v_L$  = vindhastigheden i 10 m's højde
- $v_v$  = den konstante væskehastighed i jorden, opad- eller nedadret

- $y$  = afstanden fra jordoverfladen målt nedad
- $Z$  = fugacitetskapacitetskonstanten
- $\alpha$  = jordens luftindhold
- $\gamma_i$  = aktivitetskoefficient for stoffet i en given fase
- $\delta$  = tykkelsen af det stagnante luftlag lige over jordoverfladen
- $\epsilon$  = jordens porøsitet
- $\theta$  = jordens vandindhold
- $\kappa$  = jordens permeabilitet
- $\lambda$  = jordens indhold af organisk kulstof
- $\mu$  = stoffets nedbrydningshastighed i jord
- $\nu$  = gassens viskøsitet
- $\rho$  = jordens massefylde
- $\rho_v$  = vandets massefylde
- $\rho_{va}$  = massefylden af umættet vanddamp
- $\tau$  = jordens tortuositet
- $\phi_i$  = aktivitetskoefficient for stoffet i en given fase